



Methodenentwicklung zur Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder

Dipl.-Ing. Pascal Beckstein

Geboren am: 08.10.1984 in Nürnberg

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

Vorsitzender

Prof. Dr. rer. nat. habil. S. Odenbach

Gutachter

Prof. Dr. et Ing. habil. K. Eckert

Prof. Dr.-Ing. E. Baake

Mitglieder

Prof. Dr.-Ing. habil. J. Fröhlich

Prof. Dr.-Ing. habil. U. Hampel

Eingereicht am: 29. August 2017

Verteidigt am: 08. Januar 2018

Kurzfassung

Im Bereich der industriellen Metallurgie und Kristallzüchtung treten bei zahlreichen Anwendungen, wo magnetische Wechselfelder zur induktiven Beeinflussung von leitfähigen Werkstoffen eingesetzt werden, auch Strömungen mit freier Oberfläche auf. Das Anwendungsspektrum reicht dabei vom einfachen Aufschmelzen eines Metalls in einem offenen Tiegel bis hin zur vollständigen Levitation. Auch der sogenannte Ribbon Growth on Substrate (RGS)-Prozess, ein substratbasiertes Kristallisationsverfahren zur Herstellung siliziumbasierter Dünnschichtmaterialien, ist dafür ein Beispiel. Um bei solchen Prozessen die Interaktion von Magnetfeld und Strömung zu untersuchen, ist die numerische Simulation ein wertvolles Hilfsmittel. Für beliebige dreidimensionale Probleme werden entsprechende Berechnungen bisher durch eine externe Kopplung kommerzieller Programme realisiert, die für Magnetfeld und Strömung jeweils unterschiedliche numerische Techniken nutzen. Diese Vorgehensweise ist jedoch im Allgemeinen mit unnötigem Rechenaufwand verbunden. In dieser Arbeit wird ein neu entwickelter Methodenapparat auf Basis der Finite-Volumen-Methode (FVM) vorgestellt, mit welchem sich diese Art von Berechnungen effizient durchführen lassen. Mit der Implementierung dieser Methoden in *foam-extend*, einer erweiterten Version der quelloffenen Software *OpenFOAM*, ist daraus ein leistungsfähiges Werkzeug in Form einer freien Simulationsplattform entstanden, welches sich durch einen modularen Aufbau leicht erweitern lässt. Mit dieser Plattform wurden in *foam-extend* auch erstmalig dreidimensionale Induktionsprozesse im Frequenzraum gelöst. In der vorliegenden Arbeit werden am Beispiel des RGS-Prozesses neue Lösungsmethoden zur Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder in *foam-extend* entwickelt und validiert. Das gesamte Konzept umfasst zahlreiche methodische Neuentwicklungen sowie Verbesserungen. Dabei bildet der Einsatz überlagerter Gitter das Fundament zur iterativen Lösung von Mehrfeldproblemen, welche durch Differentialgleichungen mit unterschiedlichen Gültigkeitsgebieten gekennzeichnet sind. Überall dort, wo sich mindestens zwei solcher Gitter überlappen, können physikalische Phänomene auf diskreter Ebene interagieren. Durch die Nutzung einer identischen Topologie überlappender Teilgitter wird ein direkter Datenaustausch ermöglicht. Das Konzept dieser überlagerten Gitter macht eine effiziente Parallelisierung besonders schwierig. Im Sinne einer Graphpartitionierung mit vektoriellen Knotengewichten wird dieses Problem in *foam-extend* über eine neue Schnittstelle zur Softwarebibliothek *METIS* gelöst. Hinsichtlich der Simulation zeitharmonischer Induktionsprozesse beinhaltet die Neuentwicklung in *foam-extend* mehrere große Meilensteine, wie die Realisierung komplexwertiger Algebra mit Hilfe von Blockmatrizen, die effiziente Modellierung von Induktionsspulen mit komplexer Geometrie sowie eine neue Diskretisierungsmethode zur indirekten Berücksichtigung von sich sprunghaft ändernden Materialeigenschaften. Zur Erfassung der Oberflächendynamik wird in dieser Arbeit die Interface-Tracking Technik eingesetzt. In diesem Zusammenhang werden einige technische, für die gekoppelte Lösung von Magnetfeld und Strömung aber essentielle, Weiterentwicklungen und Verbesserungen von *foam-extend* vorgestellt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Qualitative Einführung in die metallurgische Magnetohydrodynamik	5
2.1	Der Ribbon Growth on Substrate (RGS)-Prozess	5
2.2	Wechselwirkungen der Magnetohydrodynamik (MHD)	10
2.3	Existierende Modellierungsansätze	17
2.4	Einordnung der Arbeit	28
3	Grundlagen der Finite-Volumen-Methode (FVM)	31
3.1	Die Bibliotheken <i>OpenFOAM</i> und <i>foam-extend</i>	32
3.2	Diskretisierung des Lösungsgebietes	32
3.3	Diskretisierung einer Transportgleichung	38
3.3.1	Interpolationsverfahren für interne Flächen	41
3.3.2	Randbedingungen für externe Flächen	43
3.3.3	Algebraisches Gleichungssystem	44
3.3.4	Zeitableitungsterm	46
3.3.5	Konvektionsterm	49
3.3.6	Diffusionsterm	50
3.3.7	Quellterm	52
3.4	Explizite Berechnung von Gradient, Divergenz und Rotation	53
3.5	Zwischenresümee	53
4	Modellierung von Induktionsprozessen	55
4.1	Elektromagnetische Induktion	56
4.1.1	Quasistatische Approximation der Maxwell-Gleichungen	58
4.1.2	Potentialform der quasistatischen Approximation	59
4.1.3	Randbedingungen	62
4.1.4	Lorentz-Kraft und Joule-Wärme	63
4.1.5	Zweidimensionale Fälle	64
4.1.6	Ergänzende Erläuterungen	64
4.2	Zeitharmonische Anregung	65
4.2.1	Skinneffekt und Abschirmung	66
4.2.2	Quasistatische Potentialform im Frequenzbereich	67
4.2.3	Zeitgemittelte Lorentz-Kraft und Joule-Wärme	68
4.2.4	Kopplungsmechanismen	69
4.3	Effizientes Lösungsverfahren im Frequenzbereich	70
4.3.1	Semi-gekoppelter Ansatz auf Basis überlagerter Gitter	71
4.3.2	Lösungsprozedur	72

4.3.3	Lineare Gleichungssysteme	74
4.3.4	Reduziertes magnetisches Vektorpotential	80
4.3.5	Induktormodellierung mit Biot-Savart's Gesetz	84
4.4	Diskontinuierliche Materialeigenschaften	87
4.4.1	Grenzbedingungen am Übergang unterschiedlicher Medien	88
4.4.2	Eingebettete Diskretisierung von Materialgrenzen	91
4.4.3	Reduziertes magnetisches Vektorpotential mit Magnetisierung	98
4.5	Validierung	100
4.5.1	Prozesstechnisch relevante Magnetfelder	101
4.5.2	Übergänge zwischen Medien	113
4.6	Elektromagnetische Felder beim RGS-Prozess	125
4.7	Zwischenresümee	128
5	Modellierung elektromagnetisch getriebener Strömungen mit freier Oberfläche	131
5.1	Strömungen mit freier Oberfläche	133
5.1.1	Inkompressible Navier-Stokes-Gleichungen	133
5.1.2	Randbedingungen	136
5.1.3	Dynamisch bewegtes Gitter	138
5.1.4	Lösungsverfahren im Zeitbereich	142
5.1.5	Begrenzung der Zeitschrittweite	151
5.1.6	Anmerkungen zur Turbulenzmodellierung	152
5.2	Konzept zur Lösung des Mehrfeldproblems	154
5.2.1	Überlagerte Gitter	155
5.2.2	Lösungsalgorithmus	156
5.2.3	Parallelisierung	159
5.3	Anlaufverhalten des RGS-Prozesses	162
5.3.1	Zweidimensionales Modell	163
5.3.2	Dreidimensionales Modell	166
6	Zusammenfassung	171
6.1	Errungenschaften	171
6.1.1	Magnetodynamik (MD)	171
6.1.2	Hydrodynamik (HD)	174
6.1.3	Magnetohydrodynamik (MHD)	175
6.2	Limitierungen und Weiterentwicklung	176
6.3	Ausblick	177
A	Tensorrechnung im Kontext von <i>OpenFOAM</i>	183
A.1	Spezielle Tensoren	184
A.1.1	Einheitstensor	184
A.1.2	Permutationstensor	185
A.2	Algebraische Operationen	185
A.2.1	Inneres Produkt	185
A.2.2	Doppeltes inneres Produkt	186

A.2.3	Äußeres Produkt	187
A.2.4	Kreuzprodukt	188
A.3	Differentielle Operationen	189
A.3.1	Operatoren	189
A.3.2	Gradient	190
A.3.3	Divergenz	191
A.3.4	Rotation	191
A.3.5	Weitere ausgewählte Zusammenhänge	193
A.3.6	Integralsätze	195
A.3.7	Transportsätze	196
B	Bedingungen an der freien Oberfläche inkompressibler Strömungen	199
B.1	Kinematische Bedingung	199
B.2	Dynamische Bedingung	200
B.2.1	Aufteilung in Normalen- und Tangentialrichtung	201
B.2.2	Ersetzen des Spannungstensors	201
B.2.3	Normalkomponente des Deformationstensors	202
B.2.4	Normalspannungsanteil des Deformationstensors	203
B.2.5	Übergangsbedingungen für Druck und Geschwindigkeit	204
B.2.6	Randbedingungen für eine externe Oberfläche eines Fluides	204
	Literaturverzeichnis	205
	Abkürzungsverzeichnis	241
	Symbolverzeichnis	245
	Dimensionslose Kennzahlen	245
	Griechische Symbole	245
	Lateinische Symbole	250
	Mathematische Operatoren	258

1 Einleitung

Bei der Verarbeitung von Metallen und Halbmetallen kommen in einer Vielzahl industrieller Anwendungen elektromagnetische Felder zum Einsatz. Durch den hohen Wert der elektrischen Leitfähigkeit dieser Werkstoffe lassen sich innerhalb entsprechender Materialien Wirbelströme induzieren. Die elektrischen Ströme können dazu genutzt werden, um thermische Energie oder eine elektromagnetische Kraftwirkung in Form sekundärer Effekte einzubringen. Das dabei zur Induktion von außen aufgeprägte Magnetfeld wird üblicherweise durch eine oder mehrere Induktionsspulen erzeugt, welche mit einem Wechselstrom (Alternating Current, AC) gespeist werden. In Abhängigkeit von Geometrie und Anordnung dieser Spulensysteme ist für solche Induktionsprozesse eine individuelle Auslegung der Magnetfelder für unterschiedliche Anforderungen möglich [Baake 1992; Baake u. Nacke 2013].

Speziell im Bereich der industriellen Metallurgie und Kristallzüchtung treten, zum Beispiel in einem Induktionsofen, Strömungen elektrisch leitfähiger Schmelzen auf. Durch maßgeschneiderte Magnetfelder lassen sich dort, vom einfachen Erhitzen bis zur gezielten Strömungsbeeinflussung, zahlreiche verschiedene Anwendungen realisieren [Asai 2012; Molokov u. a. 2007; Lielpeteris u. Moreau 2012]. Hinsichtlich des Verständnisses, der Auslegung, Optimierung und Kontrolle solcher Anwendungen, sind detaillierte Untersuchungen der Fluidodynamik von außerordentlich großem Interesse. In Anbetracht der Tatsache, dass Metall- oder Halbleiterschmelzen einerseits für gewöhnlich sehr hohe Temperaturen aufweisen und andererseits intransparent sind, erweisen sich messtechnische Analysen besagter Prozesse als äußerst anspruchsvoll [Fazio u. a. 2015, Kapitel 11]. Die Durchführung numerischer Simulationen bietet daher eine wertvolle Ergänzung beziehungsweise (bzw.) stellenweise sogar eine Alternative zur Messung, denn für diese spielen technisch-praktische Restriktionen keine Rolle. Obwohl es damit zunächst den Anschein erwecken könnte, die numerische Modellierung sei das generell zu präferierende Werkzeug, so unterliegt natürlich auch dieses Hilfsmittel gewissen Limitierungen. Die Ursache liegt dabei schlicht in der Komplexität und der Interaktion der zu modellierenden physikalischen Effekte.

Im Kontext der Magnetohydrodynamik (MHD) [Moreau 1990; Davidson 2001] erzeugt beispielsweise ein von außen wirkendes magnetisches Wechselfeld in einem Konduktor nicht nur eine Kraft- und thermische Leistungsdichte, sondern auch eine elektromagnetische Rückwirkung infolge einer dadurch eventuell ausgelösten Fluidbewegung. Diese Kopplung der Magnetodynamik (MD) und Hydrodynamik (HD) erfordert als Mehrfeldproblem bei der Lösung nicht nur geeignete numerische Methoden, sondern erhöht gegenüber einem Einfeldproblem in der Regel den benötigten Rechenaufwand. Da elektromagnetische Felder nahezu alles durchdringen, hat speziell im Zusammenhang mit der MHD auch die nähere Umgebung eines leitfähigen Strömungsgebietes Auswirkungen auf die Dynamik der Strömung. Für ein hinreichend gutes Modell müssen demnach die unter Umständen sehr komplexen Geometrien der beteiligten Apparate berücksichtigt werden. Gerade bei dreidimensionalen Problemstellungen mit räumlicher und zeitlicher Mehrskaligkeit bringt das schnell einen immensen

Mehraufwand mit sich. Darüber hinaus sind an einem realen Prozess gegebenenfalls zusätzliche Phänomene, wie zum Beispiel Wärmetransport, Wärmestrahlung, Turbulenz, Mehrphasenströmungen, chemische Reaktionen oder Phasenumwandlungen beteiligt, was die Komplexität entsprechender Simulationen weiter steigert. Im Rahmen verfügbarer Ressourcen ist man bei der Modellentwicklung also stets darum bemüht dominante Phänomene zu identifizieren, um sich dann anhand geeigneter Annahmen und selektiver Vereinfachungen ausschließlich auf die wichtigsten Effekte zu beschränken. Somit stellt eine numerische Simulation und die zugrunde liegende Modellierung letztlich immer einen Kompromiss aus Realisierbarkeit und Genauigkeit dar.

Was die induktive Prozessierung anbelangt, so dominiert bei der metallurgischen **MHD** normalerweise die Wirkung des aufgeprägten Magnetfeldes auf die Dynamik der Strömung. Der Einfluss der reinen Bewegung des Fluides auf das Magnetfeld ist dagegen eher vernachlässigbar. Doch selbst unter vollständiger Vernachlässigung des strömungsinduzierten Feldes beeinflusst die Fluidbewegung das resultierende Magnetfeld weiterhin indirekt – nämlich dann, wenn dessen Leitfähigkeit im Verlauf der Zeit räumlich variiert. Eine solche Änderung der elektrischen Leitfähigkeit wird beispielsweise durch Temperaturänderungen, Phasenübergänge, Phasentransport oder eine bewegte freie Oberfläche ausgelöst. Damit kann bei Induktionsprozessen selbst im einfachsten Modellierungsfall einer isothermen Einphasenströmung eine indirekte Rückkopplung zwischen Fluidodynamik und dem antreibenden magnetischen Wechselfeld eintreten. Dazu genügt schon eine entsprechend starke Bewegung der Oberfläche.

Nun sind freie Oberflächen in Anwendungen zur Beeinflussung von Schmelzen mittels elektromagnetischer Felder eher die Regel als die Ausnahme [Fautrelle u. a. 2003; Molokov u. a. 2007, Teil IV; Asai 2012, Kapitel 4; Lielpeteris u. Moreau 2012, Teil C-F]. Das Anwendungsspektrum reicht dabei vom einfachen Aufschmelzen eines Metalls in einem Tiegel, über Rühr- oder Mischvorgänge, das Legieren und die magnetische Retention bis hin zur vollständigen Levitation. In vielen Fällen treten auch tatsächlich sehr große Verformungen der involvierten freien Oberfläche auf, sodass diese bei einer numerischen Modellierung mit hohem qualitativen Anspruch sowohl bezüglich der bloßen Änderung des Strömungsgebietes als auch hinsichtlich der Rückkopplung zwingend berücksichtigt werden müssen.

Die vorliegende Arbeit, welche im Kontext eines Teilprojektes der **Liquid Metal Technologies (LIM-TECH)**-Allianz (einer deutschlandweiten Forschungsinitiative der Helmholtz-Gesellschaft) unter Federführung des **Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR)** entstanden ist, befasst sich mit ebendieser Interaktion von Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder. Dabei geht es in erster Linie um die Schaffung eines Modellierungskonzeptes, mit welchem zeitharmonische Induktionsprozesse und daran gekoppelte strömungsmechanische Probleme effizient gelöst werden können. Im Zentrum der folgenden Abhandlung steht der **Ribbon Growth on Substrate (RGS)**-Prozess, ein substratbasiertes Kristallisationsverfahren zur Herstellung siliziumbasierter Dünnschichtmaterialien [Lange u. Schwirtlich 1990]. Der Schwerpunkt liegt dabei aber auf der Methodenentwicklung für die numerische Simulation und nicht bei einer genaueren Untersuchung der **RGS**-Technologie selbst.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines umfassenden Methodenapparates und einer offenen Simulationsplattform zur effizienten numerischen Berechnung von Strömungen mit freier Oberfläche im Wirkungsbereich harmonisch oszillierender Magnetfelder. Dabei ist final beabsichtigt, anhand einer dreidimensionalen Simulation eines vereinfachten RGS-Modells zu demonstrieren, dass die neu entwickelte Plattform für diese und ähnliche Problemstellungen der metallurgischen MHD geeignet ist. Zur Begrenzung des Umfangs wird jedoch im Rahmen dieser Arbeit auf eine Modellierung von Effekten der Thermodynamik (TD) verzichtet. Kapitel 2 dient dabei zu Beginn als qualitative Einführung in die Thematik der metallurgischen MHD. Dort wird das Prinzip und die Funktionsweise des RGS-Verfahrens beschrieben, dessen charakteristische Eigenschaften und Parameter zusammengetragen und daraus im Einklang mit dominanten physikalischen Effekten ein vereinfachtes Modell abgeleitet, welches – repräsentativ für eine ganze Klasse von ähnlichen Prozessen – die Grundlage für die Modellentwicklung in der vorliegenden Arbeit darstellt. Weiterhin liefert dieses Kapitel eine Übersicht zu Modellierungsansätzen und bereits existierenden Programmen für die Simulation solcher Problemstellungen. Als Abschluss erfolgt dort eine Einordnung, wo das weitere Vorgehen zur Methodenentwicklung in Kapitel 3 bis 5 motiviert und die Zielstellung sowohl hinsichtlich des RGS-Prozesses als auch bezüglich den Herausforderungen, welche sich im Kontext der metallurgischen MHD ergeben, konkretisiert wird. In Kapitel 6 werden dann rückblickend alle wichtigen Punkte der Arbeit zusammengefasst und besondere Errungenschaften hervorgehoben. Mit einer Übersicht offener bzw. neu entstandener Fragestellungen wird die Arbeit dann mit dem Anreiz für weiterführende Entwicklungen und Anwendungen abgeschlossen.

2 Qualitative Einführung in die metallurgische Magnetohydrodynamik

Das Kernthema dieser Arbeit bildet die Methodenentwicklung zur numerischen Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche im Wirkungsbereich elektromagnetischer Wechselfelder. Die spezielle Art von gegenseitiger Wechselwirkung zwischen elektromagnetischen und strömungsmechanischen Effekten, um welche es dabei im Weiteren schwerpunktmäßig gehen wird, ist ein zentrales Thema der metallurgischen **Magnetohydrodynamik (MHD)**. Dieser Teilbereich der allgemeinen **MHD** spielt bei vielen Prozessen im Labor- und Industriemaßstab in Verbindung mit flüssigen Metallen und Halbmetallen, zum Beispiel (z. B.) beim Aufschmelzen eines Metalls in einem Induktionsofen oder bei elektromagnetischen Rühr- und Mischvorgängen, eine wichtige Rolle. Repräsentativ für solche Prozesse steht in der vorliegenden Arbeit das **Ribbon Growth on Substrate (RGS)**-Verfahren [Lange u. Schwirtlich 1990], ein kontinuierliches Kristallisationsverfahren für siliziumbasierte Dünnschichtmaterialien, im Mittelpunkt. Daher beginnt dieses Kapitel in Abschnitt 2.1 zunächst mit einer Vorstellung der **RGS**-Technologie. Aus Sicht des **RGS**-Prozesses wird dann in Abschnitt 2.2 die metallurgische **MHD** qualitativ eingeführt und dabei über größenordnungsmäßige Abschätzungen schrittweise ein vereinfachtes dreidimensionales Modell des **RGS**-Prozesses entwickelt. Auf Grundlage dieses **RGS**-Modells wird schließlich gezeigt, dass es gerade die Wechselwirkung zwischen Magnetfeld und Strömung ist, welche die großskalige Dynamik beim **RGS**-Verfahren dominiert [Beckstein u. a. 2014, 2015a]. Im Anschluss daran folgt in Abschnitt 2.3 eine Übersicht zu grundsätzlichen Modellierungsmöglichkeiten und zu bereits verfügbarer Software für die Simulation solcher anspruchsvoller Problemstellungen. Dabei wird verdeutlicht, dass entsprechende Berechnungen für beliebige dreidimensionale Geometrien bisher ausschließlich durch eine externe Kopplung kommerzieller Programme realisiert wurden, die für Magnetfeld und Strömung jeweils unterschiedliche numerische Techniken nutzen, und dass eine einheitliche Modellentwicklung in einer offenen Plattform eine wertvolle Alternative darstellt. Um die Zielstellung und das dazu nötige Vorgehen im Kontext des **RGS**-Prozesses unter Berücksichtigung bereits existierender Ideen zu konkretisieren, schließt Abschnitt 2.4 dieses Kapitel durch eine kurze Einordnung der Arbeit ab.

2.1 Der Ribbon Growth on Substrate (RGS)-Prozess

Beim **RGS**-Prozess handelt es sich um ein substratbasiertes Kristallisationsverfahren zur Herstellung siliziumbasierter Wafer und Dünnschichtmaterialien, welches ursprünglich zur kontinuierlichen Produktion von **Photovoltaik (PV)**-Silizium entwickelt wurde [Lange u. Schwirtlich 1990; Hahn u. Schönecker 2004; Schönecker u. a. 2004; Hess u. a. 2011]. Obwohl die Technologie im Vergleich zu anderen etablierten Fertigungsverfahren durch eine sehr hohe erreichbare Prozessgeschwindigkeit,

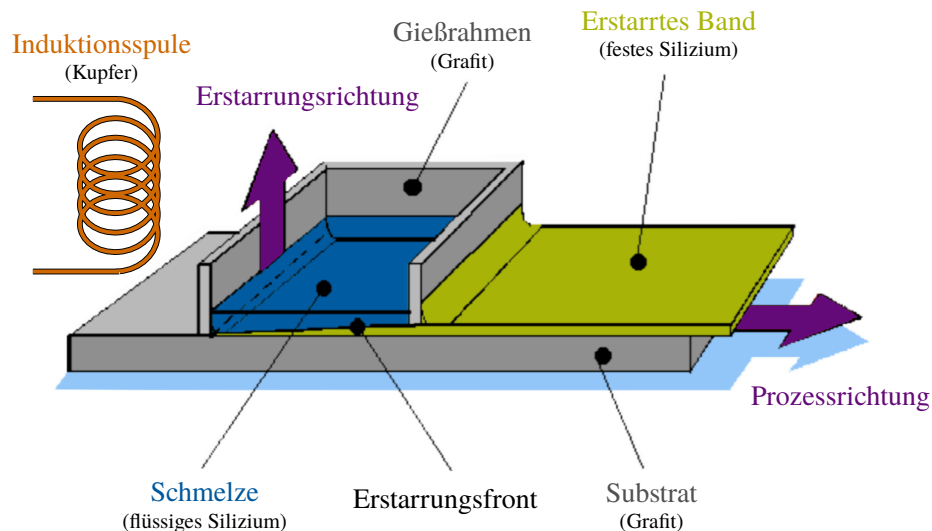


Abbildung 2.1: Prinzipielle Funktionsweise des RGS-Prozesses [Schönecker u. a. 2004].

bei gleichzeitig optimaler Materialausbeute gekennzeichnet ist, konnte sie sich im PV-Bereich bisher nicht durchsetzen. Heute wird das RGS-Verfahren hauptsächlich zur Kristallisation komplexer thermoelektrischer Materialien genutzt [Snyder u. Toberer 2008], um daraus in einer endkonturnahen Fertigung effiziente thermoelektrische Generatoren (TGEN) zu produzieren [RGS Development BV 2017].

Der eigentliche RGS-Prozess läuft innerhalb einer großen geschlossenen Anlage unter Schutzgasatmosphäre [siehe Schönecker u. a. 2004, Abbildung 5] und, bedingt durch die Schmelztemperatur von Silizium, stellenweise bei Temperaturen oberhalb von 1414 °C ab. Dabei umfasst ein Großteil der Anlage Installationen und Vorrichtungen zur Realisierung eines hermetisch geschlossenen Bereiches sowie zur Energieversorgung, Kühlung, Bestückung und der kontinuierlichen Prozessführung. Der Kernbereich, wo die Erstarrung stattfindet, ist mit einer Abmessung von circa (ca.) 20 cm in Länge, Breite und Höhe, im Gegensatz zur Gesamtanlage mit Abmessungen im ein- bis zweistelligen Meterbereich, relativ klein. Dieses Herzstück der RGS-Technologie ist in Abbildung 2.1, zusammen mit eingesetzten Materialien, anhand einer Schnittdarstellung illustriert.

Die Kristallisation erfolgt beim RGS-Verfahren direkt auf einem horizontal bewegten Trägermaterial beziehungsweise (bzw.) Substrat aus Grafit, welches vereinfacht als ein segmentiertes Förderband betrachtet werden kann. In Abbildung 2.1 ist allerdings nur ein einzelnes dieser Substrat-Segmente gezeigt. Über der Substratebene befindet sich in sehr geringem Abstand ein zweiseitig offener Gießrahmen aus Grafit, der einerseits als Kokille dient, in Verbindung mit der Substratbewegung aber andererseits auch die Funktion einer formgebenden Matrice übernimmt. Der Höhe des sehr schmalen Spaltbereichs zwischen Gießrahmen und Trägermedium beträgt dabei typischerweise nur bis zu ≈ 1 mm [Lange u. Schwirtlich 1990].

Zur Aufrechterhaltung des Prozesses wird kontinuierlich Material in einem Tiegel aufgeschmolzen und dem Gießrahmen in regelmäßigen Abständen über ein Gießrohr zugeführt (Schmelztiegel und

Gießrohr sind in Abbildung 2.1 nicht abgebildet). Die Temperatur des Substrates wird hingegen von der Unterseite so justiert, dass sich gegenüber der Schmelze eine definierte Unterkühlung einstellt und es folglich unmittelbar auf der Substratoberfläche zur Auskristallisierung des zugeführten Werkstoffes kommt. Die Erstarrungsrichtung, das heißt (d. h.) die Richtung mit der sich die so entstehende Erstarrungsfront bewegt, folgt dabei dem nahezu vertikalen Temperaturgradienten und verläuft somit auch näherungsweise senkrecht zur Prozessrichtung. Beide Richtungen sind in Abbildung 2.1 jeweils über Pfeile symbolisiert. Durch diese Entkopplung erreicht man problemlos Prozessgeschwindigkeiten von $0,01 \text{ m s}^{-1}$ bis $0,1 \text{ m s}^{-1}$ [Hahn u. Schönecker 2004], wobei das Substrat mit zunehmender Prozessgeschwindigkeit tendenziell stärker gekühlt werden muss [Lange u. Schwirtlich 1990]. Zusammen mit dem Abstand zwischen Gießrahmen und Substrat lässt sich, über eine Anpassung von Prozessgeschwindigkeit und Substrattemperatur, die Stärke des extrahierten Bandes beeinflussen, welche üblicherweise unterhalb von $0,4 \text{ mm}$ liegt [Lee u. a. 2012]. Die Ablösung des erstarrten Materials von der Oberfläche des Substrates geschieht automatisch durch die thermisch bedingte Volumenänderung bei der weiteren Abkühlung.

Hinsichtlich der praktischen Umsetzung ergeben sich aus dem geschilderten Funktionsprinzip des RGS-Prozesses zwei wesentliche Anforderungen, ohne deren Erfüllung eine stabile Prozessführung nicht möglich wäre: Zum einen müssen thermische Verluste infolge von Wärmestrahlung und Wärmeleitung ausgeglichen werden und regelbar bleiben, zum anderen ist technisch sicherzustellen, dass die Schmelze im Spaltbereich zwischen Gießrahmen und Substrat nicht unkontrolliert seitlich ausdringen kann. Beiden Ansprüchen begegnet man – unter Ausnutzung der spezifischen Materialeigenschaften der Halbmetallschmelze – durch den Einsatz elektromagnetischer Wechselfelder. Genau für diesen Zweck dient die in Abbildung 2.1 nur schematisch gezeigte Induktionsspule (der Induktor). Tatsächlich verlaufen die einzelnen Windungen dabei horizontal um den Gießrahmen herum, so dass der Wechselstrom (Alternating Current, AC), mit welchem dieser Induktor über eine Stromquelle gespeist wird, hauptsächlich parallel bezüglich der Wände des Gießrahmens fließt. Typischerweise wird die Spule beim RGS-Prozess mit einem effektiven harmonischen Quellstrom von $\approx 1000 \text{ A}$ und einer charakteristischen Frequenz von $\approx 10 \text{ kHz}$ betrieben.

Die Effekte, welche sich aus dem unmittelbaren Einsatz der Induktionsspule beim RGS-Verfahren ergeben, lassen sich im Kontext der klassischen Elektrodynamik durch eine vereinfachte Form der Maxwell-Gleichungen beschrieben. Diese Gleichungen setzen sich aus dem Durchflutungsgesetz nach Ampère, dem Induktionsgesetz nach Faraday, dem Gaußschen Gesetz sowie dem Gaußschen Gesetz für Magnetfelder zusammen [Griffiths 1999, Abschnitt 7.3]. Bevor diese vier Gleichungen in Abschnitt 4.1 näher betrachtet werden, soll an dieser Stelle der Arbeit vorerst eine qualitative Nutzung zur Einleitung der Thematik in Verbindung mit der Prinzipdarstellung aus Abbildung 2.2 genügen.

Anhand der entsprechenden Gesetzmäßigkeiten lässt sich zeigen, dass der Stromfluss in der AC-Spule (Symbole \otimes/\odot , außen) nach dem Ampèreschen und dem Gaußschen Gesetz für Magnetfelder zunächst ein magnetisches Wechselfeld \mathbf{B} bewirkt, dessen geschlossene Feldlinien stets in der Ebene senkrecht zur Richtung des erzeugenden Stromes liegen (gestrichelte Vektorpfeile). Mit der regelmäßigen Änderung des Magnetfeldes geht aber auch ein elektrisches Wirbelfeld \mathbf{E} einher, welches senkrecht zum anregenden Magnetfeld verläuft. In einem leitfähigen Medium, wie z. B. Kupfer, Grafit oder Silizium [vgl. Abbildung 2.1], erzeugt das elektrische Feld nach dem Ohmschen Gesetz

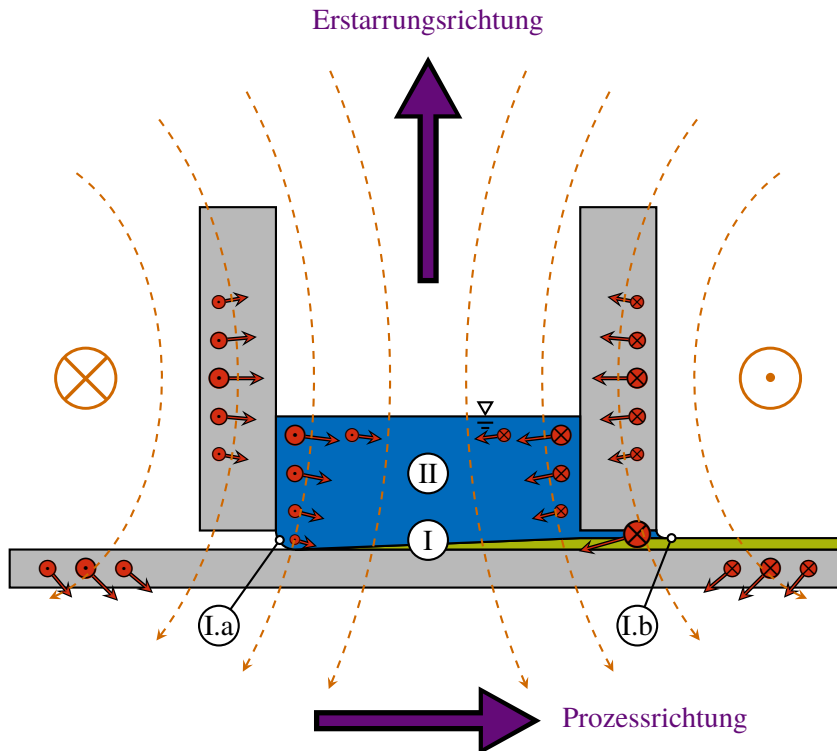


Abbildung 2.2: Prinzipdarstellung zur elektromagnetischen Kraft- und Wärmeerzeugung beim RGS-Prozess: Haupt- (II) und Spaltbereich (I) mit Kontaktbereich von Schmelze und Substrat (I.a), Austrittsbereich des erstarrten Bandes (I.b), Stromfluss in der Induktionsspule (\otimes/\odot , außen), Feldlinien des Magnetfeldes (gestrichelte Vektorpfeile), induzierter Strom und Wärmeeintrag (\otimes/\odot , innen) sowie elektromagnetische Kraft (Vektorpfeile) [vergleiche (vgl.) Hahn u. Schönecker 2004, Abbildung 3].

[Griffiths 1999, Abschnitt 7.1.1] – namensgebend für Induktionsprozesse – wiederum eine induzierte Stromdichte \mathbf{j} (Symbole \otimes/\odot , innen). Die Stärke des auf diese Weise induzierten Stromes hängt von der elektrischen Leitfähigkeit σ , d. h. einer Materialeigenschaft ab. Dadurch wird schließlich auch wieder ein induziertes Magnetfeld verursacht, das sich mit dem externen Anregungsfeld der Spule überlagert.

Für den RGS-Prozess, bzw. Induktionsprozesse im Allgemeinen, ist jedoch in erster Linie von Bedeutung, dass die Wirkung der resultierenden Stromdichte \mathbf{j} innerhalb aller leitfähigen Bereiche (der Konduktor) sekundäre Effekte zur Folge hat. Einerseits entsteht eine elektromagnetische Kraftwirkung in Form der Lorentz-Kraft mit der volumetrischen Kraftdichte [Griffiths 1999, Abschnitt 5.1]

$$\mathbf{f}_L = \mathbf{j} \times \mathbf{B}, \quad (2.1)$$

und andererseits produziert der Stromfluss nach dem ersten Jouleschen Gesetz eine spezifische Stromwärme bzw. die Joulesche Wärme mit der volumetrischen Leistungsdichte [Griffiths 1999, Abschnitt 7.1.1]

$$\dot{q} = \frac{|\mathbf{j}|^2}{\sigma}. \quad (2.2)$$

Diese beiden Effekte sind in Abbildung 2.2 symbolhaft veranschaulicht. Die Joulesche Wärme nach Gleichung (2.2) ist an solchen Stellen ausgeprägt, wo eine betragsmäßig hohe induzierte Stromdichte auftritt, was in der Darstellung innerhalb leitfähiger Materialien durch die Größe der Vektorsymbole normal zur Ebene (Symbole \otimes/\odot , innen) gekennzeichnet ist. Die Lorentz-Kraft nach Gleichung (2.1) ist dagegen betragsmäßig von \mathbf{j} und \mathbf{B} abhängig und verläuft ihrer Definition gemäß immer senkrecht zu den Feldlinien beider Größen (innere Vektorpfeile).

Die in Abbildung 2.1 und 2.2 skizzierte Induktionsspule dient nach Gleichung (2.2) primär zur Aufrechterhaltung der Schmelztemperatur. Dabei wird der Schmelze aber nicht nur direkt Joulesche Wärme zugeführt, sondern auch indirekt über Wärmeleitungseffekte durch die Erwärmung des leitfähigen Gießrahmens. Neben der Kompensation thermischer Verluste hat der Induktor aber eben noch eine zweite Funktion, welche auf Lorentz-Kraft aus Gleichung (2.1) beruht. Die resultierende Volumenkraft wirkt vor allem im Randbereich der ca. 10 mm bis 20 mm hohen Schmelze und verursacht so an freien Oberflächen – in Kombination mit der Oberflächenspannung ζ – einen magnetischen Rückhalte- bzw. Retentionseffekt. Dieser Effekt wird ausgenutzt, um den Austritt im Spaltbereich [Abbildung 2.2, I] zwischen Gießrahmen und Trägermedium [Abbildung 2.2, I.a und I.b] zu verhindern bzw. zu kontrollieren.

Als eher unerwünschter Nebeneffekt wirkt allerdings auch im Hauptbereich [Abbildung 2.2, II] eine Lorentz-Kraft, die in Verbindung mit der seitlichen Substratbewegung in Prozessrichtung zu einer teils elektromagnetisch, teils mechanisch getriebenen Strömung führt. Durch den größenordnungsmäßigen Unterschied von Haupt- und Spaltbereich ist in beiden Regionen aus hydrodynamischer Perspektive, bedingt durch die verschiedene Wirkung von Wandreibungs- und Grenzflächeneffekten, mit einem jeweils spezifischen Strömungsverhalten zu rechnen.

Da beim RGS-Verfahren die Strömung einen entscheidenden Einfluss auf die Qualität der erzeugten Wafer bzw. des extrahierten Bandes hat [Hahn u. Schönecker 2004, Abschnitt 2.2.2], ist eine genauere Analyse der Fluidynamik und sich ergebender Strömungsstrukturen äußerst wünschenswert. Diesbezüglich findet man bisher nur Literatur über die Untersuchungen des reinen Erstarrungsprozesses am Übergang der Schmelze zum Trägermaterial [Abbildung 2.2, I.a] [Apel u. a. 2002; Steinbach u. Apel 2007; Jeong u. a. 2010]. In diesen Veröffentlichungen wird bezüglich der Gesamtgröße des Strömungsgebietes nur ein sehr kleiner Teil abgedeckt. Auf Grund der Mehrskaligkeit der Geometrie sowie der Vielzahl ablaufender Phänomene, ist die Formulierung eines solchen Teilproblems grundsätzlich sinnvoll. Es wäre jedoch von Vorteil, wenn zunächst das globale Verhalten von Magnetfeld und Strömung im Hauptbereich [Abbildung 2.2, II] untersucht würde, um später gegebenenfalls (ggf.) zusätzlich auftretende Effekte bei einer selektiven Modellierung auf kleinerer Skala berücksichtigen zu können. Genau an dieser Stelle setzt die vorliegende Arbeit mit ihrem Ziel an, ein geeignetes Simulationswerkzeug zu entwickeln, welches für dieses großskalige Verhalten und ähnliche Problemstellungen eine effiziente numerische Untersuchungen ermöglicht.

Für diesen Zweck werden die dynamischen Abläufe beim RGS-Prozess drei verschiedenen physikalischen Teilaspekten zugeordnet, deren gegenseitige Wechselwirkungen im nächsten Abschnitt qualitativ diskutiert werden:

Magnetodynamik (MD) Die MD umfasst primär das dynamische Verhalten der durch die Induktionsspule erzeugten elektromagnetischen Wechselfelder \mathbf{B} und \mathbf{E} , aber auch die Entstehung sekundärer Effekte, wie der Lorentz-Kraft mit \mathbf{f}_L und der Joule-Wärme mit \dot{q} . Die zugrundeliegende Physik wird im Kontext der klassischen Elektrodynamik mit den Maxwell-Gleichungen beschrieben [Griffiths 1999, Abschnitt 7.3]. Für hochleitfähige Materialien, wie Metalle und aufgeschmolzene Halbmetalle, sind dabei durch die zeitliche Änderung des elektrischen Feldes hervorgerufene Ströme (sogenannte Verschiebungsströme) und die Wirkung von Coulomb-Kräften im Sinne der Magneto-Quasistatik (MQS) vernachlässigbar [Davidson 2001, Abschnitt 2]. D. h. die Maxwell-Gleichungen beschreiben die Dynamik des Magnetfeldes mit quasistatischem Verhalten des elektrischen Feldes. In Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit σ dringen die elektromagnetischen Felder beim RGS-Prozess unterschiedlich tief in Materie ein und wirken auch in der nicht-leitfähigen Umgebung. Allgemein ist bei Induktionsprozessen auch oft die Materialeigenschaft der magnetischen Permeabilität μ wichtig.

Hydrodynamik (HD) Innerhalb der Schmelze tritt beim RGS-Verfahren eine Strömung auf. Die HD wird gemäß der Navier-Stokes-Gleichungen [Batchelor 1967, Abschnitt 3] mit der Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} und dem Druck p über die Erhaltungseigenschaften von Masse und Impuls unter Berücksichtigung von Dichte ρ und Zähigkeit η bestimmt. Für flüssige Metalle und Halbmetalle kann dabei in sehr guter Näherung die Kompressibilität vernachlässigt werden [vgl. Marcus 2017]. Im Spaltbereich [Abbildung 2.2, I] verhält sich die Strömung durch die unmittelbare Nähe von Wänden und der Erstarrungsfront gegenüber dem Hauptbereich [Abbildung 2.2, II] infolge von Wandreibungs- und Grenzflächeneffekten unterschiedlich.

Thermodynamik (TD) Mit der TD ist im Wesentlichen der Wärmetransport, also der Transport von Energie durch Unterschiede der Temperatur T in Medien mit der Wärmeleitfähigkeit k gemeint [Batchelor 1967]. An der Oberfläche solcher thermisch leitfähiger Bereiche ist die Wärmeübertragung aber auch an Effekte der Wärmestrahlung gebunden. Auf Grund der nahezu inkompressiblen Schmelze, den hohen Temperaturen und den geringen Höhenunterschieden im Kernbereich haben Volumenänderungsarbeit, potentielle Energie sowie innere Reibungswärme aus energetischer Sicht einen vernachlässigbaren Einfluss.

Die Unterteilung setzt auf eine separate Betrachtung von Effekten der Masse- und Impulserhaltung im Rahmen der HD und energetischen Effekten in Form der TD. Diese Trennung unterliegt zwar eine gewissen Willkür, sie macht jedoch deshalb Sinn, da der Energietransport sowohl in flüssigen als auch in festen Bereichen des Konduktors eine Rolle spielt, während dem Masse- und Impulstransport nur in der Schmelze eine relevante Bedeutung zukommt.

2.2 Wechselwirkungen der Magnetohydrodynamik (MHD)

Die wichtigsten Differentialgleichungen (DGLn) zur mathematischen Beschreibung der im letzten Abschnitt separierten Teilgebiete der MD, HD und TD lassen sich prinzipiell so formulieren, dass sie jeweils eine sehr ähnliche Struktur einer verallgemeinerten Transportgleichung aufweisen. Dazu müssen allerdings zwei der bisher nur erwähnten vier Maxwell-Gleichungen unter Voraussetzung der MQS

für ein mit \mathbf{u} bewegtes Bezugssystem in die sogenannte Induktionsgleichung [vgl. Davidson 2001, Abschnitt 2.6, Gleichung (2.24)] überführt werden und zudem sichergestellt sein, dass sowohl die Quellfreiheit der magnetischen Flussdichte ($\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$) als auch die Massenerhaltung des inkompressiblen Fluides ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) erfüllt sind. Mit diesen Nebenbedingungen genügt für die drei Teilaspekte ein repräsentatives System aus Induktions-, Impulserhaltungs- und Energieerhaltungsgleichung, welches an späterer Stelle dieser Arbeit teilweise wieder aufgegriffen wird:

$$\underbrace{\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{B}}_{\text{Zeitliche Änderung und konvektiver Transport}} = \underbrace{\nabla \cdot \lambda \nabla \mathbf{B}}_{\text{diffusiver Transport}} + \underbrace{\nabla \mathbf{B} \cdot \nabla \lambda}_{\text{variable Diffusivität}} + \underbrace{\mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}}_{\text{Streckungsterm}} + \underbrace{\nabla \times \frac{\mathbf{j}_0}{\sigma}}_{\text{Spulenquelle}} \quad (2.3a)$$

$$\rho \underbrace{\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right)}_{\text{Zeitliche Änderung und konvektiver Transport}} = \underbrace{\nabla \cdot \eta \nabla \mathbf{u}}_{\text{diffusiver Transport}} + \underbrace{\nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \eta}_{\text{variable Zähigkeit}} - \underbrace{\nabla p}_{\text{Druckgradient}} + \underbrace{\rho \mathbf{g}}_{\text{Gewichtskraft}} + \underbrace{\mathbf{j} \times \mathbf{B}}_{\text{Lorentz-Kraft}} \quad (2.3b)$$

$$\rho c_p \underbrace{\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right)}_{\text{Zeitliche Änderung und konvektiver Transport}} = \underbrace{\nabla \cdot k \nabla T}_{\text{diffusiver Transport}} + \underbrace{\frac{|\mathbf{j}|^2}{\sigma}}_{\text{Joule-Wärme}} \quad (2.3c)$$

Neben bereits zuvor eingeführten Größen, findet man darin zusätzlich die magnetische Diffusivität $\lambda = 1/(\mu_0 \sigma)$ bezogen auf die Vakuumpermeabilität μ_0 (ohne Magnetisierung), die Stromdichte in der Induktionsspule \mathbf{j}_0 , den Gravitationsvektor \mathbf{g} und die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p . Grenzflächeneffekte, wie die Erstarrung der Schmelze auf dem Substrat, die Bewegung des Trägermaterials und die Wirkung der Oberflächenspannung ς , werden dabei nicht abgebildet. In der gegebenen Form ist das Gleichungssystem auch nicht geschlossen, d. h. zur Lösung spielt zusätzlich das Materialverhalten sowie die Quellfreiheit von \mathbf{B} und \mathbf{u} eine Rolle. Weiterhin sei darauf hingewiesen, dass sich die Stromdichte \mathbf{j} aus der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} bestimmen lässt und daher keine zusätzliche Unbekannte darstellt. Dem elektrischen Feld \mathbf{E} kommt gemäß der MQS nur eine untergeordnete Funktion als treibende Kraft hinter der induzierten Stromdichte \mathbf{j} zu. Streng genommen gelten die Gleichungen (2.3a) bis (2.3c) auch nur für jeweils hinreichend oft stetig differenzierbare Funktionen und leitfähige Medien mit $\sigma > 0$. Für eine qualitative Diskussion der magnetohydrodynamischen Wechselwirkungen, also der Kopplung der drei DGLn, genügt es die einzelnen Terme der Gleichungen zu betrachten. Daher werden die zusätzlichen Anforderungen bzw. Einschränkungen im weiteren Verlauf dieses Abschnittes vorübergehend ignoriert.

Durch die besondere Anordnung der Transportgleichungen sollte vor allem deutlich werden, dass die jeweils zur MD, HD oder TD gehörenden Hauptfelder \mathbf{B} , \mathbf{u} und T mit der entsprechenden lokalen Änderungsrate (erster Term auf der linken Seite) alle einem diffusiven Transport gemäß der zugehörigen (variablen) Diffusivitäten λ , η und k unterliegen (erster Term auf der Seite). Darüber hinaus werden die Hauptfelder dort, wo eine Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} auftritt, auch alle konvektiv transportiert (zweiter Term auf der linken Seite). Ansonsten unterscheiden sich die DGLn durch individuelle Quellterme.

Anhand solcher Terme, welche verschiedene der drei Gleichungen (2.3a) bis (2.3c) untereinander koppeln, lassen sich die gegenseitigen Wechselwirkungen der Magnetohydrodynamik im Einzelnen identifizieren. Zunächst erkennt man die sekundären Effekte der MD wieder, die beim RGS-Verfahren bewusst eingesetzt werden [vgl. Abbildung 2.2]: Die Lorentz-Kraft aus Gleichung (2.1) wirkt als Quellterm in der Momentenbilanz der HD [letzter Term in Gleichung (2.3b)], und die Joule-Wärme aus Gleichung (2.2) stellt eine Wärmequelle in der Energieerhaltungsgleichung der TD dar [letzter Term in Gleichung (2.3c)]. Die Wirkung der HD auf die MD und TD ist durch die bereits genannten Konvektionsterme recht offensichtlich. Die Feldgrößen \mathbf{B} , T , und auch \mathbf{u} selbst, werden demnach über die Fluidbewegung räumlich mitbewegt d. h. transportiert. Speziell in der Transportgleichung für die magnetische Flussdichte existiert aber noch ein zweiter Term in dem die räumliche Änderung der Geschwindigkeit seine Wirkung entfaltet [vorletzter Term in Gleichung (2.3a)]. Durch diesen wird das Magnetfeld, je nach lokaler Ausrichtung zu Geschwindigkeitsgradienten, verstärkt oder abgeschwächt [Davidson 2001, Kapitel 3 und 4]. Beide geschwindigkeitsabhängigen Terme in Gleichung (2.3a) ergeben sich bei der Herleitung der Induktionsgleichung aus der nichtrelativistischen Näherung der Lorentz-Transformation [Davidson 2001, Abschnitt 1; Jackson 1975, Abschnitt 11.10] in das mit der Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} bewegte Bezugssystem. Eine zwar unscheinbare, bei Induktionsprozessen jedoch sehr bedeutende Wirkung hat die Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} auch dadurch, dass es in Verbindung mit freien Oberflächen [siehe Abbildung 2.2] durch die Formänderung des angrenzenden Strömungsgebietes zu einer Umverteilung der Materialeigenschaften λ , σ , ρ , c_p , η und k kommen kann. Mögliche Temperaturänderungen, die sich aus energetischen Prozessen der TD ergeben, beeinflussen das Gesamtsystem über die Temperaturabhängigkeit der Materialeigenschaften, wobei die Bedeutung dieser indirekten Abhängigkeit stark von auftretenden Temperaturgradienten abhängt. Eine direkte Kopplung der Temperatur in den Gleichungen der MD und HD liegt jedoch nicht vor.

Nun sei nochmals daran erinnert, dass das Augenmerk in der vorliegenden Arbeit auf der Interaktion von Magnetfeld und Strömung im Hauptbereich [Abbildung 2.2, II] liegt. Um die Komplexität des Gesamtsystems (2.3) für diesen Zweck zu reduzieren, wird im Folgenden ein vereinfachtes Modell des RGS-Prozesses abgeleitet, für welches hinsichtlich der Dynamik der Schmelze nur alle dominanten Effekte erfasst und weniger einflussreiche Aspekte vernachlässigt werden.

Beim RGS-Verfahren wird die Schmelze im Hauptbereich [Abbildung 2.2, II] nur geringfügig ($\lesssim 20$ K) bezüglich der Schmelztemperatur von Silizium bei $T_m = 1687$ K überhitzt [Jeong u. a. 2010]. Die Unterkühlung des Substrates erreicht bei einer Prozessgeschwindigkeit von $0,1 \text{ m s}^{-1}$ typischerweise Werte von 160 K bis 200 K [Lange u. Schwirtlich 1990, Abbildung 4; Apel u. a. 2002, Abbildung 5; Hahn u. Schönecker 2004, Abschnitt 2.2.2]. Größere Temperaturgradienten treten daher ausschließlich im Spaltbereich [Abbildung 2.2, I] und dort nur innerhalb des bereits erstarrten Siliziums auf. Die Erstarrung der Schmelze findet außerdem auf einer räumlich viel kleineren Skala statt als die globalen Prozesse im Hauptbereich. Im Hinblick auf die in dieser Arbeit verfolgte Modellentwicklung zur Analyse des globalen Strömungsverhaltens ist eine Nichtberücksichtigung des Erstarrungsvorganges daher in sehr guter Näherung gerechtfertigt. Auf der selben Argumentationsgrundlage kann als geometrische Vereinfachung näherungsweise auch ein horizontaler Verlauf der Erstarrungsfront angenommen werden. Eine naheliegende Möglichkeit zur Reduzierung des Gesamtsystems (2.3) ergibt sich demnach aus der Vernachlässigung energetischer Prozesse in Form einer isothermen Näherung. Durch

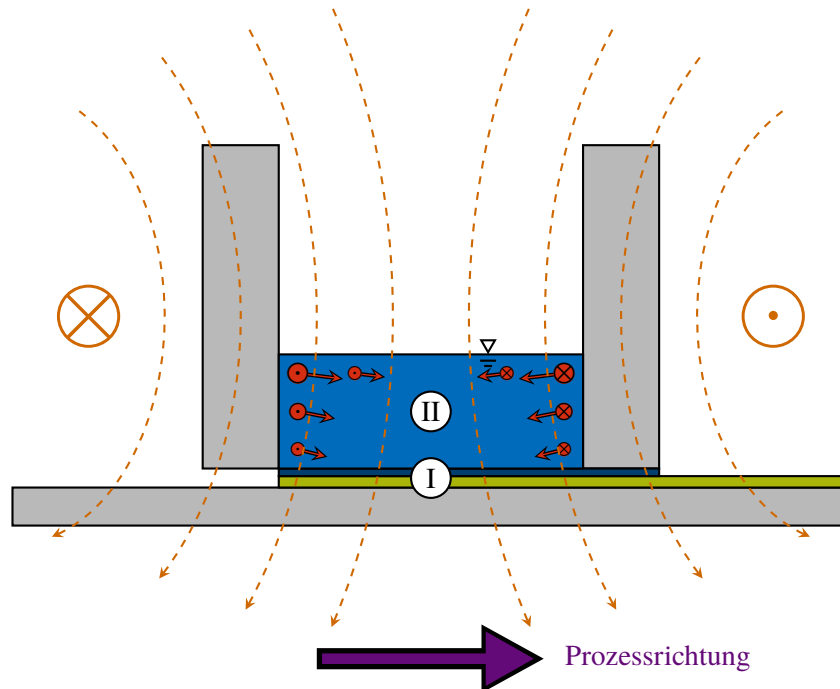


Abbildung 2.3: Prinzipdarstellung zur elektromagnetischen Krafterzeugung beim RGS-Prozess bei einem gegenüber Abbildung 2.2 vereinfachten Modell durch Vernachlässigung der TD: Haupt- (II) und Spaltbereich (I) mit idealisiertem Übergang zwischen Schmelze und Substrat, Stromfluss in der Induktionsspule (\otimes/\odot), außen), Feldlinien des Magnetfeldes (gestrichelte Vektorpfeile), induzierter Strom (\otimes/\odot , innen) sowie elektromagnetische Kraft (innere Vektorpfeile).

diese isotherme Modellierung entfällt die Energiegleichung (2.3c) und die Stoffgrößen werden als gebietsweise konstant angesehen. Das auf diese Weise aus Abbildung 2.2 abgeleitete Modell ist in Abbildung 2.3 gezeigt, wobei zu beachten ist, dass die Abmessungen in der Skizze nicht maßstabsgetreu sind. Eine dreidimensionale Version des Modells mit Induktionsspule ist in Abbildung 2.4 dargestellt, wobei spezifische Abmessungen in beiden Fällen Abbildung 2.5 entnommen werden können. Die für diese Arbeit eingesetzten Stoffparameter sind in Tabelle 2.1 für die beim RGS-Verfahren genutzten Materialien aus Abbildung 2.4 aufgeführt.

Um abschätzen zu können, wie sich die Simplifizierung aus Abbildung 2.3 bezüglich des ursprünglichen Modells auswirkt, ist ein genauerer Blick auf die Temperaturabhängigkeit der Materialeigenschaften der MD und HD erforderlich. Auch wenn in dieser Arbeit mit Tabelle 2.1 leicht unterschiedliche Werte genutzt werden, so findet man in Rhim u. Ohsaka [2000]; Zhou u. a. [2003] für reines Silizium beispielsweise empirische Zusammenhänge für Dichte, Viskosität und Oberflächenspannung im Bereich der Schmelztemperatur:

$$\rho(T) = 2580 - 0,159 \frac{(T - T_m)}{K} - 1,15 \cdot 10^{-4} \frac{(T - T_m)^2}{K^2} \text{ kg m}^{-3} \quad (2.4a)$$

$$\eta(T) = 0,75 \cdot 10^{-3} - 1,22 \cdot 10^{-6} \frac{(T - T_m)}{K} \text{ Pa s} \quad (2.4b)$$

$$\zeta(T) = 0,765 - 0,016 \cdot 10^{-3} \frac{(T - T_m)}{K} \text{ N m}^{-1} . \quad (2.4c)$$

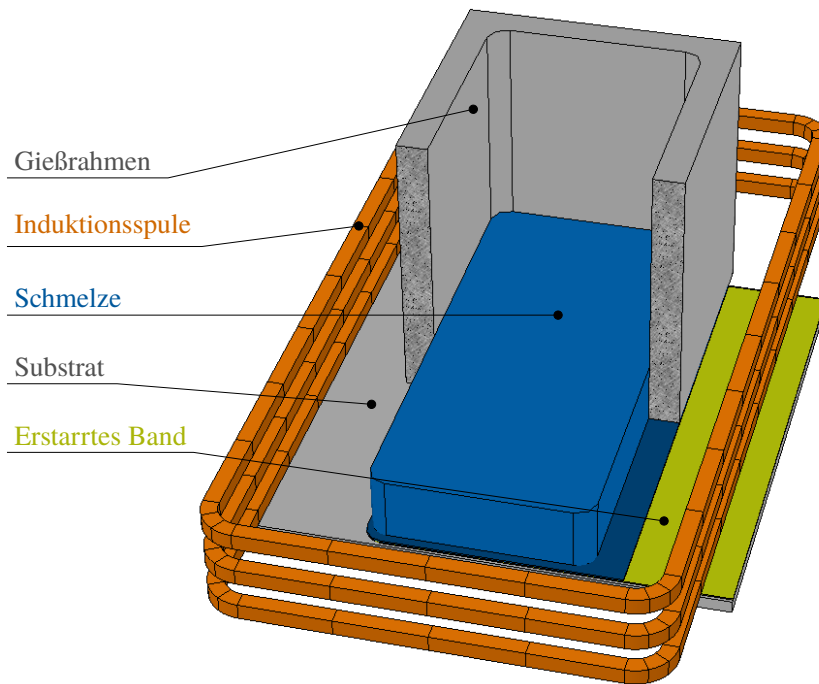


Abbildung 2.4: Geometrie des dreidimensionalen RGS-Modells.

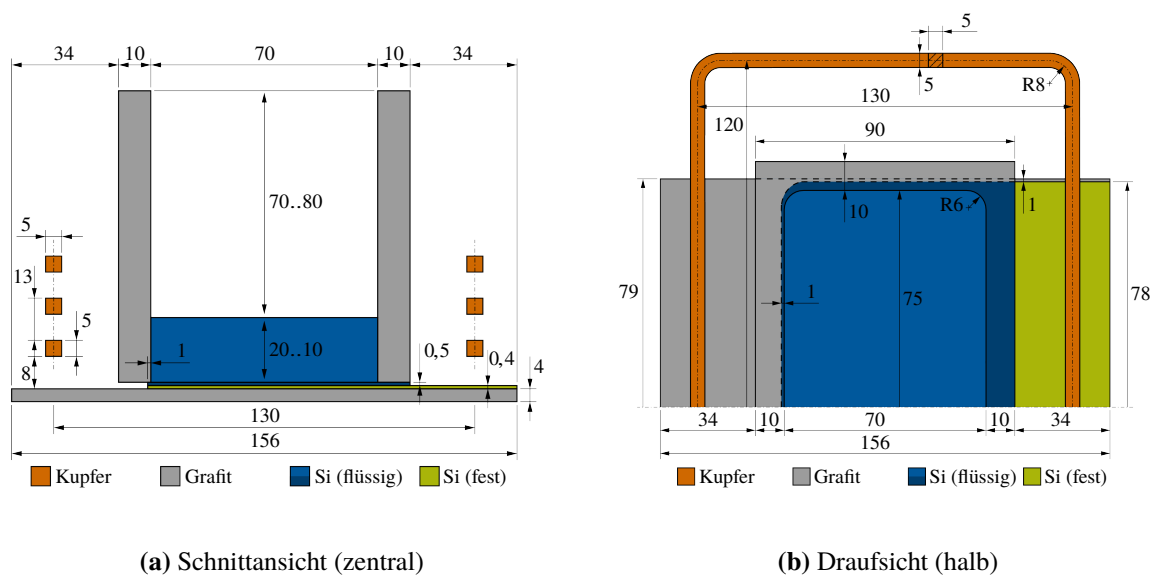


Abbildung 2.5: Geometrische Abmessungen und Materialien des dreidimensionalen RGS-Modells aus Abbildung 2.4 (Schnittansicht entspricht Abbildung 2.3): Schnittansicht durch Mittelebene (a) und Draufsicht einer Hälfte (b).

Tabelle 2.1: Stoffgrößen für die beim RGS-Prozess beteiligten Materialien [vgl. Abbildung 2.1].

Material	$\rho / 1 \text{ kg m}^{-3}$	$\eta / 1 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$	$\sigma / 1 \cdot 10^5 \text{ S m}^{-1}$	$\zeta / 1 \text{ N m}^{-1}$
Silizium, Si (flüssig)	2 580	0,86	12,00	0,733
Silizium, Si (fest)	2 330	-	0,83	-
Grafit	1 880	-	1,25	-
Kupfer	8 960	-	600,00	-

Bezüglich T_m ergeben sich aus den Gleichungen (2.4a) bis (2.4c) für die Materialeigenschaften bei einer Überhitzung der Schmelze von 20 K die folgenden prozentualen Änderungen:

$$\left| \frac{\rho(T_m + 20 \text{ K}) - \rho(T_m)}{\rho(T_m)} \right| \approx 0,13 \% \quad (2.5a)$$

$$\left| \frac{\eta(T_m + 20 \text{ K}) - \eta(T_m)}{\eta(T_m)} \right| \approx 3,25 \% \quad (2.5b)$$

$$\left| \frac{\varsigma(T_m + 20 \text{ K}) - \varsigma(T_m)}{\varsigma(T_m)} \right| \approx 0,04 \% . \quad (2.5c)$$

Der Einfluss der isothermen Modellierung auf die Momentenbilanz (2.3b) infolge der fehlenden Temperaturabhängigkeit entsprechender Materialgesetze ist folglich sehr begrenzt. Lediglich bei der Viskosität zeichnet sich ein Fehler von maximal ca. 3 % ab. Auf Grund der äußerst geringen Dichteänderung sind auch mögliche Auftriebseffekte (natürliche Konvektion) mit $|\mathbf{g}| = 9,81 \text{ m s}^{-2}$ [vorletzter Term in Gleichung (2.3b)] im Verhältnis zur Lorentz-Kraft [letzter Term in Gleichung (2.3b)] nahezu unbedeutend:

$$\frac{|(\rho(T_m + 20 \text{ K}) - \rho(T_m))\mathbf{g}|}{|\mathbf{j} \times \mathbf{B}|} = \left| \frac{\rho(T_m + 20 \text{ K}) - \rho(T_m)}{\rho(T_m)} \right| \frac{|\mathbf{g}|}{|f_L/\rho(T_m)|} \approx 0,02 \% . \quad (2.6)$$

Zur Abschätzung wurde für die Lorentz-Kraftdichte ein Betrag von $|f_L/\rho(T_m)| = 60 \text{ m s}^{-2}$ angenommen. Dieser Maximalwert ergab sich im Hauptbereich als Resultat einer numerischen Berechnung der elektromagnetischen Felder mit der Software *Cobham Opera 3D* [Cobham 2016a] für das dreidimensionale Modell nach Abbildung 2.4 [Beckstein u. a. 2014, 2015a]. Für die elektrische Leitfähigkeit von Silizium findet man in der Literatur sehr unterschiedliche absolute Werte bei Schmelztemperatur [Sasaki u. a. 1995; Schnyders u. Zytveld 1996; Okada u. Ohno 2003]. Die Änderung von σ bis zu einer Überhitzung von 20 K liegt jedoch übereinstimmend weit unterhalb von 1 %. Für die elektrische Leitfähigkeit des festen Siliziums und des Graphits werden in dieser Arbeit näherungsweise die konstanten Werte aus Tabelle 2.1 angesetzt.

Eine weitere Vereinfachung des Gesamtsystems (2.3), die allgemein bei Induktionsprozessen der metallurgischen MHD mit schnell oszillierenden Wechselfeldern angewendet wird [Davidson 2001, Abschnitt 5.1 und Kapitel 12], ist die Annahme, dass geschwindigkeitsbedingte Ströme bei der MD vernachlässigt werden können. Diese Vernachlässigung spiegelt sich in der Induktionsgleichung (2.3a) durch einen geringen Einfluss der beiden geschwindigkeitsabhängigen Terme wider.

Um auch hier beurteilen zu können, inwieweit diese Annahme gerechtfertigt ist und wie stark die MD dadurch beeinflusst wird, hilft ein größenordnungsmäßiger Vergleich der konvektiven Terme mit dem diffusiven Term:

$$\frac{|\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{B}|}{|\nabla \cdot \lambda \nabla \mathbf{B}|} \sim \frac{|\mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}|}{|\nabla \cdot \lambda \nabla \mathbf{B}|} \sim \frac{UL}{\lambda} \approx 6,03 \% . \quad (2.7)$$

Dazu wurde für den Hauptbereich [Abbildung 2.3, II] mit den Maßen aus Abbildung 2.5 eine mittlere charakteristische Länge von $L = (0.02 + 0.07 + 0.15) \text{ m}/3 = 0,08 \text{ m}$ angesetzt, die elektrische Leitfähigkeit aus Tabelle 2.1 entnommen und eine maximale charakteristische Geschwindigkeit von $U = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ angenommen. Der Geschwindigkeitswert stammt aus einer vorbereitenden Arbeit zur

Einschätzung der Strömungsverhältnisse [Beckstein u. a. 2014, 2015a]. Hinter dem Verhältnis aus Gleichung (2.7) verbirgt sich die magnetische Reynolds-Zahl [Davidson 2001, Abschnitt 1.3.1], die im Falle des RGS-Prozesses hinreichend klein ist, um geschwindigkeitsinduzierte Ströme mit dem Fokus auf die dann noch verbleibende Kopplung zwischen MD und HD zu vernachlässigen.

Mit den bisher getroffenen Vereinfachungen besteht das reduzierte Gesamtsystem zur Beschreibung von MD und HD im Vergleich zur vollständigen Version (2.3) nur noch aus einer diffusiv dominierten Induktionsgleichung und der ursprünglichen Momentenbilanz:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \cdot \lambda \nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B} \cdot \nabla \lambda + \nabla \times \frac{\mathbf{j}_0}{\sigma} \quad (2.8a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \eta \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \eta - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \mathbf{j} \times \mathbf{B} . \quad (2.8b)$$

Auf den ersten Blick scheint es in diesem System lediglich eine einseitige Wirkung der MD auf die HD zu geben. Liegt ein Strömungsgebiet mit fester Berandung vor, dann ist das auch tatsächlich der Fall. Für solch ein räumlich festes Gültigkeitsgebiet beider DGLn ergibt sich aus der Stromdichte der Induktionsspule \mathbf{j}_0 ein magnetisches Feld \mathbf{B} , über dessen zeitliche Änderung ein induzierter Strom \mathbf{j} und damit zusammen eine Lorentz-Kraft $\mathbf{j} \times \mathbf{B}$. Diese wirkt wiederum als Volumenkraft in der Impulserhaltungsgleichung und treibt somit letztlich eine Strömung an.

Für ein Strömungsgebiet mit beweglichem Rand, wie die freie Oberfläche des vereinfachten RGS-Modells aus Abbildung 2.3, kann es hingegen durch dessen Formänderung zu einer Umverteilung der Materialeigenschaften ρ , η , λ und σ kommen, was zu einer Verlagerung induzierter Ströme führt. Die Stärke der dadurch verursachten Rückkopplung hängt davon ab, wie stark sich z. B. die freie Oberfläche unter dem Einfluss der Lorentz-Kraft verändert. Das Prinzip der daraus resultierenden magnetohydrodynamischen Wechselwirkung ist in Abbildung 2.6 illustriert. Dass es im Falle des RGS-Prozesses tatsächlich zu solch einer Interaktion der MHD zwischen MD und HD kommt, lässt sich bereits mit dem zuvor genannten Wert von $|\mathbf{f}_L/\rho(T_m)| = 60 \text{ m s}^{-2}$ und $|\mathbf{g}| = 9,81 \text{ m s}^{-2}$ anhand einer betragsmäßigen Abschätzung des Verhältnisses zwischen Lorentz-Kraft und Gewichtskraft erahnen:

$$\frac{|\mathbf{j} \times \mathbf{B}|}{|\rho(T_m)\mathbf{g}|} = \frac{|\mathbf{f}_L/\rho(T_m)|}{\mathbf{g}} \approx 612 \% . \quad (2.9)$$

Streng genommen setzt sich die Lorentz-Kraft dabei aus einem konservativen und einem nicht-konservativen Anteil zusammen, während die Gravitationskraft einem konstanten Gradientenfeld entspricht. Um den beim RGS-Prozess im Spaltbereich gewünschten Retentionseffekt zu erzeugen, muss der Gradientenanteil der Lorentz-Kraft aber zwangsläufig in der selben Größenordnung liegen wie der entsprechende Anteil der Gewichtskraft, was sich auch quantitativ zeigen lässt [Beckstein u. a. 2014, 2015a]. Der nicht-konservative Anteil der Lorentz-Kraft beeinflusst die Bewegung der freien Oberfläche dagegen indirekt durch die angetriebene Strömung.

Damit wurde qualitativ demonstriert, dass die Wechselwirkung zwischen Magnetfeld und Strömung die großskalige Dynamik beim RGS-Verfahren dominiert. Sich diesem Phänomen numerisch zu widmen, lohnt sich aber nicht nur aus Sicht der RGS-Technologie, sondern auch für alle ähnlichen Prozesse der metallurgischen MHD, bei welchen dieses Phänomen dominant in Erscheinung tritt.

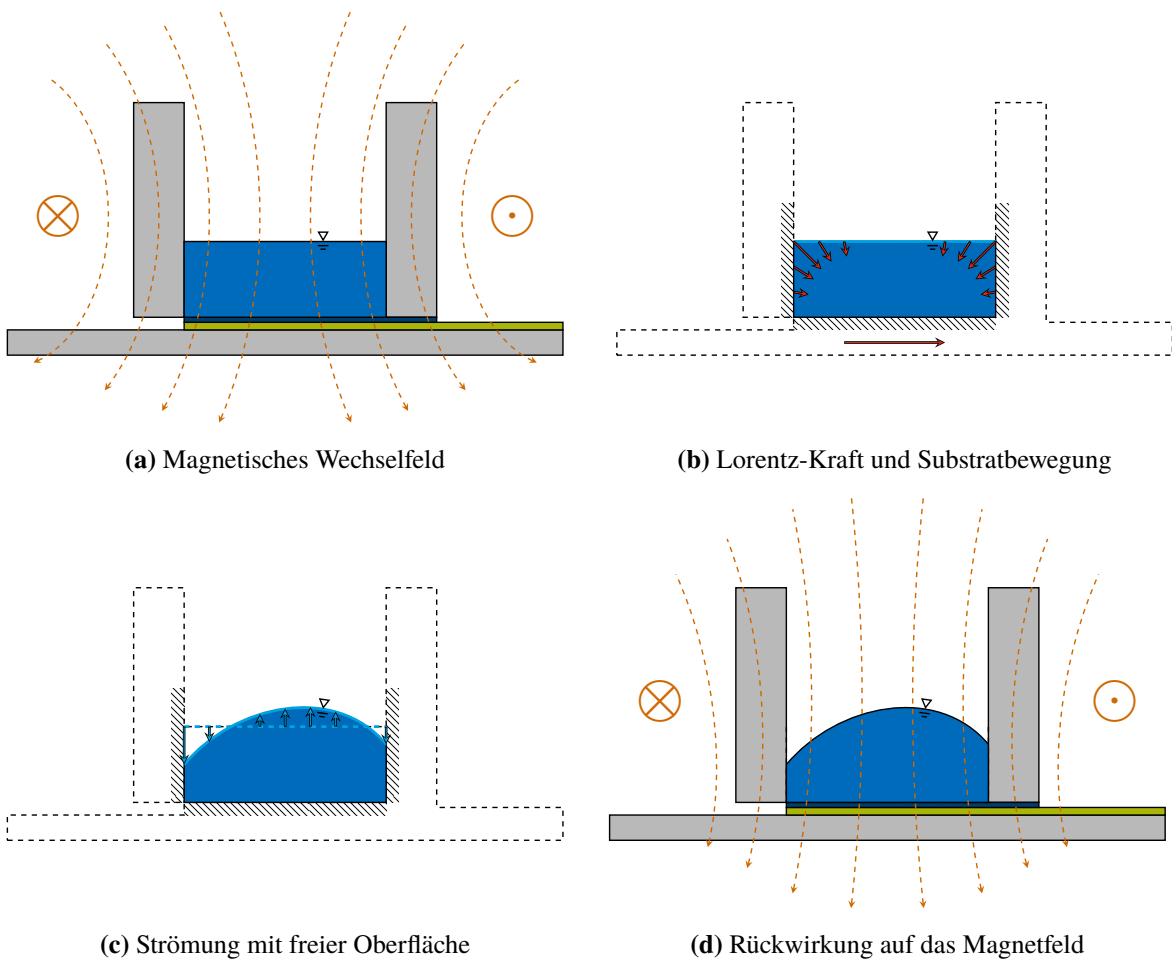


Abbildung 2.6: Magnetohydrodynamische Wechselwirkung durch die Bewegung der freien Oberfläche beim RGS-Verfahren: Das magnetische Wechselfeld (a) erzeugt eine elektromagnetische Kraftwirkung (b). Zusammen mit der Substratbewegung ergibt sich daraus eine Strömung mit freier Oberfläche (c). Durch die Verlagerung induzierter Ströme entsteht eine Rückwirkung auf das Magnetfeld (d). In der Folge ändert sich die Lorentz-Kraft und damit wiederum das Verhalten der Strömung.

2.3 Existierende Modellierungsansätze

Am Beispiel des RGS-Prozesses wurde in diesem Kapitel bisher gezeigt, dass die Modellierung von Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder einen wichtigen Forschungsgegenstand auf dem Gebiet der metallurgischen MHD darstellt. Im aktuellen Abschnitt werden nun existierende Ideen und Ansätze zur Modellierung solcher Mehrfeldprobleme der MD und HD aus der Literatur zusammengetragen und vorgestellt, welche numerischen Lösungsmethoden es für die physikalischen Teilaspekte aus Abschnitt 2.1 sowie zur Erfassung der freien Oberfläche gibt. Dabei besteht aber weniger ein Anspruch auf Vollständigkeit, sondern vielmehr soll eine bereits bestehende Softwareplattform identifiziert werden, die sich z. B. für die Lösung des gekoppelten Systems partieller DGLn (2.8a) und (2.8b) effizient nutzen lässt. Eine geeignete Software sollte zudem möglichst quell-offen und leicht erweiterbar sein sowie idealerweise eine große Nutzerbasis und Funktionalität haben. Weiterhin wird im Verlauf dieses Abschnittes untersucht, ob und ggf. wie ähnliche dreidimensionale Problemstellungen von anderen Autoren bereits gelöst wurden und welche nutzbaren Erkenntnisse sich daraus in Bezug auf mögliche Softwarelösungen ergeben.

Zur numerischen Berechnung partieller DGL wird die gesuchte kontinuierliche Lösung auf eine bestimmte Anzahl diskreter Werte (Freiheitsgrad) reduziert und das zugehörige Lösungsgebiet in der Regel durch ein numerisches Gitter abgebildet, welches die Topologie bzw. die Anordnung der diskreten Werte repräsentiert. Zur Bestimmung dieser unbekanntenen Werte löst man dann üblicherweise ein lineares Gleichungssystem, das sich im weiteren Sinne aus der Approximation partieller Ableitungen ergibt. Das konkrete Vorgehen zur Konstruktion eines solchen Gleichungssystems versteht man dabei als Diskretisierung.

Die älteste Technik zur Lösung partieller DGLn ist die **Finite-Differenzen-Methode (FDM)**, deren Ursprünge bis ins 18. Jahrhundert zurück reichen [siehe [Jordan 1950](#), Kapitel 1]. Bei der **FDM** werden partielle Ableitungen an einem Gitterpunkt direkt über finite Differenzen benachbarter Werte approximiert. Da diese Vorgehensweise für einfache Geometrien sehr effektiv ist und eine hohe Genauigkeit ermöglicht, wird die **FDM** bis heute sowohl für elektromagnetische Berechnungen [[Tafløve u. Hagness 2005](#)] als auch für strömungsmechanische Probleme eingesetzt [[Anderson 1995](#); [Ferziger u. Perić 2002](#)]. Für Anwendungen mit komplexen Geometrien, wie im Falle des **RGS-Modells** aus [Abbildung 2.4](#), ist sie jedoch eher ungeeignet [vgl. [Ferziger u. Perić 2002](#), Abschnitt 2.6.2 und Kapitel 3]. Die verfügbare Software auf Basis der **FDM** ist auch sehr begrenzt und man findet bekanntere Implementierungen hauptsächlich im Bereich der **MD** – beispielsweise eignen sich die beiden quelloffenen Programme *Meep* [[Massachusetts Institute of Technology 2017](#); [Oskooi u. a. 2010](#)] und *Angora* [[Capoglu 2017](#)] zur numerischen Berechnung der vollständigen Maxwell-Gleichungen im Zeitbereich.

Im Hinblick auf den Teilaspekt der **MD** aus [Abschnitt 2.1](#) werden entsprechende Problemstellungen heute vorrangig auf Basis der **Finite-Elemente-Methode (FEM)** adressiert [[Binns u. Lawrenson 1973](#); [Binns u. a. 1992](#); [Monk 2003](#)]. Wie in [Felippa \[2001\]](#) gezeigt, geht die Entwicklung der **FEM** methodisch bis in die 1930er-Jahre zurück, obwohl in der Literatur oftmals die Arbeit von [Turner u. a. \[1956\]](#) als Pionierarbeit zitiert wird [z. B. [Szabó u. Babuška 1991](#)]. Bei der **FEM** wird eine zu lösende partielle **DGL** zunächst mit einer Wichtungsfunktion multipliziert und dann in Integralform gebracht. Das Lösungsgebiet der **DGL** wird vollständig in finite Elemente mit zuvor definierten, polynomiellen Ansatzfunktionen zerlegt und die Integralform wiederum als Summe der einzelnen Elemente zusammen mit Stetigkeitsbedingungen ausgewertet. Die partiellen Ableitungen der **DGL** werden dabei indirekt über die Ansatzfunktionen approximiert. Diese Herangehensweise ermöglicht sowohl eine rigorose und systematische Abschätzung numerischer Fehler als auch die Nutzung beliebig komplexer Geometrien durch Elemente unterschiedlicher Gestalt [[Ferziger u. Perić 2002](#), Abschnitt 2.6.3]. Ursprünglich stammt die **FEM** aus dem Gebiet der numerischen Festkörpermechanik, wo sie sich heute de facto als Standard etabliert hat [[Szabó u. Babuška 1991](#); [Bathe 1996, 2002](#)]. Durch ihre große Flexibilität und Zuverlässigkeit wird die Technik aber inzwischen auch in vielen anderen Bereichen der Physik wie der Strömungsmechanik [[Donea u. Huerta 2003](#); [Zienkiewicz u. a. 2005](#)] und eben auch für elektromagnetische Probleme eingesetzt. Damit ist sie zur Lösung von Mehrfeldproblemen prinzipiell gut geeignet [[Zimmerman 2006](#)]. Entsprechend existiert auf Grundlage der **FEM** eine große Anzahl quelloffener Programme, wie z. B. *FreeFEM++* [[Hecht 2017, 2012](#)], *CalculiX* [[Dhondt 2017, 2004](#)], *GetDP* [[University of Liège 2017](#); [Geuzaine 2008](#)] oder *Elmer* [[CSC - IT Center for Science 2017](#); [Gagliardini u. Zwinger 2008](#)], als auch proprietäre Software, wie beispielsweise

COMSOL Multiphysics [COMSOL 2016] und *ANSYS* [ANSYS 2017a]. Die ausgewählten Softwarelösungen sind dabei alle modular aufgebaut, um verschiedene physikalische Teilaspekte miteinander zu koppeln. Neben solchen Werkzeugen, die sich universell einsetzen lassen, existiert aber auch Software, die nur für bestimmte Probleme konzipiert ist, wie z. B. die kommerziellen Programme *Cobham Opera 2D* [Cobham 2016b], *Cobham Opera 3D* und *ANSYS Maxwell* [ANSYS 2017d] für elektromagnetische Berechnungen.

Für die Maxwell-Gleichungen im Sinne der *MQS* existieren überwiegend im Kontext der *FEM* zahlreiche Lösungsansätze, wobei zur numerischen Berechnung der elektromagnetischen Felder vorwiegend Potentialformulierungen eingesetzt werden [Carpenter 1977; Morisue 1982, 1993; Bíró u. Preis 1989; Bíró 1999; Bíró u. Preis 2000; Xu u. Simkin 2004; Bíró u. Valli 2007]. Weiterhin lässt sich die hohe Stromstärke innerhalb einer typischen Induktionsspule, wie für den *RGS*-Prozess in Abbildung 2.4 dargestellt, technisch meist nur durch den Einsatz eines Schwingkreises über eine entsprechend ausgelegte Kondensatorbank realisieren. Dadurch treten allgemein bei Induktionsprozessen oft harmonisch oszillierende Felder auf, deren Frequenz typischerweise in der Größenordnung von 1 kHz und darüber liegt [vgl. Abschnitt 2.1]. Hinsichtlich des Rechenaufwandes ist es somit von Vorteil, anstelle der instationären Maxwell-Gleichungen eine zeitharmonische Formulierung im Frequenzraum zu wählen [Badea u. a. 2001], was sinngemäß ebenso für die Induktionsgleichung (2.8a) möglich ist. Entsprechende Implementierungen auf Grundlage komplexwertiger Algebra finden sich in nahezu allen zuvor genannten *FEM*-Programmen.

Bezüglich des Teilaspektes der *HD* aus Abschnitt 2.1 ist hingegen die *Finite-Volumen-Methode (FVM)* weit mehr verbreitet als andere Methoden [Ferziger u. Perić 2002; Versteeg u. Malalasekera 2007; Cohen u. a. 2012]. Im Gegensatz zur *FEM* stammt die *FVM* auch historisch gesehen aus dem Gebiet der numerischen Strömungsmechanik (*Computational Fluid Dynamics, CFD*) und lässt sich auf die Pionierarbeiten von McDonald [1971] und Maccormack u. Paullay [1972] zurückführen. Bei der *FVM* wird eine zu lösende partielle *DGL* – recht ähnlich zur *FEM* – auch in Integralform gebracht, zuvor allerdings nicht gewichtet. Das Lösungsgebiet der *DGL* wird vollständig in finite Volumina aufgeteilt und die Integralform wiederum als Summe der einzelnen Volumina ausgewertet. Die partiellen Ableitungen der *DGL* werden dabei indirekt über Werte auf Grenzflächen benachbarter Volumina ausgedrückt und dort schließlich durch Interpolation approximiert. Dieses Konzept verleiht der *FVM* einerseits eine Erhaltungseigenschaft und macht sie andererseits, was komplexe Geometrien anbelangt, ähnlich flexibel wie die *FEM*. Die Tatsache, dass bei der *FVM* allen numerischen Größen eine physikalische Bedeutung zukommt, erlaubt zudem einen sehr intuitiven Umgang [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 2.6.2]. Obwohl die *FVM* zwar primär für strömungsmechanische Zwecke genutzt wird, eignet sie sich ebenso für Problemstellungen der Festkörpermechanik [Oñate u. a. 1994; Demirdžić u. a. 1997; Jasak u. Weller 2000; Jasak 2007; Cardiff u. a. 2016], elektromagnetische Anwendungen [Haber u. a. 2000; Aruliah u. a. 2001; Huang 2010; Ehrhard 2015; Djambazov u. a. 2015] bzw. allgemein zur Lösung von Mehrfeldproblemen [z. B. Cross u. a. 1996; Taylor 1996; Jasak 2006; Beale u. a. 2015]. Weit verbreitete Vertreter von quelloffener Software auf Basis der *FVM* sind beispielsweise *OpenFOAM* [OpenFOAM Foundation 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998] und die erweiterte Version *foam-extend* [Wikki 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998], *SU²* [Stanford University 2017; Palacios u. a. 2013] sowie *Code_Saturne* [Électricité de France 2017]. Daneben gibt es aber natürlich

auch im CFD-Bereich kommerzielle Programme wie z. B. *STAR-CCM+* [Siemens 2017], *ANSYS CFX* [ANSYS 2017b] oder *ANSYS Fluent* [ANSYS 2017c], welche auf der FVM basieren. All diese Softwareplattformen bringen grundlegende Module und Funktionen für Mehrfeldprobleme mit, wobei die Funktionalität in Verbindung mit der FVM hauptsächlich Fluid-Struktur-Interaktion, Wärmeleitung, Verbrennungsvorgänge, Mehrphasenströmungen und prinzipiell auch MHD-Strömungen umfasst. Was die MHD-Anwendungen angeht, so sind im CFD-Bereich aber meist Kanalströmungen mit perfekt leitfähigen oder isolierenden Wänden in einem statischen Magnetfeld gemeint, womit sich entsprechende Software nicht zur Untersuchung der Wechselwirkung von HD und MD beim RGS-Prozess einsetzen lässt. Auf der anderen Seite weisen bekannte FVM-Programme im Vergleich zu den meisten FEM-Werkzeugen durch ihre Funktionalität deutliche Vorteile auf, wenn es beispielsweise darum geht, turbulente Strömungen durch Mittelung oder Filterung im Rahmen einer Reynolds-gemittelten Simulation (Reynolds-Averaged simulation, RAS) oder Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation, LES) zu analysieren [Pope 2000; Ferziger u. Perić 2002; Fröhlich 2006]. Darüber hinaus ist in den FVM-Codes *SU²*, *foam-extend* und *STAR-CCM+* sogar zusätzlich eine FEM implementiert, die sich für Mehrfeldprobleme in Kombination mit der FVM nutzen ließe.

Neben der FDM, FEM und FVM wird zur Lösung partieller DGLn, wie Gleichung (2.8a) und (2.8b), auch die Spektral-Elemente-Methode (SEM) [Karniadakis u. Sherwin 1999; Deville u. a. 2002] eingesetzt, die sich schwerpunktmäßig im Bereich der Fluidmechanik in Anlehnung an eine Erweiterung der FEM für beliebige Polynomgrade entwickelt hat [Szabó u. Mehta 1978; Babuška u. a. 1981; Maday u. Patera 1989; Babuska u. Suri 1994]. Diese Technik verhält sich grundsätzlich ähnlich wie die FEM, ermöglicht jedoch wesentlich genauere Approximationen. Bekanntere quelloffene Programme in diesem Bereich sind *NEK5000* [Argonne National Laboratory 2017], *Nektar++* [Imperial College London and University of Utah 2017; Cantwell u. a. 2015] und *Feel++* [Feel++ Consortium 2017; Prud'Homme u. a. 2012]. Im direkten Vergleich zu Softwarelösungen der FEM und FVM ist die Popularität und Funktionalität von Software auf Basis der SEM aber weitaus geringer.

Obwohl zur numerischen Berechnung der partiellen DGLn (2.8a) und (2.8b) weitere Möglichkeiten, wie z. B. statistische Methoden, gitterlose Techniken oder hybride Umsetzungen, existieren, basieren offensichtlich die meisten Programme mit großer Nutzerbasis und umfangreicher Funktionalität auf der FEM oder FVM. Bevor nun im Weiteren untersucht wird, welche Umsetzungen anderer Autoren zur Modellierung von dreidimensionalen Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder bereits bestehen, soll zunächst geklärt werden, welche grundlegende Techniken für inkompressible Strömungen mit der Impulserhaltungsgleichung (2.8b) zur Erfassung einer freien Oberfläche bzw. zur Beschreibung einer Phasengrenze im Allgemeinen existieren.

In dieser Hinsicht findet man in der Literatur eine sehr große Auswahl verschiedener Methoden, wobei alle Ansätze im weiteren Sinne bestimmte Indikatoren zur Lokalisierung der Phasengrenze bzw. zur Zuordnung der unterschiedlichen Phasen nutzen [Hyman 1984; Scardovell u. Zaleski 1999; Maitre 2006; Prosperetti u. Tryggvason 2007; Tryggvason u. a. 2011]. Dabei unterscheidet man die Techniken häufig anhand dreier Kriterien: nach Art der Phasenindikatoren in Markerpartikel und Markerfunktionen, nach ortsfestem und bewegtem Gitter zur Strömungsberechnung sowie nach der Betrachtungsweise der Indikatoren bzw. des Gitters aus Eulerscher und Lagrangescher Sicht. Allerdings werden sowohl die Einteilungen als auch entsprechende Begrifflichkeiten in der Literatur oft

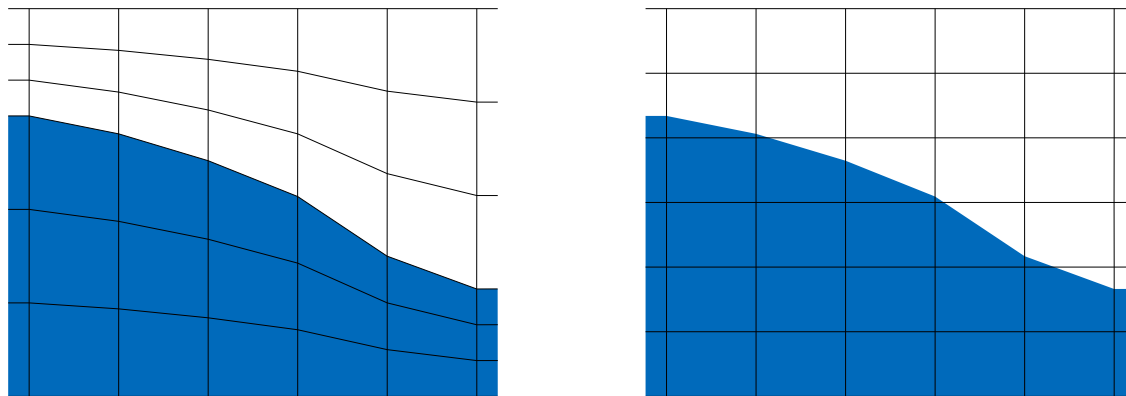
nicht konsistent genutzt. Im Folgenden sollen die wichtigsten Methoden kurz vorgestellt und hinsichtlich einer Eignung zur Modellierung der freien Oberfläche beim RGS-Prozess bewertet werden.

Eine der ältesten Techniken zur Beschreibung von Phasengrenzen ist die Marker and Cell (MAC)-Methode [Welch u. a. 1966]. Diese auch als „Volume-Tracking“ bekannte Methode basiert auf der Verfolgung von Volumenmarkern [z. B. Maitre 2006, Abschnitt 2.3.1], wobei jede Phase durch eine Gruppe unabhängiger Markerpartikel repräsentiert wird. Alle Partikel folgen dabei exakt der Fluidströmung die auf einem festen Gitter berechnet wird. Die Phasengrenze ist bei dieser Methode allerdings nicht explizit gegeben, sondern die Eigenschaften beider Phasen werden über die Verteilung der Volumenmarker rekonstruiert. Durch die Unabhängigkeit der Markerpartikel ist die Technik zwar einerseits sehr flexibel, andererseits sind zur Umsetzung äußerst viele Marker notwendig und Änderungen der Partikeldichte können zu Schwierigkeiten bei der Lokalisierung der Phasengrenze führen [Griebel u. a. 1995]. Da es durch die indirekte Erfassung auch schwierig ist Oberflächeneffekte zu berücksichtigen, ist die Methode zur Modellierung der freien Oberfläche beim RGS-Prozess eher ungeeignet.

Als Alternative zu Volumenmarkern bietet sich die Nutzung von Oberflächenmarkern an, was in der Literatur auch als „Front-Tracking“ bezeichnet wird [Glimm u. a. 1988; Unverdi u. Tryggvason 1992; Tryggvason u. a. 2001; Du u. a. 2006]. Bei dieser Technik werden die Marker in der Regel nur auf der Grenzfläche positioniert und zusätzlich die Nachbarschaftsbeziehungen der Markerpartikel berücksichtigt – in anderen Worten wird die Phasengrenze also durch ein eigenständiges Oberflächengitter erfasst. Dadurch können im Vergleich zum „Volume-Tracking“ viele Marker eingespart werden und die Grenzfläche lässt sich sehr genau lokalisieren [Scardovell u. Zaleski 1999, Abschnitt 5.1]. Allerdings macht ein Oberflächengitter wiederum topologische Änderungen anspruchsvoller [Prosperetti u. Tryggvason 2007, Abschnitt 3.4]. Die größte Herausforderung bei der Anwendung von Oberflächenmarkern liegt aber in der Realisierung eines konsistenten Transfers numerischer Daten, wie der Fluidgeschwindigkeit oder der Wirkung der Oberflächenspannung, zwischen festem Gitter der Strömung und mitbewegtem Oberflächengitter. Diese Kopplung der durch die Oberfläche separierten Phasen lässt sich über die Immersed-Boundary-Methode (Immersed boundary method, IBM) bewerkstelligen, welche auf die Arbeiten von Peskin [1977, 2002] zurückgeht und ursprünglich zur Erfassung einer Fluid-Struktur-Interaktion in der Biologie eingesetzt wurde. Durch die hohe erreichbare Genauigkeit ist der Einsatz von Oberflächenmarkern in Verbindung mit der IBM prinzipiell sehr gut geeignet, um eine Phasengrenze wie die freie Oberfläche beim RGS-Prozess zu erfassen [Mittal u. Iaccarino 2005].

Sowohl beim „Volume-Tracking“ als auch beim „Front-Tracking“ werden die Marker jeweils in Lagrangescher Betrachtungsweise mit der Fluidströmung mitbewegt, wohingegen die Strömung aus Eulerscher Sicht auf einem ortsfesten Gitter betrachtet wird. In der Literatur werden diese Techniken begrifflich zwar häufig dem „Tracking“ zugeordnet [z. B. Hyman 1984, Abschnitt 2; Maitre 2006, Abschnitt 2.3.1], stellenweise findet man sie aber auch lediglich unter dem Begriff der Marker-Methoden [z. B. Scardovell u. Zaleski 1999, Abschnitt 5.1].

Ein Spezialfall ergibt sich in Bezug auf die Verwendung von Oberflächenmarkern, wenn anstelle von zwei unabhängigen Gittern ein Rand des zur Strömungsberechnung genutzten Gitters gleichzeitig als



(a) Interface-Tracking Technik (ITT)

(b) Interface-Capturing Technik (ICT)

Abbildung 2.7: Prinzipielle Unterschiede zwischen ITT und ICT als konträre Methoden zur Modellierung eines Phasenübergangs: Bei der ITT wird die Phasengrenze über die Position von Gitterpunkten im Sinne von Markerpartikeln verfolgt und das restliche Gitter entsprechend angepasst. Bei der ICT ergibt sich die Lage der Phasengrenze hingegen aus der Verteilung einer Markerfunktion die in diskreter Form von einem ortsfesten Gitter erfasst wird.

Oberflächengitter und dessen Gitterpunkte direkt als Marker genutzt werden. Der bewegliche Rand, der in einem solchen Fall unmittelbar die Phasengrenze repräsentiert, macht auch eine Anpassung des restlichen Gitters erforderlich. Dieses Prinzip ist in Abbildung 2.7a dargestellt. Um die Strömung auf diesem dynamisch bewegten Gitter mathematisch zu beschreiben, ist somit ein nahtloser Übergang zwischen Eulerscher und Lagrangescher Betrachtungsweise nötig, was sich wiederum mit der Arbitrary-Lagrangian-Eulerian (ALE) verwirklichen lässt [Hughes u. a. 1981; Donea 1983]. Für diese eigentlich spezielle „Tracking“-Methode hat sich heute die allgemeine Bezeichnung Interface-Tracking Technik (Interface-tracking technique, ITT) etabliert [z. B. Muzaferija u. Perić 1997]. Da bei der ITT im Gegensatz zur IBM nur ein einziges Gitter existiert, können die Rand- bzw. Übergangsbedingungen an der Phasengrenze direkt in der Impulserhaltungsgleichung (2.8b) berücksichtigt werden. Genau wie mit der IBM kann mit der ITT zudem eine sehr hohe Genauigkeit bei der Lokalisierung und Krümmungsberechnung erzielt werden, womit sich diese Methode ideal zur Modellierung freier Oberflächen wie beim RGS-Verfahren eignet, wo Oberflächenspannungseffekte stark ausgeprägt sind [Tuković u. Jasak 2012]. Auf der anderen Seite können mit der ITT topologische Änderungen nur durch explizite Maßnahmen realisiert werden und die Technik verlangt der Diskretisierung eine hohe Flexibilität ab. Anwendungsbeispiele für die ITT finden sich sowohl im Bereich der FEM [Johnson u. Tezduyar 1994; Maury 1996; Loöhner u. Yang 1996; Dai u. Schmidt 2005; Quan u. Schmidt 2007; Quan u. a. 2009; Ganesan 2006] als auch im Kontext der FVM [Demirdžić u. Perić 1988; Muzaferija u. Perić 1997; Tuković 2005; Jasak u. Tuković 2007; Tuković u. Jasak 2008, 2012].

Eine weitere Gruppe numerischer Verfahren zur Erfassung einer Grenzfläche nutzt dagegen eine Markerfunktion als Phasenindikator. Bei dieser sogenannten Interface-Capturing Technik (Interface-capturing technique, ICT) ergibt sich die Lage der Phasengrenze im Vergleich zur IBM oder ITT indirekt aus einem definierten Level der jeweiligen Markerfunktion, die in diskreter Form auf einem ortsfesten Gitter erfasst und mit der Fluidströmung transportiert wird. Das zugrundeliegende Prinzip der ICT ist in Abbildung 2.7b illustriert. Gegenüber der ITT besteht damit einerseits der Vorteil, dass

topologische Änderungen der Phasengrenze sehr leicht beschreibbar sind, andererseits ergeben sich Nachteile hinsichtlich der Modellierung von Oberflächeneffekten, da diese bei der ICT qualitativ von der Approximation des Gradienten der Markerfunktion abhängen [vgl. Brackbill u. a. 1992; Jacqmin 1996]. Die Dynamik der Phasengrenze lässt sich bei Verfahren der ICT über eine entsprechende Erhaltungs- bzw. Transportgleichung für die Markerfunktion beschreiben. Je nach Definition von Markerfunktion und Transportgleichung können im Kontext der ICT drei größere Untergruppen identifizieren werden: die **Volume-of-Fluid-Methode**, die **Level-Set-Methode** und die **Phasenfeld-Methode** [siehe z. B. Maitre 2006, Abschnitt 2.3.2 sowie Prosperetti u. Tryggvason 2007, Abschnitt 3.2, 3.3, 3.5 und 3.6]. Ein visueller Vergleich der unterschiedlichen Markerfunktionen ist beispielsweise in Vukčević [2016, Abbildung 2.1] zu finden.

Die insbesondere im Zusammenhang mit der FVM sehr weit verbreitete **Volume-of-Fluid-Methode (Volume of fluid, VOF)** wurde ursprünglich von Hirt u. Nichols [1981] vorgeschlagen und nutzt als Markerfunktion den Volumenanteil einer Phase. Durch den diskontinuierlichen Verlauf des Volumenanteils am Phasenübergang zweier nicht mischbarer Fluide ist es mit der VOF streng genommen nicht möglich, die zugehörige Erhaltungsgleichung phasenübergreifend zu beschreiben. Aus numerischer Sicht lässt sich der Verlauf des Volumenanteils zwar regularisieren, doch das Lösen der entsprechenden Transportgleichung stellt auf Grund ihres rein konvektiven Charakters eine große Herausforderung dar. Viele Verfahren zur klassischen Lösung der Gleichung verursachen eine numerisch bedingte Diffusion, was unmittelbar zu einem „Verschmieren“ des Volumenanteils führt. Daher wird die VOF-Transportgleichung üblicherweise nicht direkt gelöst, sondern es kommen stattdessen geometrische Algorithmen zum Einsatz [Noh u. Woodward 1976; Ubbink u. Issa 1999; Gueyffier u. a. 1999; Pilliod u. Puckett 2004; Francois u. a. 2006; Aulisa u. a. 2007]. Diese spezifischen VOF-Algorithmen, welche die Erhaltungseigenschaft des Phasenanteils exakt erfüllen, wurden auf Grund ihrer Komplexität zuerst nur für zweidimensionale Probleme entwickelt. Inzwischen existieren aber allgemein nutzbare Umsetzung für dreidimensionale Fälle [López u. Hernández 2008; Roenby u. a. 2016]. Als Alternative können auch direkte Lösungsmethoden eingesetzt werden, die einer numerisch verursachten Diffusion gezielt durch eine zusätzliche Kompression entgegenwirken. Dazu wird die VOF-Gleichung in der Regel modifiziert [Zalesak 1979; Ubbink 1997; Rusche 2002; Weller 2008]. Die direkte Lösung ist numerisch gesehen zwar stabiler, die Genauigkeit der Propagation fällt jedoch tendenziell geringer aus als bei geometrischen Algorithmen – detaillierte Vergleiche finden sich dazu beispielsweise in Özkan u. a. [2007] und Deshpande u. a. [2012]. Der größte Nachteil der VOF liegt darin, dass die Krümmung der Phasengrenze infolge des diskontinuierlichen Volumenanteils nur sehr ungenau berechnet werden kann.

Eine Technik, die sowohl in Verbindung mit der FVM als auch mit der FEM oft eingesetzt wird, ist die **Level-Set-Methode (Level-set method, LSM)** [Sethian 1999; Osher u. Fedkiw 2002]. Das Konzept der LSM wurde von Osher u. Sethian [1988] entwickelt und unterscheidet sich von der VOF im Wesentlichen durch eine verallgemeinerte Markerfunktion, wodurch primär die Diskontinuität am Phasenübergang vermieden werden soll. Üblicherweise wird dazu bei der LSM eine vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion genutzt. Da die zugehörige Transportgleichung bzw. Level-Set-Gleichung für zwei nicht mischbare Fluide mit der VOF-Gleichung übereinstimmt, bestehen bei der LSM ähnliche numerische Schwierigkeiten hinsichtlich geeigneter Lösungsverfahren. Durch die verallgemeinerte

Markerfunktion wird die Transportgleichung im Zusammenhang mit der **LSM** jedoch typischerweise direkt gelöst und numerisch bedingte Artefakte in regelmäßigen Abständen durch eine Reinitialisierung entfernt [Sussman u. a. 1994; Sethian u. Smereka 2003]. Dadurch wird wiederum die Erhaltungseigenschaft des Phasenanteils nicht automatisch erfüllt, was dem größten Nachteil der **LSM** entspricht.

Bei der letzten größeren Untergruppe der **ICT** unterscheidet sich der methodische Ansatz gegenüber der **VOF** oder **LSM** stark. Das liegt daran, dass bei der sogenannten **Phasenfeld-Methode (Phase-field method, PFM)** von vornherein ein stetiger – thermodynamisch motivierter – Übergang zwischen zwei verschiedenen Phasen angenommen wird [Emmerich 2003, Abschnitt 4]. Diese stetige Markerfunktion wird im Kontext der **PFM** als Phasenfeld bezeichnet. Aus energetischen Überlegungen wird damit eine Gleichung abgeleitet, die zwar in ihrer Grundform einer Transportgleichung ähnelt, tatsächlich jedoch eine charakteristische Eigendynamik ausgedrückt [Anderson u. McFadden 1997; Anderson u. a. 1998, 2000; Jacqmin 1996, 2000]. Daher ist der genaue Verlauf des Phasenfeldes über die Phasengrenze hinweg sehr wichtig, um deren Bewegung korrekt wiederzugeben [Sethian u. Smereka 2003, S. 351]. Durch den stetigen Übergangsbereich im Phasenfeld ist auch eine entsprechend feine Auflösung nötig, weshalb die **PFM** bevorzugt mit adaptiven Gittern kombiniert und vermehrt mit der **FEM** genutzt wird [Aland u. a. 2010; Aland u. Voigt 2011; Aland u. a. 2013]. Setzt man die **PFM** zur Erfassung des Phasenübergangs zweier nicht mischbarer Fluide ein, so verhält sie sich aber qualitativ ähnlich wie die **LSM** [Prosperetti u. Tryggvason 2007, Abschnitt 3.6]. In Sun u. Beckermann [2007, 2008] wird sogar eine generalisierte **ICT** auf Basis der Phasenfeldgleichung vorgestellt, die im weiteren Sinne als eine **LSM** mit impliziter Reinitialisierung betrachtet werden kann [Vukčević 2016].

Abgesehen von der **VOF**, **LSM** und **PFM** gibt es zusätzlich verschiedene hybride Methoden, wie zum Beispiel die Kombination von Oberflächenmarkern mit der **LSM** in Form der sogenannten **Partikel-Level-Set-Methode (Particel-Level-Set, PLS)** [Enright u. a. 2002] oder die Kopplung von **LSM** und **VOF**, die als **gekoppelte Level-Set-VOF-Methode (Coupled Level-Set-VOF, CLSVOF)** bekannt ist [Sussman u. Puckett 2000].

Durch den Einsatz einer transportierten Markerfunktion ist es bei allen Methoden der **ICT** in erster Linie die Flexibilität, die diese Techniken für die Modellierung von Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder grundsätzlich attraktiv macht, sobald größere Verformungen der Phasengrenze zu erwarten sind. Eine besondere Schwierigkeit ergibt sich bei der Anwendung der **ICT** für Induktionsprozesse wie z. B. den **RGS**-Prozess durch das sehr große Dichteverhältnis zwischen leitfähigem Fluid und der umgebenden Atmosphäre, welches in der Größenordnung von $1 \cdot 10^4$ bis $1 \cdot 10^5$ liegt [vgl. Tabelle 2.1]. In Kombination mit der sprunghaften Änderung der Lorentz-Kraft über die freie Oberfläche hinweg können leicht unphysikalische Strömungen und numerische Artefakte entstehen. Zur Vermeidung solcher Probleme existieren für die **VOF** sogar speziell angepasste Lösungsmethoden [Peşteanu u. Baake 2011a, b], allerdings beschränkt sich deren Anwendbarkeit bisher auf zweidimensionale bzw. axialsymmetrische Geometrien. Für kleine bis mittlere Verformungen der freien Oberfläche stellt hingegen die **ITT** oder eine **IBM** aus Genauigkeitsgründen die bessere Wahl dar. Eine detaillierte Gegenüberstellung der **ITT** mit verschiedenen Vertretern der **ICT** findet man etwa in Marschall u. a. [2014] und Aland u. a. [2013] am Beispiel der Bewegung einer Taylor-Blase.

Beim Studium verfügbarer Literatur über Methoden zur Erfassung von Phasengrenzen ist besonders auffällig, dass nahezu alle vorgestellten Techniken bereits in *OpenFOAM* oder *foam-extend* implementiert oder zumindest genutzt wurden. Das betrifft sowohl die *IBM* [Jasak u. a. 2014; Constant u. a. 2016], die *ITT* [Tuković 2005; Jasak u. Tuković 2007; Tuković u. Jasak 2008, 2012] als auch zahlreiche Methoden der *ICT*, wie die *VOF* [Rusche 2002; Weller 2008; Deshpande u. a. 2012], die *LSM* [Vukčević 2016] und die *PFM* [Cai u. a. 2015; Weiss u. Donaldson 2017]. Darüber hinaus sind sogar Arbeiten über die hybriden Techniken der *PLS* und *CLSVOF* [Marić u. a. 2015; Menon u. a. 2016] zu finden. Hinsichtlich der Funktionalität heben sich damit sowohl *OpenFOAM* als auch *foam-extend* von vergleichbaren quelloffenen *FVM*-Codes, wie *SU²* und *Code_Saturne*, sowie allen größeren kommerziellen Programmen im *CFD*-Bereich wie, *STAR-CCM+*, *ANSYS CFX* und *ANSYS Fluent*, sehr deutlich ab. Allerdings ist sowohl die *ITT* als auch die *IBM* nur in *foam-extend* verfügbar.

Einen annähernd vergleichbaren Funktionsumfang findet man unter den zuvor genannten *FEM*-Codes ausschließlich mit der kommerziellen Software *COMSOL Multiphysics*. Die Programme *FreeFEM++* und *CalculiX* decken den Bereich der Strömungsmechanik eher rudimentär ab und *GetDP* stellt hauptsächlich Module für die Berechnung elektromagnetischer Probleme zur Verfügung. Die Software *Elmer* ist das einzige quelloffene Werkzeug, welches zur Modellierung der beiden Teilaspekte der *MD* und *HD* beim *RGS*-Verfahren etwas breiter aufgestellt ist. In *Elmer* sind beispielsweise grundlegende Module zur Berechnung turbulenter Strömungen vorhanden und die Phasengrenze ließe sich dort mit der *LSM* beschreiben. Die Tatsache, dass *Elmer* aber auch eine eigene Schnittstelle zur Kopplung mit *OpenFOAM* bereit stellt, unterstreicht einerseits erneut die Vorteile von *OpenFOAM* bzw. *foam-extend* hinsichtlich des Teilaspektes der *HD*, andererseits verdeutlicht diese Existenz aber wiederum das Fehlen geeigneter Lösungsmethoden für den Teilaspekt der *MD* in *FVM*-Programmen. Rein aus Effizienzgründen ist die Kopplung von *Elmer* und *OpenFOAM* bzw. allgemein eine Kombination verschiedener Codes aber nicht sinnvoll, da die einzelnen Methoden numerische Daten unterschiedlich handhaben. In dieser Hinsicht wäre es eher vorteilhaft, wenn sich die physikalischen Teilaspekte der *MD* und *HD* beim *RGS*-Prozess mit ein und der selben numerischen Technik modellieren ließen. Andernfalls kann die regelmäßig notwendige Interpolation der Daten in Verbindung mit dem Austausch geometrischer Änderungen durch die Bewegung der freien Oberfläche zu unnötigem Rechenaufwand führen.

Insofern ist es doch recht verwunderlich, dass man bezüglich magnetisch beeinflusster Strömungen mit freier Oberfläche, trotz großem Interesse an der Thematik [Fautrelle u. a. 2003; Asai 2012; Lielpeteris u. Moreau 2012], kaum Literatur zu einer geschlossenen Modellierung findet, die sich auf eine bestimmte Methode beschränkt. Eine Ausnahme bilden allerdings die erwähnenswerten Arbeiten von Bojarevics u. a. [2000]; Bojarevics u. Pericleous [2003]; Bojarevics u. a. [2004]; Pericleous u. a. [2006]; Bojarevics u. a. [2010], wo ähnliche Mehrfeldprobleme zur elektromagnetischen Levitation über eine spezielle Pseudo-Spektralmethode im Rahmen einer *RAS* gelöst werden. Dazu nutzen die Autoren einen selbst entwickelten Code namens *SPHINX*, der speziell für axialsymmetrische Fälle konzipiert ist. Als Erweiterung von *SPHINX* wird in [Easter u. a. 2011] zudem der Code *SPHINX 3D* für dreidimensional-sphärische Geometrien angedeutet, der ähnlich konzipiert ist wie *SPHINX*. Sowohl in *SPHINX* als auch in *SPHINX 3D* wird die freie Oberfläche durch eine Koordinatentransformation auf eine Einheitssphäre realisiert, was prinzipiell mit einem angepassten Gitter im Rahmen einer

ITT vergleichbar ist. Beide Programme sind jedoch weder frei verfügbar, noch eignet sich eine axialsymmetrische oder sphärische Beschreibung für die numerische Simulation des RGS-Verfahrens.

Umsetzungen, die auf eine Kombination aus FEM und FVM/FDM setzen, sind etwas weiter verbreitet. Erste zwei- und dreidimensionale Simulationen von elektromagnetisch getriebenen Strömungen mit freier Oberfläche findet man unter anderem im Zusammenhang mit der Untersuchung von Rührvorgängen beim Strangguss von Stahl [Fujisaki u. Ueyama 1998; Fujisaki u. a. 2000]. Die dabei eingesetzte Methode basiert auf einer Kombination von FEM und FDM in Verbindung mit der VOF zur Erfassung der Phasengrenze. Die Wechselwirkung zwischen MD und HD wird dazu jedoch sehr stark vereinfacht und die elektromagnetische Berechnung sogar nur einmalig zu Beginn einer Rechnung durchgeführt.

In Kirpo [2008] werden beispielsweise die kommerziellen Programme ANSYS Classic [ANSYS 2008] (FEM) sowie ANSYS Fluent (FVM) und ANSYS CFX (FVM) eingesetzt, um Untersuchungen zur Turbulenz und dem Partikeltransport von Strömungen in Induktionsöfen anzustellen. Für ein axialsymmetrisches Modell wird in Kirpo [2008, Abschnitt 4.5] die rein hydrostatische Deformation einer freien Oberfläche bei der Durchführung einer RAS berücksichtigt. Zur Lösung werden Strömung und Magnetfeld iterativ gekoppelt und die freie Oberfläche durch die VOF modelliert.

Die mit Abstand fortschrittlichste Entwicklung zeigt eine recht aktuelle Arbeit von Spitans [2015]. Darin wird eine dreidimensionale Modellierung vorgestellt, die auf einer ähnlichen Kombination der kommerziellen Programme ANSYS Maxwell (FEM) und ANSYS CFX bzw. ANSYS Fluent (FVM) in Verbindung mit der VOF beruht, wie in Kirpo [2008]. Zur Kopplung werden in Spitans [2015] jedoch ausgereifte und optimierte Algorithmen auf Dateibasis genutzt und zudem einige numerische Tricks zur Lösung der VOF-Gleichung angedeutet. In zugehörigen Veröffentlichungen [Spitans u. a. 2013, 2014, 2015a, b] wird damit anhand verschiedener Anwendungsfälle demonstriert, dass eine kombinierte Herangehensweise für große dreidimensionale Fälle mit vollständig abgebildeter Oberflächendynamik funktioniert. Obwohl sich die Arbeiten schwerpunktmäßig mit der elektromagnetischen Levitation befassen, wäre solch ein Modell also grundsätzlich auch zur Untersuchung des RGS-Prozesses geeignet. Folgt man der Argumentation in Spitans u. a. [2015a, b] allerdings aufmerksam, so findet man mehrere Hinweise darauf, dass die Kopplung der unterschiedlichen Programme einen merklichen Anteil des totalen Rechenaufwandes entsprechender Simulationen ausmacht. Konkrete Daten zu Simulationszeiten sind in den Artikeln aber nicht angegeben.

In einer recht neuen Veröffentlichung von Vencels u. a. [2017] wird ein frei verfügbares Werkzeug zur Kopplung der Codes OpenFOAM (FVM) und Elmer (FEM) präsentiert, das im Vergleich zu dateibasierter Kommunikation anscheinend einen effizienteren Datenaustausch über MPI [Argonne National Laboratory 2015] ermöglicht. Mit dem Einsatz dieser speziellen Schnittstelle zwischen Elmer und OpenFOAM führen die Autoren eine Simulation einer Strömung mit freier Oberfläche innerhalb eines Induktionsschmelztiegels durch. Die Anwendung wird aber nur für einen axialsymmetrischen Testfall gezeigt und auch hier deutet sich an, dass die numerische Berechnung mit einem hohen Rechenaufwand verbunden ist – wie viel davon speziell durch den Kopplungsalgorithmus verursacht wird, ist nicht aufgeschlüsselt. Auch hier wird der Phasenübergang mit der VOF beschrieben.

Es lässt sich demnach festhalten, dass zwar einige Umsetzungen zur Simulation von Strömungen mit freier Oberfläche unter der Wirkung eines elektromagnetischen Wechselfeldes existieren, davon

aber nur die Minderheit tatsächlich zur Lösung dreidimensionaler Problemstellungen wie dem RGS-Verfahren taugt. Die von anderen Autoren bisher genutzten Codes sind dabei größtenteils kommerzielle Programme oder interne Entwicklungen, sodass der Nutzen für die Allgemeinheit beschränkt ist. Neben der nicht frei verfügbaren Software lassen sich viele Realisierungen zudem durch fehlende Angaben technisch nicht nachstellen bzw. testen. Grundsätzlich deutet jedoch vieles darauf hin, dass die Kopplung unterschiedlicher Methoden nicht sonderlich effizient ist und daher vermieden werden sollte. Über eine eigene Implementierung auf Basis der kommerziellen Software *COMSOL Multiphysics* (FEM), zusammen mit einem extern gekoppelten Einsatz von *OpenFOAM* zur Strömungssimulation, konnte diese Tatsache zumindest für einen dateibasierten Datenaustausch bestätigt werden [Beckstein u. a. 2015b].

Mit Blick auf eine einheitliche numerische Technik wurden im Vorfeld dieser Arbeit auch bereits eigene Versuche unternommen, die Modellierung der Oberflächendynamik der MHD beim RGS-Prozess alleine mit *COMSOL Multiphysics* zu bewerkstelligen [Beckstein u. a. 2014, 2015a]. Dabei hat sich jedoch herausgestellt, dass *COMSOL Multiphysics* – zumindest was den Zeitpunkt der Machbarkeitsstudie betrifft – denkbar ungeeignet für sehr große instationäre Simulationen ist. Zwar stehen dort viele hilfreiche Werkzeuge zur Verfügung, doch mehrere Softwarefehler, der massive Arbeitsspeicher (Random-Access Memory, RAM)-Bedarf, die zentrale Datenverwaltung sowie der nicht einsehbare Quellcode führten letztlich zum Abbruch der Tests.

Unter der Prämisse einer effizienten Simulation anhand freier Software mit umfangreicher Funktionalität, eignen sich – wie zuvor schon diskutiert – vor allem *OpenFOAM* (FVM), die erweiterte Version *foam-extend* (FVM) und *Elmer* (FEM) als mögliche Werkzeuge zur einheitlichen Modellierung. Eine weiteres Programm namens *PHYSICA* [Cross u. a. 1996; Wang u. a. 2011] (FVM), welches bisher noch nicht erwähnt wurde, wird zwar in der Literatur stellenweise als frei beworben, ist aber nicht zugänglich. Da bei der induktiven Prozessierung die Turbulenz der Strömung eine wichtige Rolle spielt [Kirpo 2008; Spitans 2015; Vencels u. a. 2017], sind FVM-Codes bezüglich der Strömungssimulation zu bevorzugen. Gegenüber der Software *Elmer* stellen *OpenFOAM* und *foam-extend* demnach eine Präferenz dar. Die beiden Softwareplattformen sind im Vergleich zu anderen Programmen zudem gut dokumentiert, bieten zahlreiche Bibliotheken aus unterschiedlichsten Bereichen der Physik und erfreuen sich auch tendenziell an der größten Nutzerbasis. Erstaunlicherweise ist bereits in Spitans u. a. [2010] eine Andeutung darüber zu finden, dass *OpenFOAM* als Grundlage zur Modellierung von Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss elektromagnetischer Wechselfelder geeignet wäre.

Für eine einheitliche Umsetzung in der Softwarebibliothek *OpenFOAM* bzw. *foam-extend* ist es jedoch nötig, dass dort neben der Strömungsberechnung auch die gesamte elektromagnetische Berechnung durchgeführt wird. Obwohl es in diesem Feld zwar schon Pionierarbeiten gibt, die sich sowohl mit der Lösung von magnetostatischen Problemen [Huang 2010] als auch mit magnetodynamischen Fragestellungen beschäftigen [Ehrhard 2015], so gibt es bisher keinerlei Arbeiten oder Ansätze zur Lösung zeitharmonischer Induktionsvorgänge in *OpenFOAM*.

Interessanterweise haben sich in den letzten beiden Dekaden Autoren im Bereich der Geophysik mit ähnlichen Problemstellungen unter Anwendung der FVM beschäftigt, wobei es dort um die elektro-

magnetische Exploration von Gesteinsschichten geht [Haber u. a. 2000; Aruliah u. a. 2001; Novo u. a. 2007; Haber u. Heldmann 2007; Horesh u. Haber 2011; Weiss 2013; Jahandari u. Farquharson 2015]. Diese Arbeiten sind insofern bedeutend, als dort im Vergleich zu Induktionsprozessen nahezu identische Annahmen getroffen, ausschließlich zeitharmonische Felder betrachtet und die quasistatischen Maxwell-Gleichungen direkt mittels komplexwertiger Algebra im Frequenzraum gelöst werden.

Was die Lösung magnetodynamischer Probleme im Frequenzbereich angeht, so findet man ansonsten nur noch eine alternative **FVM**-Umsetzung in der Software *PHYSICA*. Doch abgesehen davon, dass *PHYSICA* nicht frei zugänglich ist, wird dort eine Technik verwendet, die – nach Aussage der Autoren selbst – nicht für sehr große Simulationen geeignet ist [Djambazov u. a. 2015] und außerdem im Hinblick auf eine nicht-konstante Leitfähigkeit fragwürdig erscheint. Ungeachtet der Limitierungen wird damit erneut die Idee einer homogenen Methodik bekräftigt.

2.4 Einordnung der Arbeit

In dieser Arbeit wird im Weiteren das Ziel verfolgt, einen Methodenapparat zu entwickeln, der hinsichtlich der genutzten numerischen Technik auf eine einheitliche Behandlung von Magnetfeld und Strömung und dabei gleichzeitig auf eine Software mit öffentlich verfügbarem Quellcode als Basis setzt. Die technische Umsetzung dieses Apparates soll in Form einer Simulationsplattform direkt auf der Softwarebibliothek *OpenFOAM* bzw. auf der erweiterten Version *foam-extend* aufbauen und sich demnach methodisch der **FVM** bedienen. Durch diese Neuheit lässt sich einerseits unnötiger Rechenaufwand vermeiden, der aus einer Kopplung verschiedener Programme entsteht, andererseits besteht aber auch der Vorteil, dass sich die umfangreiche Funktionalität von *OpenFOAM* im **CFD**-Bereich, wie beispielsweise Turbulenz- und Feinstrukturmodelle, direkt nutzen lässt und die neuen Lösungsmethoden künftig von Anderen aufgegriffen sowie ggf. weiterentwickelt werden können.

Am Ende von Abschnitt 2.1 wurden die dynamischen Abläufe beim **RGS**-Prozess den drei verschiedenen physikalischen Teilaspekten der **MD**, **HD** und **TD** zugeordnet und deren Wechselwirkungen anschließend im Rahmen der **MHD** in Abschnitt 2.2 diskutiert. Unter Vernachlässigung der **TD** wurde die **MHD** dann inhaltlich auf die dominante Interaktion von **MD** und **HD** im Zusammenhang mit der Bewegung der freien Oberfläche reduziert. In Anlehnung an diese Aufteilung der physikalischen Teilaspekte lassen sich gemäß der zuvor konkretisierten Zielstellung die folgenden Teilprobleme abgrenzen:

Magnetodynamik (MD) Ein erstes Teilproblem umfasst die Berechnung zeitharmonischer Induktionsprozesse im Frequenzraum. Da diesbezüglich bisher keinerlei Arbeiten oder Umsetzungen in *OpenFOAM* oder *foam-extend* existieren, besteht der wichtigste Schritt und gleichzeitig die größte Herausforderung dieser Arbeit darin, für dreidimensionale Problemstellungen, wie die Berechnung der elektromagnetischen Felder auf Basis des **RGS**-Modells aus Abbildung 2.4, eine effiziente Lösungsstrategie auf Grundlage der **FVM** zu entwickeln. Für dieses Teilproblem der **MD** ist allerdings eine komplexwertige Beschreibung der Maxwell-Gleichungen oder einer alternativen Form wie z. B. der Induktionsgleichung (2.8a) erforderlich. Dabei muss sowohl die

Unbeschränktheit des Gültigkeitsgebietes der Maxwell'schen Gleichungen als auch die Unterscheidung leitfähiger und nicht-leitfähiger Bereiche berücksichtigt werden. Besonders schwierig gestaltet sich in dieser Hinsicht auch die numerische Erfassung von sich sprunghaft ändernden Materialeigenschaften wie μ und σ im Kontext der **FVM**. Eine weitere Schwierigkeit betrifft die effiziente Modellierung von Induktionsspulen mit komplexer Geometrie. Dieser gesamte Themenkomplex wird vollständig in Kapitel 4 behandelt, wobei die Abschnitte 4.1 und 4.2 den magnetodynamischen Grundlagen gewidmet sind und ab Abschnitt 4.3 bis zum Ende des Kapitels die Lösung des Teilproblems der **MD** präsentiert wird.

Hydrodynamik (HD) Das zweite Teilproblem betrifft die Simulation inkompressibler Strömungsvorgänge mit freier Oberfläche unter dem Einfluss der Lorentz-Kraft. Da *OpenFOAM* und *foam-extend* schwerpunktmäßig für den Einsatz im **CFD**-Bereich ausgelegt sind, besteht hier weniger Entwicklungsbedarf als bei der **MD**. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Wahl einer geeigneten Technik zur Beschreibung der freien Oberfläche und auf technischen Weiterentwicklungen und Verbesserungen im Hinblick auf die Eigenheiten der elektromagnetisch getriebenen Strömung und in Vorbereitung auf die Kopplung mit der **MD**. Das Teilproblem der **HD** wird im ersten Teil von Kapitel 5 aufgegriffen [Abschnitt 5.1].

Magnetohydrodynamik (MHD) Das dritte Teilproblem besteht schließlich in der Zusammenführung der Teilprobleme der **MD** und **HD**. Hier geht es zum einen darum, die verschiedenen Gültigkeitsbereiche der Gleichungen (2.8a) und (2.8b) methodisch zu erfassen sowie diese untereinander zu verknüpfen, und zum anderen einen geeigneten Lösungsalgorithmus für das Mehrfeldproblem aus **MD** und **HD** zu entwerfen. Ein sehr wichtiger Punkt ist dabei auch die Parallelisierung bzw. Parallelisierbarkeit im Hinblick auf große Simulationen. Ziel ist es hier ferner, das methodische Konzept so allgemein zu halten, dass es sich zukünftig, z. B. durch Berücksichtigung der **TD**, leicht erweitern lässt. Das Teilproblem der **MHD** wird im zweiten Teil von Kapitel 5 aufgegriffen [Abschnitt 5.2]. Dort werden ausschließlich im Rahmen dieser Arbeit entstandene Neuentwicklungen gezeigt.

Da für die Bearbeitung der genannten drei Teilprobleme detailliertes Wissen über die **FVM** erforderlich ist, wird in Kapitel 3 zunächst die numerische Technik der **FVM** in einer für diese Arbeit aufbereiteten Form beschrieben. Dort werden alle wesentlichen Begrifflichkeiten eingeführt, wichtige geometrische Relationen geklärt sowie Besonderheiten in Bezug auf *OpenFOAM* und *foam-extend* hervorgehoben. Stellvertretend für die Gleichungen (2.3a) bis (2.3c) bzw. (2.8a) und (2.8b) wird dann anhand einer allgemeinen Transportgleichung der Prozess vom mathematischen Modell bis hin zur numerischen Lösung in kompakter Form dargelegt. Insgesamt schafft dieses Grundlagenkapitel also die Basis, welche zum weiteren Verständnis der Methodenentwicklung in den Kapiteln 4 und 5 unbedingt notwendig ist.

3 Grundlagen der Finite-Volumen-Methode (FVM)

Dieses Grundlagenkapitel ist der Einführung in die numerische Lösung von **Differentialgleichungen (DGLn)** mit der **Finite-Volumen-Methode (FVM)** gewidmet. Differentialgleichungen, wie etwa die Gleichungen (2.3a) bis (2.3c) oder (2.8a) und (2.8b) des letzten Kapitels, sind typischerweise das Resultat einer mathematischen Modellierung physikalischer Prozesse unter kontinuumsmechanischer Betrachtungsweise [Batchelor 1967, Abschnitt 1.2; Altenbach 2015, Kapitel 1]. Die **DGL**, oder ein gekoppeltes System mehrerer **DGLn**, beschreibt dabei ein bestimmtes physikalisches Verhalten, zum Beispiel (z. B.) eine Erhaltungseigenschaft, auf einem zugehörigen Gebiet. Das Verhalten im Inneren dieses Gebietes ist jedoch auch maßgeblich von den Bedingungen an dessen Rand (Randwerten beziehungsweise (bzw.) Randbedingungen) und im zeitlichen Verlauf auch von einem anfänglichen Zustand (Anfangswert) abhängig. In Kombination mit einer **DGL** entsteht über Anfangs- und Randwerte ein Anfangsrandwertproblem. Nach einer Kurzvorstellung von *OpenFOAM* [OpenFOAM Foundation 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998] und der erweiterten Version *foam-extend* [Wikki 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998] in Abschnitt 3.1, wird hier im Rahmen der Abschnitte 3.2 bis 3.4 die numerische Berechnung eines solchen Problems mit Hilfe der **FVM** in einer speziell für diese Arbeit aufbereiteten Form kompakt beschrieben. Dabei werden auch viele grundlegende Begrifflichkeiten eingeführt, welche im weiteren Verlauf dieser Arbeit regelmäßig genutzt bzw. referenziert werden. Darüber hinaus findet man umfangreiche und weiterführende Literatur zur **FVM** beispielsweise in Ferziger u. Perić [2002], Versteeg u. Malalasekera [2007] oder Cohen u. a. [2012].

Die Finite-Volumen-Methode geht auf die Pionierarbeiten von McDonald [1971] und Maccormack u. Paullay [1972] im Bereich der Strömungsmechanik bzw. auf die **numerische Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics, CFD)** zurück. Wie in Moukalled u. a. [2016, Kapitel 5] einführend erklärt wird, baut die heutige Popularität der **FVM**, im Vergleich zur **Finite-Differenzen-Methode (FDM)**, **Finite-Elemente-Methode (FEM)** oder **Spektral-Elemente-Methode (SEM)**, im Wesentlichen auf ihrer hohen Flexibilität und intuitiven Herangehensweise zur Diskretisierung auf. Unter Diskretisierung versteht man dabei den Prozess, ein kontinuierliches Anfangsrandwertproblem in einen Satz algebraischer Gleichungen zu überführen. Durch das Lösen der algebraischen Gleichungen gelangt man zu einem diskreten Ergebnis des ursprünglich kontinuierlichen Problems. Die diskrete Lösung stellt dabei im Allgemeinen nur eine Approximation bzw. Näherung des kontinuierlichen Falles dar. Gegenüber anderen Methoden hat die **FVM** hierbei den großen Vorteil, dass sie im diskreten Sinn einen Erhaltungscharakter aufweist [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 2.5.4]. Die Anzahl der Unbekannten bzw. der zugrundeliegenden algebraischen Gleichungen wird in diesem Zusammenhang auch Freiheitsgrad genannt. Eine Diskretisierung und die damit einhergehende numerische Vorgehensweise ist deshalb sinnvoll, da sich beliebig komplizierte **DGLn**, oder Systeme dieser, oft nicht mehr analytisch lösen lassen.

3.1 Die Bibliotheken *OpenFOAM* und *foam-extend*

Bei *OpenFOAM* handelt es sich um eine in der Programmiersprache C++ implementierte Bibliothek, in welcher die FVM umgesetzt ist. Der Name steht für „Open Field Operation and Manipulation“ und stellt einem Anwender diverse Hilfsmittel, wie Programme und verschiedenste C++-Bibliotheken zur Lösung und Manipulation von Feldern zur Verfügung. Die Entwicklung geht auf [Jasak \[1996\]](#) und [Weller u. a. \[1998\]](#) zurück, die beide einen Großteil des Programmcodes geschrieben haben [[Chen u. a. 2014](#)]. Durch eine relativ offene Lizenzierung wurde bis heute aber kontinuierlich neuer Code und weitere Funktionalität von zahlreichen Autoren ergänzt. Mit dem Wunsch der Wissenschaftsgemeinde eine vollständig freie Codeentwicklung zu ermöglichen, ist aus dem eher industriell orientierten *OpenFOAM* zusätzlich ein mehr akademischer Abzweig *foam-extend* entstanden.

Die erweiterte Version *foam-extend* unterscheidet sich hinsichtlich der grundlegenden Umsetzung von *OpenFOAM* kaum – Konzeption und vor allem die Beschreibung der FVM ist in beiden Bibliotheken nahezu identisch. Allerdings gibt es in *foam-extend* inzwischen einige zusätzliche Möglichkeiten, wie die Kombination von FVM mit der Finite-Flächen-Methode (Finite Area Method, FAM) [[Tuković 2005](#); [Tuković u. Jasak 2012](#); [Qin u. a. 2015](#)], die Nutzung einer speziellen Tetraeder-basierten FEM für bewegte Gitter [[Jasak u. Tuković 2007](#); [Jasak 2009](#)] oder die Verfügbarkeit von Blockmatrizen zur gekoppelten Lösung von Gleichungen [[Darwish u. a. 2009](#); [Jareteg u. a. 2014](#)], um nur eine kleine Auswahl zu nennen.

Bezieht sich im weiteren Verlauf dieser Arbeit eine Erklärung auf *OpenFOAM*, so wird impliziert, dass es sich um einen allgemeinen Bezug handelt, der sowohl für *OpenFOAM* als auch für *foam-extend* zutrifft. Falls sich jedoch nachfolgend Erläuterungen auf *foam-extend* beziehen, so wird fortan davon ausgegangen, dass es dabei um eine Besonderheit von *foam-extend* geht, welche nicht ohne Weiteres auf *OpenFOAM* übertragbar ist.

Generelle und technische Informationen zur Handhabung von Simulationen und zum Programmaufbau von *OpenFOAM* findet sich unter anderem in den offiziellen *OpenFOAM*-Handbüchern [[OpenFOAM Foundation 2015, 2016](#)] und [Marić u. a. \[2014\]](#). Eine sehr detaillierte Ausführung zur Implementierung und Umsetzung der FVM in *OpenFOAM* ist in [Moukalled u. a. \[2016\]](#) zu finden. Über die nächsten Abschnitte dieses Kapitels werden nun die wesentlichen Grundlagen für die vorliegende Arbeit zusammengetragen.

3.2 Diskretisierung des Lösungsgebietes

Bei der Diskretisierung unterscheidet man prinzipiell – genau wie bei Anfangs- und Randwerten – zwischen zeitlicher und räumlicher Diskretisierung. Da es sich bei der Zeit t um eine einseitige Koordinate handelt [[Patankar 1981](#), Abschnitt 2.2-3] erfolgt eine Zeitdiskretisierung, indem der zukünftige Zeitverlauf, ausgehend von einem Startzeitpunkt t_0 , in diskrete Zeitpunkte unterteilt wird. Den Übergang von einem zum nächsten Zeitpunkt nennt man Zeitschritt und dessen (variable) Weite Δt Zeitschrittweite. Der augenblickliche Zeitpunkt bei der mathematischen Betrachtung von DGLn

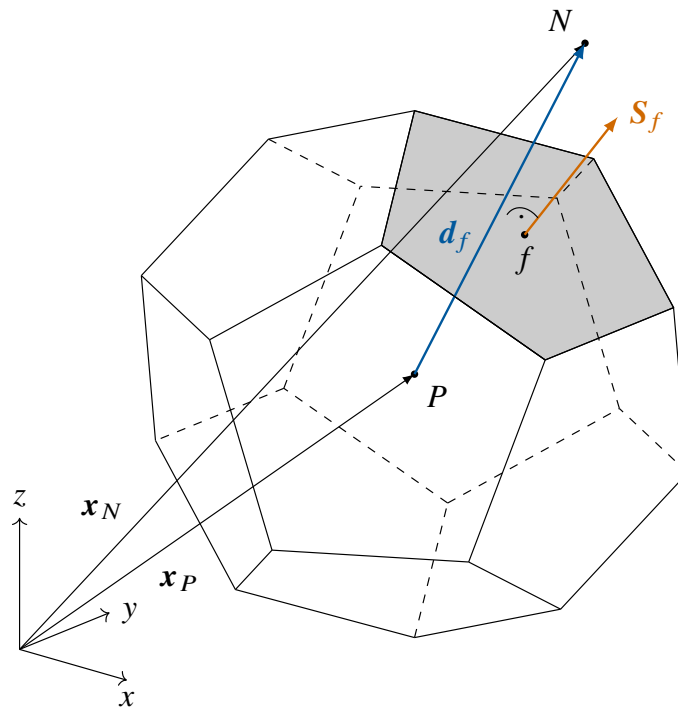


Abbildung 3.1: Polyedrisches Kontrollvolumen mit dem Schwerpunkt P und Schwerpunktkoordinaten \mathbf{x}_P , dem Zellzentrum einer Nachbarzelle N und deren Schwerpunktkoordinaten \mathbf{x}_N , dem Mittelpunkt der Grenzfläche f zum Nachbar-Kontrollvolumen, dem Flächennormalenvektor \mathbf{S}_f und dem Abstandsvektor der Zellzentren \mathbf{d}_f . Jede Zelle teilt sich eine Fläche mit der unmittelbaren Nachbarzelle [in Anlehnung an Tuković u. Jasak 2012, Abbildung 1].

wird im Folgenden stets als t^* bezeichnet. Durch die Diskretisierung der Zeit lässt sich ein Anfangswertproblem durch eine Approximation von Zeitableitungen folglich in einen Satz einseitig voneinander abhängiger Randwertprobleme zerlegen. Für jedes dieser semi-diskretisierten Randwertprobleme erfolgt anschließend eine Ortsdiskretisierung bezüglich des Ortes $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$, indem das Gültigkeitsgebiet Ω und der Rand $\partial\Omega$ der DGL in endliche (finite) Teilstücke zerlegt und letztlich alle Ortsableitungen approximiert werden. Die Herangehensweise und Eigenschaften der örtlichen Diskretisierung unterscheiden sich je nach numerischer Methode teils stark.

Im Rahmen der FVM spricht man bei den Teilstücken von Ω generell von Kontrollvolumina [McDonald 1971] oder Zellen, die so verteilt sind, dass sie sich nicht gegenseitig überlappen und insgesamt das gesamte Lösungsgebiet abdecken. Die Kontrollvolumina sind konvex und jeweils durch ebene Flächen begrenzt, welche wiederum über Kanten und Punkte definiert sind. Die räumliche Anordnung der Zellen, Flächen, Kanten und Knoten ergibt ein numerisches Gitter (oder Netz). Letzteres kann entweder strukturiert, d.h. mit regelmäßiger, indizierbarer Topologie, oder unstrukturiert sein [vergleiche (vgl.) Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 2.4.4]. Die betroffenen Differentialgleichungen werden im Zuge der FVM in integraler Form diskretisiert und benachbarte Kontrollvolumina über Flüsse auf geteilten Grenzflächen in Relation gesetzt. Diese Herangehensweise birgt, wie bereits erwähnt, gegenüber der FDM oder FEM den großen Vorteil einer Erhaltungseigenschaft der diskretisierten Größen. Zudem lassen sich damit beliebige Polyeder als Zellen in Verbindung mit unstrukturierten Gittern realisieren.

Die Programmbibliothek *OpenFOAM* nutzt ebendiese unstrukturierten Gitter und ermöglicht so den Einsatz von polyedrischen Kontrollvolumina, wie eines in Abbildung 3.1 exemplarisch gezeigt ist. Die Adressierung bzw. topologische Zuordnung von benachbarten Zellen erfolgt aus Effizienzgründen flächenorientiert. In Übereinstimmung mit der Notation von [Jasak \[1996\]](#) wird jeder internen Grenzfläche mit der Oberfläche $\Gamma_f \subset \Omega \setminus \partial\Omega$ zwischen zwei Kontrollvolumina eine Zelle P mit der Region Ω_P und ein Nachbarzelle N mit dem Gebiet Ω_N zugeordnet: $\Gamma_f = \Omega_P \cap \Omega_N$. Externe Zellflächen mit $\Gamma_f \subset \partial\Omega$ sind nur mit einer Zelle P verbunden: $\Gamma_f = \Omega_P \cap \partial\Omega$. Der Orthonormalenvektor \mathbf{n}_f von f zeigt für interne Flächen stets von P nach N und für externe Flächen nach außen bezüglich Ω . Der Flächeninhalt S_f ergibt zusammen mit \mathbf{n}_f den Flächennormalenvektor $\mathbf{S}_f = S_f \mathbf{n}_f$.

Ohne einen ausdrücklichen Hinweis, bezieht sich f im weiteren Verlauf dieser Arbeit immer auf interne Flächen. Eine solche Grenzfläche und deren angrenzende Zellen haben jeweils ein Zentrum bzw. einen Schwerpunkt, der die selbe Bezeichnung (f, P, N) trägt. Die Lage des Schwerpunktes \mathbf{x}_P einer Zelle P resultiert aus

$$\int_{\Omega_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \, dV = 0. \quad (3.1)$$

Mit Hilfe des Zellvolumens V_P ergibt sich daraus:

$$\mathbf{x}_P = \frac{1}{V_P} \int_{\Omega_P} \mathbf{x} \, dV. \quad (3.2)$$

Analog lässt sich die Koordinate des Flächenschwerpunktes \mathbf{x}_f über den Zusammenhang

$$\int_{\Gamma_f} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \, dS = 0, \quad (3.3)$$

oder auch direkt über den Flächeninhalt S_f aus

$$\mathbf{x}_f = \frac{1}{S_f} \int_{\Gamma_f} \mathbf{x} \, dS. \quad (3.4)$$

ermitteln [vgl. [Rusche 2002](#)]. Der die Zellzentren P und N verbindende Vektor $\mathbf{d}_f = \overline{PN} = \mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P$, welcher wie \mathbf{n}_f und \mathbf{S}_f für jede innere Grenzfläche stets in die Richtung des Nachbarn zeigt, verläuft nur im Idealfall durch die Koordinate des Flächenschwerpunktes \mathbf{x}_f und parallel zum Flächennormalenvektor \mathbf{S}_f . Falls der Schnittpunkt $f_c = \mathbf{d}_f \cap \Gamma_f$ und der Schwerpunkt f nicht für jede Flächen des diskretisierten Lösungsgebietes koinzidiert, so handelt es sich um ein schiefes Gitter. Sind \mathbf{d}_f und \mathbf{S}_f nicht parallel ($\mathbf{d}_f \not\parallel \mathbf{S}_f$), so nennt man das Gitter nicht-orthogonal, anderenfalls ($\mathbf{d}_f \parallel \mathbf{S}_f$) spricht man von einem orthogonalen Gitter.

Neben den bereits zuvor genannten Begrifflichkeiten aus Abbildung 3.1, zeigt Abbildung 3.2 weitere wichtige Größen, die in Verbindung mit den beiden Hauptmerkmalen - Nicht-Orthogonalität und Schiefe - des Gitter bzw. der Gitterqualität in *OpenFOAM* stehen. Zur Beschreibung dieser Merkmale

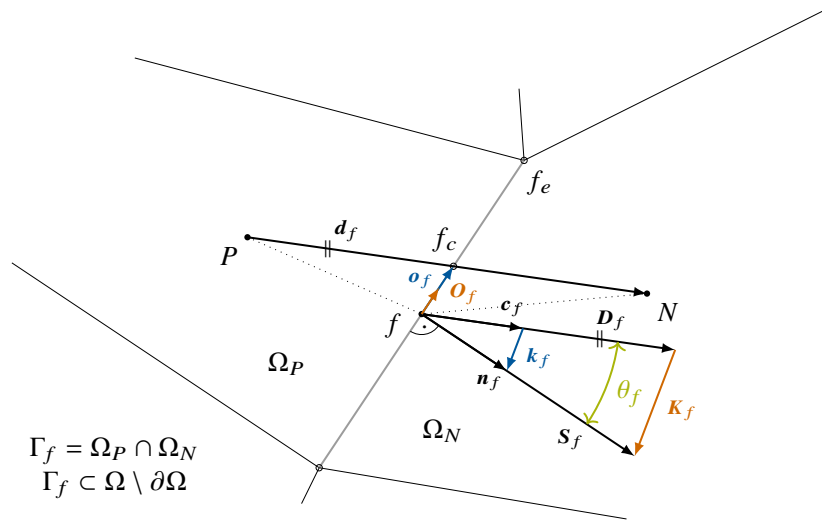


Abbildung 3.2: Situation an einer internen Grenzfläche f zwischen zwei benachbarten Zellen P und N . Zusätzlich zu Abbildung 3.1 sind hier der Orthonormalenvektor \mathbf{n}_f , der Schnittpunkt f_c von \mathbf{d}_f und der Oberfläche Γ_f , der normierte Zellabstandsvektor \mathbf{c}_f sowie der flächengewichtete Zellabstandsvektor \mathbf{D}_f abgebildet. Die Gitterqualität lässt sich hinsichtlich einer Nicht-Orthogonalität über zwei mögliche Vektoren \mathbf{k}_f und \mathbf{K}_f und bezüglich einer Schiefe über die Vektoren \mathbf{o}_f und \mathbf{O}_f beschreiben.

sei zunächst über \mathbf{d}_f der inverse Abstand

$$\delta_f = \frac{1}{|\mathbf{d}_f|} \quad (3.5)$$

zwischen den zwei benachbarten Zellen P und N um eine interne Grenzfläche f eingeführt, der im Zusammenhang mit der Approximation örtlicher Ableitungen auch Delta-Koeffizient genannt wird. Auf dessen Basis ist mit \mathbf{n}_f und Normierung von \mathbf{d}_f in Form des Vektors

$$\mathbf{c}_f = \delta_f \mathbf{d}_f, \quad (3.6)$$

der Vektor

$$\mathbf{k}_f = \mathbf{n}_f - \mathbf{c}_f \quad (3.7)$$

definiert, welcher bereits die Stärke der Abweichung von einem idealen, orthogonalen Gitter ausdrückt. Dieser Korrekturvektor \mathbf{k}_f wird in *OpenFOAM* bei der Diskretisierung von Ortsableitungen zur nicht-orthogonalen Korrektur genutzt. Als alternative Beschreibung kommt, wie etwa in Jasak [1996, Abschnitt 3.3.1.3, Gleichung (3.29)] und Jasak [1996, Abschnitt 3.3.1, Abbildung 3.5] erklärt, dafür aber auch der mit dem Flächeninhalt S_f gewichtete Vektor

$$\mathbf{K}_f = \mathbf{k}_f S_f = \mathbf{S}_f - \mathbf{D}_f, \quad (3.8)$$

zusammen mit dem flächengewichteten Zellabstandsvektor

$$\mathbf{D}_f = \mathbf{c}_f S_f \quad (3.9)$$

zum Einsatz. Zur Quantifizierung eines nicht-orthogonalen Gitters ist jedoch der Winkel $\theta_f \in [0, \pi/2)$, welcher in Abbildung 3.2 dargestellt ist, wesentlich aussagekräftiger und vor allem intuitiver:

$$\cos \theta_f = \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{c}_f = \frac{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{D}_f}{S_f^2}. \quad (3.10)$$

Während θ_f für ein orthogonales Gitter verschwindet: $\theta_f = 0$, so sind für den nicht-orthogonalen Fall Winkel bis ausschließlich $\theta_f = \pi/2$ zugelassen. Ein noch größerer Winkel würde zwangsläufig zu einer nicht mehr zulässigen Gitterstruktur führen.

Die Schiefe des Gitters wird nach Jasak [1996, Abschnitt 3.6.3, Abbildung 3.15] über den Vektor

$$\mathbf{o}_f = \mathbf{x}_{f_c} - \mathbf{x}_f \quad (3.11)$$

bestimmt, der, wie in Abbildung 3.2 gezeigt, den Schwerpunkt der Grenzfläche f und den Schnittpunkt f_c mit dem Zellabstandsvektor \mathbf{d}_f verbindet. Wird der Vektor \mathbf{o}_f über den Abstand in dessen Richtung von f_c bis zum Schnittpunkt $f_e = \mathbf{o}_f \cap \partial\Gamma_f$ zur nächsten Kante skaliert, so erhält man eine alternative Möglichkeit zur Beschreibung der Schiefe mit:

$$\mathbf{O}_f = \frac{\mathbf{o}_f}{|\mathbf{x}_{f_e} - \mathbf{x}_f|}. \quad (3.12)$$

Anhand dieses Vektors ist das Gitter nicht schief, wenn dessen Betrag $|\mathbf{O}_f|$ verschwindet. Um einen schiefen Fall handelt es sich mit $|\mathbf{O}_f| > 0$, wobei für $|\mathbf{O}_f| > 1$ der Schnittpunkt f_c sogar außerhalb der Fläche f liegt und damit ein besonders schiefes Gitter vorliegt [vgl. Abbildung 3.2]. Im Zusammenhang mit der Schiefe wird in Jasak [1996, Abschnitt 3.6.3] darauf hingewiesen, dass für Gitter mit hinreichend guter Qualität das Verhältnis zwischen $|\mathbf{o}_f|$ und $|\mathbf{d}_f|$ klein ist:

$$\frac{|\mathbf{o}_f|}{|\mathbf{d}_f|} = \delta_f |\mathbf{o}_f| \ll 1. \quad (3.13)$$

Unter dieser Voraussetzung spielt die Schiefe im Vergleich zur Nicht-Orthogonalität des Gitters in Bezug auf numerische Fehler nur eine untergeordnete Rolle.

Fällt eine Grenzfläche f mit dem Gebietsrand $\partial\Omega$ der zu lösenden DGL zusammen, so sieht, wie in Abbildung 3.3 skizziert, die Situation etwas anders aus. Für solch eine Randfläche geht man in *OpenFOAM* aus Konsistenzgründen davon aus, dass vorgegebene Randbedingungen dort auf der gesamten Fläche gültig (konstant) sind [Jasak 1996, Abschnitt 3.3.3.1]. Anstelle des Vektors \mathbf{d}_f wird hier ein Zellrandvektor \mathbf{d}_f^\perp eingeführt, welcher vom Zellzentrum einer Randzelle P auf den Lotfußpunkt f_c auf $\partial\Gamma$ zeigt. Die Länge dieses Vektors ist am Rand also das Pendant zu Gleichung (3.5):

$$\delta_f^\perp = \frac{1}{|\mathbf{d}_f^\perp|}, \quad (3.14)$$

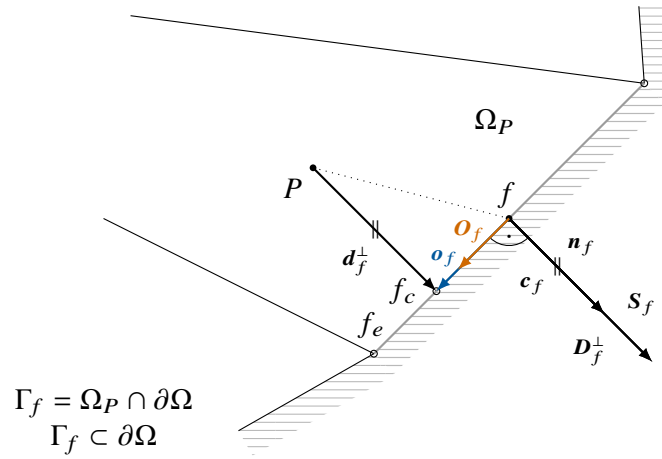


Abbildung 3.3: Situation an einer externen Grenzfläche f der Zelle P . Zusätzlich zu Abbildung 3.1 sind hier der Orthonormalenvektor \mathbf{n}_f , der Lotfußpunkt f_c , das Zellrandvektor \mathbf{d}_f^\perp sowie der normierte \mathbf{c}_f^\perp und flächengewichtete Zellrandvektor \mathbf{D}_f^\perp abgebildet. Die Gitterqualität lässt sich hinsichtlich einer Schiefe über die Vektoren \mathbf{o}_f und \mathbf{O}_f beschreiben. Der nicht-orthogonale Einfluss wird vernachlässigt.

und der normierte Zellrandvektor ergibt sich analog zu Gleichung (3.6):

$$\mathbf{c}_f^\perp = \delta_f^\perp \mathbf{d}_f^\perp. \quad (3.15)$$

Die Vektoren $\mathbf{n}_f, \mathbf{S}_f, \mathbf{d}_f^\perp, \mathbf{c}_f^\perp$ und $\mathbf{D}_f^\perp = \mathbf{d}_f^\perp \mathbf{S}_f$ sind alle parallel: $\mathbf{n}_f \parallel \mathbf{S}_f \parallel \mathbf{d}_f^\perp \parallel \mathbf{c}_f^\perp \parallel \mathbf{D}_f^\perp$. Damit ist die gesamte Modellierung am Rand im Allgemeinen jedoch nur noch erster Ordnung genau. Eine nicht-orthogonale Korrektur wird dort in *OpenFOAM* nicht durchgeführt. Wie groß der Einfluss ist, lässt sich am Rand über die Schiefe, also den Vektor \mathbf{o}_f aus Gleichung (3.11) bzw. \mathbf{O}_f aus Gleichung (3.12) abschätzen. Umso wichtiger ist es, schiefe Zellen am Rand eines numerischen Gitters in *OpenFOAM* unter allen Umständen zu vermeiden, was insbesondere für Kapitel 5 eine wichtige Rolle spielt. Solange die Bedingung aus Gleichung (3.13) hinreichend gut erfüllt ist, erzielt man für die Randzellen eine akzeptable Güte der Approximation.

Unabhängig von allen Merkmalen des Gitters, beruht eine grundlegende Eigenschaft der *FVM* in *OpenFOAM* auf der Annahme, dass ein zu diskretisierendes, allgemeines Feld $\psi(t, \mathbf{x})$ räumlich und zeitlich nur linear um die Schwerpunkte von f , P und N variiert [siehe Jasak 1996, Abschnitt 3.3], z. B.:

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \psi(t, \mathbf{x}_P) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot \{\nabla\psi(t, \mathbf{x})\}_P \quad (3.16a)$$

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \psi(t^*, \mathbf{x}) + (t - t^*) \left\{ \frac{\partial\psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} \right\}^* \quad (3.16b)$$

Dadurch kann in Verbindung mit Gleichung (3.2), wie auch in Ferziger u. Perić [2002, Abschnitt 4.3] oder Moukalled u. a. [2016, Abschnitt 5.4.2] dargelegt wird, der Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt eines Kontrollvolumens (z. B. der Zelle P mit dem Gebiet Ω_P) über den volumetrischen Mittelwert

approximiert werden:

$$\psi_P = \psi(t, \mathbf{x}_P) \approx \frac{1}{V_P} \int_{\Omega_P} \psi(t, \mathbf{x}) dV. \quad (3.17)$$

Analog findet sich mit Gleichung (3.4) für den Wert von ψ im Flächenschwerpunkt f auf Γ_f die folgende Darstellung:

$$\psi_f = \psi(t, \mathbf{x}_f) \approx \frac{1}{S_f} \int_{\Gamma_f} \psi(t, \mathbf{x}) dS. \quad (3.18)$$

Die Approximationen (\approx) in Gleichung (3.17) und (3.18) beziehen sich jeweils auf die angenommene, lineare Variation und nicht auf die Auswertung der Integrale. Letztere können für den Schwerpunkt exakt ausgewertet werden [vgl. [Jasak 1996](#), Abschnitt 3.3.1, Gleichung (3.12)]. Aus diesem Grund werden diskrete Daten in *OpenFOAM* immer der Lage der Schwerpunkte zugeordnet. Weitergehende Details zur Speicheranordnung und den Gittereigenschaften in *OpenFOAM* sind auch in [Rusche \[2002](#), Abschnitt 2.2], [Juretić \[2004](#), Abschnitt 3.2 & 3.6] [Marić u. a. \[2014](#), Abschnitt 1.3.1] und [Moukalled u. a. \[2016](#), Abschnitt 4] zu finden.

3.3 Diskretisierung einer Transportgleichung

Anhand dieses Abschnittes soll am Beispiel einer Transportgleichung demonstriert werden, wie die Diskretisierung eines Anfangsrandwertproblems in *OpenFOAM* im Einzelnen abläuft. Zahlreiche physikalische Probleme, wie Strömungsprozesse, Wärme- oder Energietransportvorgänge und auch elektromagnetische Prozesse lassen sich über die differentielle Transportgleichung der Art

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \psi}{\partial t}}_{\text{Zeitableitung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \psi)}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot (\gamma \nabla \psi)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{s(\psi)}_{\text{Quelle}} \quad (3.19)$$

für eine skalare, vektorielle oder tensorwertige Größe $\psi(t, \mathbf{x})$ beschreiben [[Ferziger u. Perić 2002](#)]. Darin steht der erste Term für die rein zeitliche Änderung der Transportgröße mit der skalaren Dichte ρ , und der zweite Term repräsentiert eine Änderung infolge eines konvektiven Transports mit einer Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} . Der Dritte Term beschreibt wiederum einen diffusiven Transport auf Basis einer skalaren Diffusivität γ , und der letzte Term fasst alle sonstigen Quellen und Senken (negative Quellen) für die Größe ψ zusammen. Diese DGL zweiter Ordnung kann durch die FVM in *OpenFOAM* idealerweise mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung numerisch gelöst werden, solange ein akzeptables Gitter gemäß Gleichung (3.13) vorliegt.

Dazu wird Gleichung (3.19) nach der Diskretisierung des Lösungsgebietes, wie im letzten Abschnitt erklärt, zunächst für eine Zelle P in Integralform überführt:

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial \rho \psi}{\partial t} dV + \int_{\Omega_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \psi) dV = \int_{\Omega_P} \nabla \cdot (\gamma \nabla \psi) dV + \int_{\Omega_P} s(\psi) dV. \quad (3.20)$$

Eine Verallgemeinerung der Integralgleichung für ein mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} bewegtes Bezugssystem ergibt sich über die Anwendung des Reynolds-Transport-Theorems [Anhang A.3.7, Gleichung (A.48)]. Durch Ersetzen des ersten Integralterms mit der partiellen Zeitableitung erhält man unter Anwendung dieser Transformationsvorschrift [siehe Tuković 2005, Anhang A; Jasak u. Tuković 2007, Gleichung (1)]:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_P} \rho \psi \, dV + \int_{\Omega_P} \nabla \cdot (\rho (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \psi) \, dV = \int_{\Omega_P} \nabla \cdot (\gamma \nabla \psi) \, dV + \int_{\Omega_P} s(\psi) \, dV, \quad (3.21)$$

wobei für die relative Bewegung in Verbindung mit der zeitlichen Volumenänderung der Zellen zusätzlich das Volumenerhaltungsgesetz (Space conservation law, SCL) gilt [Demirdžić u. Perić 1988; Jasak u. Tuković 2007, Gleichung (2)]:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_P} dV - \int_{\Omega_P} \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV = 0. \quad (3.22)$$

Die Transformation in ein entsprechendes Bezugssystem nach Gleichung (3.21) stellt dabei den Kern der Arbitrary-Lagrangian-Eulerian (ALE)-Methode dar, auf Basis derer ein fließender Übergang zwischen Eulerscher und Lagrangescher Betrachtungsweise möglich ist [Hughes u. a. 1981; Donea 1983].

Für jedes einzelne von insgesamt n Kontrollvolumina (Freiheitsgrad) wird an späterer Stelle eine algebraische Gleichung für eine Näherungslösung abgeleitet. Der erste und letzte Term in Gleichung (3.21) ist jeweils von lokaler Natur und unabhängig von Nachbarzellen der Zelle P . Konvektions- und Diffusionsterm hingegen hängen – und das unterscheidet sie wesentlich von den zuvor genannten Termen – naturgemäß von den angrenzenden Nachbarzellen ab. Die Divergenz-Operatoren machen diese Eigenschaft in beiden Fällen offensichtlich.

Über eine verallgemeinerte Form des Gaußschen Integralsatzes [Anhang A.3.6, Gleichung (A.41)], kann ein Volumenintegral über Ω_P einer Funktion, welche aus der Anwendung des differentiellen Nabla-Operators auf die Größe ψ über ein Skalar-, Vektor- oder Tensorprodukt [siehe Anhang A.2] entsteht, als Oberflächenintegral über den Rand $\partial\Omega_P$ ausgedrückt werden:

$$\int_{\Omega_P} \nabla \circ \psi \, dV = \int_{\partial\Omega_P} \mathbf{n} \circ \psi \, dS = \int_{\partial\Omega_P} dS \circ \psi. \quad (3.23)$$

Wird das Produkt „ \circ “ als Kreuzprodukt aufgefasst, so ergibt sich ein Integralsatz für $\nabla \times \psi$, für das äußere Produkt erhält man einen Satz für $\nabla \psi$ und für das innere Produkt entsteht der klassische Gaußsche Integralsatz für die Divergenz $\nabla \cdot \psi$. Damit lassen sich die beiden nicht-lokalen Volumenintegrale aus Gleichung (3.21)

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_P} \rho \psi \, dV + \int_{\partial\Omega_P} dS \cdot (\rho (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \psi) = \int_{\partial\Omega_P} dS \cdot (\gamma \nabla \psi) + \int_{\Omega_P} s(\psi) \, dV, \quad (3.24)$$

und das zweite Integral aus Gleichung (3.22)

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_P} dV - \int_{\partial\Omega_P} dS \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.25)$$

in Oberflächenintegrale transformieren. Bis hier ist bezüglich der ursprünglichen Gleichungen (3.19) und (3.22) noch keinerlei Näherung eingeflossen.

Nun sei jedoch am Beispiel der Größe ψ an die grundlegende Annahme einer örtlich nur linearen Veränderung gemäß Gleichung (3.16a) erinnert, aus der die beiden Gleichungen (3.17) und (3.18) hervorgehen. Durch die Anwendung von Gleichung (3.17) können, wie bereits gezeigt, Volumenintegrale einer Funktion ψ über Ω_P durch den Wert der Funktion im Schwerpunkt \mathbf{x}_P der Zelle approximiert werden:

$$\int_{\Omega_P} \psi dV \approx \psi_P V_P . \quad (3.26)$$

Ein Oberflächenintegral über den gesamten Rand $\partial\Omega_P$ des Zellgebietes Ω_P kann zunächst als Summe über die stückweise zusammenhängenden Begrenzungsflächen aufgefasst und darin anschließend mit Gleichung (3.18) jeweils einzeln über den Wert im Schwerpunkt \mathbf{x}_f der zugehörigen Fläche f angenähert werden:

$$\int_{\partial\Omega_P} dS \circ \psi = \sum_f \int_{\Gamma_f}^{\Gamma_f \in \partial\Omega_P} dS \circ \psi \approx \sum_f \mathbf{S}_f \circ \psi_f . \quad (3.27)$$

Bei der Berechnung der Summe muss hier hinsichtlich der Ränder des Kontrollvolumens P zwischen internen [siehe Abbildung 3.2] und externen Grenzflächen [siehe Abbildung 3.3] unterschieden werden. Daher ist eine entsprechende Aufteilung der Summen nach inneren Flächen mit $\Gamma_f \subset \Omega \setminus \partial\Omega$ und äußeren Flächen mit $\Gamma_f \subset \partial\Omega$ zielführend:

$$\begin{aligned} \underbrace{\sum_f^{\Gamma_f \in \partial\Omega_P} \mathbf{S}_f \circ \psi_f}_{\text{Alle Flächen}} &= \underbrace{\sum_f^{\substack{\Gamma_f \subset \Omega \setminus \partial\Omega \\ \Gamma_f \in \partial\Omega_P}} \mathbf{S}_f \circ \psi_f}_{\text{Interne Flächen}} + \underbrace{\sum_f^{\substack{\Gamma_f \subset \partial\Omega \\ \Gamma_f \in \partial\Omega_P}} \mathbf{S}_f \circ \psi_f}_{\text{Externe Flächen}} \\ \sum_f^{\boxtimes} \mathbf{S}_f \circ \psi_f &= \sum_f^{\times} \mathbf{S}_f \circ \psi_f + \sum_f^{\square} \mathbf{S}_f \circ \psi_f \end{aligned} \quad (3.28)$$

Um die Lesbarkeit zu wahren wird dazu eine neue Notation eingeführt, anhand derer im weiteren Gebrauch dieser Summen zwischen allen (\boxtimes), internen (\times) und externen Flächen (\square) unterschieden wird.

Bevor die Transportgleichung in der Form von Gleichung (3.24) für jedes Kontrollvolumen, unter Zuhilfenahme der Approximationen nach Gleichung (3.26) und (3.27), Term für Term diskretisiert

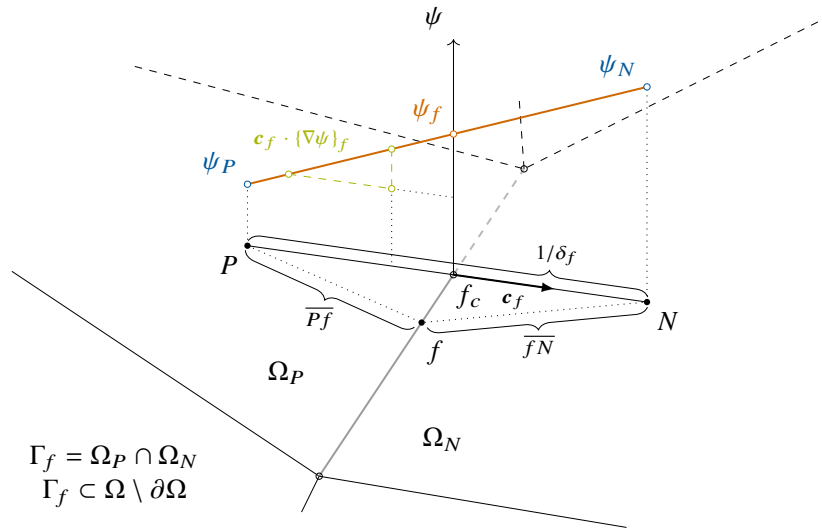


Abbildung 3.4: Interpolation der Zellwerte ψ_P und ψ_N zur Generierung eines Wertes ψ_f auf der gemeinsamen, internen Grenzfläche beider Zellen. Die Darstellung zeigt das Beispiel der linearen Interpolation gemäß Gleichung (3.31) mit $\psi_f = \bar{\psi}_f$. Die Interpolationsgewichte ergeben sich dort aus den Schwerpunktabständen \overline{Pf} und \overline{fN} nach Gleichung (3.32). Über eine zentrale Differenz (3.33) kann der Gradient $c_f \cdot \{\nabla\psi\}_f$ linear approximiert werden.

wird, soll im Rahmen der nächsten beiden Abschnitte zuerst geklärt werden, wie die Werte ψ_f auf internen und externen Grenzflächen ermittelt werden können.

3.3.1 Interpolationsverfahren für interne Flächen

Zur Bestimmung der Werte ψ_f aus Gleichung (3.28) auf internen Grenzflächen f mit $\Gamma_f \subset \Omega \setminus \partial\Omega$ bedient man sich einer Näherung auf Basis der benachbarten Zellen P und N :

$$\psi_f \approx \psi_f(\psi_P, \psi_N, \dots) \quad (3.29)$$

Hinsichtlich der Annahme in Gleichung (3.16a) genügt dabei jedoch eine Linearkombination aus den Werten ψ_P und ψ_N - gegebenenfalls (ggf.) mit zusätzlicher Korrektur ψ_U :

$$\psi_f \approx w_f \psi_P + (1 - w_f) \psi_N + \psi_U. \quad (3.30)$$

Die geometrisch lineare Interpolation

$$\bar{\psi}_f \approx \bar{w}_f \psi_P + (1 - \bar{w}_f) \psi_N + \bar{\psi}_U \quad (3.31)$$

erreicht man auf Grundlage dieses Ansatzes mit den Gewichten [vgl. Jasak 1996, Abschnitt 3.3.1.2, Gleichung (3.19)]

$$\bar{w}_f = \frac{\overline{fN}}{\overline{Pf} + \overline{fN}} \quad \text{und} \quad \bar{\psi}_U = 0. \quad (3.32)$$

Das Prinzip dieser linearen Interpolation und relevante Größen sind in Abbildung 3.4 abgebildet. Weiterhin kann in ähnlicher Weise der Gradient von ψ in Richtung von \mathbf{d}_f auf der Fläche per zentraler Differenz näherungsweise berechnet werden:

$$\mathbf{c}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f \approx \delta_f (\psi_N - \psi_P) . \quad (3.33)$$

Die Interpolation und Gradientenberechnung ist jeweils zweiter Ordnung genau, wobei die lineare Interpolation zu numerischen Oszillationen führen kann [Jasak 1996; Ferziger u. Perić 2002; Moukalled u. a. 2016]. Gerade bei numerisch empfindlichen Problemstellungen wird daher häufig auf das Aufwind-Interpolationsverfahren erster Ordnung

$$\psi_f \approx \hat{w}_f \psi_P + (1 - \hat{w}_f) \psi_N + \psi_U \quad (3.34)$$

mit den Gewichten

$$\hat{w}_f = \begin{cases} 1 & \text{für } F_f \geq 0 \\ 0 & \text{für } F_f < 0 \end{cases} \quad \text{und } \psi_U = 0 , \quad (3.35)$$

zurückgegriffen, wobei der Fluss F_f durch die Fläche f , der hier die Richtung des Informationstransports angibt, folgendermaßen definiert ist:

$$F_f = \mathbf{S}_f \cdot \{\rho(\mathbf{u} - \mathbf{v})\}_f = \dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f . \quad (3.36)$$

Die Dichte ρ wird dazu nach Gleichung (3.31) und (3.32) üblicherweise linear interpoliert. Die Geschwindigkeit \mathbf{u}_f bzw. der Massenstrom $\dot{m}_f = \rho_f \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f$ kann grundsätzlich auch interpoliert werden. In den meisten Fällen existiert für \mathbf{u} jedoch zusätzlich eine Erhaltungsgleichung (z. B. im Fall einer inkompressiblen Strömung), sodass eine Interpolation in dieser Hinsicht ggf. unzureichend ist. Für die Geschwindigkeit \mathbf{v} des bewegten Bezugssystems, welches im diskreten Sinne einem bewegten Gitter entspricht, sollte das SCL aus Gleichung (3.25) exakt gelten. Daher wird \mathbf{v} beispielsweise in *foam-extend*, indirekt in Form des Volumenstromes $\dot{V}_f = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{v}_f$, geometrisch berechnet [Jasak u. Tuković 2007, Abschnitt 2].

Um ein Gleichgewicht zwischen Genauigkeit und Robustheit zu liefern, kann man auch beide Interpolationsverfahren anhand eines Mischfaktors kombinieren. Tatsächlich basieren zahlreiche Interpolationsverfahren auf einer örtlich geschickten Wahl dieses (nicht konstanten) Mischfaktors [Jasak 1996; Ferziger u. Perić 2002]. Im Rahmen dieser Arbeit wird hauptsächlich die in diesem Abschnitt zuerst skizzierte lineare Interpolation eingesetzt. Für die Diskretisierung des Konvektionsterms aus Gleichung (3.19) ist aus Stabilitätsgründen jedoch ein gemischtes Verfahren, wie beispielsweise das Gamma-Verfahren [Jasak u. a. 1999] besser geeignet, welches eine Kombination von linearer Interpolation und Aufwind-Interpolation nutzt.

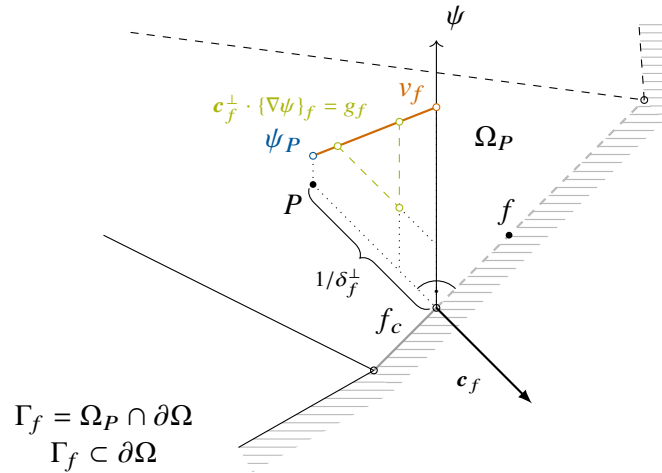


Abbildung 3.5: Bedingungen und Größen zur Ermittlung der Randwerte ψ_f auf einer externen Grenzfläche. Bei Dirichlet-Randbedingungen ist der Wert am Rand direkt über v_f gegeben. Bei Neumann-Randbedingungen findet man eine lineare Approximation des Randwertes mit Hilfe von Gleichung (3.39b). Der Normalengradient $\mathbf{c}_f^\perp \cdot \{\nabla\psi\}_f = g_f$ ist hingegen bei Neumann-Randbedingungen mit g_f direkt verfügbar. Im Falle von Dirichlet-Randbedingungen kann zu dessen Ermittlung die Approximation aus Gleichung (3.39a) genutzt werden.

3.3.2 Randbedingungen für externe Flächen

Bei der Ermittlung von Werten ψ_f aus Gleichung (3.28) auf externen Grenzflächen f mit $\Gamma_f \subset \partial\Omega$ kommen die Randbedingungen der DGL ins Spiel. Dabei lassen sich viele Problemstellungen durch zwei grundlegende Klassen von Randbedingungen modellieren:

- Wesentliche oder Dirichlet-Randbedingungen [siehe Cheng u. Cheng 2005, Abschnitt 3, 3.1 und Gleichung (13)] liegen vor, wenn der Wert einer Funktion ψ_f am Rand Γ_f über v_f vorgegeben ist:

$$\Gamma_f \cap \partial\Gamma: \quad \psi_f = v_f, \quad (3.37)$$

und von

- natürlichen oder Neumann-Randbedingungen [siehe Cheng u. Cheng 2005, Abschnitt 3, 3.2 und Gleichung (14)] ist die Rede, wenn am Rand die Änderung g_f der Funktion in Normalenrichtung \mathbf{n}_f das Problem determiniert:

$$\Gamma_f \cap \partial\Gamma: \quad \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f = \mathbf{c}_f^\perp \cdot \{\nabla\psi\}_f = g_f. \quad (3.38)$$

In Gleichung (3.38) wurde bereits ausgenutzt, dass sich der Orthonormalenvektor mit den Vereinbarungen aus Abschnitt 3.2 und Abbildung 3.3 durch den Zellrandvektor \mathbf{d}_f^\perp und dessen Länge δ_f^\perp ersetzen lässt: $\mathbf{n}_f = \mathbf{c}_f^\perp = \delta_f^\perp \mathbf{d}_f^\perp$.

Je nach dem, ob entweder der Funktionswert v_f oder der Normalengradient g_f gegeben ist, kann am Rand die jeweils andere (fehlende) Größe, zusammen mit dem Wert ψ_P im Schwerpunkt der Zelle

x_P , linear approximiert werden. Wie in Abbildung 3.5 skizziert, ist das Vorgehen dazu analog zur Berechnung der zentralen Differenz im Inneren aus Gleichung (3.33):

$$g_f \approx \delta_f^\perp (v_f - \psi_P) \quad (3.39a)$$

$$v_f \approx \psi_P + \frac{g_f}{\delta_f^\perp}. \quad (3.39b)$$

Eine verallgemeinerte Randbedingung, die sowohl Dirichlet- (3.37) als auch Neumann-Randbedingungen (3.38) zulässt, ergibt sich durch eine gemischte Linearkombination beider Grundtypen in Form einer Robin-Randbedingung [Gustafson u. Abe 1998b, a]:

$$\Gamma_f \cap \partial\Gamma: \quad \psi_f \approx \beta_f v_f + (1 - \beta_f) \left(\psi_P + \frac{g_f}{\delta_f^\perp} \right) \quad (3.40a)$$

$$\mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f \approx \beta_f \delta_f^\perp (v_f - \psi_P) + (1 - \beta_f) g_f. \quad (3.40b)$$

Über den Mischfaktor $\beta_f \in [0, 1]$ kann für jede Fläche individuell eine reine Dirichlet-Randbedingungen mit $\beta_f = 1$, eine reine Neumann-Randbedingungen mit $\beta_f = 0$ oder eine echte Robin-Randbedingung mit $0 < \beta_f < 1$ realisiert werden.

Damit lässt sich die Summe der äußeren Flächen aus Gleichung (3.28) schließlich folgendermaßen aufteilen:

$$\sum_f \mathbf{S}_f \circ \psi_f = \underbrace{\sum_f \beta_f \mathbf{S}_f \circ v_f}_{\text{Dirichlet-Randbedingung } (\beta_f = 1)} + \underbrace{\sum_f (1 - \beta_f) \mathbf{S}_f \circ \left(\psi_P + \frac{g_f}{\delta_f^\perp} \right)}_{\text{Neumann-Randbedingung } (\beta_f = 0)}. \quad (3.41)$$

Robin-Randbedingung ($0 < \beta_f < 1$)

Obwohl im Rahmen dieser Arbeit keine Robin-Randbedingung als solche genutzt werden, bietet diese Aufteilung die Möglichkeit einer geschlossenen Darstellung von Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen ohne Fallunterscheidungen.

3.3.3 Algebraisches Gleichungssystem

In Abschnitt 3.3 wurde gezeigt, wie die Transportgleichung (3.19) für eine Zelle P in eine integrale Form (3.24) überführt und anschließend auf Basis von Gleichung (3.26) und (3.27) linear approximiert wird. Im Anschluss wurde in Abschnitt 3.3.1 und Abschnitt 3.3.2 angedeutet, wie man im Inneren und auf dem Rand des Lösungsgebietes Ω an Werte im Schwerpunkt von Grenzflächen f gelangt.

Über die Betrachtung einer endlichen Zahl von n Zellen P_k mit $k = 1, \dots, n$, die gemeinsam das gesamte Lösungsgebiet ausfüllen, ergibt sich jeweils durch Diskretisierung von Gleichung (3.24) die Lösung ψ_{P_k} im Schwerpunkt der entsprechenden Zelle aus einer algebraischen Gleichung. Diese Gleichung hängt jedoch durch die Interpolation (3.30) von der gesamten Nachbarschaft N_f bezüglich

der Flächen f von P_k ab:

$$\underbrace{a_{P_k}}_{\text{Koeffizient von } \psi_{P_k}} \psi_{P_k} + \sum_f^{\Gamma_f \in \partial\Omega_{P_k}} \underbrace{a_{N_{kf}}}_{\text{Koeffizienten der } \psi_{N_f}} \psi_{N_f} = \underbrace{r_{P_k}}_{\text{konstanter Wert}} \quad \forall k = 1, \dots, n. \quad (3.42)$$

In Bezug auf die Beiträge zu den Koeffizienten jeder Gleichung kann hinsichtlich des Ursprungs aus Gleichung (3.24) zwischen approximierten Volumenintegralen (■) und Oberflächenintegralen (⊠) unterschieden werden:

$$\underbrace{\left(a_{P_k}^{\blacksquare} + \sum_f a_{P_{kf}}^{\boxtimes} \right)}_{\substack{\text{Beiträge zu } a_{P_k}: \\ \text{Volumenanteil (■),} \\ \text{Flächenanteile (⊠)}}} \psi_{P_k} + \underbrace{\sum_f a_{N_{kf}}^{\boxtimes}}_{\substack{\text{Beiträge zu } a_{N_{kf}}: \\ \text{Flächenanteile (⊠)}}} \psi_{N_f} = \underbrace{r_{P_k}^{\blacksquare} + \sum_f r_{P_{kf}}^{\boxtimes}}_{\substack{\text{Beiträge zu } r_{P_k}: \\ \text{Volumenanteil (■),} \\ \text{Flächenanteile (⊠)}}} \quad \forall k = 1, \dots, n. \quad (3.43)$$

Alle n Gleichungen ergeben insgesamt ein lineares Gleichungssystem, welches anhand einer quadratischen Matrix \mathbf{A} mit $n \times n$ Koeffizienten und den Vektoren $\boldsymbol{\psi}$ und \mathbf{r} der Größe n in Matrix-Vektor-Form dargestellt werden kann:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{r}. \quad (3.44)$$

Alternativ lässt sich das System mit $\boldsymbol{\psi} = [\psi_l] = (\psi_{P_1}, \psi_{P_2}, \dots, \psi_{P_{n-1}}, \psi_{P_n})^T$ und $\mathbf{r} = [r_k] = (r_{P_1}, r_{P_2}, \dots, r_{P_{n-1}}, r_{P_n})^T$ aber auch in Indeschreibweise ausdrücken:

$$\sum_{l=1}^n [a_{kl}] [\psi_l] = [r_k]. \quad (3.45)$$

Die Koeffizienten a_{P_k} aus Gleichung (3.42) stellen darin für jede k -te Zeile

$$\sum_{l=1}^n a_{kl} \psi_l = r_k \quad \forall k = 1, \dots, n \quad (3.46)$$

die Diagonalkoeffizienten $a_{kl} \forall l = 1, \dots, n$ in $\mathbf{A} = [a_{kl}]$ mit $l = k$ dar. Die der Oberfläche $\Gamma_f \in \partial\Omega_{P_k}$ zugeordneten Koeffizienten $a_{N_{kf}}$ entsprechen für jedes k nur solchen Nebendiagonalkoeffizienten $a_{kl} \forall l = 1, \dots, n$ mit $l \neq k$, welche sich aus der Gittertopologie ergeben. Alle anderen Nebendiagonalkoeffizienten verschwinden.

Zur Lösung des linearen Gleichungssystems (3.44) stehen in *OpenFOAM* unterschiedliche iterative Gleichungslöser (implementierte Lösungsalgorithmen) zur Verfügung. Da deren Vorteile und Nachteile jeweils von der genauen Struktur und Kondition der grundsätzlich nur dünn besetzten Matrix \mathbf{A} abhängen, wird an dieser Stelle auf weitere Details verzichtet. Im Zusammenhang mit konkreten Problemstellungen werden im weiteren Verlauf die Eigenschaften von \mathbf{A} stellenweise weiter beleuchtet und bevorzugte Lösungsalgorithmen genannt. Ein grundsätzlicher Überblick in Bezug auf *OpenFOAM* findet sich hinsichtlich geeigneter Verfahren beispielsweise in Jasak [1996, Abschnitt 3.5], Rusche

[2002, Abschnitt 2.6], Juretić [2004, Abschnitt 3.7] und Moukalled u. a. [2016, Abschnitt 10.5.2]. Allgemein im Zusammenhang mit FVM seien diesbezüglich Ferziger u. Perić [2002, Abschnitt 5.2] und Saad [2003] genannt.

Bevor im restlichen Teil dieses Kapitels mit der Analyse der einzelnen Terme aus Gleichung (3.24) fortgefahren wird, ist ausgehend von Gleichung (3.43) noch die Aufteilung aller Grenzflächen (\boxtimes) in interne (\times) und externe (\square) Flächen gemäß Gleichung (3.28) sinnvoll:

$$\underbrace{\left(a_{P_k}^{\blacksquare} + \sum_f^{\times} a_{P_{kf}}^{\times} + \sum_f^{\square} a_{P_{kf}}^{\square} \right)}_{\substack{\text{Diagonalbeiträge:} \\ \text{Volumenanteil } (\blacksquare), \\ \text{Flächenanteile } (\times) / (\square)}} \psi_{P_k} + \underbrace{\sum_f^{\times} a_{N_{kf}}^{\times} \psi_{N_f}}_{\substack{\text{Nebendiagonalbeiträge:} \\ \text{Flächenanteile } (\times)}} = \underbrace{\left(r_{P_k}^{\blacksquare} + \sum_f^{\times} r_{P_{kf}}^{\times} + \sum_f^{\square} r_{P_{kf}}^{\square} \right)}_{\substack{\text{Beiträge zur rechten Seite:} \\ \text{Volumenanteil } (\blacksquare), \\ \text{Flächenanteile } (\times) / (\square)}} \quad \forall k = 1, \dots, n. \quad (3.47)$$

Dabei geht hinsichtlich der Approximation der Flächenintegrale aus einem Vergleich von gewichteter Interpolation (3.30) und Robin-Randbedingungen (3.40) deutlich hervor, dass Nebendiagonalkoeffizienten in \mathbf{A} nicht durch physikalische Randbedingungen entstehen können.

3.3.4 Zeitableitungsterm

Zur zeitlichen Diskretisierung bzw. zeitlichen Integration von Gleichung (3.24) ist es vorteilhaft, vorübergehend gedanklich den Konvektionsterm auf die rechte Seite zu bringen, um ihn anschließend mit dem Diffusions- und Quellterm geschlossen als eine Funktion $O(\psi, \nabla\psi, \dots)$ in Abhängigkeit von $\psi, \nabla\psi$ und allen sonstigen Größen der Transportgleichung aufzufassen:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_P} \rho\psi \, dV = O(\psi, \nabla\psi, \dots). \quad (3.48)$$

Weiterhin wird zur Vereinfachung eine äquidistante Zeitschrittweite Δt angenommen. Die örtliche Diskretisierung des Volumenintegrals mit der Zeitableitung ergibt sich dann direkt aus Gleichung (3.26):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_P} \rho\psi \, dV \approx \left\{ \frac{\partial(\rho\psi V)}{\partial t} \right\}_P, \quad (3.49)$$

während die rechte Seite hier nur formell in eine örtlich diskrete Form überführt wird:

$$\left\{ \frac{\partial(\rho\psi V)}{\partial t} \right\}_P = \{O(\psi, \nabla\psi, \dots)\}_P. \quad (3.50)$$

Nun wird deutlich, warum hier die anderen Terme aus Gleichung (3.24) in Gestalt des Ausdruckes $O(\psi, \nabla\psi, \dots)$ überhaupt mit betrachtet werden. Bei der eigentlichen Zeitdiskretisierung der semi-diskreten, d.h. nur örtlich aber noch nicht zeitlich diskretisierten Gleichung (3.50), spielt nämlich der Zeitpunkt der rechten Seite eine wesentliche Rolle.

In *OpenFOAM* kommen Mehrschrittverfahren zum Einsatz, welche neben dem aktuellen Zeitpunkt t^* auf den bereits vergangenen Zeitpunkten $t^\circ = t^* - \Delta t$ und $t^{\circ\circ} = t^* - 2\Delta t$ basieren können [Moukalled u. a. 2016, Kapitel 13]. Zur Vereinfachung der Schreibweise werden diesbezüglich die Notationen $\psi_P^\circ = \psi(t^\circ, \mathbf{x}_P)$ und $\psi_P^{\circ\circ} = \psi(t^{\circ\circ}, \mathbf{x}_P)$ für die diskreten Zeitlevel der Funktion ψ genutzt. Für den aktuellen Zeitpunkt wird allerdings mit der Vereinbarung $\psi_P = \psi(t^*, \mathbf{x}_P)$ auf einen hochgestellten Index verzichtet. Übereinstimmend kommt mit $\rho_P = \rho(t^*, \mathbf{x}_P)$, $\rho_P^\circ = \rho(t^\circ, \mathbf{x}_P)$ und $\rho_P^{\circ\circ} = \rho(t^{\circ\circ}, \mathbf{x}_P)$ auch für die Dichte, mit $V_P = V(t^*, \mathbf{x}_P)$, $V_P^\circ = V(t^\circ, \mathbf{x}_P)$ und $V_P^{\circ\circ} = V(t^{\circ\circ}, \mathbf{x}_P)$ für die Zellvolumina und schließlich mit $O_P(\psi_P, \psi_N, \dots) = O(t^*, \mathbf{x}_P)$, $O_P(\psi_P^\circ, \psi_N^\circ, \dots) = O(t^\circ, \mathbf{x}_P)$ und $O_P(\psi_P^{\circ\circ}, \psi_N^{\circ\circ}, \dots) = O(t^{\circ\circ}, \mathbf{x}_P)$ für die rechte Seite eine entsprechende Schreibweise zum Einsatz.

Die einfachste Möglichkeit zur approximativen Zeitintegration von Gleichung (3.50) ist das explizite Euler-Verfahren [z. B. Herrmann 2007, Abschnitt 10.5.1]:

$$\frac{\rho_P \psi_P V_P - \rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ}{\Delta t} = O_P(\psi_P^\circ, \psi_N^\circ, \dots) = \left\{ \frac{\partial(\rho\psi V)}{\partial t} \right\}_P^\circ. \quad (3.51)$$

Dabei wird eine zeitliche Vorwärts-Extrapolation von t° nach t^* vorgenommen, die auf dem Rest der Gleichung zum vorherigen Zeitpunkt basiert. Die Methode ist nur erster Ordnung genau und für größere Zeitschrittweiten Δt numerisch instabil. Daher kommt dieses Verfahren in der reinen Form gemäß Gleichung (3.51) in *OpenFOAM* auch nicht zur Anwendung.

Zum Beispiel in Ferziger u. Perić [2002, Abschnitt 6.3.1, Seite 143-146] wird jedoch anhand der Anwendung des expliziten Euler-Verfahrens zur Diskretisierung einer eindimensionalen Transportgleichung (ohne Quellterm) eine dimensionslose Kennzahl abgeleitet, über welche sich die Stabilität der Zeitintegration auch für mehrdimensionale Probleme abschätzen lässt. Diese Kennzahl ist die Courant-Zahl bzw Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)-Zahl [Courant u. a. 1928]:

$$C = \frac{U \Delta t}{\Delta x}, \quad (3.52)$$

welche in der Strömungsmechanik einen Schlüsselparameter darstellt. Darin ist die Größe U eine charakteristische Geschwindigkeit und Δx steht für eine charakteristische Länge der Kontrollvolumina. Die Zahl beschreibt das Verhältnis von Zeitschrittweite und charakteristischer Konvektionszeit $U/\Delta x$ und damit auch, inwieweit sich Informationen innerhalb eines Zeitschrittes konvektiv ausbreiten. In Ferziger u. Perić [2002, Abschnitt 6.3.1] wird weiterhin gezeigt, dass zur Stabilität des expliziten Euler-Verfahrens im eindimensionalen Fall notwendigerweise eine Courant-Zahl kleiner als eins erfüllt sein muss. Dieses CFL-Kriterium lautet:

$$C < 1 \quad \leftrightarrow \quad \Delta t < \frac{\Delta x}{U}. \quad (3.53)$$

Eine ähnliche Beschränkung der Zeitschrittweite Δt ergibt sich zwar theoretisch auch aus der charakteristischen Diffusionszeit $\rho(\Delta x)^2/\gamma$, diese hat jedoch in *OpenFOAM* im Bereich der Strömungsmechanik üblicherweise keine Bedeutung. Das CFL-Kriterium spielt in der Strömungsmechanik auch bei impliziter Zeitintegration noch eine Rolle, da es ein intuitives Maß der Ausbreitung von Strömungsinformationen zur Verfügung stellt.

Werden also, abgesehen vom Zeitableitungsterm, die anderen Terme der Transportgleichung zum aktuellen (noch unbekanntem) Zeitpunkt mit einer zeitlichen Rückwärts-Extrapolation von t^* nach t° herangezogen, so ergibt sich das implizite Euler-Verfahren [z. B. Herrmann 2007, Abschnitt 10.5.3]:

$$\frac{\rho_P \psi_P V_P - \rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ}{\Delta t} = O_P(\psi_P, \psi_N, \dots). \quad (3.54)$$

Genau wie die explizite Variante (3.51) ist dieses Verfahren durch den einseitigen Charakter nur erster Ordnung genau, aber prinzipiell für beliebige Δt stabil.

Das Crank-Nicolson-Verfahren [Crank u. Nicolson 1947] basiert auf der Trapez-Regel in der Zeit [z. B. Herrmann 2007, Abschnitt 10.5.3] und entspricht damit der Mittelung von explizitem (3.51) und implizitem (3.54) Euler-Verfahren:

$$2 \frac{\rho_P \psi_P V_P - \rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ}{\Delta t} = O_P(\psi_P, \psi_N, \dots) + \left\{ \frac{\partial(\rho \psi V)}{\partial t} \right\}_P^\circ. \quad (3.55)$$

Durch die zentrale Differenz ist es für beliebige Δt stabil und zweiter Ordnung genau. Wie bei der zentralen Differenz aus Gleichung (3.33) können hier allerdings Probleme im Zusammenhang mit numerischen Oszillationen auftreten, sodass es in *OpenFOAM* mit einem in Richtung des impliziten Euler-Verfahrens verschobenen Anteil über einen Mischfaktor $\beta_e \in [0, 1]$ (Exzentrizität) verallgemeinert wird:

$$(1 + \beta_e) \frac{\rho_P \psi_P V_P - \rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ}{\Delta t} = O_P(\psi_P, \psi_N, \dots) + \beta_e \left\{ \frac{\partial(\rho \psi V)}{\partial t} \right\}_P^\circ. \quad (3.56)$$

Auf diese Weise kann sowohl das implizite Euler- ($\beta_e = 0$), das reine Crank-Nicolson-Verfahren ($\beta_e = 1$) als auch ein Mischbereich $0 < \beta_e < 1$ realisiert werden.

Als Alternative zum verallgemeinerten Crank-Nicolson-Verfahren steht in *OpenFOAM* zusätzlich das implizite Rückwärts-Differenzen (Backward Differencing Formulas, BDF)-Verfahren zweiter Ordnung zur Verfügung:

$$\frac{3\rho_P \psi_P V_P - 4\rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ + \rho_P^{\circ\circ} \psi_P^{\circ\circ} V_P^{\circ\circ}}{2\Delta t} = O_P(\psi_P, \psi_N, \dots), \quad (3.57)$$

welches in Hairer u. a. [2008, Kapitel 3] und Hairer u. Wanner [2002, Kapitel 5] beschrieben wird. Es ist auch für alle Δt stabil und zweiter Ordnung genau. Zur Einordnung sei hier noch angemerkt, dass das implizite Euler-Verfahren dem BDF-Verfahren erster Ordnung entspricht.

Im Zusammenhang mit den verschiedenen Verfahren wurde im Rahmen dieses Abschnittes begrifflich zwischen expliziten und impliziten Verfahren unterschieden. Explizit bedeutet in diesem Sinne, dass eine Diskretisierung auf bekannten (zeitlich älteren) Werten basiert und eine neue Lösung explizit berechenbar ist. Zum Beispiel kann beim expliziten Euler-Verfahren (3.51) die Lösung für ψ_P direkt ermittelt werden, indem die Gleichung danach umgestellt wird. Bei einer impliziten Diskretisierung lässt sich, wie beim impliziten Euler-Verfahren (3.54) ersichtlich ist, die Gleichung nicht ohne weiteres nach ψ_P auflösen. In der Regel muss dort das (lineare) Gleichungssystem (3.44) aus Abschnitt 3.3.3 gelöst werden. Da bekannte, also von der gesuchten Lösung unabhängige Terme nur Beiträge zur rechten

Seite dieses Gleichungssystems liefern, spricht man auch von einer expliziten Diskretisierung, wenn dabei ausschließlich Beiträge zu \mathbf{r} und nicht zur Matrix \mathbf{A} entstehen. Eine implizite Diskretisierung liefert dagegen immer Beiträge zur Matrix \mathbf{A} .

Abschließend werden die Beiträge einer Zelle P gemäß Gleichung (3.47) zum Gleichungssystem (3.44) durch örtliche und zeitliche Diskretisierung des Zeitableitungsterms aus Gleichung (3.24) zusammengetragen. Für das Crank-Nicolson-Verfahren mit Exzentrizität β_e aus Gleichung (3.56) trägt eine Zelle P Folgendes bei:

$$\text{Diagonalbeitrag zu A:} \quad a_P^\blacksquare = (1 + \beta_e) \frac{\rho_P V_P}{\Delta t}, \quad (3.58a)$$

$$\text{Beitrag zu r:} \quad r_P^\blacksquare = (1 + \beta_e) \frac{\rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ}{\Delta t} + \beta_e \left\{ \frac{\partial(\rho\psi V)}{\partial t} \right\}_P^\circ. \quad (3.58b)$$

Die Beiträge des Rückwärts-Differenzen-Verfahrens zweiter Ordnung nach Gleichung (3.57) ergeben sich zu:

$$\text{Diagonalbeitrag zu A:} \quad a_P^\blacksquare = \frac{3\rho_P V_P}{2\Delta t}, \quad (3.59a)$$

$$\text{Beitrag zu r:} \quad r_P^\blacksquare = \frac{4\rho_P^\circ \psi_P^\circ V_P^\circ - \rho_P^{\circ\circ} \psi_P^{\circ\circ} V_P^{\circ\circ}}{2\Delta t}. \quad (3.59b)$$

Da es sich bei dem Zeitableitungsterm aus Gleichung (3.24) um ein Volumenintegral handelt, liefert er folglich auch nur Volumenbeiträge (\blacksquare). Da alle Zeitdiskretisierungsverfahren in *OpenFOAM* einen zumindest teilweise impliziten Charakter haben, ergeben sich auch in allen Fällen implizite Beiträge zur Diagonalen a_P^\blacksquare der Matrix \mathbf{A} und explizite Beiträge r_P^\blacksquare zur rechten Seite \mathbf{r} . Durch die Zeitableitung können keine Nebendiagonalbeiträge entstehen, sodass eine ggf. symmetrische Matrix nicht in dieser Eigenschaft beeinflusst wird. Die Terme $O_P(\psi_P, \psi_N, \dots)$ aus Gleichung (3.56) und Gleichung (3.57) beinhalten die örtliche Diskretisierung des Konvektions-, Diffusions- und Quellterms und werden in den folgenden drei Anschnitten diskutiert.

3.3.5 Konvektionsterm

Zur örtlichen Diskretisierung des Konvektionsterms aus Gleichung (3.24), wird das entsprechende Oberflächenintegral über die Gleichung (3.27) approximiert:

$$\int_{\partial\Omega_P} dS \cdot (\rho(\mathbf{u} - \mathbf{v})\psi) \approx \sum_f^{\boxtimes} \mathbf{S}_f \cdot \{\rho(\mathbf{u} - \mathbf{v})\psi\}_f = \sum_f^{\boxtimes} F_f \psi_f. \quad (3.60)$$

Der dabei genutzte Fluss F_f , der bereits im Zusammenhang mit der Interpolation aus Abschnitt 3.3.1 in Gleichung (3.36) eingeführt wurde, wird auf die Flächen interpoliert. Falls die Transportgleichung Gleichung (3.24) für \mathbf{u} selbst gelöst wird, dann ist für den Konvektionsterm eine Linearisierung notwendig. In *OpenFOAM* wird beispielsweise für strömungsmechanische Simulationen in erster Näherung der Fluss eines vorherigen Zeitpunktes F_f° genutzt und über eine iterative Vorgehensweise verbessert [Jasak 1996, Abschnitt 3.8]. Die Bestimmung der Werte F_f bzw. ψ_f für innere und äußere

Flächen wurde in den Abschnitten 3.3.1 und 3.3.2 schon besprochen. Im Rahmen dieses Abschnittes wird angenommen, dass der Fluss bereits auf den Flächen vorliegt.

Mit der allgemeinen Form der gewichteten Interpolation nach Gleichung (3.30) für Flächen im Inneren (\times) von Ω und der gemischten Randbedingung aus Gleichung (3.40a) für Flächen, welche mit dem Rand $\partial\Omega$ zusammenfallen (\square), können die Werte ψ_f aus Gleichung (3.60) ersetzt werden:

$$\begin{aligned} \sum_f^{\times} F_f \psi_f &= \sum_f^{\times} F_f (w_f \psi_P + (1 - w_f) \psi_N + \psi_U) \\ &+ \sum_f^{\square} F_f \beta_f v_f + \sum_f^{\square} F_f (1 - \beta_f) \left(\psi_P + \frac{g_f}{\delta_f^\perp} \right). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Damit ergeben sich für den Konvektionsterm aus Gleichung (3.24) durch Diskretisierung folgende Beiträge einer Fläche f gemäß Gleichung (3.47) zum Gleichungssystem (3.44):

$$\text{Diagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad a_{P_{k,f}}^{\times} = F_f w_f, \quad (3.62a)$$

$$a_{P_{k,f}}^{\square} = F_f (1 - \beta_f), \quad (3.62b)$$

$$\text{Nebendiagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad a_{N_{k,f}}^{\times} = F_f (1 - w_f), \quad (3.62c)$$

$$\text{Beitrag zu } \mathbf{r}: \quad r_{P_{k,f}}^{\times} = -F_f \psi_U, \quad (3.62d)$$

$$r_{P_{k,f}}^{\square} = -F_f \beta_f v_f - F_f (1 - \beta_f) \frac{g_f}{\delta_f^\perp}. \quad (3.62e)$$

Bei dem Konvektionsterm in Gleichung (3.24) handelt es sich um ein Oberflächenintegral. Die Interpolation für innere Grenzflächen (\times) liefert sowohl Beiträge zur Diagonalen als auch zur Nebendiagonalen der Matrix \mathbf{A} . Da die Interpolationsgewichte w_f im Allgemeinen für zwei benachbarte Zellen P und N auf beiden Seiten einer Fläche unterschiedlich sind (z. B. durch unterschiedliche große Abstände \overline{Pf} und \overline{fN}), sind die Nebendiagonalbeiträge im oberen und unteren Dreieck von \mathbf{A} in der Regel asymmetrisch. Falls bei der Interpolation ein Korrekturterm $\psi_U \neq 0$ genutzt wird, so entsteht zusätzlich ein Beitrag zur rechten Seite \mathbf{r} . Letztere erhält auch für äußere Flächen (\square) im Falle von Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen weitere Beiträge. Neumann-Randbedingungen führen außerdem zu einem Diagonalbeitrag in \mathbf{A} .

3.3.6 Diffusionsterm

Die Diskretisierung des Diffusionsterms aus Gleichung (3.24) erfolgt, genau wie bei der Vorgehensweise in Bezug auf den Konvektionsterm aus dem vorherigen Abschnitt, durch Approximation des entsprechenden Oberflächenintegrals mit Gleichung (3.27):

$$\int_{\partial\Omega_P} dS \cdot (\gamma \nabla \psi) \approx \sum_f^{\times} S_f \cdot \{\gamma \nabla \psi\}_f = \sum_f^{\times} \gamma_f S_f \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f. \quad (3.63)$$

Die Diffusivität γ_f dieses erweiterten Laplace-Operators im Schwerpunkt der Fläche wird, analog zum Fluss F_f in Gleichung (3.60), ggf. gemäß Gleichung (3.30) von den angrenzenden Zellen auf die

Flächen interpoliert. Im Gegensatz zum Konvektionsterm sind hier jedoch, anstelle von Werten ψ_f , die Normalengradienten $\mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f$ auf den Flächen gesucht.

In Abschnitt 3.3.2 wurde diesbezüglich bereits gezeigt, wie die Gradientenberechnung am Rand $\partial\Omega$ (\square) erfolgt. Mittels Gleichung (3.40b) lassen sich die gemischten Robin-Randbedingungen direkt in Gleichung (3.63) einarbeiten:

$$\begin{aligned} \sum_f^{\boxtimes} \gamma_f S_f \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f &= \sum_f^{\times} \gamma_f S_f \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f \\ &+ \sum_f^{\square} \gamma_f S_f \beta_f \delta_f^\perp (v_f - \psi_P) + \sum_f^{\square} \gamma_f S_f (1 - \beta_f) g_f . \end{aligned} \quad (3.64)$$

Für innere Grenzflächen (\times) ist es aus numerischen Gründen wünschenswert, die im Rahmen der Interpolation erwähnten, zentralen Differenzen aus Gleichung (3.33) zur Berechnung der Gradienten zu nutzen [Jasak 1996, Abschnitt 3.3.1.3]. Allerdings stehen diese per Definition natürlich nur in Richtung des Vektors \mathbf{d}_f zur Verfügung, obwohl sie in Richtung des Normalenvektors \mathbf{n}_f der Flächen gebraucht werden. Für nicht-orthogonale Gitter sind \mathbf{d}_f und \mathbf{n}_f nicht zwangsläufig parallel. Es erfolgt daher zunächst eine Aufteilung des Normalenvektors durch Superposition des mit Gleichung (3.5) normierten Zellabstandsvektors \mathbf{c}_f und des nicht-orthogonalen Korrekturvektors \mathbf{k}_f nach Gleichung (3.7):

$$\mathbf{n}_f = \mathbf{c}_f + \mathbf{k}_f . \quad (3.65)$$

Für den Gradienten auf einer inneren Fläche erhält man damit:

$$\mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f = \mathbf{c}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f + \mathbf{k}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f . \quad (3.66)$$

Die Approximation des gesamten Gradienten kann dann, ausgehend von einer zentralen Differenz gemäß Gleichung (3.33) im ersten Anteil, mit einer zusätzlichen Korrektur in Richtung von \mathbf{k}_f auf Basis der Werte zum vorherigen Iterations- oder Zeitschritt t° [vgl. Abschnitt 3.3.4] realisiert werden:

$$\begin{aligned} \sum_f^{\boxtimes} \gamma_f S_f \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f &\approx \sum_f^{\times} \gamma_f S_f \delta_f (\psi_N - \psi_P) + \sum_f^{\times} \gamma_f S_f \mathbf{k}_f \cdot \overline{\{\nabla\psi\}_f}^\circ \\ &+ \sum_f^{\square} \gamma_f S_f \beta_f \delta_f^\perp (v_f - \psi_P) + \sum_f^{\square} \gamma_f S_f (1 - \beta_f) g_f \end{aligned} \quad (3.67)$$

Die Berechnung von $\overline{\{\nabla\psi\}_f}^\circ$ erfolgt über eine explizite Gradientenberechnung in den Zellen [vgl. Abschnitt 3.4] mit anschließend linearer Interpolation nach Gleichung (3.31) auf die Flächen. Über mehrfache Iterationen kann der Korrekturterm so systematisch verbessert werden.

Wie in Jasak [1996, Abschnitt 3.3.1.3] oder Moukalled u. a. [2016, Abschnitt 8.6] erläutert wird, gibt es alternativ zur nicht-orthogonalen Korrektur mit einer Aufteilung von \mathbf{n}_f nach Gleichung (3.65) auch noch die Möglichkeiten einer unter- oder über-relaxierten Zerlegung des Normalenvektors. Die hier gezeigte, bzw. die in *OpenFOAM* implementierte Methode ist dabei ein Kompromiss hinsichtlich Genauigkeit [Jasak 1996, Abschnitt 3.6.3] einerseits und Stabilität [Jasak 1996, Abschnitt 3.7.4] ande-

rerseits. Die Schiefe des Gitters gemäß Gleichung (3.11) bleibt bei der Diskretisierung unter Annahme einer hinreichend guten Gitterqualität nach Gleichung (3.13) in *OpenFOAM* aus Konsistenzgründen unberücksichtigt.

Insgesamt ergeben sich damit durch die Diskretisierung des Diffusionsterms aus Gleichung (3.24) folgende Beiträge einer Fläche f gemäß Gleichung (3.47) zum Gleichungssystem (3.44):

$$\text{Diagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad a_{P_{k_f}}^\times = \gamma_f S_f \delta_f, \quad (3.68a)$$

$$a_{P_{k_f}}^\square = \gamma_f S_f \beta_f \delta_f^\perp, \quad (3.68b)$$

$$\text{Nebendiagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad a_{N_{k_f}}^\times = -\gamma_f S_f \delta_f, \quad (3.68c)$$

$$\text{Beitrag zu } \mathbf{r}: \quad r_{P_{k_f}}^\times = \gamma_f S_f \mathbf{k}_f \cdot \overline{\{\nabla \psi\}}_f^\circ, \quad (3.68d)$$

$$r_{P_{k_f}}^\square = \gamma_f S_f \beta_f \delta_f^\perp v_f + \gamma_f S_f (1 - \beta_f) g_f. \quad (3.68e)$$

Durch das Oberflächenintegral erhält man, ähnlich wie beim Konvektionsterm, Beiträge zur Diagonalen und Nebendiagonalen der Matrix \mathbf{A} . Die Anwendung der zentralen Differenzen im Inneren (\times) führt hier jedoch auf symmetrische Matrixkoeffizienten, wie aus einem Vergleich von Gleichung (3.68a) und Gleichung (3.68c) ersichtlich ist. Die nicht-orthogonale Korrektur spiegelt sich in der rechten Seite \mathbf{r} wieder. Letztere erhält, im Falle von Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen, auch für äußere Flächen (\square) weitere Beiträge. Neumann-Randbedingungen liefern zusätzlich einen Diagonalbeitrag.

3.3.7 Quellterm

Das Volumenintegral über den Quellterm aus Gleichung (3.24) kann auf Basis von Gleichung (3.26) im Schwerpunkt der Zelle ausgewertet werden:

$$\int_{\Omega_P} s(\psi) \, dV = \{s(\psi)\}_P V_P. \quad (3.69)$$

Diese Prozedur wurde auch schon bei der Zeitdiskretisierung in Gleichung (3.49) genutzt. Damit die Funktion $s(\psi)$ des Quellterms effizient diskretisiert wird, und in Abhängigkeit der Lösung in der Zelle P zur Struktur der linearen Gleichungen (3.47) passt, ist eine Linearisierung wie in [Jasak \[1996, Abschnitt 3.3.1.4\]](#) oder [Versteeg u. Malalasekera \[2007\]](#) angebracht:

$$s(\psi) \approx s_U + s_P \psi. \quad (3.70)$$

In der linearisierten Form ergeben sich durch die Diskretisierung des Quellterms aus Gleichung (3.24) dann folgende Beiträge einer Zelle P gemäß Gleichung (3.47) zum Gleichungssystem (3.44):

$$\text{Diagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad a_P^\blacksquare = -s_P V_P, \quad (3.71a)$$

$$\text{Beitrag zu } \mathbf{r}: \quad r_P^\blacksquare = s_U V_P. \quad (3.71b)$$

Da es sich bei dem Quellterm, wie bei der Zeitableitung aus Abschnitt 3.3.4, um ein Volumenintegral handelt, fallen folglich auch nur Volumenbeiträge (■) an. Neben einem Beitrag zur rechten Seite \mathbf{r} entsteht ein Beitrag zur Matrix \mathbf{A} nur auf der Diagonalen. Obwohl dadurch eine mögliche Symmetrie-Eigenschaft der Matrix nicht beeinflusst wird, kann das negative Vorzeichen in a_P^\blacksquare im Allgemeinen die Matrixeigenschaften nachteilig beeinflussen [Jasak 1996]. Je nach Vorzeichen von s_P ist daher eine Verschiebung in Richtung explizitem Anteil s_U nötig.

3.4 Explizite Berechnung von Gradient, Divergenz und Rotation

Zum Abschluss dieses Kapitels soll noch kurz angedeutet werden, wie die explizite Berechnung von Gradient, Divergenz und Rotation eines bekannten, diskreten Feldes in *OpenFOAM* abläuft. Nach Gleichung (3.17), (3.18) und (3.26) kann für ein bekanntes Feld ψ das verallgemeinerte Produkt „ \circ “ im Schwerpunkt der einer Zelle P auf Basis von Gleichung (3.23) folgendermaßen ausgewertet werden:

$$\{\nabla \circ \psi\}_P \approx \frac{1}{V_P} \int_{\Omega_P} \nabla \circ \psi \, dV = \frac{1}{V_P} \int_{\partial\Omega_P} dS \circ \psi \approx \frac{1}{V_P} \sum_f^{\boxtimes} \mathbf{S}_f \circ \psi_f. \quad (3.72)$$

Sind die diskreten Werte ψ_P, ψ_N, \dots in den Zellen und die Randwerte v_f auf den externen Flächen bekannt, dann müssen lediglich die Werte auf den internen Flächen ψ_f interpoliert werden. Damit gilt zum Beispiel mit der bekannten Form der gewichteten Interpolation aus Gleichung (3.30):

$$\{\nabla \circ \psi\}_P \approx \frac{1}{V_P} \sum_f^{\times} \mathbf{S}_f \circ (w_f \psi_P + (1 - w_f) \psi_N + \psi_U) + \frac{1}{V_P} \sum_f^{\square} \mathbf{S}_f \circ v_f. \quad (3.73)$$

Konkret mit der linearen Interpolation gemäß Gleichung (3.31) und den Gewichten nach Gleichung (3.32) gilt:

$$\{\nabla \circ \psi\}_P \approx \frac{1}{V_P} \sum_f^{\times} \mathbf{S}_f \circ (\bar{w}_f \psi_P + (1 - \bar{w}_f) \psi_N) + \frac{1}{V_P} \sum_f^{\square} \mathbf{S}_f \circ v_f. \quad (3.74)$$

Damit lassen sich, je nach Art des Produktes „ \circ “ (Skalar-, Vektor- oder Tensorprodukt), sowohl die Divergenz ($\nabla \cdot \psi$), der Gradient ($\nabla \psi$) als auch die Rotation ($\nabla \times \psi$) explizit als diskrete, zellbasierte Felder bestimmen.

3.5 Zwischenresümee

In diesem Kapitel wurde als Voraussetzung für die folgende Abhandlung der Kapitel 4 und 5 die Technik der *FVM* direkt am Beispiel von *OpenFOAM* beschrieben. Da die drei in Abschnitt 2.4 mit Bezug auf das *Ribbon Growth on Substrate (RGS)*-Verfahren definierten Teilprobleme eng mit der *FVM* verwoben sind, wird in den nächsten Kapiteln regelmäßiger Gebrauch von den hier eingeführten Begrifflichkeiten gemacht [Abschnitt 3.1 und 3.2]. Besonders wichtig ist in diesem Kontext die Aufteilung

des Lösungsgebietes einer DGL in Kontrollvolumina und Flächen, die Annahme der linearen Variation innerhalb eines Kontrollvolumens, die zwei Hauptmerkmale der Schiefe und Nicht-Orthogonalität zur Gitterqualität, der Zweck von Interpolation und Randbedingungen sowie die Unterscheidung von impliziter und expliziter Diskretisierung.

Darüber hinaus tauchen an zahlreichen Stellen dieser Arbeit Gleichungen auf, die einer speziellen Art der Transportgleichung (3.19) entsprechen. Das betrifft nicht nur einen Teil der im letzten Kapitel bereits gezeigten Gleichungen (2.3a) bis (2.3c) bzw. (2.8a) und (2.8b), sondern im weiteren Verlauf noch weitere DGLn. Von größter Bedeutung ist dabei die Poisson-Gleichung, die im Sinne der Transportgleichung nur aus einem Diffusionsterm mit ggf. variabler Diffusivität und einem Quellterm besteht. Diese Gleichung tritt einerseits bei der Magnetodynamik (MD) durch die zeitharmonische Beschreibung der Maxwell-Gleichungen und im Zusammenhang mit der Erhaltung elektrischer Ladungen auf, andererseits spielt sie aber auch bei der Hydrodynamik (HD) in Verbindung mit der Massenerhaltung inkompressibler Fluide eine essentielle Rolle.

Schließlich sind vor allem für die methodischen Neuentwicklungen im nächsten Kapitel Modifikationen der Diskretisierung zum Teilproblem der MD unerlässlich. Beispielsweise muss dort bei Existenz von Diskontinuitäten in der Diffusivität sowohl die Interpolation als auch die Herangehensweise in Bezug auf den Diffusionsterm überarbeitet werden, was letztlich auf eine Änderung von Matrixbeiträgen hinausläuft. Dies ist einer der Gründe, warum hier hinsichtlich der Diskretisierung der Transportgleichung einzelne Terme bis auf Matrixebene analysiert wurden [Abschnitt 3.3].

4 Modellierung von Induktionsprozessen

Die in diesem Kapitel gezeigten Methoden widmen sich der Modellierung von zeitharmonischen Induktionsprozessen mit der **Finite-Volumen-Methode (FVM)** in *foam-extend* [Wikki 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998] und damit dem Teilproblem der **Magnetodynamik (MD)**. Inhaltlich orientiert sich dieses Kapitel dabei teilweise an den eigenen Veröffentlichungen Beckstein u. a. [2017d, b]. Zu Beginn werden in den Abschnitten 4.1 und 4.2 zunächst die elektromagnetischen Grundlagen eingeführt und wichtige Modellannahmen diskutiert. Dabei wird eine mathematische Formulierung der Maxwell-Gleichungen im Sinne der **Magneto-Quasistatik (MQS)** beziehungsweise (bzw.) der metallurgischen **Magnetohydrodynamik (MHD)** gewählt, welche aus technischer Sicht besser geeignet ist als die Induktionsgleichung (2.8a). Anschließend wird in Abschnitt 4.3 ein neu entwickelter Methodenapparat zur effizienten numerischen Berechnung zeitharmonischer Induktionsvorgänge und der dabei wirkenden elektromagnetischen Felder mit der **FVM** präsentiert, wobei in diesem Zusammenhang alle zuvor benannten Anforderungen zur **MD** Berücksichtigung finden. Das schließt sowohl die Unbeschränktheit des Gültigkeitsgebietes der Maxwellschen Gleichungen, die Unterscheidung zwischen leitfähigen und nicht-leitfähigen Gebieten als auch eine praktisch günstige Induktormodellierung mit ein. Dem methodischen Vorgehen zur Erfassung von sich sprunghaft ändernden Materialeigenschaften ist auf Grund des Umfangs der dedizierte Abschnitt 4.4 gewidmet. Nach der theoretischen Methodenentwicklung folgt dann in Abschnitt 4.5 eine umfangreiche Validierung, wo Funktionalität und Effizienz der im Rahmen dieser Arbeit umgesetzten Implementierung in *foam-extend* anhand verschiedener Modelle und Magnetfeldkonfigurationen selektiv überprüft werden. Abschließend wird die neu entstandene Simulationsplattform dann in Abschnitt 4.6 anhand des vereinfachten **Ribbon Growth on Substrate (RGS)**-Modells aus Abbildung 2.4 zur Berechnung von Magnetfeld und Lorentz-Kraft beim **RGS**-Verfahren genutzt.

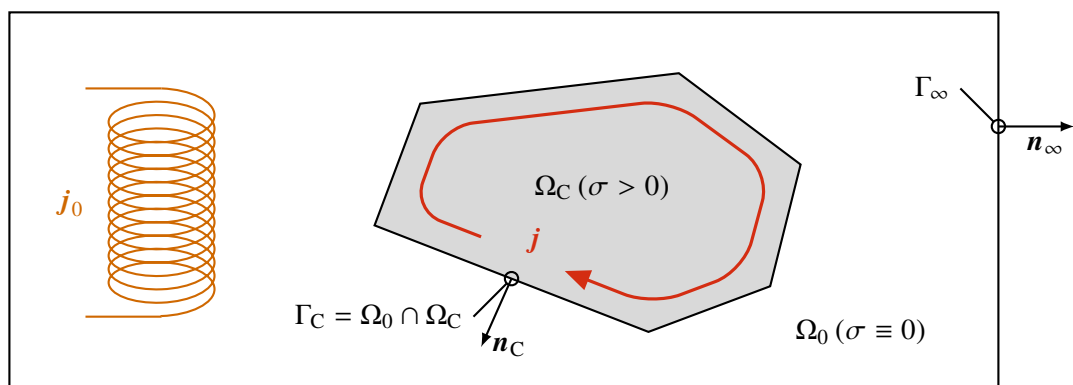


Abbildung 4.1: Idealisierte Konfiguration eines Induktionsprozesses: Eine Wechselstromdichte j_0 durch eine Spule innerhalb der nicht-leitfähigen Umgebung Ω_0 erzeugt eine Wirbelstromdichte j in einem nahegelegenen, leitfähigen Material Ω_C .

Abbildung 4.1 zeigt eine idealisierte Konfiguration, wie sie im Zusammenhang mit elektromagnetischen Bearbeitungsprozessen auftritt [siehe zum Beispiel (z. B.) Asai 2012]: Eine Induktionsspule, welche sich in einer nicht-leitfähigen Umgebung Ω_0 befindet, erzeugt Wirbelströme mit der Stromdichte \mathbf{j} in einem nahegelegenen, leitfähigen Medium Ω_C , dem Konduktor. Die elektromagnetischen Wechselfelder werden durch einen entsprechenden Wechselstrom (Alternating Current, AC) generiert, der in der Darstellung über die Wechselstromdichte \mathbf{j}_0 repräsentiert wird. In vielen Fällen ist die AC-Spule schleifenförmig aufgebaut und der Konduktor befindet sich im Zentrum des Induktors, da dort die magnetische Feldenergie größer ist als außerhalb des Spulensystems. Die leitfähige Region kann, wie das Beispiel des RGS-Modells aus Abbildung 2.4 deutlich macht, im Allgemeinen aus verschiedenen festen und flüssigen Teilgebieten bestehen und die elektrische Leitfähigkeit σ demzufolge lokal variieren. Innerhalb dieses Kapitels wird der Konduktor aber – unabhängig von Material und Aggregatzustand – als ein zusammenhängendes Gebiet mit variablen Materialeigenschaften betrachtet. Die leitfähige und nicht-leitfähige Region sind dabei durch die Konduktor-Oberfläche $\Gamma_C = \Omega_0 \cap \Omega_C$ getrennt. Eine Begrenzung der nicht-leitfähigen Region Γ_∞ ist technischer Natur und wird in Abschnitt 4.1.3 noch erklärt.

4.1 Elektromagnetische Induktion

Die grundlegenden Gleichungen zur Beschreibung klassischer elektromagnetischer Phänomene im Sinne der Kontinuumsmechanik sind die makroskopischen Maxwell-Gleichungen [Jackson 1975; Griffiths 1999]:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (4.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.1c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho. \quad (4.1d)$$

Diese vier vektoriiellen, partiellen Differentialgleichungen, die im Allgemeinen auf einem unbeschränkten Gebiet Ω_∞ gelten, beschreiben den Zusammenhang zwischen den örtlich (Ortsvektor \mathbf{x}) und zeitlich (Zeit t) variablen Feldgrößen der magnetischen Feldstärke \mathbf{H} und Flussdichte \mathbf{B} und der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} und Flussdichte \mathbf{D} . Das erweiterte Durchflutungsgesetz nach Ampère-Maxwell (4.1a) erklärt die Entstehung eines magnetischen Wirbelfeldes infolge einer Quellstromdichte \mathbf{j} oder Verschiebungsstromdichte. Gemäß des Induktionsgesetzes nach Faraday (4.1c) entsteht ein elektrisches Wirbelfeld wiederum bei zeitlicher Änderung der magnetischen Flussdichte. Das Gaußsche Gesetz (4.1d) erklärt freie Ladungen in Form der Ladungsdichte ρ als Quelle des elektrischen Feldes, wohingegen das Gaußsche Gesetz für magnetische Felder (4.1b) die Quellfreiheit des Magnetfeldes ausdrückt.

Die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (4.2)$$

welche sich aus Gleichungen (4.1a) und (4.1d) ergibt, ist eine Formulierung der Ladungserhaltung. Daraus geht auch die Bedeutung der Stromdichte als Produkt von Ladungsdichte und Geschwindigkeit der Ladungsträger hervor.

Bei Anwesenheit von Materie werden die Maxwell-Gleichungen (4.1) zusätzlich um die Materialgleichungen der Elektrodynamik ergänzt [Jackson 1975; Griffiths 1999]:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B} = \frac{1}{\mu_0 \mu_r} \mathbf{B} \quad (4.3a)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon \mathbf{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} . \quad (4.3b)$$

Die Polarisation \mathbf{P} und Magnetisierung \mathbf{M} charakterisieren darin die effektive, das heißt (d. h.) örtlich gemittelte, mikroskopische Wirkung der elektromagnetischen Felder auf Materie in einer folglich makroskopischen Betrachtungsweise. Sowohl die Polarisation als auch die Magnetisierung können, neben der räumlich-zeitlichen Abhängigkeit, selbst Funktion von \mathbf{E} bzw. \mathbf{B} sein. Alternativ ist die Beschreibung der Materialgleichungen auch über die Permeabilität μ und Permittivität ε , bzw. die relative Permeabilität $\mu_r = \mu/\mu_0$ und die relative Permittivität $\varepsilon_r = \varepsilon/\varepsilon_0$ möglich. Für das Vakuum, mit $\mathbf{P} \equiv \mathbf{0}$ und $\mathbf{M} \equiv \mathbf{0}$ bzw. $\mu \equiv \mu_0$ und $\varepsilon \equiv \varepsilon_0$, stehen die elektromagnetischen Feldstärken und Flussdichten jeweils direkt über die magnetische Feldkonstante

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N A}^{-2} \approx 1,2566 \dots \cdot 10^{-6} \text{ N A}^{-2} \quad (4.4)$$

und die elektrische Feldkonstante

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c_0^2} \approx 8,8541 \dots \cdot 10^{-12} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}^{-1} \quad (4.5)$$

im Zusammenhang. Beide Feldkonstanten sind mit der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum

$$c_0 = \sqrt{\frac{1}{\mu_0 \varepsilon_0}} = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1} \quad (4.6)$$

verknüpft.

Für leitfähige Materialien, wie dem Konduktor aus Abbildung 4.1, gilt zudem das verallgemeinerte Ohmsche Gesetz [Moreau 1990; Davidson 2001]

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) , \quad (4.7)$$

welches die Stromdichte in Relation zum elektrischen Feld und nach der nichtrelativistischen Näherung der Lorentz-Transformation [Davidson 2001, Abschnitt 1; Jackson 1975, Abschnitt 11.10] auch einer gegebenenfalls (ggf.) auftretenden Bewegungsgeschwindigkeit \mathbf{u} (von Teilbereichen) des Konduktors setzt. Über eine allgemein tensorielle Leitfähigkeit $\boldsymbol{\sigma}$ können mögliche, anisotropische Eigenschaften widerspiegelt werden. Auch hier kann $\boldsymbol{\sigma}$ selbst, zusätzlich zur räumlich-zeitlichen Abhängigkeit, von der elektrischen Feldstärke abhängen, was einen nichtlinearen Zusammenhang zur Folge hat.

4.1.1 Quasistatische Approximation der Maxwell-Gleichungen

Im Rahmen dieser Arbeit werden die folgenden Vereinfachungen getroffen:

1. Die elektrische Leitfähigkeit wird im Folgenden stets als eine skalare, von E unabhängige Funktion betrachtet:

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma \mathbf{I} . \quad (4.8)$$

Folglich beschreibt auch Gleichung (4.7) ein rein lineares Materialgesetz eines isotropen Konduktors. Zudem beschränkt sich die weitere Abhandlung auf Materialien mit einer hohen Leitfähigkeit von $\sigma \sim 1 \cdot 10^4 \text{ S m}^{-1}$ bis $1 \cdot 10^7 \text{ S m}^{-1}$, sodass typische Ladungsrelaxationszeiten in der Größenordnung von $\epsilon/\sigma \sim 1 \cdot 10^{-16} \text{ s}$ bis $1 \cdot 10^{-19} \text{ s}$ liegen [vergleiche (vgl.) Davidson 2001, Abschnitt 2.2].

2. Handelt es sich bei Teilen des Konduktors um flüssige leitfähige Medien, oder tritt eine andere Bewegung des Konduktors auf, so wird fortan angenommen, dass eine charakteristische Strömungs- oder Bewegungsgeschwindigkeit U weit unterhalb der Lichtgeschwindigkeit liegt:

$$U \ll c_0 . \quad (4.9)$$

Unter diesen Umständen lässt für einen hochleitfähigen Konduktor zeigen [Davidson 2001, Abschnitt 2.2 und 2.3], dass sowohl auf die zeitliche Änderung der Ladungsdichte in Gleichung (4.2)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \ll \nabla \cdot \mathbf{j} , \quad (4.10)$$

als auch auf die Berücksichtigung der Verschiebungsstromdichte in Gleichung (4.1a)

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \ll \mathbf{j} \quad (4.11)$$

verzichtet werden kann.

3. Falls im weiteren Verlauf dieser Arbeit Strömungen (innerhalb) des Konduktors, d. h. in Ω_C , betrachtet werden, dann nur unter der Voraussetzung einer kleinen magnetischen Reynolds-Zahl [Davidson 2001, Abschnitt 5]:

$$\text{Re}_M \ll 1 . \quad (4.12)$$

Diese dimensionslose Kennzahl

$$\text{Re}_M = \frac{UL}{\lambda} \quad (4.13)$$

basiert auf der magnetischen Diffusivität

$$\lambda = \frac{1}{\sigma \mu} \quad (4.14)$$

der Induktionsgleichung (2.8a) und beschreibt für eine charakteristische Längenskala L das Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Transport der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} . Die magnetische Reynolds-Zahl hilft zu beurteilen, inwieweit die Strömung eines leitfähigen Fluides mit der Geschwindigkeit U ein äußeres Magnetfeld in der Umgebung beeinflusst [vgl. Gleichung (2.7)]. Für sehr kleine Werte von Re_M wird ein existierendes Magnetfeld durch eine Fluidströmung kaum gestört. Trotz teils starker Vereinfachung deckt die zugrundeliegende Annahme ein sehr breites Spektrum von technisch relevanten Anwendungen ab [Davidson 2001].

Aus den Annahmen (4.9), (4.10) und (4.11) ergibt sich – im Sinne der MQS – eine quasistatische Approximation der Maxwell-Gleichungen [Moreau 1990; Davidson 2001]:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \mathbf{B} = \mathbf{j} \quad (4.15a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.15b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.15c)$$

$$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{E} = \varrho, \quad (4.15d)$$

worin die magnetische Feldstärke und die elektrische Flussdichte gegenüber der ursprünglichen Darstellung (4.1) ersetzt wurden. Die Ladungserhaltung aus Gleichung (4.2) vereinfacht sich zu:

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (4.16)$$

Gemäß der Vereinbarung aus Gleichung (4.8) und mit der Voraussetzung einer kleinen magnetischer Reynolds-Zahl nach Gleichung (4.12), lässt sich das Ohmsche Gesetz (4.7) für eine magnetische Flussdichte ohne statischen Feldanteil soweit vereinfachen, dass lediglich die linke Seite des Summanden verbleibt [Moreau 1990, Abschnitt II.3]:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}. \quad (4.17)$$

Ein elektrisches Feld $\mathbf{u} \times \mathbf{B}$, welches infolge einer Bewegung des Konduktors mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} entstehen würde [vgl. Gleichung (4.7)], wird in dieser Arbeit mit Verweis auf Abschnitt 2.2 näherungsweise vernachlässigt.

Die Induktionsgleichung für die elektromagnetischen Felder \mathbf{B} und \mathbf{E} (2.8a), welche in Abschnitt 2.2 genutzt wurde um die gegenseitigen Wechselwirkungen der beim RGS-Prozess auftretenden Effekte zu beschreiben, lässt sich aus der quasistatische Approximation der Maxwell-Gleichungen mit Gleichung (4.15c) durch Kombination mit Gleichung (4.15a) und (4.17) ableiten. Eine andere Beschreibung der Induktionsgleichung findet man durch die Einführung elektromagnetischer Potentiale, welche Gegenstand des nächsten Abschnittes sind.

4.1.2 Potentialform der quasistatischen Approximation

Durch die quellfreie Natur der magnetischen Flussdichte (4.15b) und unter Berücksichtigung des Faradayschen Gesetzes (4.15c), lässt sich als alternative Beschreibung von \mathbf{B} und \mathbf{E} das magnetische

Vektorpotential \mathbf{A} und das elektrische Potential ϕ einführen [Jackson 1975, Abschnitt 6.4]:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.18a)$$

$$\mathbf{E} = - \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \phi \right). \quad (4.18b)$$

Eine Nutzung der Potentiale ist insofern von Vorteil, da mit Gleichung (4.18a) die Quellfreiheit von \mathbf{B} automatisch erfüllt ist. Die Divergenz des magnetischen Vektorpotentials ist dagegen für die physikalische Bedeutung von \mathbf{B} und \mathbf{E} nicht direkt von Belang und kann im Rahmen der Lorentz-Bedingung [Jackson 1975, Abschnitt 6.4] willkürlich festgelegt (geeicht) werden. Für die vorliegende Arbeit wurde die divergenzfreie Coulomb-Eichung [Jackson 1975, Abschnitt 6.5]

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (4.19)$$

gewählt, weil damit die globale Stetigkeit von \mathbf{A} sichergestellt ist, was im Kontext der FVM wiederum numerische Vorteile bietet. Durch die Einführung von \mathbf{A} und ϕ ist es möglich, die vier partiellen Differentialgleichungen erster Ordnung auf zwei Gleichungen zweiter Ordnung zu reduzieren, da durch die Definition der Potentiale sowohl das Gaußsche Gesetz für Magnetfelder (4.15b) als auch das Induktionsgesetz (4.15c) exakt erfüllt werden.

Eine erste Gleichung lässt sich mit Hilfe von Gleichung (4.18a) aus dem noch verbleibenden Ampèreschen Gesetz (4.15a) gewinnen:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{j}. \quad (4.20)$$

Nach Bíró u. Preis [1989, Abschnitt II.2] kann dabei die Quellfreiheit ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) des magnetischen Vektorpotentials eingearbeitet werden, indem zur linken Seite von Gleichung (4.20) ein zusätzlicher Term addiert wird:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} - \nabla \left(\frac{1}{\mu} \nabla \cdot \mathbf{A} \right) = \mathbf{j}, \quad (4.21)$$

und homogene Randbedingungen für $1/\mu \nabla \cdot \mathbf{A}$ zur Anwendung kommen. Die beiden Terme auf der linken Seite können dann über den schiefsymmetrischen Anteil von $\nabla \mathbf{A}$ [Anhang A.3.4, Gleichung (A.35)] und mit Hilfe des Einheitstensors [Anhang A.1.1 und Anhang A.3.5, Gleichung (A.37i)] gemeinsam innerhalb eines Divergenz-Operators zusammengefasst werden:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\mu} \left(\nabla \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{A})^T + (\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{I} \right) = -\mathbf{j}. \quad (4.22)$$

Unter Anwendung der Produktregel der Divergenz [Anhang A.3.5, Gleichung (A.39b)] ist es weiter möglich, den Gradienten der Reluktivität (inverse Permeabilität) auszuklammern. Mit der Identität $\nabla \cdot (\nabla \mathbf{A})^T = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) = \nabla \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{I})$ [siehe Anhang A.3.5, Gleichung (A.37i) und Gleichung (A.37l)] heben sich dabei die zwei entsprechenden Summanden direkt unter der Divergenz auf. Schließlich vereinfacht sich die vektorielle Relation zu:

$$\frac{1}{\mu} \nabla^2 \mathbf{A} + \nabla \frac{1}{\mu} \cdot \left(\nabla \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{A})^T + (\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{I} \right) = -\mathbf{j}. \quad (4.23)$$

Bei Abwesenheit von magnetisierbaren Medien ($\mathbf{M} \equiv 0 \Leftrightarrow \mu_r \equiv 1 \Leftrightarrow \mu \equiv \mu_0$) verschwindet der Gradient der Reluktivität und auf der linken Seite verbleibt demnach lediglich der vektorielle Laplace-Term für \mathbf{A} :

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A} = -\mathbf{j} . \quad (4.24)$$

Zur Erleichterung des Verständnisses beschränken sich die folgenden Abschnitte zunächst auf den zuletzt genannten Fall gemäß Gleichung (4.24). Im Zusammenhang mit Induktionsprozessen, bei welchen paramagnetische Effekte ($\mu_r > 1$) innerhalb der leitfähigen Region tatsächlich eine Rolle spielen, treten im Allgemeinen auch sprunghafte Änderungen von μ an den Materialgrenzen auf. Eine Verallgemeinerung wird daher erst im späteren Verlauf dieser Arbeit präsentiert, nachdem in Abschnitt 4.4 zuvor alle grundlegenden Aspekte im Umgang mit diskontinuierlichen Stoffeigenschaften diskutiert wurden.

Um der Aufteilung der Stromdichte nach Abbildung 4.1 in einen aufgeprägten Teil \mathbf{j}_0 und einen induzierten Teil \mathbf{j} Rechnung zu tragen, wird die Gesamtstromdichte \mathbf{j} in Ω als abschnittsweise definierte Funktion ausgedrückt:

$$\Omega: \quad \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{j}_0(\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}) & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_0 \wedge \mathbf{x} \notin \Gamma_C \\ \mathbf{j}(\mathbf{x}_C = \mathbf{x}) & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_C \end{cases} . \quad (4.25)$$

Die Aufteilung ist derart, dass die aufgeprägte Stromdichte \mathbf{j}_0 des Induktors, welche zur Modellierung der Spule dient, nur auf den nicht-leitfähigen Bereich beschränkt ist. D. h. die Leitfähigkeit der Spule σ_0 wird, wie in Abbildung 4.1 gezeigt, nicht berücksichtigt. Diese Vereinfachung setzt allerdings voraus, dass die Spule hinreichend weit von der leitfähigen Region Ω_C entfernt ist. Im Gegensatz dazu existiert die induzierte Stromdichte \mathbf{j} nur innerhalb und auf dem Rand des leitfähigen Konduktors. Über das Ohmsche Gesetz (4.17) und Gleichung (4.18b) wird der induzierte Strom ersetzt. Gemäß der Zerlegung der Stromdichte aus Gleichung (4.25) nimmt die Gleichung (4.24) also scheinbar zweierlei Gestalt an:

$$\Omega_0: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A} = -\mathbf{j}_0 \quad (4.26a)$$

$$\Omega_C: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A} = \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \phi \right) . \quad (4.26b)$$

Dem elektrischen Potential ϕ kommt (nur) in der leitfähigen Region mit Gleichung (4.26b) indirekt die Bedeutung eines Quellterms zu. An dieser Stelle spielt nun der erwähnte und bedeutende Vorteil der Coulomb-Eichung (4.19) eine Rolle, da in Verbindung mit der Quellfreiheit von \mathbf{B} das divergenzfreie magnetische Vektorpotential \mathbf{A} zumindest für nicht-magnetische Materialien auf dem gesamten Gebiet $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_C$ und insbesondere auf der Konduktoroberfläche stetig und differenzierbar ist [siehe [Morisue 1993](#), Gleichung (5)]. Es ist folglich problemlos möglich, Gleichung (4.26) auch (wieder) zusammenhängend auszudrücken:

$$\Omega: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A} = \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \phi \right) - \mathbf{j}_0 . \quad (4.27)$$

Eine zweite Gleichung kann für leitfähige Medien mit Hilfe des Ohmschen Gesetzes (4.17) aus der Kontinuitätsgleichung der elektrischen Stromdichte (4.16) abgeleitet werden:

$$\nabla \cdot \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \phi \right) = 0. \quad (4.28)$$

Diese Gleichung ist jedoch nur innerhalb der leitfähigen Region Ω_C gültig und benötigt entsprechende Randbedingungen. Über die Produktregel der Divergenz [Anhang A.3.5, Gleichung (A.39a)] in Verbindung mit der Coulomb-Eichung ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) des magnetischen Vektorpotentials, gelingt ein Ausklammern des Gradienten der elektrischen Leitfähigkeit:

$$\Omega_C: \quad \nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) + \nabla \sigma \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 0. \quad (4.29)$$

Aus den selben Gründen wie zuvor in Verbindung mit μ wird auch hier zur Erleichterung des Verständnisses zunächst eine stetige Verteilung der elektrischen Leitfähigkeit innerhalb von Ω_C angenommen. Die Erweiterung für mögliche Diskontinuitäten wird im Rahmen von Abschnitt 4.4 vorgestellt.

4.1.3 Randbedingungen

In Zusammenhang mit Abbildung 4.1 wurden die Ränder der Konduktoroberfläche Γ_C und die technisch motivierte Begrenzung Γ_∞ eingeführt. Nachfolgend soll deren Bedeutung für Gleichung (4.27) und Gleichung (4.29) kurz diskutiert und dargelegt werden. Für die Behandlung weiterer Ränder, welche zum Beispiel bei leicht modifizierten Problemstellungen auftreten können, sei an spezielle Bücher wie Binns u. Lawrenson [1973]; Binns u. a. [1992] oder die Zusammenstellung in Bíró u. Preis [1989] verwiesen.

Wie die Gleichungen (4.1a) bis (4.1d) ist auch die quasistatische Form der Maxwell-Gleichungen (4.15) allgemein auf einem unbeschränkten Gebiet Ω_∞ gültig. Eine unbegrenzte Umgebung wäre im Hinblick auf die numerische Lösbarkeit dieses Gleichungssystems weder zielführend noch realisierbar. Allerdings fallen, wie beispielsweise anhand eines elektrischen Dipols [Jackson 1975, Abschnitt 4.13] oder dem Magnetfeld einer lokalen Stromverteilung [Jackson 1975, Abschnitt 5.6] gezeigt werden kann, elektromagnetische Felder mit zunehmender Entfernung r zu Bereichen mit nicht verschwindender Ladungs- ρ und Quellstromdichte \mathbf{j} schnell ($\sim r^{-3}$) ab. Für eine Konfiguration wie in Abbildung 4.1 bedeutet dies wiederum, dass Bereiche in hinreichend großer Entfernung zu Induktor und Konduktor nur noch einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Lösung von Gleichung (4.15) im prozesstechnisch relevanten Bereich Ω_C haben. Insoweit ist es auch gerechtfertigt, nur das bereits in der Einleitung dieses Abschnitts eingeführte Teilgebiet $\Omega \subseteq \Omega_\infty$ mit $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_C$ für numerische Lösungsansätze zu berücksichtigen, solange Ω hinreichend weit über den Rand Γ_∞ trunziert wird. Der konkrete Einfluss der Platzierung wird in Abschnitt 4.5.1 noch beispielhaft diskutiert.

Auf Grundlage dieser Überlegungen ergibt sich auf Γ_∞ im einfachsten Fall eine homogene Dirichlet-Randbedingung [vgl. Abschnitt 3.3.2] für das \mathbf{B} -Feld bzw. das magnetische Vektorpotential:

$$\Gamma_\infty: \quad \mathbf{A} = \mathbf{0}. \quad (4.30)$$

Eine demgegenüber etwas abgeschwächte Form der Randbedingungen lässt sich aus der Quellfreiheit der magnetischen Flussdichte motivieren. Indem nur die Normalkomponente von \mathbf{B} auf Γ_∞ beschränkt wird: $\Gamma_\infty: \mathbf{n}_\infty \cdot \mathbf{B} = 0$, erzwingt man kein vollständig abgeklungenes Magnetfeld und erreicht trotzdem geschlossene Feldlinien. Für das magnetische Vektorpotential bedeutet diese tangential-magnetische Beschreibung, dass nur die tangentialen Komponenten von \mathbf{A} einer homogenen Dirichlet-Bedingung genügen. Aus der Coulomb-Eichung (4.19) ergibt sich jedoch auch eine Einschränkung des Gradienten von \mathbf{A} in Richtung der Normalen \mathbf{n}_∞ [vgl. Bíró u. Preis 1989, Gleichung (48) und (49)]:

$$\Gamma_\infty: \quad (\mathbf{I} - \mathbf{n}_\infty^2) \cdot \mathbf{A} = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n}_\infty \cdot \nabla \mathbf{A} = \mathbf{0}. \quad (4.31)$$

Wie bereits in Abschnitt 4.1.2 erklärt, ist das divergenzfreie magnetische Vektorpotential auf der Oberfläche des Konduktors Γ_C stetig. Ebenso ist das elektrische Potential auf Γ_C stetig fortsetzbar. Der Gradient des elektrischen Potentials auf Konduktorseite ist jedoch von der Forderung einer verschwindenden Stromdichte in Normalenrichtung $\mathbf{n}_C \cdot \mathbf{j} = \mathbf{0}$ abhängig, wobei mit \mathbf{n}_C der entsprechende Normalenvektor gemeint ist. Daraus lässt sich für ϕ eine inhomogene Neumann-Randbedingung [vgl. Abschnitt 3.3.2] identifizieren:

$$\Gamma_C \cap \Omega_C: \quad \mathbf{n}_C \cdot \nabla \phi = -\mathbf{n}_C \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (4.32)$$

welche den Gradienten des elektrischen Potentials in Relation zur Zeitableitung des magnetischen Vektorpotentials stellt.

4.1.4 Lorentz-Kraft und Joule-Wärme

Die innerhalb des Konduktors induzierten Wirbelströme führen zu sekundären Effekten, welche für elektromagnetische Bearbeitungsprozesse von leitfähigen Materialien von fundamentaler Bedeutung sind [Davidson 2001, Abschnitt 12]. Dazu zählt die Lorentz-Kraft [siehe Gleichung (2.1)], die dort auftritt, wo induzierter Strom senkrecht bezüglich der Feldlinien der magnetischen Flussdichte fließt [vgl. Anhang A.2.4, Gleichung (A.21)]:

$$\Omega_C: \quad \mathbf{f}_L = \mathbf{j} \times \mathbf{B} = \mathbf{j} \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -\mathbf{j} \cdot (\nabla \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{A})^T). \quad (4.33)$$

Bei \mathbf{f}_L handelt es sich streng genommen um eine volumetrische Kraftdichte, bzw. Volumenkraft. Ersetzt man in Gleichung (4.33) die Stromdichte mit dem Ampèreschen Gesetz (4.15a) und nutzt die Quellfreiheit von \mathbf{B} aus, dann findet man für die Lorentz-Kraft eine Aufteilung in Rotations- und Gradientenfeld nach dem Helmholtz-Theorem [Van Bladel 1958], welche auf der magnetischen Flussdichte beruht [Davidson 2001, Abschnitt 3.9]:

$$\Omega_C: \quad \mathbf{f}_L = \frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot (\mathbf{B}\mathbf{B}) - \nabla p_B = \frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A})^2 - \nabla p_B. \quad (4.34)$$

Darin ist der magnetische Druck folgendermaßen definiert [vgl. Anhang A.2.1, Gleichung (A.6)]:

$$\Omega: \quad p_B = \frac{|\mathbf{B}|^2}{2\mu_0} = \frac{|\nabla \times \mathbf{A}|^2}{2\mu_0}. \quad (4.35)$$

Eine Verallgemeinerung der Aufteilung im Zusammenhang mit einer variablen Permeabilität gelingt im linearen Fall über den sogenannten verallgemeinerten Maxwell'schen Spannungstensor [Sugai 1965].

Weiterhin führt der im leitfähigen Medium induzierte Strom auch zu einem spezifischen Wärmeinput durch Joule-Wärme [siehe Gleichung (2.2)]. Die entsprechende volumetrische thermische Leistungsdichte lässt sich über die elektrische Feldstärke berechnen [Davidson 2001, Abschnitt 5]:

$$\Omega_C: \quad \dot{q} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = \frac{|\mathbf{j}|^2}{\sigma} . \quad (4.36)$$

4.1.5 Zweidimensionale Fälle

Bei einer zweidimensionalen Beschreibung liegen die Feldlinien des magnetischen Feldes vollständig in einer betrachteten Ebene. Das magnetische Vektorpotential besitzt daher nur eine Komponente in Richtung der Normalen der Ebene \mathbf{e}_\odot : $\mathbf{A} = A \mathbf{e}_\odot$. Zudem verschwinden alle Ableitungen in dieser Richtung ($\partial_{\mathbf{e}_\odot} \psi = 0$). Mittels Gleichung (4.27) und (4.18b) ist sofort ersichtlich, dass folglich auch die Stromdichte nur Komponenten in Normalenrichtung aufweisen kann:

$$\Omega: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 A \mathbf{e}_\odot = \mathbf{j} \mathbf{e}_\odot + j_0 \mathbf{e}_\odot . \quad (4.37)$$

Aus der inhomogenen Neumann-Bedingung (4.32) wird eine homogene Randbedingung, da die involvierte Zeitableitung von A parallel zu \mathbf{e}_\odot ist ($\partial_t A \parallel \mathbf{e}_\odot$). Dazu muss berücksichtigt werden, dass die Normale der Konduktoroberfläche immer senkrecht zur Normalen der zweidimensionalen Ebene ($\mathbf{n}_C \perp \mathbf{e}_\odot$) steht:

$$\Omega_C \cap \Gamma_C: \quad \mathbf{n}_C \cdot \nabla \phi = 0 . \quad (4.38)$$

Auf der selben Argumentationsgrundlage verschwindet auch die rechte Seite von Gleichung (4.29), da $\partial_{\mathbf{e}_\odot} \sigma = 0$ und $\mathbf{A} \parallel \mathbf{e}_\odot$ gilt. Zusammen mit Gleichung (4.38) ergibt sich schließlich $\phi \equiv 0$ als Lösung für das elektrische Potential. Dies bedeutet, dass bei einer zweidimensionalen Modellierung elektromagnetischer Probleme in der Potentialform nur das magnetische Vektorpotential relevant ist. Gleichung (4.27) in Ω vereinfacht sich zu der skalaren Gleichung:

$$\Omega: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 A = \sigma \partial_t A - j_0 . \quad (4.39)$$

4.1.6 Ergänzende Erläuterungen

Zusammen mit den Randbedingung aus Gleichungen (4.30) bis (4.32) bilden die Grundgleichungen in der Potentialform (4.27) und (4.29) ein geschlossenes Differentialgleichungssystem für die beiden Potentiale A und ϕ im dreidimensionalen Raum. Da das elektrische Potential nur in der leitfähigen Region Ω_C des Konduktors zur Lösung nötig ist, wird die entsprechende Beschreibung in der Literatur

oft als \mathbf{A}, ϕ - \mathbf{A} -Formulierung bezeichnet [siehe z. B. Bíró u. Preis 1989; Bíró 1999; Bíró u. Valli 2007]. Vor allem durch das Nichtvorhandensein von Operatoren wie der Rotation $\nabla \times \psi$ oder des Gradienten einer Divergenz $\nabla(\nabla \cdot \psi)$ eignet sich diese Form sehr gut zur Diskretisierung im Rahmen der FVM für unstrukturierte Gitter mit kompakten Differenzensternen. Alle involvierten Operatoren kommen auch im Bereich der numerischen Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics, CFD) im Zusammenhang mit der Navier-Stokes-Gleichung vor [Ferziger u. Perić 2002]. Das heißt, dass numerische Programme wie *OpenFOAM* [OpenFOAM Foundation 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998], welche sonst vorrangig im Bereich der Strömungsmechanik zum Einsatz kommen, direkt geeignet sind um dreidimensionale Simulationen auf Basis der quasistatischen Approximation der Maxwell-Gleichungen in Potentialform im Zeitbereich durchzuführen [siehe z. B. Ehrhard 2015]. Falls die elektrische Leitfähigkeit σ im Konduktor Diskontinuitäten aufweist, ist allerdings eine besondere Diskretisierung der Gleichungen im numerischen Sinne notwendig. Für zweidimensionale Simulationen reduziert sich auf Grund einer trivialen Lösung für ϕ der Rechenaufwand gegenüber Rechnungen mit drei Raumdimensionen erheblich. Eine spezielle Behandlung ist in diesem Fall hinsichtlich der Implementierung und nötigen Algorithmen nicht nötig.

4.2 Zeitharmonische Anregung

Bei nahezu allen Anwendungen technischer Induktionsprozesse ist die Induktionsspule, wie in Abbildung 4.1 idealisiert dargestellt, Bestandteil eines Schwingkreises oder einer ähnlichen Stromquelle mit harmonischem Zeitverhalten hinsichtlich des Quellstromes [Asai 2012; Grote u. Feldhusen 2011, Abschnitt 7.3]:

$$\mathbf{j}_0 = \hat{\mathbf{j}}_0 \cos(\omega_0 t - \alpha_0). \quad (4.40)$$

Die Kreisfrequenz (Winkelgeschwindigkeit) ω_0 bezüglich der Frequenz $f_0 = \omega_0/2\pi$ und die Phasenlage α_0 der Quellstromdichte \mathbf{j}_0 sind dabei natürlich abhängig vom jeweiligen Anwendungsfall. Unter der naheliegenden Annahme, dass für beide Potentiale des linearen Systems (4.27) und (4.29) eine harmonische Lösung existiert, lässt sich mittels imaginärer Einheit i eine komplexwertige Ansatzfunktion [vgl. Griffiths 1999, Abschnitt 9.1.2]

$$\psi_{\mathbb{C}}(\mathbf{x}, t) = \hat{\psi}_{\mathbb{C}}(\mathbf{x}) e^{i\omega_0 t} \quad (4.41)$$

mit der komplexen Amplitude (Phasor)

$$\hat{\psi}_{\mathbb{C}}(\mathbf{x}) = \hat{\psi}(\mathbf{x}) e^{-i\alpha_{\psi}(\mathbf{x})} \quad (4.42)$$

einführen und nutzen. Unter Zuhilfenahme dieser Definitionen kann das zeitharmonische, elektromagnetische System letztlich vom Zeitbereich in den Frequenzbereich transformiert werden. Die allgemeine, reellwertige Funktion ψ steht in den Gleichungen (4.41) und (4.42) symbolisch für ein beliebiges Feld, welches bei Kenntnis der zugehörigen komplexen Funktion über den Realteil wieder-

gewonnen werden kann:

$$\begin{aligned}
 \psi(\mathbf{x}, t) &= \Re(\psi_{\mathbb{C}}(\mathbf{x}, t)) \\
 &= \Re(\hat{\psi}(\mathbf{x}) \cos(\omega_0 t - \alpha_{\psi}(\mathbf{x})) + i \hat{\psi} \sin(\omega_0 t - \alpha_{\psi}(\mathbf{x}))) \\
 &= \hat{\psi}(\mathbf{x}) \cos(\omega_0 t - \alpha_{\psi}(\mathbf{x})) .
 \end{aligned} \tag{4.43}$$

Das Besondere der komplexen Amplitude (4.42) ist, dass sie sowohl die reelle Amplitude $\hat{\psi}$ als auch eine Phasenlage α_{ψ} beinhaltet und es sich dabei um eine zeitlich invariante Funktion handelt. Die Zeitableitungen einer physikalischen Größe ψ können im Frequenzraum analytisch ausgewertet werden:

$$\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \Re(i \omega_0 \psi_{\mathbb{C}}(\mathbf{x}, t)) . \tag{4.44}$$

Um die Lesbarkeit im weiteren Verlauf zu wahren, seien abschließend noch Kurzformen für den Real- und Imaginärteil des komplexen Phasors (4.42) eingeführt:

$$\psi_{\Re}(\mathbf{x}) = \Re(\hat{\psi}_{\mathbb{C}}(\mathbf{x})) \tag{4.45a}$$

$$\psi_{\Im}(\mathbf{x}) = \Im(\hat{\psi}_{\mathbb{C}}(\mathbf{x})) , \tag{4.45b}$$

da diese nach Einsetzen der Gleichungen (4.43) und (4.44) für alle Felder in Gleichung (4.27) und (4.29) die zeitunabhängigen Unbekannten des Systems im Frequenzraum darstellen. Die beiden reellwertigen Größen der Amplitude und Phasenlage ergeben sich daraus über trigonometrische Zusammenhänge:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sqrt{\psi_{\Re}^2(\mathbf{x}) + \psi_{\Im}^2(\mathbf{x})} \tag{4.46a}$$

$$\alpha_{\psi}(\mathbf{x}) = -\operatorname{atan}\left(\frac{\psi_{\Im}(\mathbf{x})}{\psi_{\Re}(\mathbf{x})}\right) . \tag{4.46b}$$

Bei der Nutzung der Potentiale A und ϕ oder abgeleiteter Größen wie \mathbf{j} , wird mit Bezug auf den zeitharmonischen Fall im Weiteren impliziert, dass der Real- bzw. Imaginärteil des entsprechenden Phasors nach Gleichung (4.45) gemeint ist, falls an entsprechender Stelle nicht explizit darauf hingewiesen wird.

4.2.1 Skineffekt und Abschirmung

Beim Eindringen eines AC-Feldes in ein leitfähiges Medium werden die Wirbelströme \mathbf{j} derart induziert, dass das daraus resultierende Feld dem Ursprungsfeld entgegenwirkt. Laut Gleichung (4.18b) und dem Ohmschen Gesetz (4.17) skalieren tangentiale Ströme bezüglich der Konduktoroberfläche Γ_C mit $\mathbf{j} \sim -\sigma \frac{\partial A}{\partial t}$. Mit wachsender Frequenz wird auch die induzierte Stromdichte bei gegebener Leitfähigkeit proportional größer. Die Wirbelstromdichte konzentriert sich folglich mehr und mehr an der Oberfläche, denn tiefer gelegene Bereiche werden durch Superposition aus anregendem und induziertem Feld zunehmend abgeschirmt. Dadurch kann das äußere Feld letztlich nur bis in eine

begrenzte Tiefe des Mediums eindringen. Die Größenordnung dieser Penetration wird durch die Skintiefe

$$\delta = \sqrt{\frac{2\lambda}{\omega_0}} \quad (4.47)$$

beschrieben, wobei es sich bei λ um die magnetische Diffusivität aus Gleichung (4.14) handelt. Das zugrundeliegende Phänomen, welches bei hohen Frequenzen eine nahezu vollständige magnetische Abschirmung bewirkt, nennt sich Skinneffekt [vgl. Davidson 2001, Abschnitt 12].

Wird die Größenordnung einer typischen geometrischen Abmessung L in Bezug zur Skintiefe δ aus Gleichung (4.47) gesetzt, so ergibt sich nach Quadratur die Definition des Abschirmparameters

$$S = 2 \left(\frac{L}{\delta} \right)^2 = \frac{\omega_0 L^2}{\lambda}. \quad (4.48)$$

Diese dimensionslose Größe ist somit eine alternative bzw. inverse Möglichkeit zur Beschreibung des Skinneffektes.

4.2.2 Quasistatische Potentialform im Frequenzbereich

In Anlehnung an die über Gleichung (4.45) festgelegte Notation, lässt sich das System aus Gleichung (4.27) und (4.29) mit den Randbedingungen aus den Gleichungen (4.31) und (4.32) über die Real- \mathbf{A}_{\Re} , ϕ_{\Re} bzw. Imaginärteile \mathbf{A}_{\Im} , ϕ_{\Im} der komplexen Amplituden von \mathbf{A} und ϕ folgendermaßen zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \Omega: \quad & \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A}_{\Re} = -\sigma \omega_0 \mathbf{A}_{\Im} + \sigma \nabla \phi_{\Re} - \mathbf{j}_{0\Re} \\ & \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A}_{\Im} = +\sigma \omega_0 \mathbf{A}_{\Re} + \sigma \nabla \phi_{\Im} - \mathbf{j}_{0\Im} \end{aligned} \quad (4.49a)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\infty}: \quad & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\infty}^2) \cdot \mathbf{A}_{\Re} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{n}_{\infty} \cdot \nabla \mathbf{A}_{\Re} = \mathbf{0} \\ & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\infty}^2) \cdot \mathbf{A}_{\Im} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{n}_{\infty} \cdot \nabla \mathbf{A}_{\Im} = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (4.49b)$$

$$\begin{aligned} \Omega_C: \quad & \nabla \cdot (\sigma \nabla \phi_{\Re}) = +\nabla \sigma \cdot \omega_0 \mathbf{A}_{\Im} \\ & \nabla \cdot (\sigma \nabla \phi_{\Im}) = -\nabla \sigma \cdot \omega_0 \mathbf{A}_{\Re} \end{aligned} \quad (4.49c)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_C: \quad & \mathbf{n}_C \cdot \nabla \phi_{\Re} = +\mathbf{n}_C \cdot \omega_0 \mathbf{A}_{\Im} \\ & \mathbf{n}_C \cdot \nabla \phi_{\Im} = -\mathbf{n}_C \cdot \omega_0 \mathbf{A}_{\Re} \end{aligned} \quad (4.49d)$$

Infolge der Transformation in den Frequenzraum hat dieses System im Vergleich zur Beschreibung im Zeitbereich doppelt so viele Unbekannte. Insgesamt liegen hier acht skalarwertige Funktionen vor. Sechs davon stammen vom magnetischen Vektorpotential und zwei vom elektrischen Potential.

4.2.3 Zeitgemittelte Lorentz-Kraft und Joule-Wärme

Die sekundären Effekte, wie Lorentz-Kraft und Joule-Wärme aus Gleichungen (4.33) und (4.36), welche sich jeweils aus einem Produkt zweier zeitlich harmonischer Funktionen ergeben, lassen sich, am Beispiel einer allgemeinen reellwertigen Funktion ψ , in einen konstanten Anteil

$$\langle \psi \rangle_t = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} \psi \, dt \quad \text{mit} \quad T_0 = \frac{1}{f_0} = \frac{2\pi}{\omega_0} \quad (4.50)$$

und einen mit doppelter Kreisfrequenz $2\omega_0$ oszillierenden Teil ψ' zerlegen:

$$\psi = \langle \psi \rangle_t + \psi' . \quad (4.51)$$

In vielen Fällen ist der zeitlich gemittelte Anteil bereits ausreichend um tertiäre Effekte wie eine Strömung oder Wärmeleitung für technische Zwecke hinreichend genau zu modellieren.

Wenn beispielsweise die leitfähige Region Ω_C zum Teil aus einem flüssigen Medium besteht, dann erzeugt die Lorentz-Kraft dort eine typische Strömungsgeschwindigkeit U . Laut [Stiller \[2008, Abschnitt 2.2, Seite 22\]](#) und [Koal \[2011, Abschnitt 2.1, Seite 10\]](#) kann für die zugehörigen Geschwindigkeitsanteile $U_{\langle f_L \rangle_t}$ und $U_{f'_L}$ nach Aufteilung gemäß Gleichung (4.51) das Verhältnis anhand einer charakteristischen Länge L abgeschätzt werden:

$$\frac{U_{f'_L}}{U_{\langle f_L \rangle_t}} \sim \frac{\nu}{2\omega_0 L^2} , \quad (4.52)$$

worin $\nu = \eta/\rho$ die kinematische Viskosität des Fluides darstellt. Daraus ist sofort ersichtlich, dass mit steigender Kreisfrequenz die Bedeutung von $U_{f'_L}$ gegenüber $U_{\langle f_L \rangle_t}$ schwindet. Ist die Trägheit des Fluides hinreichend groß, kann die zeitabhängige Teil f'_L der Lorentz-Kraft vernachlässigt werden. Nach [Stiller \[2008\]](#) liegt das Verhältnis (4.52) für typische Anwendungen im Bereich von $1 \cdot 10^{-8}$ bis $1 \cdot 10^{-6}$, beim RGS-Prozess mit Tabelle 2.1 sowie $\omega_0 = 2\pi \cdot 10 \text{ kHz}$, $\nu = 3,33 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und $L = 0,08 \text{ m}$ beträgt das Verhältnis sogar nur $\approx 8,2 \cdot 10^{-10}$ [vgl. Abschnitt 2.2]. Eine ähnliche Begründung findet man beispielsweise auch in [Davidson u. Hunt \[1987, Abschnitt 2, Seite 72\]](#).

Bei harmonischer Anregung [siehe Abschnitt 4.2] lässt sich die zeitlich gemittelte Lorentz-Kraft

$$\Omega_C: \quad \langle f_L \rangle_t = \frac{1}{2} (\mathbf{j}_{\Re} \times (\nabla \times \mathbf{A}_{\Re}) + \mathbf{j}_{\Im} \times (\nabla \times \mathbf{A}_{\Im})) , \quad (4.53)$$

der zeitlich gemittelte magnetische Druck

$$\Omega: \quad \langle p_B \rangle_t = \frac{1}{4\mu_0} \left(|\nabla \times \mathbf{A}_{\Re}|^2 + |\nabla \times \mathbf{A}_{\Im}|^2 \right) \quad (4.54)$$

und die zeitlich gemittelte Joule-Wärme

$$\Omega_C: \quad \langle \dot{q} \rangle_t = \frac{1}{2\sigma} \left(|\mathbf{j}_{\Re}|^2 + |\mathbf{j}_{\Im}|^2 \right) . \quad (4.55)$$

auch direkt aus den Real- und Imaginärteilen der komplexen Amplituden berechnen.

4.2.4 Kopplungsmechanismen

Bei genauerer Analyse des elektromagnetischen Systems (4.49) im Frequenzraum lassen sich hinsichtlich der Kopplung von \mathbf{A} und ϕ bzw. der beteiligten Differentialgleichungen (DGLn) und deren Herleitung drei unterschiedliche Mechanismen ausmachen.

Mit dem ersten Mechanismus ist dabei die ursprüngliche Kopplung des magnetischen Vektorpotentials zwischen der Konduktorregion Ω_C und der Umgebung Ω_0 gemeint, welche sich aus der Unbeschränktheit des Gültigkeitsgebietes der Maxwellschen Gleichungen in Verbindung mit einer Unterscheidung von leitfähiger und nicht-leitfähiger Region ergibt. Diese Gebietskopplung wurde jedoch zuvor über die Coulomb-Eichung (4.19) des magnetischen Vektorpotentials aufgelöst. Mit dieser Eichung ist es infolge der resultierenden Stetigkeit von \mathbf{A} möglich, die beiden Gleichungen (4.26a) und (4.26b) geschlossen in der Form (4.27) zu beschreiben, woraus sich im Frequenzraum die beiden vektoriellen Gleichungen (4.49a) ergeben. Ohne diese geschlossene Formulierung müssten zur Lösung des magnetischen Vektorpotentials beide Regionen mit passenden Übergangsbedingungen getrennt behandelt werden.

Zwei weitere Kopplungsmechanismen können anhand der Region des Konduktors Ω_C sehr anschaulich illustriert werden, wenn die zugehörigen Teile des Systems (4.49) in eine Pseudo-Matrixform gebracht werden:

$$\Omega_C: \begin{bmatrix} \nabla \cdot (\sigma \nabla) & 0 & 0 & 0 & -\omega_0 \partial_x \sigma & -\omega_0 \partial_y \sigma & -\omega_0 \partial_z \sigma & 0 \\ -\sigma \partial_x & 1/\mu_0 \nabla^2 & 0 & 0 & +\omega_0 \sigma & 0 & 0 & 0 \\ -\sigma \partial_y & 0 & 1/\mu_0 \nabla^2 & 0 & 0 & +\omega_0 \sigma & 0 & 0 \\ -\sigma \partial_z & 0 & 0 & 1/\mu_0 \nabla^2 & 0 & 0 & +\omega_0 \sigma & 0 \\ 0 & -\omega_0 \sigma & 0 & 0 & 1/\mu_0 \nabla^2 & 0 & 0 & -\sigma \partial_x \\ 0 & 0 & -\omega_0 \sigma & 0 & 0 & 1/\mu_0 \nabla^2 & 0 & -\sigma \partial_y \\ 0 & 0 & 0 & -\omega_0 \sigma & 0 & 0 & 1/\mu_0 \nabla^2 & -\sigma \partial_z \\ 0 & +\omega_0 \partial_x \sigma & +\omega_0 \partial_y \sigma & +\omega_0 \partial_z \sigma & 0 & 0 & 0 & \nabla \cdot (\sigma \nabla) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \phi_{\Re} \\ A_{x\Re} \\ A_{y\Re} \\ A_{z\Re} \\ A_{x\Im} \\ A_{y\Im} \\ A_{z\Im} \\ \phi_{\Im} \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (4.56)$$

Die meisten Einträge sind dabei als Differentialoperatoren aufzufassen und in diesem Sinne auf das zugehörige Feld anzuwenden. Mit A_x , A_y und A_z sind die kartesischen Komponenten des magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A} bezeichnet.

Der zweite Kopplungsmechanismus ist aus der Transformation vom Zeit- in den Frequenzbereich hervor gegangen, da über die Gleichungen (4.43) und (4.44) bei getrennter Auswertung von Real- (A_{\Re}) und Imaginärteil (A_{\Im}) durch die Zeitableitung eine Kopplung der komplexen Anteile entsteht. Lässt man in den Gleichungen (4.49a) die beiden letzten Terme auf der rechten Seite gedanklich unbeachtet, verbleibt ein Paar inhomogener Poisson-Gleichungen für den Phasor von \mathbf{A} , wobei die Inhomogenitäten kreuzweise gekoppelte Quellterme darstellen. Die Bedeutung und Stärke dieses Mechanismus hängt direkt von der Größenordnung des Koeffizienten $\omega_0 \sigma$ ab, welcher im Zentrum der Matrix aus Gleichung (4.56) an sechs Positionen sichtbar ist. Bei einem Material mit gegebener

elektrischer Leitfähigkeit wird die Kopplungsstärke direkt von der Kreisfrequenz ω_0 des Quellstromes in der Spule bestimmt.

Ein dritter Kopplungsmechanismus fußt im Wesentlichen auf der Abhängigkeit beider elektromagnetischen Potentiale A und ϕ , beinhaltet jedoch auch einen aus der Transformation in den Frequenzbereich entstandenen Teil. Zum einen verbinden die Gleichungen (4.49a) die komplexen Amplituden des magnetischen Vektorpotentials mit dem elektrischen Potential infolge des Gradienten auf der rechten Seite, zum anderen gibt es aber auch eine Verknüpfung von ϕ und den Komponenten von A auf Grund des inneren Produktes auf der rechten Seite der Gleichungen (4.49c) und den Randbedingungen (4.49d). In der Matrix aus Gleichung (4.56) sind auf den äußeren Positionen alle zwölf zugehörigen Differentialoperatoren zu sehen.

Wie beispielsweise in Haber u. a. [2000]; Aruliah u. a. [2001] bereits diskutiert wurde, handelt es sich im letztgenannten Fall um eine verzweigte, aber eher schwache Kopplung, während die zuvor genannte Abhängigkeit der komplexen Komponenten des Phasors von A im Allgemeinen, d. h. für beliebige ω_0 , eine starke Kopplung darstellt.

4.3 Effizientes Lösungsverfahren im Frequenzbereich

Im Verlauf der letzten beiden Abschnitte wurden die theoretischen Grundlagen elektromagnetischer Induktionsprozesse behandelt, eine Potentialform zur Beschreibung der quasistatischen Maxwell-Gleichungen ausgewählt und zuletzt die Besonderheiten im Zusammenhang mit harmonisch oszillierenden Feldern geklärt. In diesem Abschnitt wird nun ein Konzept zur effizienten numerischen Berechnung zeitharmonischer Induktionsvorgänge in *foam-extend* präsentiert. Konkret geht es dabei im Folgenden um die Lösung des Gleichungssystem (4.49) mit der FVM für beliebige dreidimensionale Problemstellungen. Die Grundlage dazu bildet ein neuer Lösungsalgorithmus, welcher im Rahmen dieser Arbeit unter Berücksichtigung der leitfähigen Region Ω_C und nicht-leitfähigen Region Ω_0 speziell an die Kopplung von A und ϕ im Frequenzraum angepasst wurde. Die drei verschiedenen Kopplungsmechanismen, die diesbezüglich im letzten Abschnitt abgegrenzt worden sind, umfassen

1. die Kopplung des magnetischen Vektorpotentials A auf den Gebieten Ω_C und Ω_0 ,
2. die starke Kopplung von Real- und Imaginärteil der komplexen Amplitude von A sowie
3. die schwache Kopplung der beiden Potentiale A und ϕ untereinander.

Der erste Mechanismus kann durch die geschlossene Beschreibung (4.49a) von A auf $\Omega = \Omega_C \cup \Omega_0$ umgangen werden und der dritte Punkt legt eine iterative Vorgehensweise zur Lösung von A und ϕ über die Gleichungen (4.49a) und (4.49c) nahe. Für den Einsatz eines iterativen Lösungsverfahrens verbleibt aber die Frage, wie ggf. mit der zweiten Kopplungsart zu verfahren ist, die sich für höhere Frequenzen in der Regel nicht iterativ erfassen lässt.

Nun scheint es zunächst naheliegend, der zweiten Kopplungsart mittels komplexwertiger Algebra und entsprechenden Algorithmen für lineare Gleichungssysteme zu begegnen, indem anstelle der gekoppelten reellwertigen Poisson-Gleichungen (4.49a) nur eine komplexwertige Helmholtz-Gleichung

gelöst wird. Über sehr große Matrizen mit flexibler Adressierung und angepasster Diskretisierung wäre es theoretisch sogar machbar, das gesamte System (4.49) im Komplexen voll gekoppelt zu lösen. Dies wird beispielsweise in Haber u. a. [2000]; Aruliah u. a. [2001]; Weiss [2013] und Jahandari u. Farquharson [2015] im Bereich der Geophysik eindrucksvoll gezeigt.

Der Umgang mit komplexen Zahlen ist jedoch im CFD-Bereich eher unüblich – so sind beispielsweise auch in *OpenFOAM* oder *foam-extend* zum Zeitpunkt der Entstehung der vorliegenden Arbeit keinerlei geeignete Methoden implementiert, und eine entsprechende Erweiterung würde einen massiven Entwicklungsaufwand auf unterster Programmebene erfordern. Im Gegensatz zu *OpenFOAM* sind in *foam-extend* aber Blockmatrizen zur Diskretisierung nutzbar, welche auf tensorwertigen Matrixkoeffizienten beruhen [Saad 2003; Darwish u. a. 2009; Cardiff u. a. 2016]. Diese Blockmatrizen stellen insofern eine Alternative zur komplexen Formulierung dar, als sie die gekoppelte Lösung der reellwertigen Poisson-Gleichungen (4.49a) in einem erweiterten Gleichungssystem ermöglichen. Dazu werden die gegenseitig abhängigen Quellterme beider Gleichungen, wie über die Koeffizienten $\omega_0\sigma$ in Gleichung (4.56) prinzipiell gezeigt, in die Struktur der Blockmatrix überführt, d. h. implizit gemacht.

Zwar gäbe es ansonsten auch noch die Möglichkeit der Quellterm-Linearisierung [vgl. Abschnitt 3.3.7] als Ersatz komplexwertiger Algebra, allerdings sind dafür zum einen äußere Iterationen notwendig und zum anderen scheint diese Vorgehensweise laut Djambazov u. a. [2015] weniger robust zu sein. In dieser Arbeit wird daher der vielversprechende Ansatz via Blockmatrizen in *foam-extend* weiter verfolgt.

4.3.1 Semi-gekoppelter Ansatz auf Basis überlagerter Gitter

Das Gleichungssystem (4.49) lässt sich durch die schwache Kopplung der beiden Potentiale A und ϕ über ein iteratives Verfahren lösen, sofern dabei die starke Kopplung von Real- und Imaginärteil der komplexen Amplitude von A gesondert berücksichtigt wird. In *foam-extend* ist diese Berücksichtigung über eine implizit gekoppelte Lösung der beiden Poisson-Gleichungen (4.49a) mit Hilfe von Blockmatrizen realisierbar.

Auf dieser Basis wird im Weiteren ein semi-gekoppelter Algorithmus zur numerischen Lösung des Problems (4.49) vorgestellt, welcher auf zwei überlagerten Gittern beruht: Ein Hauptgitter repräsentiert die Region Ω für Gleichung (4.49a), und ein Teilgitter repräsentiert das Gebiet Ω_C für Gleichung (4.49c). Dabei stimmt die Gittergeometrie von Ω_C im Hauptgitter exakt mit der Gittergeometrie des Teilgitters von Ω_C überein. Diese Deckungsgleichheit dient zur Ressourceneffizienz, indem numerische Daten direkt und bidirektional abgebildet werden können. Die Grundidee zur Nutzung individueller Gitter für die einzelnen Gleichungen eines Differentialgleichungssystems ist dabei ähnlich zu der Umsetzung in Beale u. a. [2015].

Durch das iterative Vorgehen zur Lösung von A und ϕ mit Haupt- und Teilgitter kann der Bedarf an Arbeitsspeicher (Random-Access Memory, RAM) gegenüber der Alternative einer voll gekoppelten Lösung des Systems (4.49), die in Verbindung mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) häufig anzutreffen ist, stark reduzieren. Beispielsweise hätte die zugehörige Systemmatrix für ein Gitter mit n Zellen nach der Diskretisierung des voll gekoppelten Systems über Blockmatrizen eine Größe von

$8n \times 8n$ [vgl. Gleichung (4.56)]. Obwohl eine solche Matrix natürlich nicht voll, sondern der Zellanzordnung nach nur dünn besetzt wäre, ist das ohne spezielle Speicheroptimierung ein Faktor von 64 im Vergleich zur Diskretisierung einer skalaren Gleichung. Auf Grund des hohen Bedarfs an RAM haben sich auch erst seit einiger Zeit voll gekoppelte Ansätze im CFD-Bereich durchgesetzt, welche für stationäre Strömungsprobleme etwas bessere Konvergenzeigenschaften zeigen [Jareteg u. a. 2014]. Eine solche Simulation führt mit drei Geschwindigkeitskomponenten und dem Druck zu einer Systemmatrix mit einer Größe von $4n \times 4n$, was aber im Vergleich immer noch vier mal kleiner ist. Bei der separaten Lösung von \mathbf{A} und ϕ im Frequenzbereich können die Gleichungen (4.49c) der komplexen Amplitude von ϕ dagegen als skalare Probleme behandelt werden. Damit verbleibt zunächst scheinbar eine Systemmatrix mit der Größe von $6n \times 6n$ für die Gleichungen (4.49a) der komplexen Amplitude von \mathbf{A} . Bei einem genaueren Blick auf die Pseudo-Matrix (4.56) stellt man jedoch fest, dass sich durch die explizite Behandlung von ϕ auch die implizite Kopplung der Komponenten von \mathbf{A} im Komplexen auflöst. Es ist also möglich, zur Lösung alle drei kartesischen Komponenten von \mathbf{A} individuell über Systemmatrizen der Größe $2n \times 2n$ zu behandeln. Mehr als eine dieser Matrizen muss nicht gleichzeitig im RAM gehalten werden.

Im Hinblick auf die Zusammenführung von elektromagnetischen und strömungsmechanischen Effekten stellt der semi-gekoppelte Ansatz zur Lösung des Gleichungssystems (4.49) einen idealen Kompromiss aus Speicherbedarf und Konvergenz dar. Die genaue Lösungsprozedur dieses semi-gekoppelten Algorithmus wird im nächsten Abschnitt detailliert beschrieben.

4.3.2 Lösungsprozedur

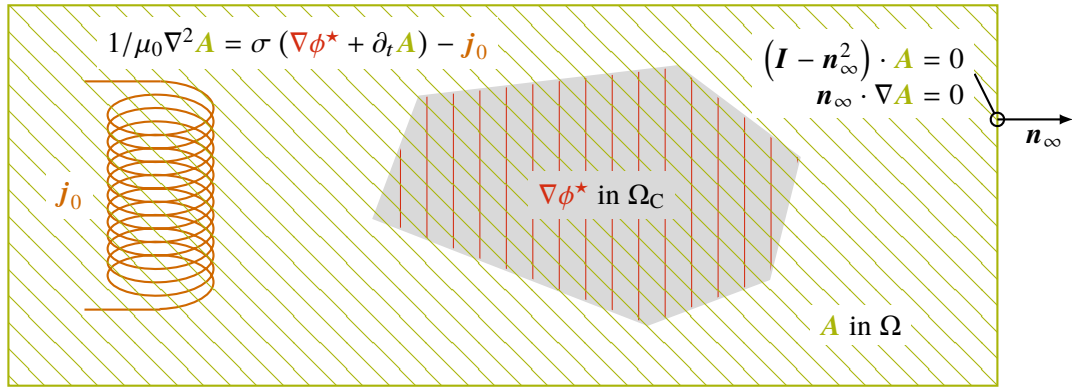
Die iterative Lösung von \mathbf{A} und ϕ basiert, ausgehend von einer Startlösung, auf schrittweise wiederholten Korrekturen bis zur Konvergenz. Zur Erklärung der einzelnen Schritte soll im Folgenden die ganzzahlige Variable m als Zähler dienen. Mit einer trivialen oder intermediären Lösung für den Gradienten des elektrischen Potentials $\nabla\phi$ innerhalb des Konduktors Ω_C , wird dabei die inverse Abbildung dieses Gradienten vom Teilgitter in das Hauptgitter folgendermaßen definiert:

$$\Omega_C: \quad \nabla\phi_{\Re, \Im m}^{\{0\}}(\mathbf{x}_C) \equiv \mathbf{0} \quad (4.57a)$$

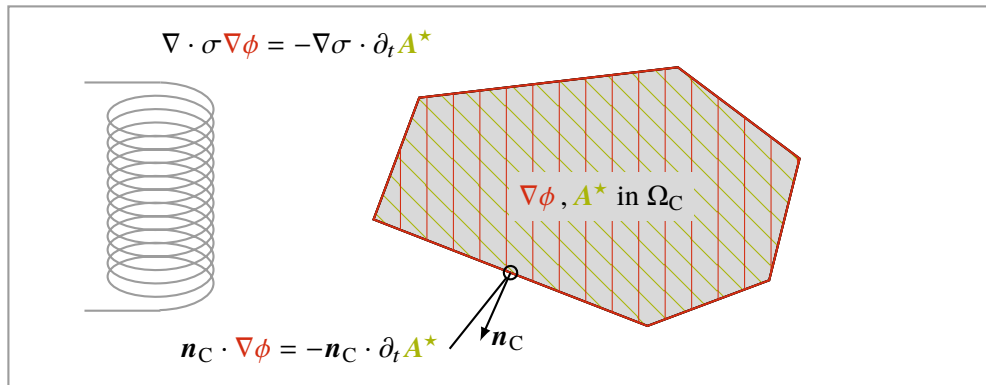
$$\Omega: \quad \nabla\phi_{\Re, \Im m}^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} \nabla\phi_{\Re, \Im m}^{\{m-1\}}(\mathbf{x}_C = \mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega_C \\ \mathbf{0}, & \mathbf{x} \in \Omega_0 \end{cases} \quad (4.57b)$$

Die hochgestellten Ausdrücke in geschweiften Klammern bezeichnen eine approximative Lösung im Iterationsschritt mit dem Index m . Das Feld $\nabla\phi^*$ ist die Repräsentation des Gradienten $\nabla\phi$ im Gebiet Ω . Der Teil von $\nabla\phi^*$, der im Bereich von Ω_0 liegt ist zur Lösung des Phasors von \mathbf{A} nicht erforderlich.

Mit $\nabla\phi^*$ aus einer vorherigen Iteration ($m - 1$) in Ω ist es möglich eine bessere Approximation von \mathbf{A} , bzw. dessen komplexen Phasor-Anteile, im folgenden Iterationsschritt (m) zu erhalten. Diese Korrektur ist in Abbildung 4.2a veranschaulicht – aus Gründen der Lesbarkeit aber nur für den Zeitbereich, d. h. ohne Unterscheidung von Real- und Imaginärteil. Wie schon erwähnt können in diesem Schritt alle kartesischen Komponenten separat behandelt und korrigiert werden, da diese durch die explizite Behandlung von ϕ untereinander entkoppeln.



(a) Korrektur des magnetischen Vektorpotentials in Ω . Der Gradient des elektrischen Potentials wird dazu invers von Ω_C auf Ω abgebildet und explizit behandelt. Dadurch kann jede Komponente von \mathbf{A} separat behandelt werden.



(b) Korrektur des Gradienten des elektrischen Potentials in Ω_C . Das magnetische Vektorpotential wird dazu vorher von Ω auf Ω_C abgebildet und explizit behandelt.

Abbildung 4.2: Semi-gekoppelter Algorithmus zur Lösung der elektromagnetischen Problemstellung auf Grundlage des (totalen) magnetischen Vektorpotentials: Das illustrierte Vorgehen ist zwar für den Zeitbereich dargestellt, kann jedoch sinngemäß auch auf die komplexen Anteile Phasors von \mathbf{A} im Frequenzbereich übertragen werden.

Die starke Kopplung zwischen den Anteilen der komplexen Amplitude der Komponenten von \mathbf{A} im Frequenzraum wird wie beschrieben implizit auf Blockmatrixebene adressiert. In Anlehnung an die Notation der Pseudo-Matrix (4.56) lässt sich Gleichung (4.49a) mit explizitem ϕ für eine Vektor-Komponente A_i von \mathbf{A} folgendermaßen schreiben:

$$\Omega: \begin{bmatrix} 1/\mu_0 \nabla^2 & +\omega_0 \sigma \\ -\omega_0 \sigma & 1/\mu_0 \nabla^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{i_{\Re}} \{m\} \\ A_{i_{\Im}} \{m\} \end{bmatrix} = \sigma \begin{bmatrix} \nabla \phi_{\Re}^* \cdot \mathbf{e}_i \\ \nabla \phi_{\Im}^* \cdot \mathbf{e}_i \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{j}_{0_{\Re}} \cdot \mathbf{e}_i \\ \mathbf{j}_{0_{\Im}} \cdot \mathbf{e}_i \end{bmatrix} \quad \forall i = x, y, z. \quad (4.58)$$

In der kompakten Blockmatrix, auf der linken Seite der Gleichung, erkennt man die impliziten Koppelkoeffizienten $\omega_0 \sigma$ wieder. Auf der rechten Seite befinden sich dagegen die explizit behandelten Komponenten des Gradienten des elektrischen Potentials und die Quellstromdichte. Für ein Gitter

mit n Zellen ist die Größe der Blockmatrix $2n \times 2n$ und damit sechzehn mal kleiner als die in Gleichung (4.56).

Nach der Lösung von Gleichung (4.58) steht im Iterationsschritt m eine bessere Approximation für A zur Verfügung. Auf Grundlage dieser kann im Anschluss das elektrische Potential korrigiert werden. Dazu wird aber vorerst das magnetische Vektorpotential in Ω_C benötigt. Die zugehörige Abbildung vom Hauptgitter Ω auf das Teilgitter Ω_C erfolgt gemäß:

$$\Omega_C: \mathbf{A}_{\mathfrak{Re}, \mathfrak{Im}}^*(\mathbf{x}_C) = \begin{cases} \mathbf{A}_{\mathfrak{Re}, \mathfrak{Im}}^{\{m\}}(\mathbf{x} = \mathbf{x}_C), & \mathbf{x}_C \in \Omega_C \wedge \mathbf{x}_C \notin \Gamma_C \\ \mathbf{A}_{\mathfrak{Re}, \mathfrak{Im}}^{\{m\}}|_{\Gamma_C}(\mathbf{x} = \mathbf{x}_C), & \mathbf{x}_C \in \Gamma_C \end{cases}, \quad (4.59)$$

wobei hier \mathbf{A}^* die Repräsentation des magnetischen Vektorpotentials in Ω_C im m -ten Iterationsschritt bezeichnet. Die Randwerte $\mathbf{A}|_{\Gamma_C}$ auf der Konduktoroberfläche können auf Grund der Art der FVM nicht direkt abgebildet werden. Dieses Problem ergibt sich aus der Tatsache, dass in *foam-extend* diskrete Daten von gewöhnlichen Feldern in den Zellzentren und nicht auf den Zellflächen gespeichert werden, über welche Γ_C diskretisiert wird (vgl. Kapitel 3). Infolgedessen wird $\mathbf{A}|_{\Gamma_C}$ entweder über Interpolation in Ω oder über eine Extrapolation in Ω_C ermittelt. Bei der Interpolation handelt es sich um das standardmäßige Mittel zur Berechnung der Flächenwerte der FVM [siehe Abschnitt 3.3.1] und gerade nicht um eine rechenintensive Interpolation zwischen Haupt- und Teilgitter, wie sie beispielsweise bei der externen Kopplung verschiedener Programme eingesetzt wird [siehe Abschnitt 2.3].

Mit der korrigierten Lösung von A in Ω_C in Form von \mathbf{A}^* kann nun wieder das elektrische Potential bzw. dessen Gradient korrigiert werden. Dazu löst man gemäß Gleichung (4.49c)

$$\begin{aligned} \Omega_C: \quad \nabla \cdot \left(\sigma \nabla \phi_{\mathfrak{Re}}^{\{m\}} \right) &= +\nabla \sigma \cdot \omega_0 \mathbf{A}_{\mathfrak{Im}}^* \\ \nabla \cdot \left(\sigma \nabla \phi_{\mathfrak{Im}}^{\{m\}} \right) &= -\nabla \sigma \cdot \omega_0 \mathbf{A}_{\mathfrak{Re}}^* \end{aligned} \quad (4.60)$$

beide Poisson-Gleichungen separat (hintereinander), wobei hier nun \mathbf{A}^* jeweils über explizite Quellterme erscheint. Eine sinngemäße Veranschaulichung dazu befindet sich in Abbildung 4.2b – zu Zwecken der Lesbarkeit wieder im Zeitbereich.

Die gesamte Prozedur von Gleichung (4.57) bis (4.59) wird, wie zu Beginn schon erwähnt, bis zur Konvergenz der Gleichungen (4.58) und (4.60) für beide Potentiale bzw. deren komplexe Amplituden wiederholt. Der gesamte Ablauf ist zur Übersicht auch nochmal in Abbildung 4.3 veranschaulicht. Dabei wird zusätzlich der triviale Fall eines zweidimensionalen Falles mit abgedeckt.

4.3.3 Lineare Gleichungssysteme

Bei der iterativen Lösung von A und ϕ gemäß Gleichung (4.49a) und (4.49c) im Frequenzraum fallen mit dem Lösungsalgorithmus aus dem letzten Abschnitt pro Iterationsschritt fünf lineare Gleichungssysteme an – drei über Blockmatrizen gekoppelte Gleichungssysteme (4.58) für die Komponenten von A auf dem Hauptgitter und zwei Gleichungssysteme (4.60) für ϕ auf dem Teilgitter.

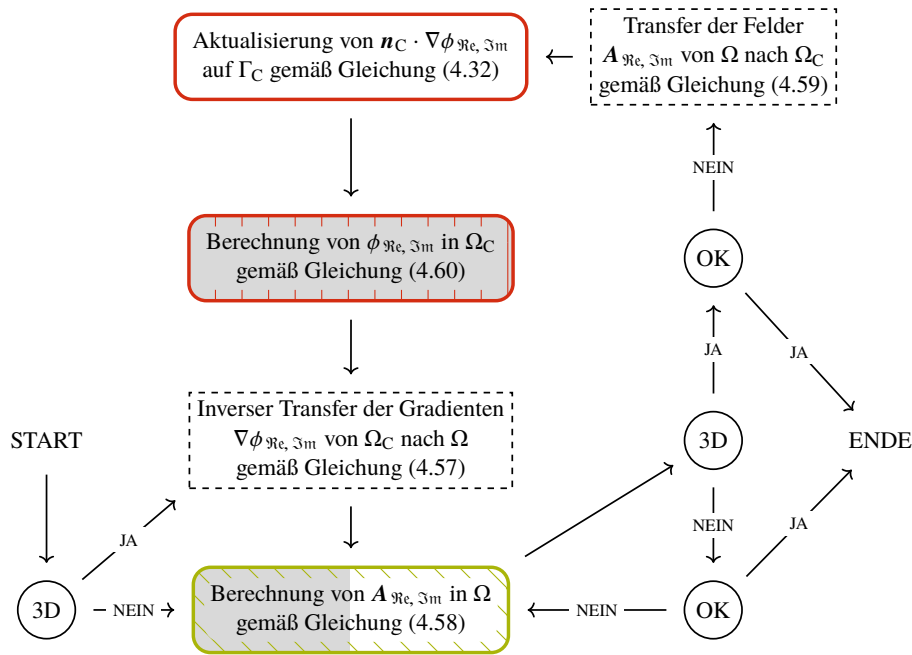


Abbildung 4.3: Ablaufplan zur semi-gekoppelten Lösung des elektromagnetischen Problems auf Basis des (totalen) magnetischen Vektorpotentials aus Abschnitt 4.3.2: Die Kurzform „3D“ bezeichnet einen Test, ob es sich um ein dreidimensionales Problem handelt und das Kürzel „OK“ steht für einen Konvergenztest.

Die drei gekoppelten Gleichungssysteme für die kartesischen Komponenten von \mathbf{A} sind durch asymmetrische Systemmatrizen gekennzeichnet, welche zudem für höhere Kreisfrequenzen ω_0 des Quellstromes (4.40) in der Spule nicht diagonal dominant sind [vgl. Abschnitt 4.2.4]. Diese beiden Matrixeigenschaften ergeben sich daraus, dass die Kopplungskoeffizienten $\omega_0 \sigma$ einerseits linear mit ω_0 skalieren und andererseits in der Blockstruktur aus Gleichung (4.58) im oberen Dreieck mit positivem und im unteren Dreieck mit negativem Vorzeichen stehen. Zur Lösung der Gleichungssysteme im Frequenzraum eignet sich daher vor allem ein präkonditioniertes, stabilisiertes Bikonjugierte-Gradienten (Biconjugate Gradient Stabilized, BiCGSTAB)-Verfahren [Saad 2003, Abschnitt 7.4.2] oder ein verallgemeinertes Minimales-Residuum (Generalized Minimal Residual, GMRES)-Verfahren [Saad 2003, Abschnitt 6.5], die beide in *foam-extend* verfügbar sind.

Obwohl sich diese Arbeit ausschließlich auf den Frequenzbereich bezieht, sei zur Einordnung an dieser Stelle ergänzend hinzugefügt, dass gerade in den Eigenschaften der drei Gleichungssysteme für \mathbf{A} der wesentliche Unterschied zum Zeitbereich besteht. Im Zeitbereich sind die Gleichungssysteme durch die fehlende Unterscheidung von Real- und Imaginärteil nämlich nicht nur kleiner, sondern die Grundgleichungen für die drei Komponenten (4.27) weisen auch die Struktur einer zeitabhängigen Diffusionsgleichung mit zusätzlichem Quellterm auf. Die zugehörige Systemmatrix ist dadurch sowohl symmetrisch als auch diagonal dominant. Die entsprechenden Matrixeigenschaften lassen sich, mit Verweis auf die Diskretisierung des Zeitableitungsterms aus Abschnitt 3.3.4 und des Diffusionsterms aus Abschnitt 3.3.6 leicht identifizieren. Beide Eigenschaften ergeben sich dabei aus den reinen Diagonalbeiträgen a_p^\square durch die Zeitintegration [siehe Gleichung (3.58) oder (3.59)] in Verbindung mit den betragsmäßig identischen Beiträgen $a_{P_{kf}}^\times$ und $a_{N_{kf}}^\times$ des Diffusionsoperators [siehe Gleichung (3.68)]. Speziell für reine Neumann-Randbedingungen ergibt sich im stationären Fall eine schwache Diago-

naldominanz, da die Diagonalbeiträge des Zeitableitungsterms entfallen und die Diagonalbeiträge $a_{P_{k,f}}^{\square}$ beim Diffusionsoperator nur durch Dirichlet-Randbedingungen mit $\beta_f > 0$ entstehen können. Daher eignet sich im Zeitbereich zur Lösung von A ein präkonditioniertes **Konjugierte-Gradienten** (**Conjugate Gradient, CG**)-Verfahren, dessen Theorie beispielsweise in Saad [2003] oder Schwarz u. Köckler [2009] näher erläutert wird. Alternativ kann dort auch ein in *OpenFOAM* verfügbares geometrisch-algebraisches Mehrgitter (**Geometric Algebraic Multigrid, GAMG**)-Verfahren eingesetzt werden [vgl. Saad 2003, Abschnitt 13].

Bei den zwei Gleichungssystemen für ϕ handelt es sich auf Grund der reinen Neumann-Randbedingungen aus Gleichung (4.49d) um Neumann-Probleme, welche durch eine singuläre Systemmatrix gekennzeichnet sind. Durch die Struktur der Gleichungen ist die Systemmatrix in beiden Fällen – genau wie im stationären Fall bei A im Zeitbereich – symmetrisch und schwach diagonal dominant [vgl. Gleichung (3.68)].

Für diese Neumann-Probleme existieren zusätzlich Kompatibilitätsbedingungen, d. h. Abhängigkeiten zwischen den Randbedingungen und der jeweiligen Inhomogenität der zu lösenden Poisson-Gleichungen. Die Randbedingungen der beiden Gleichungen (4.60) hängen aber von der im Hauptgitter interpolierten oder im Teilgitter extrapolierten Lösung von A^* ab. In diesem Zusammenhang kann es durch die Inter- oder Extrapolation der Randwerte für die Abbildung gemäß Gleichung (4.59) mitunter zu kleinen numerischen Ungenauigkeiten, damit streng genommen zu einer Verletzung der zugehörigen Kompatibilitätsbedingung und somit schließlich zu numerischen Instabilitäten bei der iterativen Lösung kommen. Zur generellen Vermeidung dieser Problematik wird im weiteren Verlauf dieses Abschnittes eine in dieser Arbeit entwickelte Alternative zu der standardmäßig in *OpenFOAM* implementierten Regularisierungstechnik für singuläre Matrizen vorgestellt, die für solche Fälle zu einem robusteren Lösungsprozess führt.

Die für das elektrische Potential ϕ zu lösenden Gleichungen haben sowohl im Zeit- (4.29) als auch im Frequenzbereich (Gleichung (4.49c)) die Struktur:

$$\Omega_C: \quad \nabla \cdot (\gamma \nabla \psi) = s_U \quad (4.61a)$$

$$\Gamma_C: \quad \mathbf{n}_C \cdot \nabla \psi = g_C, \quad (4.61b)$$

wobei die Inhomogenität s_U einen expliziten Quellterm für eine repräsentative, reelle Funktion ψ darstellt [vgl. Abschnitt 3.3.7]. Auf dem Rand Γ_C ist über die Neumann-Bedingung (4.61b) der Gradient g_C in Normalen-Richtung \mathbf{n}_C festgelegt. Die beiden Gradienten-Operatoren in Gleichungen (4.61a) und (4.61b) machen dieses elliptische Neumann-Problem invariant gegenüber jedem reellen, konstanten Anteil ψ_0 der gesuchten Funktion $\psi = \tilde{\psi} + \psi_0$:

$$\Omega_C: \quad \nabla \cdot (\gamma \nabla \psi) = \nabla \cdot (\gamma \nabla (\tilde{\psi} + \psi_0)) = \nabla \cdot (\gamma \nabla \tilde{\psi}) = s_U \quad \forall \psi_0 \in \mathbb{R} \quad (4.62a)$$

$$\Gamma_C: \quad \mathbf{n}_C \cdot \nabla \psi = \mathbf{n}_C \cdot \nabla (\tilde{\psi} + \psi_0) = \mathbf{n}_C \cdot \nabla \tilde{\psi} = g_C \quad \forall \psi_0 \in \mathbb{R}. \quad (4.62b)$$

Das heißt wiederum, dass ψ aus (4.61) ohne weitere Bedingungen nur bis auf eine Konstante bestimmbar ist.

Diskretisiert man nun Gleichung (4.61a) in *OpenFOAM* nach den in Kapitel 3 gezeigten Methoden für n Zellen, so ergibt sich das aus Abschnitt 3.3.3 bzw. Gleichung (3.44) bekannte lineare Gleichungssystem der Art

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{r} . \quad (4.63)$$

Dabei entspricht die quadratische Systemmatrix \mathbf{A} mit ihren reellen Koeffizienten der diskreten Form des Operators $\nabla \cdot (\gamma \nabla \psi)$, und der Vektor \mathbf{r} auf der rechten Seite beinhaltet sowohl den diskretisierten Quellterm s_U als auch die Beiträge der Neumann-Randbedingungen g_C . Wie zuvor muss dieses diskrete Gleichungssystem mit dem Lösungsvektor $\boldsymbol{\psi}$ invariant gegenüber einem konstanten Anteil in $\boldsymbol{\psi} = \tilde{\boldsymbol{\psi}} + \psi_0 \mathbf{1}$ sein:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{A}(\tilde{\boldsymbol{\psi}} + \psi_0 \mathbf{1}) = \mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\psi}} + \psi_0 \mathbf{A}\mathbf{1} \stackrel{!}{=} \mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{\psi}} = \mathbf{r} \quad \forall \psi_0 \in \mathbb{R} , \quad (4.64)$$

um den kontinuierlichen Fall korrekt abzubilden. Daraus ist sofort ersichtlich, dass bei einer sinnvollen Diskretisierung der Eins-Vektor $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1, 1)^T$ im Kern der linearen Abbildung $\mathbf{A}\boldsymbol{\psi}$ liegt und damit $\mathbf{v}_1 = \mathbf{1}/\sqrt{n}$ normierter Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_1 = 0$ ist:

$$(\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}) \mathbf{v}_1 = \mathbf{0} . \quad (4.65)$$

Es lässt sich leicht prüfen, dass diese Invarianz auch für die Diskretisierung des Diffusionsterms aus Abschnitt 3.3.6 erfüllt ist: Da die Beiträge $a_{P_{k,f}}^\times$ und $a_{N_{k,f}}^\times$ nach Gleichung (3.68) betragsmäßig identisch sind, sich jedoch im Vorzeichen unterscheiden, heben sich konstante Anteile bei der Ausführung des Matrix-Vektor-Produktes $\mathbf{A}\boldsymbol{\psi}$ auf.

Im Zusammenhang mit reinen Neumann-Problemen (4.61) ist man oft nicht an der Lösung von ψ selbst, sondern nur am Gradienten $\nabla \psi$ interessiert. Die absolute Lage der Lösung hinsichtlich der konstanten ψ_0 ist in solchen Fällen unbedeutend. Zur Regularisierung wird in *OpenFOAM* standardmäßig das diskrete $\boldsymbol{\psi}$ in einer frei wählbaren Zelle P über einen ebenso frei spezifizierbaren Referenzwert ψ_R festgesetzt. Dazu addiert man in der entsprechenden Zeile der Matrix \mathbf{A} die Gleichung

$$c_{\text{Ref}} \psi_P = c_{\text{Ref}} \psi_R \quad (4.66)$$

hinzu. Dies verbessert bei geschickter Wahl (Vorzeichen) des Koeffizienten c_{Ref} nicht nur die Diagonaldominanz der Systemmatrix, sondern vermeidet auch eine Änderung der Matrixstruktur. Zusätzlich erlaubt dieses Vorgehen, welches nebenbei auch im Bereich der FEM als Strafverfahren für die Umsetzung von Zwangsbedingungen genutzt wird [Bathe 1996, Abschnitt 3.4], je nach Betrag von c_{Ref} sogar eine flexible Stärke der Festsetzung von $\boldsymbol{\psi}$ in der Zelle P . In *OpenFOAM* wird der Koeffizient so ausgewählt, dass er dem zum Zellwert zugehörigen, ursprünglichen Diagonaleintrag a_P der Matrix \mathbf{A} entspricht:

$$c_{\text{Ref}} = a_P , \quad (4.67)$$

und ψ_P damit nur im schwachen Sinne festhält.

Damit das Randwertproblem (4.61) korrekt gestellt ist, und folglich überhaupt eine Lösung existiert, muss zusätzlich zu (4.61) die Kompatibilitätsbedingung

$$\int_{\Omega_C} s_U \, dV \stackrel{!}{=} \int_{\Gamma_C} \gamma g_C \, dS \quad (4.68)$$

erfüllt sein, wie sich leicht über den Gaußschen Integralsatz zeigen lässt. Im kontinuierlichen Fall ist diese Bedingung mit $\psi \hat{=} \phi$ und $\gamma \hat{=} \sigma$ laut Gleichung (4.29) und Gleichung (4.32) exakt erfüllt, da sich der Quellterm $s_U = -\nabla \cdot (\sigma \partial_t \mathbf{A})$ aus dem Divergenz-Operator und der Normalgradient gemäß $g_C = -\partial_t \mathbf{A}$ ergibt. Im diskreten Gleichungssystem (4.63) entspricht die Bedingung (4.68):

$$\mathbf{r}^T \mathbf{1} \stackrel{!}{=} 0, \quad (4.69)$$

wobei $\mathbf{1}$ auch hier wieder der schon zuvor genutzte Eins-Vektor und \mathbf{r} der in Gleichung (4.63) eingeführte Spaltenvektor der rechten Seite ist.

Durch die iterative Kopplung des magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A} und des elektrischen Potentials ϕ , in Verbindung mit der Extrapolation der Randbedingungen für \mathbf{A} in Ω_C [vgl. Gleichung (4.59)], konnte für numerische Simulationen im Kontext dieser Arbeit in einigen Fällen die diskrete Bedingung aus (4.69) während des Iterationsprozesses nicht exakt erfüllt werden. Es hat sich dabei gezeigt, dass im Zusammenspiel mit der punktuellen Regularisierung nach Gleichung (4.66) und (4.67) schon bereits für kleine Verletzungen der Kompatibilitätsbedingung eine lokale Verzerrung der numerischen Lösung um die Referenzzelle P entstehen kann, welche letztlich den iterativen Prozess destabilisiert.

Zur Vermeidung wurde für Simulationen zu dieser Arbeit eine zu Gleichung (4.66) alternative Form der Regularisierung in *foam-extend* implementiert, welche über die Theorie zur Lösung singularer Integralgleichungen [Stuart Lynn u. Timlake 1968] bzw. Neumann-Probleme [Ikebe u. a. 1969] im Bereich der Elektrokardiographie [Barnard u. a. 1967a, b] motiviert wurde. Die selbe Technik findet aber auch in der Theorie zur kontaktlosen Strömungstomographie [Wondrak 2012, Abschnitt 2.1, S. 20] Anwendung. In allen genannten Quellen wird im Zusammenhang mit integralen Neumann-Problemen eine Regularisierung einer singularen Matrix erreicht, indem deren Eigenwerte geschickt verschoben werden. Eine elementare Rolle spielt diese Eigenwertverschiebung auch bei Methoden zur Lösung von Eigenwertproblemen unter dem Begriff der Deflation, wie es beispielsweise in [Wilkinson 1965, Abschnitt 9-19], [Parlett 1998, Kapitel 5] oder [Saad 2011, Abschnitt 9.2.3] genau erläutert wird.

Der Kerngedanke, welcher daraus für hiesige Zwecke aufgegriffen wurde, ist es, die Matrix \mathbf{A} aus Gleichung (4.63) gezielt so zu modifizieren, dass dabei nur ein einzelner Eigenwert verändert wird. Konkret geht es hier natürlich um den Eigenwert $\lambda_1 = 0$ mit Eigenvektor $\mathbf{v}_1 = \mathbf{1}/\sqrt{n}$ aus Gleichung (4.65). Dazu ist es zunächst wichtig, nochmals auf die Symmetrie des Laplace-Operators $\nabla \cdot (\nabla \psi) = \nabla^2 \psi$ hinzuweisen [Werner 2011, S. 351]. Obwohl im elliptischen Operator $\nabla \cdot (\gamma \nabla \psi)$ zusätzlich die Diffusivität γ auftritt, ist auch dafür die resultierende Systemmatrix \mathbf{A} symmetrisch [vgl. Gleichung (3.68) und Saad [2003]].

Nach dem Spektralsatz der linearen Algebra für symmetrische Matrizen [Parlett 1998, Definition 1.4] lässt sich die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit ihren Eigenwerten λ_k und den zugehörigen, orthonormalen

Eigenvektoren \mathbf{v}_k folgendermaßen zerlegen:

$$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^n \lambda_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^T = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T + \sum_{k=2}^n \lambda_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^T . \quad (4.70)$$

Diese Aufteilung, mit einem bekannten Eigenwert λ_1 und seinem zugehörigen normierten Eigenvektor \mathbf{v}_1 , wird bei der Hotelling-Deflation von Matrizen genutzt [Wilkinson 1965, Abschnitt 9, Gleichung (19.1)]. Dort besteht der Wunsch, einen bekannten Eigenwert zu „löschen“ bzw. ihn auf Null zu setzen. Hier wird der Eigenwert λ_1 dagegen nach dem gleichen Prinzip auf einen von Null verschiedenen Wert $\tilde{\lambda}_1$ verschoben, was dem Gegenteil der Deflation – also einer Inflation – gleichkommt:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \tilde{\lambda}_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T = \mathbf{A} + \tilde{\lambda}_1 \frac{1}{n} \mathbf{1} \mathbf{1}^T . \quad (4.71)$$

Eine direkte Manipulation der Matrix wäre jedoch nicht nur Verschwendung von RAM, sondern auch kontradiktiv im Sinne der Adressierungsmethode von *OpenFOAM*, wonach nämlich nur solche Nebendiagonaleinträge vorgesehen sind, die sich aus der Konnektivität des zugrunde liegenden Gitters tatsächlich ergeben. Allerdings kann die Modifikation aus Gleichung (4.71) indirekt bei der Ausführung der Matrix-Vektor-Multiplikation

$$\tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\psi} = \mathbf{A} \boldsymbol{\psi} + \tilde{\lambda}_1 \frac{1}{n} \mathbf{1} \mathbf{1}^T \boldsymbol{\psi} = \mathbf{A} \boldsymbol{\psi} + \tilde{\lambda}_1 \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \psi_k \mathbf{1} \quad (4.72)$$

berücksichtigt werden, welche die Grundlage iterativer Gleichungslöser darstellt [Saad 2003]. In dieser Form lässt sich auch eine Parallelisierung einfach bewerkstelligen, da ein Austausch der lokal berechenbaren Summe in Gleichung (4.72) keinen hohen Kommunikationsaufwand erfordert.

Zur sinnvollen Festlegung des neuen Eigenwertes $\tilde{\lambda}_1$ ist eine Abschätzung der bestehenden Eigenwerte hilfreich: Für die reelle, quadratische Matrix $\mathbf{A} = [a_{kl}]$ lässt sich bei Diagonaldominanz, z. B. in Verbindung mit der Zeilensummennorm

$$\|\mathbf{A}\|_{\infty} = \max_{k=1, \dots, n} \sum_{l=1}^n |a_{kl}| , \quad (4.73)$$

das Spektrum der Eigenwerte eingrenzen. Nach Gershgorin's Theorem [Geršgorin 1931] und zugehörigen Erläuterungen in Saad [2003, Abschnitt 4.2.3] findet man:

$$|\lambda_k| \leq \|\mathbf{A}\|_{\infty} \quad \forall k = 1, \dots, n . \quad (4.74)$$

Die Matrix \mathbf{A} für das Neumann-Problem (4.61) in *OpenFOAM* ist immer schwach diagonaldominant. Darüber hinaus ergeben sich auch stets alle Zeilensummen zu Null. Weiterhin handelt es sich bei \mathbf{A} um eine positiv semidefinite Matrix. Mit dieser Kenntnis lässt sich der größte Eigenwert noch weiter eingrenzen:

$$\lambda_k \leq 2 \max_{l=1, \dots, n} |a_{ll}| \quad \forall k = 1, \dots, n . \quad (4.75)$$

Um den Spektralradius möglichst nicht zu vergrößern, und die positive Definitheit nicht zu verändern, ist für Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit ein mittlerer Diagonalwert für $\tilde{\lambda}_1$ gewählt worden:

$$\tilde{\lambda}_1 = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n |a_{ll}| . \quad (4.76)$$

In Kombination mit präkonditionierten CG-Verfahren wurde anhand der Regularisierung gemäß Gleichung (4.72) und (4.76), im Vergleich zu der in *OpenFOAM* standardmäßig implementierten Version nach Gleichung (4.66) und (4.67), keinerlei Nachteile festgestellt. Dafür bietet die neue Variante im Zusammenhang mit numerischen Abweichungen von der diskreten Kompatibilitätsbedingung (4.69) einen entscheidenden Vorteil, da die Lösung dort nicht nur in einer einzelnen Zelle festgehalten wird. Zahlreiche Tests haben gezeigt, dass sich ein möglicher numerischer Fehler so auf das gesamte Rechengebiet verteilt, was letztendlich eine wesentlich glattere Lösung liefert.

4.3.4 Reduziertes magnetisches Vektorpotential

In Abschnitt 4.3.1 und Abschnitt 4.3.2 wurde ein neuer semi-gekoppelter Algorithmus zur iterativen Lösung der Potentiale \mathbf{A} und ϕ auf Basis überlagerter Gitter vorgestellt, wobei die Gleichungen (4.49a) und (4.49c) im Frequenzraum gelöst werden. In diesem Abschnitt wird nun – hauptsächlich im Hinblick auf die Möglichkeit einer vereinfachten Modellierung von Induktionsspulen – das reduzierte magnetische Vektorpotential eingeführt und der semi-gekoppelte Lösungsalgorithmus aus Abschnitt 4.3.2 entsprechend angepasst.

Zur Verbesserung der Lesbarkeit beziehen sich nachfolgend, wie schon zuvor in Abbildung 4.2, alle methodischen Beschreibungen auf den Zeitbereich, obwohl in dieser Arbeit ausschließlich elektromagnetische Berechnungen im Frequenzraum durchgeführt werden. Dieses Vorgehen ist legitim, da sich die Lösung von Gleichung (4.49a) im Frequenzbereich und Gleichung (4.27) im Zeitbereich letztlich nur durch die gekoppelte Lösung der Komponenten des Phasors von \mathbf{A} mittels Blockmatrizen unterscheidet, abgesehen davon sind alle anderen Aspekte des iterativen Algorithmus auch auf den Zeitbereich übertragbar.

Als Motivation für die Einführung des reduzierten magnetischen Vektorpotentials sei zunächst noch einmal darauf aufmerksam gemacht, dass eine numerische Lösung von \mathbf{A} und ϕ im Allgemeinen die Diskretisierung der nicht-leitfähigen Region Ω_0 voraussetzt, welche unter anderem die Spulen mit der aufgeprägten Quellstromdichte \mathbf{j}_0 beinhaltet. Auch wenn gemäß Abbildung 4.1 die Leitfähigkeit der Spule und deren Stromverteilung im Rahmen der Modellierung unberücksichtigt bleiben, so ist es dennoch nötig die Stromverteilung \mathbf{j}_0 – und damit letztlich die Erregerspule selbst – über ein numerisches Gitter zu erfassen.

Im Zuge der Grundlagen zur FVM wurden diesbezüglich in Abschnitt 3.2 die zwei Hauptmerkmale der Schiefe und Nicht-Orthogonalität zur Gitterqualität in *OpenFOAM* besprochen und darauf hingewiesen, dass unter hinreichend guter Einhaltung der Bedingung (3.13) die Schiefe im Vergleich zur Nicht-Orthogonalität des Gitters in Bezug auf numerische Fehler nur eine untergeordnete Rolle spielt. Für komplexe Geometrien, welche bei Induktionsspulen in der Regel vorliegen [vgl. Abbildung 2.4]

ist die Erfüllung von Gleichung (3.13) jedoch keine leichte Aufgabe. Schon bei Spulen mit vielen Windungen und einer kleinen Steigung wird der Anspruch einer entsprechenden Gitterqualität zur großen Herausforderung. Für ein solches Gitter kommt auch schnell eine sehr große Menge an Zellen ins Spiel. Zudem ist im Nahbereich der Spulen eine entsprechend feine Gitterauflösung erforderlich, um die Gradienten des magnetischen Vektorpotentials hinreichend gut beschreiben zu können. Diese Bedingungen machen es im Allgemeinen auch sehr schwer, eine hohe Gitterqualität hinsichtlich Nicht-Orthogonalität und Schiefe zu erreichen.

Um diese Anforderungen abzuschwächen und die Anzahl der Zellen in Ω_0 auf ein Minimum zu reduzieren, ist es möglich das magnetische Vektorpotential in ein (äußerlich) aufgeprägtes Feld \mathbf{A}_0 und einen (verbleibenden) reduzierten Anteil \mathbf{a} zu zerlegen [Binns u. Lawrenson 1973; Binns u. a. 1992; Xu u. Simkin 2004]:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{a} . \quad (4.77)$$

Der erste Teil wird dabei so definiert, dass er genau dem Feld entspricht, welches ausschließlich durch die Erregerspule und die Quellstromdichte \mathbf{j}_0 entsteht:

$$\Omega: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A}_0 = -\mathbf{j}_0 , \quad (4.78)$$

während der reduzierte Anteil alleine aus der induzierten Wirbelstromdichte $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ in Ω_C entspringt:

$$\Omega: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{a} = \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}_0}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \nabla \phi \right) . \quad (4.79)$$

Gleichung (4.78) unterscheidet sich dabei von Gleichung (4.26a) nur im Gültigkeitsbereich. Die Gleichung (4.79) aber gilt im Vergleich mit Gleichung (4.26b) nicht nur auf einem erweiterten Bereich, sondern enthält auch einen zusätzlichen Quellterm aus dem elektrischen Feld $\mathbf{E} = -(\partial_t \mathbf{A}_0 + \partial_t \mathbf{a} + \nabla \phi)$. Durch Addition beider Gleichungen (4.78) und (4.79) findet man mit Gleichung (4.77) unmittelbar die geschlossene Darstellung (4.27) wieder.

Neben einer differentiellen Berechnung des magnetischen Feldes kann auch das Gesetz von Biot-Savart [Jackson 1975; Griffiths 1999] genutzt werden. Anstelle Gleichung (4.78) über Mittel der FVM zu lösen, lässt sich das aufgeprägte magnetische Vektorpotential \mathbf{A}_0 ausgehend von \mathbf{j}_0 über die Integralgleichung

$$\mathbf{A}_0(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Omega} \frac{\mathbf{j}_0(\mathbf{r})}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}|} dV(\mathbf{r}) \quad (4.80)$$

ermitteln. Das Volumenintegral ist darin auf den Raum beschränkt, in welchem die Stromdichte \mathbf{j}_0 nicht verschwindet. Die Auswertung des Integrals kann, falls sich \mathbf{j}_0 zumindest stückweise analytisch beschreiben lässt, entweder direkt bewerkstelligt werden oder sie erfolgt näherungsweise implizit oder explizit. Dabei ist man hinsichtlich der im letzten Fall nötigen Diskretisierung nicht zwangsläufig an die FVM gebunden.

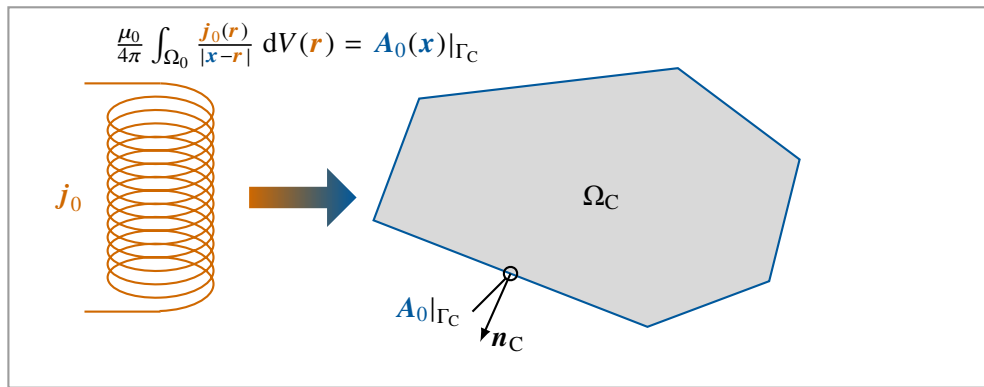
Eine implizite Einbettung auf Matrixebene lässt zwar einerseits sehr komplexe, feingliedrige Geometrien zu, würde aber andererseits die dünnbesetzte Struktur und die Symmetrie der entsprechenden Systemmatrix zerstören, was sich wiederum äußerst nachteilig auf iterative Gleichungslöser auswirken würde [Saad 2003] und somit letztlich den Freiheitsgrad beschränkt [siehe z. B. in Gagnoud u. a. 2015, Advantages and drawbacks].

Ein Nachteil der expliziten numerischen Determination des Gesetzes von Biot-Savart (4.80) ist hingegen, dass die Berechnungszeit mit wachsendem Freiheitsgrad der Diskretisierung sehr schlecht skaliert. Angenommen die Quellstromdichte \mathbf{j}_0 wird auf n_0 diskreten Punkten (\mathbf{r}) ausgewertet und das resultierende magnetische Vektorpotential an n diskreten Punkten (\mathbf{x}) gesucht, so wäre ein Aufwand von $n_0 \times n$ Rechenoperationen vonnöten. Im Falle einer Parallelisierung, die im Hinblick auf die Handhabung sehr großer Problemstellungen unvermeidbar ist, wird die unvorteilhafte Skalierung zusätzlich noch von einem hohen Kommunikationsaufkommen begleitet, da die Quellstromdichte dann verteilt vorliegt [vgl. Weber 2016, Abschnitt 2.3.4].

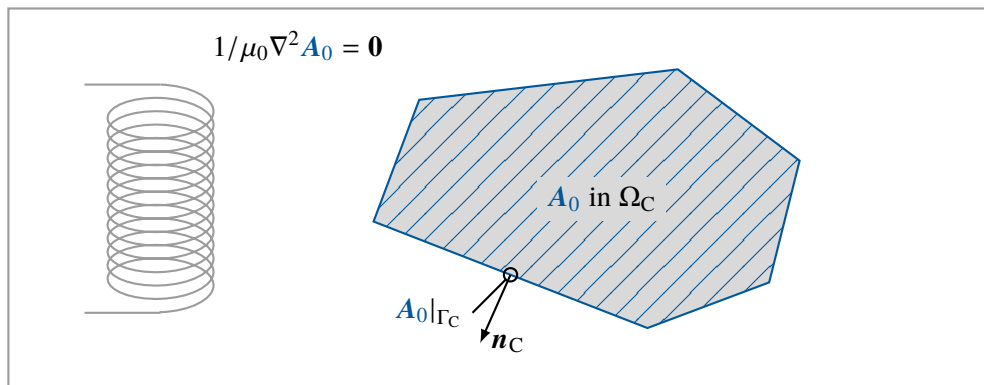
In zu dieser Arbeit verwandten Modellierungsfällen, wo bewusst auf die nicht-leitfähige Region verzichtet wird [Weber u. a. 2013; Djambazov u. a. 2015; Weber 2016; Weber u. a. 2017a, b], wird sogar das reduzierte magnetische Vektorpotential \mathbf{a} über Biot-Savart's Gesetz aus $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ (oder einer ähnlichen Version des Ohmschen Gesetzes) berechnet. Obwohl in solchen Fällen vollständig auf die Diskretisierung von Ω_0 verzichtet werden kann, zeigt eine nähere Untersuchung von Djambazov u. a. [2015], dass dieser Ansatz für die Lösung des elektromagnetischen Problems im Frequenzraum (4.49) nicht optimal ist. Der Wegfall der nicht-leitfähigen Region macht zwar kein erweitertes Rechengitter erforderlich, sodass auch kaum Anpassungen bestehender CFD-Software nötig sind, jedoch kommt dieser Vorteil auf Kosten eines massiven Zuwachses an Rechenaufwand. Die Kopplungsmechanismen, die in Abschnitt 4.2.4 ausführlich diskutiert wurden, müssen dann nämlich alle iterativ realisiert werden. Selbst im Fall von sehr langsam oszillierenden Feldern müsste man dazu das Integral (4.80) mehrfach lösen.

Insgesamt lassen sich vier Ansätze im Zusammenhang mit der Anwendung von Biot-Savart's Gesetz und der Aufteilung des magnetischen Vektorpotentials identifizieren, wobei die zuletzt genannte, implizite Herangehensweise sicher noch weiter unterteilt werden kann:

1. Das totale magnetische Vektorpotential \mathbf{A} wird auf Ω gemäß Gleichung (4.27) gelöst. Das Gesetz von Biot-Savart kommt nicht zum Einsatz, und die Region Ω_0 muss inklusive der Spulen diskretisiert werden. Die Lösung von \mathbf{A} und ϕ kann sowohl gekoppelt als auch iterativ umgesetzt werden.
2. Das reduzierte magnetische Vektorpotential \mathbf{a} wird auf Ω gemäß Gleichung (4.78) gelöst. Das Gesetz von Biot-Savart kommt explizit zur Bestimmung des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A}_0 aus \mathbf{j}_0 in Ω_0 zum Einsatz, und die Region Ω_0 kann ohne Induktionsspule diskretisiert werden. Die Lösung von \mathbf{a} und ϕ kann auch hier sowohl gekoppelt als auch iterativ realisiert werden.
3. Das magnetische Vektorpotential wird nicht über eine Lösung einer DGL berechnet, sondern Biot-Savart's Gesetz wird explizit zur Ermittlung des totalen magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A}



(a) Berechnung des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials auf Γ_C . Nur die Randwerte werden über die Integralgleichung bestimmt, um deren Einsatz und die damit verbundene Rechenzeit minimal zu halten.



(b) Berechnung des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials in Ω_C . Das Lösen der DGL ist für größere Simulationen numerisch mit weniger Aufwand verbunden, als die Integralgleichung für jeden diskreten Wert im Inneren auszuwerten. In der Umgebung des Konduktors ist die Lösung nicht unbedingt erforderlich.

Abbildung 4.4: Herangehensweise zur Ermittlung des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials im Zusammenhang mit Biot-Savart's Gesetz.

aus j_0 in Ω_0 und j in Ω_C genutzt. Die Region Ω_0 entfällt, dafür muss die differentielle Lösung von ϕ iterativ an die Integrallösung von A gekoppelt werden. Im Frequenzraum müssen zusätzlich, z. B. mit Hilfe der bereits erwähnten Quellterm-Linearisierung, die komplexen Anteile des Phasors von A über Iterationen korrigiert werden. Blockmatrizen können in diesem Fall auf Grund der Integralbeschreibung von A nicht genutzt werden.

4. Das magnetische Vektorpotential wird nicht über eine Lösung einer DGL ermittelt, sondern Biot-Savart's Gesetz wird implizit zur Ermittlung des totalen magnetischen Vektorpotentials A aus j_0 in Ω_0 und j in Ω_C auf Matrixebene (über Matrixkoeffizienten) genutzt. Auch hier entfällt die Region Ω_0 , aber die Kopplung von A und ϕ lässt sich, genau wie Kopplung der komplexen Anteile des Phasors von A im Frequenzbereich, auf Matrixebene adressieren. Die resultierende Systemmatrix für Gleichung (4.29) oder ein voll gekoppeltes System ist allerdings im Allgemeinen voll besetzt und es werden spezielle (direkte) Lösungsverfahren benötigt. Wenn die implizite Umsetzung nur für Gleichung (4.29) geschieht, sind auch hier Iterationen notwendig.

Im Rahmen dieser Arbeit kommen sowohl der erste als auch der zweite Fall zum Einsatz. Dabei ist der Zweite in Verbindung mit der FVM in *foam-extend* hinsichtlich der Gesamteffizienz als optimal zu betrachten, da dort die Vorteile und Nachteile, welche sich aus dem Einsatz von Biot-Savart's Gesetz ergeben, im Gleichgewicht stehen. Zudem findet man mit Gleichung (4.79) weitere Vereinfachungen: Ein struktureller Vergleich mit Gleichung (4.27) offenbart, dass sich beide Gleichungen im Kern nur durch die Quellterme „ $+\sigma\partial_t A_0$ “ in der Gleichung für \mathbf{a} und „ $-j_0$ “ in der Gleichung für \mathbf{A} unterscheiden. Das heißt mit anderen Worten, dass die Quelle des reduzierten magnetischen Vektorpotentials nur innerhalb des Konduktors liegt, während sich ein Teil der Quelle des totalen magnetischen Vektorpotentials auch in der nicht-leitfähigen Umgebung befindet. Dieser Umstand kann dahingehend zur Optimierung genutzt werden, dass bei ausschließlichem Interesse an einer Lösung von \mathbf{A} und ϕ in Ω_C , z. B. zur Bestimmung der Lorentz-Kraft \mathbf{f}_L oder der Joule-Wärme \dot{q} , die Verteilung von A_0 in Ω_C schlicht ignoriert werden kann.

Zur weiteren Reduktion der Rechenzeit kann ferner die Integralgleichung (4.80) nur auf dem Rand Γ_C ausgewertet werden, um das reduzierte magnetische Vektorpotential $A_0|_{\Gamma_C}$ auf der Konduktoroberfläche zu ermitteln. Über eine Dirichlet-Randbedingung lässt sich im Inneren des Konduktors anschließend die Lösung von A_0 über eine gegenüber Gleichung (4.78) reduzierte DGL

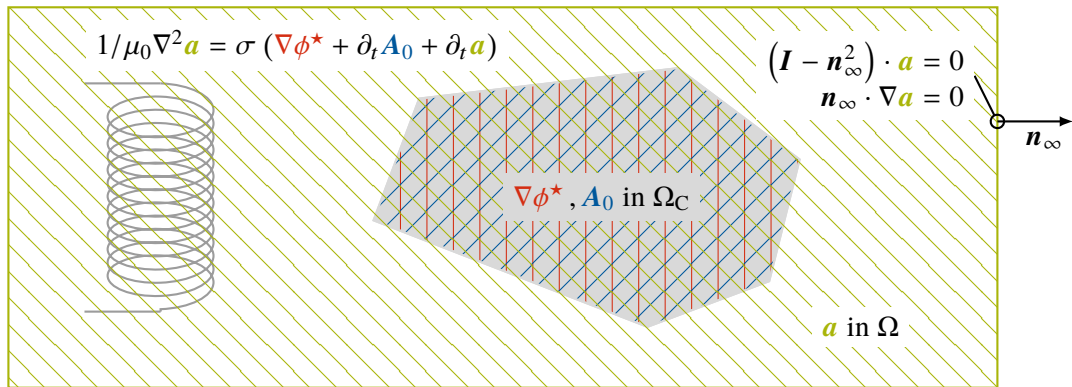
$$\Omega_C: \quad \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 A_0 = 0 \quad (4.81)$$

bestimmen, da dort gemäß Definition (4.25) die Quellstromdichte j_0 verschwindet. Dieses Vorgehen ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Das reduzierte magnetische Vektorpotential braucht in Ω_C sogar nur initial berechnet werden, solange keine geometrischen Änderungen auftreten.

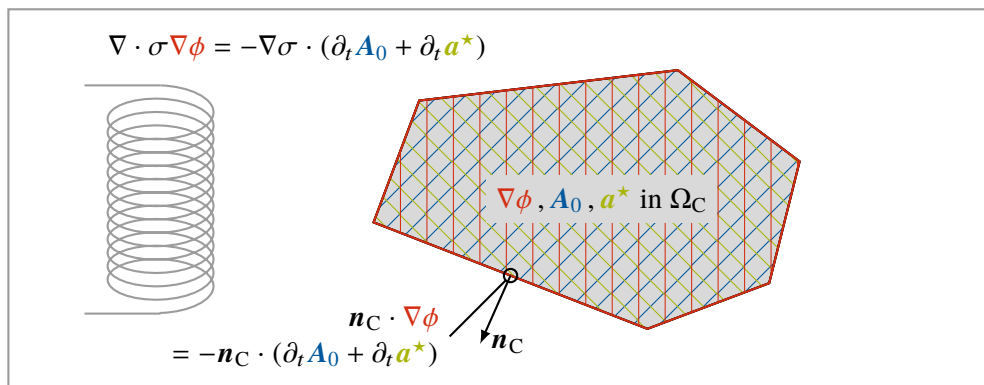
Für die Lösung von \mathbf{a} und ϕ kann sowohl im Zeit- als auch Frequenzbereich vorgegangen werden, wie es in Abschnitt 4.3.2 beschrieben wurde. Ausgehend von einem initialen $\nabla\phi^*$ und der Berechnung von A_0 gemäß Abbildung 4.4, löst man Gleichung (4.79) iterativ zusammen mit Gleichung (4.29). Abbildung 4.5 zeigt diese Vorgehensweise. Die Ähnlichkeit mit Abbildung 4.5 ist in einem direkten Vergleich offensichtlich. Mit der Lösung des reduzierten magnetischen Vektorpotentials und des elektrischen Potentials in Ω_C steht zusammen mit dem aufgeprägten magnetischen Vektorpotential auch die Lösung des entsprechenden elektrischen Feldes durch die Zeitableitungen von A_0 , \mathbf{a} und dem Gradienten von ϕ fest. Das totale magnetische Vektorpotential muss nicht gespeichert werden und ergibt sich jederzeit durch Superposition.

4.3.5 Induktormodellierung mit Biot-Savart's Gesetz

Für eine Erregerspule mit hinreichend kleiner Querschnittsfläche S_0 im Vergleich zu einer eigenen, charakteristischen Länge (z. B. dem Spulendurchmesser), ist es angemessen das Volumenintegral des Gesetzes von Biot-Savart (4.80) mit Hilfe eines Linienintegrals im dreidimensionalen Raum zu vereinfachen. Wird diese Art der Modellierung in Betracht gezogen, so muss jedoch auch sichergestellt sein, dass der Abstand zwischen Induktor und der leitfähigen Region ausreichend groß im Vergleich zur Abmessung der Querschnittsfläche ist. Sind diese Voraussetzungen erfüllt, kann in einem zusätzlichen Modellierungsschritt die Kurve zur Beschreibung der Spule durch eine feste Anzahl von



(a) Korrektur des reduzierten magnetischen Vektorpotentials in Ω . Das aufgeprägte magnetische Vektorpotential wird dazu einmalig in Ω_C über Biot-Savart's Gesetz bestimmt. Der Gradient des elektrischen Potentials wird dann genau wie in Abbildung 4.2a invers von Ω_C auf Ω abgebildet und explizit berücksichtigt, wodurch jede Komponente von A separat behandelt werden kann.



(b) Korrektur des Gradienten des elektrischen Potentials in Ω_C . Analog zu Abbildung 4.2b wird das reduzierte magnetische Vektorpotential dazu vorher von Ω auf Ω_C abgebildet und explizit berücksichtigt.

Abbildung 4.5: Semi-gekoppelter Ansatz zur Lösung der elektromagnetischen Problemstellung auf Grundlage des reduzierten magnetischen Vektorpotentials. Das illustrierte Vorgehen ist zwar für den Zeitbereich dargestellt, kann jedoch analog zu Abbildung 4.2 auch auf die komplexen Anteile Phasors von A im Frequenzbereich übertragen werden.

geraden, endlichen Linien approximiert werden. Diese Liniensegmente stellen dann letztlich Stücke stromdurchflossener Leiter dar, wie sie in Abbildung 4.6 skizziert sind.

Im beschränkten Rahmen kann auch eine Spule größeren Querschnittes auf ähnlich Weise modelliert werden, indem über Kurvenscharen z. B. deren Einhüllende (der Windungen) nachgebildet wird. Dazu nimmt man an, dass sich bei höheren Frequenzen ω_0 des Wechselstromes ein Großteil der Stromdichte j_0 auf der Induktoroberfläche konzentriert. Diese Annahme hängt allerdings nach Gleichung (4.47) von der Skintiefe $\delta_0 = \sqrt{2/(\sigma_0 \omega_0 \mu_0)}$ der Spule ab, welche gerade bei σ_0 eines hochleitfähigen Spulenwerkstoffes wie Kupfer besonders klein wird. Bei kleineren Frequenzen können die Kurvenscharen aber auch so positioniert werden, dass sie die Quellstromdichte j_0 gleichmäßig über den Querschnitt des Induktors verteilen. In der Praxis werden Induktionsspulen intern auch oft mit Wasser gekühlt – der Hohlraum kann dabei auch berücksichtigt werden.

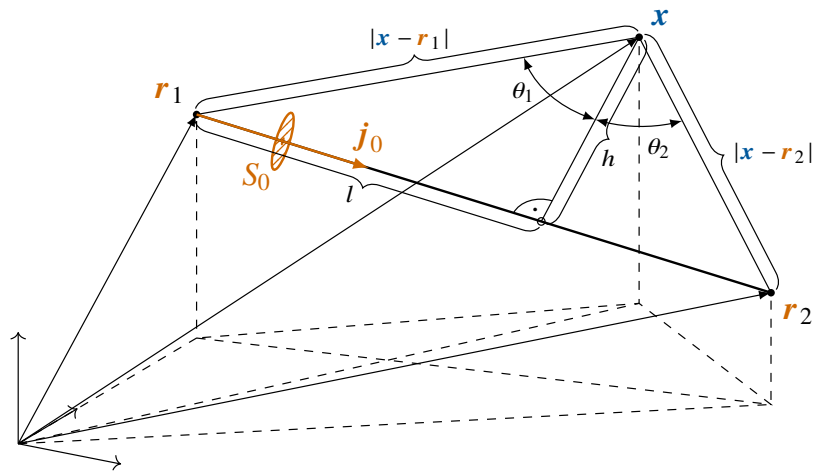


Abbildung 4.6: Geometrische Beziehungen an einem endlichen, stromdurchflossenen Leiter zwischen zwei Punkten \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 . Die Stromdichte \mathbf{j}_0 , welche sich gleichmäßig auf der verhältnismäßig kleinen Querschnittsfläche verteilt, erzeugt an einem entfernten Punkt \mathbf{x} ein magnetisches Feld $\mathbf{B}_0(\mathbf{x})$ und damit ein entsprechendes magnetisches Vektorpotential $\mathbf{A}_0(\mathbf{x})$.

Das reduzierte magnetische Vektorpotential an einem entfernten Punkt \mathbf{x} lässt sich für einen stromdurchflossenen Leiter durch Integration der Gleichung (4.80) über ein endliches Geradenstück errechnen:

$$\mathbf{A}_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\ln \left(\frac{\cos \theta_2 + \sin \theta_2 + 1}{\cos \theta_2 - \sin \theta_2 + 1} \right) - \ln \left(\frac{\cos \theta_1 - \sin \theta_1 + 1}{\cos \theta_1 + \sin \theta_1 + 1} \right) \right) S_0 \mathbf{j}_0. \quad (4.82)$$

Dabei erstreckt sich der Integrationsbereich vom Anfangspunkt \mathbf{r}_1 bis zum Endpunkt \mathbf{r}_2 . Die beiden Lotwinkel θ_1 und θ_2 , welche in Abbildung 4.6 eingezeichnet sind, ergeben sich aus den geometrischen Relationen

$$\sin \theta_1 = \frac{l}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_1|} \quad \sin \theta_2 = \frac{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| - l}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_2|} \quad (4.83a)$$

$$\cos \theta_1 = \frac{h}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_1|} \quad \cos \theta_2 = \frac{h}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_2|}, \quad (4.83b)$$

wobei die Länge l und Lothöhe h folgendermaßen definiert sind:

$$l = \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1) \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \quad (4.84a)$$

$$h = \sqrt{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_1|^2 - l^2}. \quad (4.84b)$$

In den meisten Anwendungsfällen ist die Stromdichte \mathbf{j}_0 in der Spule unbekannt. Indem das Produkt $S_0 \mathbf{j}_0$ in Gleichung (4.82) substituiert wird, ist aber auch eine direkte Beschreibung über einen harmonisch oszillierenden Strom I_0 mit der Amplitude \hat{I}_0 möglich:

$$S_0 \mathbf{j}_0 = \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} I_0 = \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \hat{I}_0 \cos(\omega_0 t - \alpha_0). \quad (4.85)$$

Als Abschlussbemerkung sei mit Erinnerung an Gleichung (4.40) noch erwähnt, dass im Frequenzbereich der Real- und Imaginärteil des Phasors der Stromdichte bzw. des Stromes über den Zusammenhang

$$I_{0_{\text{re}}} = \cos \alpha_0 \hat{I}_0 \quad (4.86a)$$

$$I_{0_{\text{im}}} = -\sin \alpha_0 \hat{I}_0 \quad (4.86b)$$

für beide Anteile separat ermittelt wird.

4.4 Diskontinuierliche Materialeigenschaften

Das Verhalten der elektromagnetischen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} hängt gemäß der Maxwell-Gleichungen (4.15) von den Materialeigenschaften der Permeabilität μ und Permittivität ε in Ω sowie der elektrischen Leitfähigkeit σ in Ω_C ab [vgl. Abbildung 4.1]. Bei technischen Anwendungen von Induktionsprozessen ist gerade die elektrische Leitfähigkeit die Voraussetzung zur Nutzung der sekundären Effekte magnetisch induzierter Wirbelströme [vgl. Kapitel 4 und Abschnitt 4.1.4]. Bisher wurden innerhalb dieses Kapitels nur stetige Änderung der elektrischen Leitfähigkeit σ in Gleichung (4.29) angenommen und nur nicht-magnetische Medien mit $\mu = \mu_0$ in Gleichung (4.27) betrachtet.

In vielen technischen Fällen spielen aber auch Magnetisierungseffekte eine Rolle. Eine Erweiterung der gezeigten Methoden für para- oder ferromagnetische Materialien, macht eine Verallgemeinerung von Gleichung (4.27) über Gleichung (4.22) bzw. Gleichung (4.23) erforderlich. Das führt jedoch allgemein zu einer diskontinuierlichen Permeabilität μ am Übergang dieser Medien und an der Grenze zu einer möglichen nicht-magnetischen Umgebung. Besteht die leitfähige Region zudem aus Teilbereichen verschiedener Materialien, wie in Abbildung 4.7 veranschaulicht, so ändert sich auch die elektrische Leitfähigkeit σ an den entsprechenden Übergängen sprunghaft. Die unstetige Änderung der Stoffeigenschaften hat direkt eine sprunghafte Änderung der magnetischen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} zur Folge. In Potentialform [vgl. Abschnitt 4.1.2] drückt sich dies für die Potentiale \mathbf{A} und ϕ wiederum in einem Verlust der Differenzierbarkeit aus.

Die Differentialoperatoren des Gradienten von $\nabla(1/\mu)$ aus Gleichung (4.23) und des Gradienten $\nabla\sigma$ aus Gleichung (4.29) können im kontinuierlichen Fall also nicht geschlossen auf Ω oder Ω_C angewendet, sondern müssen stattdessen stückweise auf separaten Gebieten und geeigneten Grenzbedingungen ausgewertet werden. Numerisch gesehen gibt es, neben der Möglichkeit zur Kopplung unterschiedlicher Teilgebiete, den alternativen Ansatz einer speziellen Diskretisierung. Obgleich beide Konzepte hinsichtlich der modellierten Physik äquivalent sind, hat eine angepasste Diskretisierung, welche diskontinuierliche Materialeigenschaften im diskreten Sinne korrekt abbildet, den Vorteil, dass selbst für sehr komplexe Geometrien leitfähiger oder magnetisierbarer Bereiche ein einfaches Aufsetzen von Simulationen gewährleistet ist. Zudem ist eine Gebietskopplung in *foam-extend* nicht gewünscht, da dort, wie in Abschnitt 4.3 erklärt, eine gleichzeitige Gebiets- und Gleichungskopplung im Frequenzbereich nicht realisierbar ist.

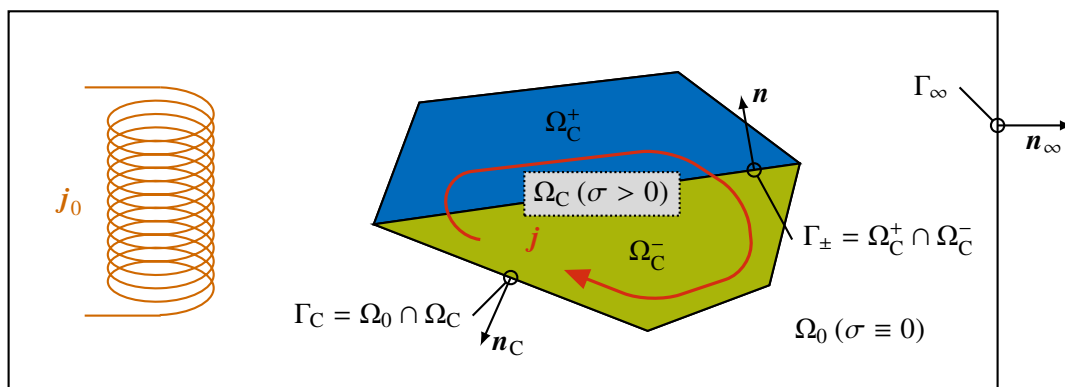


Abbildung 4.7: Beispiel einer idealisierten Konfiguration eines Induktionsprozesses mit Materialübergang: Wie in Abbildung 4.1 wird durch die Wechselstromdichte j_0 der Spule eine Wirbelstromdichte j im Konduktor erzeugt. Bei Γ_{\pm} gelten besondere Übergangsbedingungen infolge einer sprunghafte Änderung von Materialeigenschaften.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde daher in Anlehnung an die Methodik von Vukčević [2016]; Vukčević u. a. [2017] eine geschlossene, diskrete Modellierung entwickelt, bei der die Grenzbedingungen für \mathbf{E} und \mathbf{B} bzw. \mathbf{A} und ϕ infolge diskontinuierlicher Permeabilität μ und elektrischer Leitfähigkeit σ direkt in die aus Kapitel 3 bekannte Diskretisierung der Differentialoperatoren aus Gleichung (4.23) und (4.29) bzw. Gleichung (4.22) und (4.28) eingearbeitet werden.

Die grundlegende Idee findet man auch im Zusammenhang mit der Beschreibung von Strömungen mit freien Oberflächen unter dem Begriff der Pseudo-Fluid-Methode (Ghost Fluid Method, GFM). Bei dieser Technik werden schon im Diskretisierungsprozess einseitige Extrapolationen genutzt, sodass Diskontinuitäten letztlich in spezielle Schemata eingebettet werden [Fedkiw u. a. 1999; Huang u. a. 2007]. Die GFM wurde beispielsweise von Desjardins u. a. [2008]; Lalanne u. a. [2015] erfolgreich für inkompressible Strömungen eingesetzt. Eine sehr ähnliche Vorgehensweise wird in Johansen u. Colella [1998]; Crockett u. a. [2010] auch direkt unter der Bezeichnung einer eingebetteten Methode für freie Oberflächen vorgestellt, wobei dort tendenziell Verfahren höherer Genauigkeit zum Einsatz kommen. Tatsächlich hat jedoch Wang u. a. [2013] diesbezüglich darauf hingewiesen, dass der Unterschied beider Techniken nur formeller Natur ist. Obwohl die Grundidee der GFM universell ist, wurde sie bisher noch nicht für elektromagnetische Problemstellungen angewendet. Die Übertragung und Umsetzung der GFM im Sinne einer eingebetteten Diskretisierung für diese Zwecke wird daher im Folgenden vorgestellt. Da die GFM hier allerdings nicht in Verbindung mit einem Fluid auftritt, wird in dieser Arbeit die verallgemeinerte Bezeichnung einer eingebetteten Diskretisierungsmethode bevorzugt.

4.4.1 Grenzbedingungen am Übergang unterschiedlicher Medien

Ausgangspunkt zur mathematischen Beschreibung der Grenzbedingungen für die elektromagnetischen Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} , bzw. deren Potentiale \mathbf{A} und ϕ , ist eine Quantifizierung der sprunghaften Änderung

am Übergang unterschiedlicher Medien. Dazu wird zur weiteren Verwendung der Sprung-Operator

$$\llbracket \psi \rrbracket = \psi^+ - \psi^- \quad \text{mit} \quad \mathbf{n} = \mathbf{n}^- = -\mathbf{n}^+ \quad (4.87)$$

anhand einer allgemeinen skalar- oder vektorwertigen Funktion ψ eingeführt, wobei die Markierungen „+“ und „-“ jeweils eines zweier in Kontakt stehender Medien repräsentieren (vgl. [Vukčević u. a. 2017, Gleichungen (3), (5) und (6)], [Huang u. a. 2007, Gleichung (12)] und [Desjardins u. a. 2008, Abschnitt 2.1]). Auf der entsprechenden Seite des Übergangs symbolisiert dabei die Kennzeichnung in Gleichung (4.87) jeweils den Wert in infinitesimal kleinem Abstand zur Grenzfläche Γ_{\pm} des Materialübergangs. [vgl. Abbildung 4.7].

Als essentielles Hilfsmittel der FVM wurde in Abschnitt 3.3 über Gleichung (3.23) bereits die verallgemeinerte Form des Gaußschen Integralsatzes [Anhang A.3.6, Gleichung (A.41)] genutzt. Damit lassen sich für ein Feld ψ , auf welches ein Differentialoperator wie der Gradient, die Divergenz oder die Rotation angewendet wird, auch Kompatibilitätsbedingungen ableiten. Durch geschickte zweiseitige Integration eines zur Grenzfläche Γ_{\pm} mittig und normal ausgerichteten Zylinders ergeben sich im Grenzfall eines verschwindenden Volumens je nach Differentialoperator beispielsweise Stetigkeitsbedingungen für die Normalkomponenten (Divergenz), Tangentialkomponenten (Rotation) oder gar alle Komponenten (Gradient).

Eine detaillierte Ableitung der einzelnen Kompatibilitäts- bzw. Grenzbedingungen für die elektromagnetischen Felder \mathbf{B} und \mathbf{E} in Abhängigkeit der Permeabilität μ , Permittivität ε und der elektrischen Leitfähigkeit σ findet man beispielsweise in Jackson [1975, Abschnitt 1.5]. Zur Herleitung der Beziehungen an einer Grenzfläche wird üblicherweise die idealisierte Flächenstrom- \mathbf{j}_S und Flächenladungsdichte ϱ_S eingeführt um beispielsweise perfekte Leiter effizient modellieren zu können. Mit Hilfe des Sprung-Operators (4.87) lauten die Grenzbedingungen für die quasistatische Form der Maxwell-Gleichungen (4.15) und der Ladungserhaltung (4.16) für \mathbf{B} , \mathbf{E} und \mathbf{j} folgendermaßen:

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \mathbf{B} = \mathbf{j} \quad \Rightarrow \quad \llbracket \mathbf{n} \times \frac{1}{\mu} \mathbf{B} \rrbracket = \mathbf{j}_S \quad (4.88a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \Rightarrow \quad \llbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{B} \rrbracket = 0 \quad (4.88b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \llbracket \mathbf{n} \times \mathbf{E} \rrbracket = \mathbf{0} \quad (4.88c)$$

$$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{E} = \varrho \quad \Rightarrow \quad \llbracket \mathbf{n} \cdot \varepsilon \mathbf{E} \rrbracket = \varrho_S \quad (4.88d)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad \Rightarrow \quad \llbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{j} \rrbracket = 0. \quad (4.88e)$$

Wie jedoch in Tai [1991, Abschnitt 3-4] oder Vanderlinde [2004, Abschnitt 7.4 und 8.1.1] erläutert wird, ist beim Übergang zwischen nicht perfekten Leitern eine Nutzung der Flächenstromdichte in Gleichung (4.88a) nicht sinnvoll. Im Rahmen dieser Arbeit ist eine Auflösung des Materialübergangs zudem bewusst gewünscht, d. h. der Flächenstromdichte kommt keine Bedeutung zu: $\mathbf{j}_S \equiv \mathbf{0}$. Nur bei sehr hohen Kreisfrequenzen ω_0 der Quellstromdichte \mathbf{j}_0 nach Gleichung (4.40) wäre eine Oberflächen-Modellierung sinnvoll.

Für das magnetische Vektorpotential \mathbf{A} und das elektrische Potential ϕ aus Gleichung (4.18) gelangt man, unter Anwendung des Ohmschen Gesetzes (4.17), über Gleichung (4.22) und Gleichung (4.28)

zu den folgenden Grenzbedingungen:

$$\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{B} = \mathbf{0} \Rightarrow \llbracket \mathbf{n} \times \mathbf{A} \rrbracket = 0 \quad (4.89a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \Rightarrow \llbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \rrbracket = 0 \quad (4.89b)$$

$$\Rightarrow \llbracket \mathbf{A} \rrbracket = 0 \quad (4.89c)$$

$$-\nabla \cdot \frac{1}{\mu} \left(\nabla \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{A})^T + (\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{I} \right) = \mathbf{j} \Rightarrow \llbracket \mathbf{n} \cdot \frac{1}{\mu} \nabla \mathbf{A} \rrbracket = - \llbracket \mathbf{n} \cdot \frac{1}{\mu} \left((\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{I} - (\nabla \mathbf{A})^T \right) \rrbracket \quad (4.89d)$$

$$\nabla \phi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{E} = \mathbf{0} \Rightarrow \llbracket \phi \rrbracket = 0 \quad (4.89e)$$

$$\nabla \cdot \sigma \left(\nabla \phi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0 \Rightarrow \llbracket \mathbf{n} \cdot \sigma \nabla \phi \rrbracket = - \llbracket \mathbf{n} \cdot \sigma \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \rrbracket. \quad (4.89f)$$

Sowohl das elektrische Potential als auch alle Komponenten des magnetischen Vektorpotentials sind über die Grenzfläche Γ_{\pm} stetig. Die Normalengradienten von \mathbf{A} und ϕ sind hingegen unstetig, wobei Gleichung (4.89d) und (4.89f) die zugehörigen Sprungbedingungen in Abhängigkeit der Permeabilität μ und der elektrischen Leitfähigkeit σ darstellen. Für ein lokales kartesisches Koordinatensystem mit dem Normalenvektor \mathbf{n} und den beiden Tangentialvektoren \mathbf{s} und \mathbf{t} als Basis [vgl. Anhang A], lassen sich die Grenzbedingungen mit Kenntnis der Stetigkeit der Potentiale und deren Tangentialgradienten noch weiter konkretisieren. Dazu wird für das magnetische Vektorpotential die Gleichung (4.89d) von rechts per innerem Produkt mit \mathbf{n} , \mathbf{s} oder \mathbf{t} multipliziert, die Identität $\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{I} : \nabla \mathbf{A} = \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{A} + \mathbf{ss} : \nabla \mathbf{A} + \mathbf{tt} : \nabla \mathbf{A}$ angewendet und anschließend die Orthogonalität der Basis ausgenutzt:

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{nn} : \frac{1}{\mu} \nabla \mathbf{A} \rrbracket &= - \llbracket \frac{1}{\mu} \left((\nabla \cdot \mathbf{A}) \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}}_{=1} - \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{A} \right) \rrbracket \\ &= - \llbracket \frac{1}{\mu} \rrbracket (\mathbf{ss} : \nabla \mathbf{A} + \mathbf{tt} : \nabla \mathbf{A}) \end{aligned} \quad (4.90a)$$

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{ns} : \frac{1}{\mu} \nabla \mathbf{A} \rrbracket &= - \llbracket \frac{1}{\mu} \left((\nabla \cdot \mathbf{A}) \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}}_{=0} - \mathbf{ns} : \nabla \mathbf{A} \right) \rrbracket \\ &= - \llbracket \frac{1}{\mu} \rrbracket (-\mathbf{ns} : \nabla \mathbf{A}) \end{aligned} \quad (4.90b)$$

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{nt} : \frac{1}{\mu} \nabla \mathbf{A} \rrbracket &= - \llbracket \frac{1}{\mu} \left((\nabla \cdot \mathbf{A}) \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{t}}_{=0} - \mathbf{nt} : \nabla \mathbf{A} \right) \rrbracket \\ &= - \llbracket \frac{1}{\mu} \rrbracket (-\mathbf{nt} : \nabla \mathbf{A}) \end{aligned} \quad (4.90c)$$

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \rrbracket &= - \llbracket \sigma \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) \rrbracket \\ &= - \llbracket \sigma \rrbracket \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right). \end{aligned} \quad (4.90d)$$

Stetige Anteile können jeweils aus dem Sprung-Operator auf der rechten Seite herausgezogen werden. Durch die Gleichungen (4.90a) bis (4.90c) wird deutlich, dass die sprunghafte Änderung des

Normalgradienten aller Komponenten von \mathbf{A} bei einem Materialübergang von den (stetigen) Tangentialgradienten abhängt. Speziell in Gleichung (4.90a) wird spätestens an dieser Stelle auch ersichtlich, inwieweit der mit Gleichung (4.21) eingeführte Zusatzterm die Quellfreiheit von \mathbf{A} im Falle sich sprunghaft ändernder Permeabilität bewirkt. Anstelle von Gleichung (4.90a) lässt sich nämlich auch vereinfacht $[[\mu^{-1}\nabla \cdot \mathbf{A}]] = 0$ schreiben [vgl. Bíró u. Preis 1989, Abschnitt II.2]. Die Diskontinuität im Normalgradienten von ϕ hängt dagegen von der zeitlichen Änderung des magnetischen Vektorpotentials in Normalenrichtung ab. In Gleichung (4.90d) wird gegenüber Gleichung (4.89f) lediglich die Stetigkeit von \mathbf{A} berücksichtigt.

Zusammenfassend lässt sich also festhalten, dass sich am Übergang zwischen unterschiedlichen Medien die Normalgradienten der stetigen Potentiale \mathbf{A} und ϕ gemäß

$$[[\mathbf{n} \cdot \frac{1}{\mu} \nabla \mathbf{A}]] = - [[\frac{1}{\mu}]] \mathbf{n} \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{A})\mathbf{I} - (\nabla \mathbf{A})^T) \quad (4.91a)$$

$$[[\mathbf{n} \cdot \sigma \nabla \phi]] = - [[\sigma]] \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (4.91b)$$

unstetig verhalten. Innerhalb des nächsten Abschnittes wird erklärt, wie Sprungstellen dieses Typs bei einer geschlossenen numerischen Herangehensweise ohne explizite Gebietsaufteilung berücksichtigt werden können.

4.4.2 Eingebettete Diskretisierung von Materialgrenzen

Über die verallgemeinerte Darstellung

$$[[\mathbf{n} \cdot \mathbf{G}]] = 0 \quad (4.92a)$$

$$[[\psi]] = h \quad (4.92b)$$

$$\nabla \cdot \gamma (\nabla \psi + \mathbf{G}) + s_U = 0 \quad \Rightarrow \quad [[\mathbf{n} \cdot \gamma \nabla \psi]] = - [[\gamma]] \mathbf{n} \cdot \mathbf{G} . \quad (4.92c)$$

für die skalar- oder vektorwertige Funktion ψ lassen sich die Gleichungen (4.89d) und (4.89f) bzw. die Gleichungen (4.91a) und (4.91b) als Spezialfälle wiedergewinnen. Mit $\gamma \hat{=} \mu^{-1}$, $h \equiv 0$, $s_U \hat{=} \mathbf{j}$ und $\mathbf{G} \hat{=} (\nabla \cdot \mathbf{A})\mathbf{I} - (\nabla \mathbf{A})^T$ für das magnetische Vektorpotential sowie $\gamma \hat{=} \sigma$, $h \equiv 0$, $s_U \equiv 0$ und $\mathbf{G} \hat{=} \partial_t \mathbf{A}$ im Falle des elektrischen Potentials, unterscheiden sich beide Bedingungen im Wesentlichen durch die Abhängigkeit der stetigen Gradienten-Sprungfunktion \mathbf{G} . Die Sprungbedingung für \mathbf{A} bewirkt eine zusätzliche Kopplung der kartesischen Komponenten des magnetischen Vektorpotentials, während aus der Grenzbedingung für ϕ eine Verstärkung der Kopplung der Potentiale untereinander resultiert.

In Abschnitt 4.2.4 wurden für die Potentialform der Maxwell-Gleichungen im Frequenzbereich alle relevanten Kopplungsmechanismen analysiert. Unter der Voraussetzung einer segregierten Lösung der Potentiale ist die implizite Kopplung der Komponenten von \mathbf{A} nicht gewünscht, da sonst die Speichereffizienz der in Abschnitt 4.3 vorgestellten Lösungsmethode verloren ginge. Da die Kopplung der beiden Potentiale untereinander jedoch bereits explizit erfolgt, ist die Grenzbedingung am Übergang unterschiedlicher elektrischer Leitfähigkeiten hinsichtlich eines geeigneten Lösungsansatzes unkritisch. Insofern wird die Berücksichtigung der Sprungbedingungen in beiden Fällen über eine explizite (d. h. eine iterative) Methode umgesetzt.

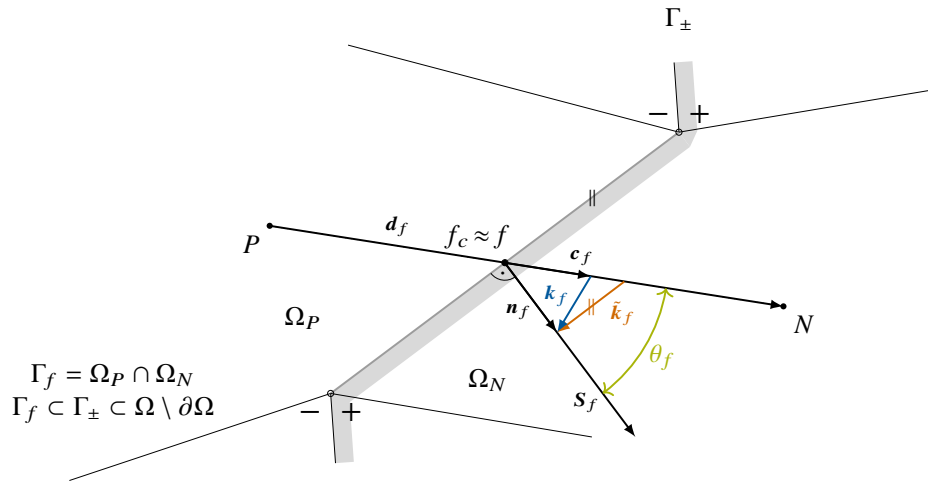


Abbildung 4.8: Materielle Grenzfläche f zwischen zwei benachbarten Zellen P und N jeweils unterschiedlicher Medien $-$ und $+$. Wie in Abbildung 3.2 sind hier der Orthonormalenvektor \mathbf{n}_f , der Zellabstansvektor \mathbf{d}_f und dessen Normierung \mathbf{c}_f gezeigt. Für den Schnittpunkt f_c von \mathbf{d}_f und der Oberfläche $\Gamma_f \subset \Gamma_{\pm}$ wird angenommen, er verlaufe näherungsweise durch den Schwerpunkt der Fläche: $\mathbf{x}_f \approx \mathbf{x}_{f_c} \Leftrightarrow \mathbf{o}_f \approx \mathbf{0}$. Die Schiefe des Gitters wird mit Verweis auf Gleichung (3.13) näherungsweise vernachlässigt. Die Nicht-Orthogonalität kann neben dem Vektor \mathbf{k}_f auch über den senkrecht zu \mathbf{n}_f verlaufenden Vektor $\tilde{\mathbf{k}}_f$ beschreiben werden.

Diskrete materielle Grenzfläche

Bei der örtlichen Diskretisierung des Lösungsgebietes Ω [siehe Abschnitt 3.2] wird die Grenzfläche Γ_{\pm} in einzelne Teilflächen zerlegt. Genauer setzt sie sich für eine Konfiguration nach Abbildung 4.1 in diskreter Form aus einer Menge interner Zell-Grenzflächen $\Gamma_f \subset \Gamma_{\pm}$ mit $\Gamma_f = \Omega_P \cap \Omega_N$ und $\Gamma_{\pm} \subset \Omega \setminus \partial\Omega$ zusammen. Dabei werden zur weiteren Behandlung der Grenzbedingungen (4.92) an einer materiellen Grenzfläche f die bereits bekannten Bezeichnungen P , für eine an dieser Teilfläche angrenzende Zelle und N für die gegenüberliegende Nachbarzelle genutzt. In Abbildung 4.8 ist solch eine materielle Grenzfläche schematisch dargestellt. Weiterhin sei das Material mit der Kennzeichnung „ $-$ “ der Seite der Zelle P und das Material mit der Markierung „ $+$ “ der Seite der Zelle N fest zugeordnet.

Die Bedingungen (4.92) an solch einer materiellen Grenzfläche stehen nun im direkten Widerspruch zu der Annahme der linearen Variation der FVM (3.16). Für die Diskretisierung von Gleichung (4.23) und (4.29) muss folglich bei Existenz eines abrupten Materialübergangs berücksichtigt werden, dass die wesentliche Voraussetzung für die lineare Interpolation aus Gleichung (3.31) sowie die zentrale Differenz nach Gleichung (3.33) nicht mehr erfüllt ist. Letztere ist aber, wie aus Abschnitt 3.3.6 bekannt, die Basis für die Diskretisierung des erweiterten Laplace-Operators, welcher ja gerade das Kernelement bei der Ableitung der Grenzbedingungen in Gleichung (4.92c) darstellt. Die Idee ist es also im Weiteren, die der FVM zugrundeliegende Annahme linear variierender Felder lokal, d. h. an der materiellen Grenzfläche, zu revidieren. Dies ist möglich, indem sowohl die lineare Interpolation als auch die zentrale Differenz mit Hilfe der Übergangsbedingungen (4.92a) bis (4.92c) ersetzt werden. Dieser grundlegende Ansatz ähnelt der Herangehensweise in Vukčević u. a. [2017, Abschnitt 4] für Strömungen mit freier Oberfläche, wobei der Unterschied zu der vorliegenden Arbeit in der Betrachtung

anderer Sprungbedingungen liegt. Das Prinzip der GFM, bzw. der eingebetteten Diskretisierung im weiteren Sinne, wird in dieser Arbeit erstmalig für elektromagnetische Anwendungen genutzt.

Einseitige Gradientenberechnung

Der erste Schritt zur Umsetzung der eingebetteten Diskretisierung der Grenzbedingungen (4.92) ist die Ableitung einer geeigneten (nicht-linearen) Interpolationsmethode. Über Gleichung (4.92b) und die zusätzlich verfügbare Information aus Gleichung (4.92c) lassen sich entsprechende Werte der Funktion ψ durch beidseitig stückweise lineare Gradientenberechnung auf der Grenzfläche bestimmen. Zur Ableitung einer solchen Interpolationsvorschrift werden die Beziehungen an einer internen Grenzfläche aus Abbildung 3.2 aufgegriffen. Weiterhin sei noch mal an Abschnitt 3.2 erinnert, wo erklärt wurde, dass die Gitterqualität in *OpenFOAM* durch die zwei Eigenschaften der Schiefe und der Nicht-Orthogonalität charakterisiert wird.

Wie bei der Diskretisierung des erweiterten Laplace-Operators (Diffusionsterm) aus Abschnitt 3.3.6 wird auch hier die Schiefe des Gitters gemäß Gleichung (3.11) mit Verweis auf die Voraussetzung einer hinreichend guten Gitterqualität nach Gleichung (3.13) aus Konsistenzgründen unberücksichtigt. Unter dieser Annahme fällt, wie in Abbildung 4.8 gezeigt, der Schnittpunkt f_c und f näherungsweise zusammen: $\mathbf{x}_{f_c} \approx \mathbf{x}_f$ [vgl. Abbildung 3.2].

Da nicht-orthogonale Gitter eher die Regel als die Ausnahme sind, ist die Berücksichtigung der Nicht-Orthogonalität bei der Diskretisierung wichtig. Eine entsprechende Korrektur zur Bestimmung eines Wertes von ψ auf der materiellen Grenzfläche erfolgt jedoch, im Gegensatz zu der Aufteilung des Normalenvektors aus Gleichung (3.65), durch Einsatz des über-relaxierten nicht-orthogonalen Korrekturvektors

$$\tilde{\mathbf{k}}_f = \mathbf{k}_f + (1 - \sec \theta_f) \mathbf{c}_f \quad (4.93)$$

mit

$$\mathbf{n}_f = \sec \theta_f \mathbf{c}_f + \tilde{\mathbf{k}}_f. \quad (4.94)$$

In Abbildung 4.8 ist der tangential zur Grenzfläche verlaufende Vektor $\tilde{\mathbf{k}}_f$ eingezeichnet. Wird diese Zerlegung herangezogen um die Gleichungen (4.92a) und (4.92c) für eine diskrete Grenzfläche f umzuformulieren, so erhält man:

$$\llbracket \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{G}_f \rrbracket = 0 \quad (4.95a)$$

$$\llbracket \psi_f \rrbracket = h_f \quad (4.95b)$$

$$\llbracket \mathbf{c}_f \cdot \gamma_f \{ \nabla \psi \}_f \rrbracket = - \llbracket \gamma_f \rrbracket \cos \theta_f \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{G}_f. \quad (4.95c)$$

Darin wurde bereits ausgenutzt, dass der Sprung des Anteils in Richtung von $\tilde{\mathbf{k}}_f$ auf Grund der Parallelität zu Γ_{\pm} verschwindet. Durch anschließende Auswertung des Sprung-Operators aus Gleichung (4.87)

gelangt man weiter zur Darstellung

$$\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{G}^+ - \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{G}^- = 0 \quad (4.96a)$$

$$\psi_f^+ - \psi_f^- = h_f \quad (4.96b)$$

$$\gamma_f^+ \mathbf{c}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f^+ - \gamma_f^- \mathbf{c}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f^- = -(\gamma_f^+ - \gamma_f^-) \cos \theta_f \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{G}_f. \quad (4.96c)$$

Da angenommen wird, dass die Punkte f und f_c näherungsweise zusammenfallen, können die beiden Gradiententerme in Gleichung (4.96c) jeweils einseitig aus der Änderung von ψ zwischen Mittelpunkt von Zelle und Fläche, also entlang \overline{fN} oder \overline{Pf} , linear approximiert werden:

$$\mathbf{c}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f^- \approx \frac{(\psi_f^- - \psi_P)}{\overline{Pf}} = \frac{(\psi_f^+ - \psi_P)}{\overline{Pf}} - \frac{h_f}{\overline{Pf}} \quad (4.97a)$$

$$-\mathbf{c}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f^+ \approx \frac{(\psi_f^+ - \psi_N)}{\overline{fN}} = \frac{(\psi_f^- - \psi_N)}{\overline{fN}} + \frac{h_f}{\overline{fN}}. \quad (4.97b)$$

Wird ergänzend angenommen, dass sich die Materialeigenschaften entlang des Grenzübergangs \overline{fN} und \overline{Pf} nicht verändern

$$\gamma_f^- = \gamma_P \quad (4.98a)$$

$$\gamma_f^+ = \gamma_N, \quad (4.98b)$$

so findet man nach Kombination der Gleichungen (4.96b) bis (4.98b) die mit den Grenzbedingungen konsistenten Ausdrücke für die Werte im Schwerpunkt einer materiellen Grenzfläche. Interessanterweise können diese Beziehungen jeweils über

$$\widehat{\psi}_f^- \approx \widehat{w}_f \psi_P + (1 - \widehat{w}_f) \psi_N + \widehat{\psi}_U^- \quad (4.99a)$$

$$\widehat{\psi}_f^+ \approx \widehat{w}_f \psi_P + (1 - \widehat{w}_f) \psi_N + \widehat{\psi}_U^+ \quad (4.99b)$$

durch

$$\widehat{w}_f = \frac{\gamma_P \overline{w}_f}{\overline{\gamma}_f} \quad \text{und} \quad \widehat{\psi}_U = \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\overline{\gamma}_f} \overline{w}_f (1 - \overline{w}_f) \frac{\cos \theta_f}{S_f \delta_f} \{J\}_f^\circ, \quad (4.100)$$

sowie

$$\widehat{\psi}_U^- = \widehat{\psi}_U - (1 - \widehat{w}_f) h_f \quad (4.101a)$$

$$\widehat{\psi}_U^+ = \widehat{\psi}_U + \widehat{w}_f h_f \quad (4.101b)$$

in Form der gewichteten Interpolation gemäß Gleichung (3.30) ausgedrückt werden. Darin ist zur Vereinfachung bereits die lineare Interpolation von γ mit $\overline{\gamma}_f = \overline{w}_f \gamma_P + (1 - \overline{w}_f) \gamma_N$ nach Gleichung (3.31) eingeflossen, wobei die \overline{w}_f die zugehörigen Gewichte aus Gleichung (3.32) repräsentieren. Die neu eingeführte Größe $\{J\}_f^\circ = \{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{G}_f\}^\circ$ stellt in Anlehnung an die bekannte Definition aus Gleichung (3.36) eine Art (expliziten) Fluss der Gradienten-Sprungfunktion zu einem vorherigen Iterations- oder Zeit-

schritt dar. Zur Erinnerung sei noch hinzugefügt, dass es sich bei S_f um den Flächennormalenvektor, bei S_f um den Flächeninhalt von Γ_f und bei δ_f um den Delta-Koeffizienten (3.5) bzw. inversen Betrag von \mathbf{d}_f handelt.

Mit der Kenntnis über die Stetigkeit des Feldes ψ gemäß Gleichung (4.96b) mit $h_f = 0$, welches ja repräsentativ für die Potentiale \mathbf{A} und ϕ steht, ergibt sich jedoch offensichtlich nur ein Wert auf der Fläche:

$$\psi_f = \psi_f^- = \psi_f^+. \quad (4.102)$$

Statt der individuellen Interpolationsvorschriften (4.99) findet man im stetigen Fall also nur

$$\widehat{\psi}_f \approx \widehat{w}_f \psi_P + (1 - \widehat{w}_f) \psi_N + \widehat{\psi}_U. \quad (4.103)$$

Dazu bietet Abbildung 4.9 einen visuellen Eindruck der Gleichungen (4.97a), (4.97b) und (4.102). Nach Einsetzen der Gewichte des Korrekturterms aus Gleichung (4.100) folgt schließlich:

$$\psi_f \approx \frac{\gamma_P \overline{w}_f}{\overline{\gamma}_f} \psi_P + \frac{\gamma_N}{\overline{\gamma}_f} (1 - \overline{w}_f) \psi_N + \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\overline{\gamma}_f} \overline{w}_f (1 - \overline{w}_f) \frac{\cos \theta_f}{S_f \delta_f} \{J\}_f^\circ. \quad (4.104)$$

Wie in Abschnitt 3.4 beschrieben, ist damit für stetige ψ , also auch für die elektromagnetischen Potentiale \mathbf{A} und ϕ , eine explizite Berechnung des Gradienten, der Divergenz oder der Rotation laut Gleichung (3.73) direkt möglich. Aber auch die zur impliziten Diskretisierung genutzten Matrixkoeffizienten des Konvektionsterms in Gleichung (3.61) oder eines einfachen Divergenzoperators lassen sich über Gleichung (3.30) bereits bestimmen.

Extrapolation über die Grenzfläche

Die zweite Maßnahme zur Realisierung einer eingebetteten Diskretisierung der Grenzbedingungen (4.92) ist die Entwicklung eines geeigneten Ersatzes für die zentrale Differenz (3.33), welche zur Diskretisierung des Diffusions- bzw. erweiterten Laplace-Operators in Gleichung (3.67) benötigt wird. Durch die Unstetigkeit der Normalenableitung von ψ an der materiellen Grenzfläche existieren für beide Seiten des Übergangs separate Gradienten. Indirekt wurden diese bereits zur Bestimmung der gewichteten Interpolation im vorhergehenden Abschnitt genutzt.

Ein Einsetzen der gewichteten Interpolation gemäß der Gleichungen (4.99a) und (4.99b) in die Gleichungen (4.97a) und (4.97b) liefert unmittelbar eine Berechnungsvorschrift für die Gradienten in Richtung des normierten Zellabstandsvektors \mathbf{c}_f :

$$\mathbf{c}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f^- \approx \delta_f \frac{1 - \widehat{w}_f}{1 - \overline{w}_f} \left(\psi_N - \psi_P + \frac{1}{1 - \widehat{w}_f} \widehat{\psi}_U - h_f \right) \quad (4.105a)$$

$$-\mathbf{c}_f \cdot \{\nabla \psi\}_f^+ \approx \delta_f \frac{\widehat{w}_f}{\overline{w}_f} \left(\psi_P - \psi_N + \frac{1}{\widehat{w}_f} \widehat{\psi}_U + h_f \right). \quad (4.105b)$$

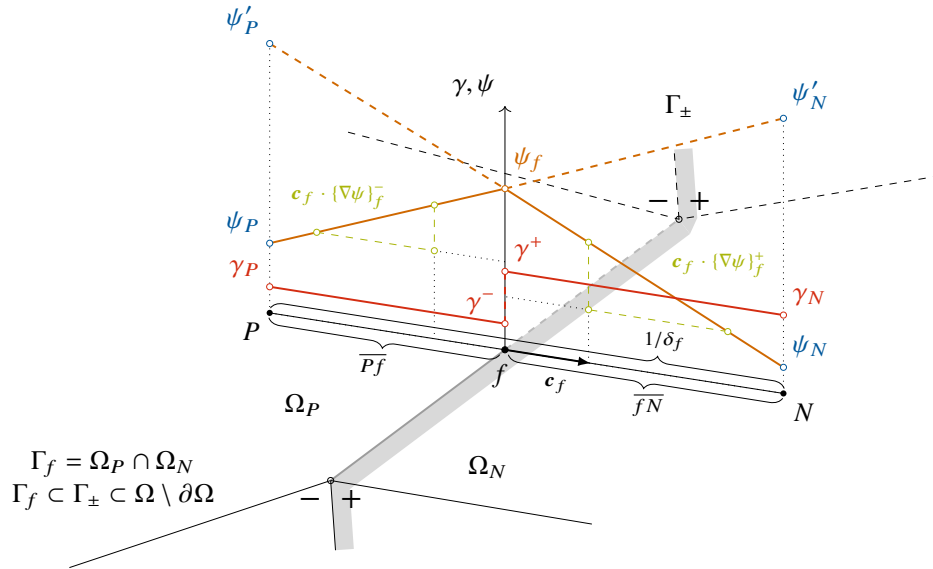


Abbildung 4.9: Veranschaulichung zur linearen Extrapolation von ψ an einer materiellen Grenzfläche f beim Übergang von einer Zelle P (Material „-“) zur Nachbarzelle N (Material „+“). Dargestellt ist der nicht-lineare Verlauf zwischen ψ_P und ψ_N über ψ_f auf Grund der Diskontinuität der beidseitig lokal konstant angenommenen Materialeigenschaft γ . Ein Ersatz für die Idee der zentralen Differenz (3.33) findet man durch die jeweils extrapolierten Pseudo-Werte ψ'_P und ψ'_N .

Wesentlich anschaulicher lässt sich deren Herleitung jedoch anhand der entlang \overline{fN} oder \overline{Pf} über die Grenzfläche hinaus extrapolierten Pseudo-Werte

$$\psi'_N = \psi_f^- + \frac{\psi_f^- - \psi_P}{\overline{Pf}} \overline{fN} = \frac{1 - \widehat{w}_f}{1 - \overline{w}_f} \left(\psi_N - \psi_P + \frac{1}{1 - \widehat{w}_f} \widehat{\psi}_U - h_f \right) + \psi_P \quad (4.106a)$$

$$\psi'_P = \psi_f^+ + \frac{\psi_f^+ - \psi_N}{\overline{fN}} \overline{Pf} = \frac{\widehat{w}_f}{\overline{w}_f} \left(\psi_P - \psi_N + \frac{1}{\widehat{w}_f} \widehat{\psi}_U + h_f \right) + \psi_N \quad (4.106b)$$

wieder in Form einer zentralen Differenz (3.33)

$$c_f \cdot \{\nabla\psi\}_f^- \approx \delta_f (\psi'_N - \psi_P) \quad (4.107a)$$

$$-c_f \cdot \{\nabla\psi\}_f^+ \approx \delta_f (\psi'_P - \psi_N). \quad (4.107b)$$

formulieren. Das zugrundeliegende Prinzip ist in Abbildung 4.9 für den stetigen Fall von ψ mit $h_f = 0$ abgebildet. Die Pseudo-Werte ψ'_N und ψ'_P fungieren dabei auf der jeweils gegenüberliegenden Seite der Grenzfläche als reines Hilfsmittel. Die zentrale Differenz ist intuitiver und bei der technischen Implementierung in *OpenFOAM* bzw. *foam-extend* äußerst hilfreich.

Zur näheren Analyse der Bildungsvorschriften (4.105) und (4.107) und deren Konsequenzen für die Diskretisierung des erweiterten Laplace-Operators, ist es sinnvoll die Gewichte und den Korrekturterm aus Gleichung (4.100) wieder heranzuziehen. Werden diese nämlich in die Gleichungen (4.105a) und (4.105b) bzw. Gleichungen (4.107a) und (4.107b) eingearbeitet und zusätzlich Gleichung (4.102) berücksichtigt, so fallen einige Vereinfachungen an:

$$c_f \cdot \{\nabla\psi\}_f^- \approx \delta_f \frac{\gamma_N}{\overline{\gamma}_f} (\psi_N - \psi_P) + \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\overline{\gamma}_f} \overline{w}_f \frac{\cos \theta_f}{S_f} \{J\}_f^\circ \quad (4.108a)$$

$$-\mathbf{c}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f^+ \approx \delta_f \frac{\gamma_P}{\bar{\gamma}_f} (\psi_P - \psi_N) + \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\bar{\gamma}_f} (1 - \bar{w}_f) \frac{\cos \theta_f}{S_f} \{J\}_f^\circ. \quad (4.108b)$$

Für eine vollständige Auswertung des diskreten Oberflächenintegrals materieller Grenzflächen aus Gleichung (3.64) fehlt an dieser Stelle nur noch eine geeignete nicht-orthogonale Korrektur. Zu deren Umsetzung wird der Korrekturvektor \mathbf{k}_f gegenüber Gleichung (3.65) zusätzlich mit

$$\mathbf{k}_f^\perp = \mathbf{n}_f \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{k}_f \quad (4.109a)$$

$$\mathbf{k}_f^\parallel = (\mathbf{I} - \mathbf{n}_f \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{k}_f = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_f^\perp \quad (4.109b)$$

in einen bezüglich Γ_f parallelen und normalen Anteil

$$\mathbf{n}_f = \mathbf{c}_f + \mathbf{k}_f^\perp + \mathbf{k}_f^\parallel \quad (4.110)$$

zerlegt [Anhang A.2.3, Gleichung (A.18) und Gleichung (A.19)], um der Diskontinuität des Gradienten in Richtung \mathbf{n}_f Rechnung zu tragen. Mit den Gleichungen (4.108a) und (4.108b) lautet der Beitrag für innere Grenzflächen am Übergang zweier Medien als Teil von Gleichung (3.64) schließlich:

$$\begin{aligned} \sum_f^\times \gamma_f^- S_f \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f^- &\approx \sum_f^\times \tilde{\gamma}_f S_f \delta_f (\psi_N - \psi_P) + \sum_f^\times \gamma_P \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\bar{\gamma}_f} \bar{w}_f \cos \theta_f \{J\}_f^\circ \\ &+ \sum_f^\times \gamma_P S_f \mathbf{k}_f^\perp \cdot \{\nabla\psi\}_P^\circ + \sum_f^\times \gamma_P S_f \mathbf{k}_f^\parallel \cdot \overline{\{\nabla\psi\}_f^\circ} \end{aligned} \quad (4.111a)$$

$$\begin{aligned} - \sum_f^\times \gamma_f^+ S_f \mathbf{n}_f \cdot \{\nabla\psi\}_f^+ &\approx \sum_f^\times \tilde{\gamma}_f S_f \delta_f (\psi_P - \psi_N) + \sum_f^\times \gamma_N \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\bar{\gamma}_f} (1 - \bar{w}_f) \cos \theta_f \{J\}_f^\circ \\ &- \sum_f^\times \gamma_N S_f \mathbf{k}_f^\perp \cdot \{\nabla\psi\}_N^\circ - \sum_f^\times \gamma_N S_f \mathbf{k}_f^\parallel \cdot \overline{\{\nabla\psi\}_f^\circ} \end{aligned} \quad (4.111b)$$

Diese beiden Beziehungen stellen hier das Pendant für die inneren Flächen (\times) aus Gleichung (3.67) dar. In der jeweils ersten Summe auf der rechten Seite ergeben die zusammengefassten Koeffizienten eine harmonische Interpolation der Materialeigenschaft:

$$\tilde{\gamma}_f = \frac{\gamma_N \gamma_P}{\bar{\gamma}_f} = \left(\frac{\bar{w}_f}{\gamma_N} + \frac{1 - \bar{w}_f}{\gamma_P} \right)^{-1}. \quad (4.112)$$

Damit wird verdeutlicht, dass im Falle von $h_f = 0$, $\{J\}_f^\circ = 0$ (z. B. Magnetostatik, Wärmeleitung) und einem weitgehend orthogonalen Gitter alleine die harmonische Interpolation der Diffusivität γ ausreichend ist, um einen Grenzübergang zweier Medien bei der Diskretisierung zu berücksichtigen.

In Abschnitt 3.3 wurde für eine allgemeine Transportgleichung gezeigt, dass sich im Zuge der Diskretisierung ein lineares Gleichungssystem (3.44) ergibt. Für die Terme der Transportgleichung wurden dort auch die sich im Einzelnen ergebenden Beiträge zur Matrix \mathbf{A} und der rechten Seite \mathbf{r} dieses Gleichungssystems zusammengestellt. Für die Diskretisierung des Diffusionsterms mit kontinuierlicher Diffusivität sind die Beiträge einer inneren Fläche zu \mathbf{A} und \mathbf{r} für eine Zelle P in den Gleichungen (3.68a), (3.68c) und (3.68d) aufgelistet. Im Vergleich dazu erhält man für eine materielle Grenzfläche f mit diskontinuierlicher Diffusivität γ die Beiträge der Zelle P durch Auswertung von

Gleichung (4.111a):

$$\text{Diagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad \mathbf{a}_{P_{kf}}^\times = \tilde{\gamma}_f S_f \delta_f, \quad (4.113a)$$

$$\text{Nebendiagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad \mathbf{a}_{N_{kf}}^\times = -\tilde{\gamma}_f S_f \delta_f, \quad (4.113b)$$

$$\begin{aligned} \text{Beitrag zu } \mathbf{r}: \quad \mathbf{r}_{P_{kf}}^\times &= \gamma_P \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\tilde{\gamma}_f} \bar{w}_f \cos \theta_f \{J\}_f^\circ \\ &+ \gamma_P S_f \mathbf{k}_f^\perp \cdot \{\nabla\psi\}_P^\circ + \gamma_P S_f \mathbf{k}_f^\parallel \cdot \overline{\{\nabla\psi\}_f^\circ}. \end{aligned} \quad (4.113c)$$

Man beachte dabei, dass das Vorzeichen der Matrixkoeffizienten wechselt, da der Diffusionsterm in der Transportgleichung (3.19) auf der rechten Seite steht. Aus den entsprechenden Koeffizienten der Gleichung (4.111b) folgt für die materielle Grenzfläche auf der Seite der Zelle N analog:

$$\text{Diagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad \mathbf{a}_{P_{kf}}^\times = \tilde{\gamma}_f S_f \delta_f, \quad (4.114a)$$

$$\text{Nebendiagonalbeitrag zu } \mathbf{A}: \quad \mathbf{a}_{N_{kf}}^\times = -\tilde{\gamma}_f S_f \delta_f, \quad (4.114b)$$

$$\begin{aligned} \text{Beitrag zu } \mathbf{r}: \quad \mathbf{r}_{P_{kf}}^\times &= \gamma_N \frac{\gamma_N - \gamma_P}{\tilde{\gamma}_f} \bar{w}_f \cos \theta_f \{J\}_f^\circ \\ &- \gamma_N S_f \mathbf{k}_f^\perp \cdot \{\nabla\psi\}_N^\circ - \gamma_N S_f \mathbf{k}_f^\parallel \cdot \overline{\{\nabla\psi\}_f^\circ}. \end{aligned} \quad (4.114c)$$

Ähnlich wie in Vukčević u. a. [2017, Abschnitt 4.8] zeigt ein Vergleich der Matrixkoeffizienten (4.113a) und (4.113b) mit (4.114a) und (4.114b), dass die resultierende Matrix einer impliziten Diskretisierung des Diffusionsterms mit diskontinuierlicher Diffusivität symmetrisch ist. Weiterhin entsprechen die Diagonalbeiträge betragsmäßig den Nebendiagonaleinträgen, was die spezielle Eigenschaften der Matrix bezüglich ihres Spektralradius und der Eigenwerte bewirkt [vgl. Abschnitt 4.3.3]. Im Gegensatz zu den Gleichungen (3.68a), (3.68c) und (3.68d) ist hier für die Matrixkoeffizienten allerdings eine harmonisch interpolierte Diffusivität obligatorisch. Der größte Unterschied liegt jedoch bei den zwischen P und N betragsmäßig unterschiedlichen Beiträgen zur rechten Seite des Gleichungssystems (3.44) sowie bei der Aufteilung und Berechnung der einseitigen nicht-orthogonalen Korrektur.

4.4.3 Reduziertes magnetisches Vektorpotential mit Magnetisierung

In Abschnitt 4.3.4 wurden die Vorteile einer Aufteilung des magnetischen Vektorpotentials in einen aufgeprägten \mathbf{A}_0 und einen reduzierten Anteil \mathbf{a} gemäß Gleichung (4.77) beschrieben. In Verbindung mit einem geschickten Ausnutzen des Gesetzes von Biot-Savart [Gleichung (4.80)] kann so die Komplexität der nicht-leitfähigen Region Ω_0 drastisch reduziert und gleichzeitig übermäßig mehr Rechenaufwand vermieden werden.

Die Definition des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials wurde mit Gleichung (4.78) so gewählt, dass es gerade jenes Feld repräsentiert, welches durch die Quellstromdichte \mathbf{j}_0 in einem ansonsten materiefreien Raum erzeugt wird. Die für das reduzierte magnetische Vektorpotential durch Subtraktion der Gleichung (4.78) von Gleichung (4.27) abgeleitete Gleichung (4.79) gilt allerdings nur, solange die Magnetisierung \mathbf{M} aus Gleichung (4.3a) keine Rolle spielt.

Eine Erweiterung der Gleichung für \mathbf{a} zur Berücksichtigung von Magnetisierungseffekten gelingt auf Basis von Gleichung (4.22). Dabei muss allerdings zusätzlich eine durch \mathbf{A}_0 verursachte effektive Magnetisierungsstromdichte \mathbf{j}_M berücksichtigt werden [Jackson 1975, Abschnitt 5.8]:

$$\Omega: \quad \nabla \cdot \frac{1}{\mu} \left(\nabla \mathbf{a} - (\nabla \mathbf{a})^T + (\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{I} \right) = \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}_0}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \nabla \phi \right) - \mathbf{j}_M. \quad (4.115)$$

Die effektive Stromdichte

$$\mathbf{j}_M = \nabla \times \mathbf{M}_0 \quad (4.116)$$

entspringt wiederum als Rotation der Magnetisierung des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials [Griffiths 1999, Abschnitt 6.4]:

$$\mathbf{M}_0 = \frac{\chi}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_0. \quad (4.117)$$

Darin bezeichnet χ die magnetische Suszeptibilität

$$\chi = \mu_r - 1. \quad (4.118)$$

Durch Addition der Gleichungen (4.78) und (4.115) findet man mit Gleichung (4.77) und Beachtung der Aufteilung der Stromdichte nach Gleichung (4.25) die originäre Darstellung (4.20) für das vollständige magnetische Vektorpotential \mathbf{A} wieder:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A}_0 + \nabla \cdot \frac{1}{\mu} \left(\nabla \mathbf{a} - (\nabla \mathbf{a})^T + (\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{I} \right) &= \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}_0}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \nabla \phi \right) - \mathbf{j}_M - \mathbf{j}_0 \\ \nabla \times \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{A}_0 - \nabla \times \frac{\chi}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_0 + \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{a} &= \mathbf{j}_0 - \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}_0}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \nabla \phi \right) \\ \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_0 + \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{a} &= \mathbf{j}_0 - \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}_0}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \nabla \phi \right) \\ \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} &= \mathbf{j}_0 - \sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \phi \right) \\ \nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} &= \mathbf{j}. \end{aligned} \quad (4.119)$$

Unter der Annahme, dass die nicht-leitfähige Region Ω_0 vollständig nicht-magnetisch ist, und innerhalb der leitfähigen Region Ω_C nur paramagnetische Bereiche auftreten, gilt für die magnetische Suszeptibilität:

$$\Omega: \quad \begin{cases} \chi(\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}) = 0 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_0 \wedge \mathbf{x} \notin \Gamma_C \\ \chi(\mathbf{x}_C = \mathbf{x}) > 0 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_C \end{cases}. \quad (4.120)$$

Da die Suszeptibilität χ in Ω_0 verschwindet, existiert auch die effektive Magnetisierungsstromdichte \mathbf{j}_M nur innerhalb der leitfähigen bzw. auch (teilweise) magnetisierbaren Region. Damit kann also auch im Zusammenhang mit magnetisierbaren Medien weiterhin auf die Lösung von \mathbf{A}_0 in der nicht-leitfähigen Region verzichtet werden. Für die Berechnung des effektiven Magnetisierungsstromes des

aufgeprägten Potentials A_0 eignen sich mit

$$\mathbf{j}_M = \nabla \times \mathbf{M}_0 = \nabla \times \frac{\chi}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}_0 = -\nabla \cdot \frac{\chi}{\mu} \left(\nabla \mathbf{A}_0 - (\nabla \mathbf{A}_0)^T + (\nabla \cdot \mathbf{A}_0) \mathbf{I} \right) \quad (4.121)$$

die speziellen Methoden aus Abschnitt 4.4.2. Eine mögliche diskontinuierliche Suszeptibilität wird bei der Berechnung damit direkt numerisch berücksichtigt.

4.5 Validierung

Mit dem Ziel, die gesamte Neuentwicklung zur Lösung des Teilproblems der MD aus den letzten beiden Abschnitten dieses Kapitels selektiv auf Funktionalität und Effizienz zu überprüfen, wird in diesem Abschnitt eine Validierung der in *foam-extend* implementierten Methoden zur Simulation von zeitharmonischen Induktionsprozessen mit der FVM durchgeführt. Die dazu genutzten Testfälle umfassen zwei verschiedene Basiskonfigurationen eines eher anwendungsbezogenen und eines eher akademischen Testfalls. In Kombination mit verschiedenen Magnetfeld- und Parameterkonfigurationen ergeben sich so insgesamt acht verschiedene Validierungsszenarios, wobei für einige dieser Fälle zusätzlich unterschiedliche Modellierungsstrategien zum Einsatz kommen. Im Zuge des gesamten Validierungsprozesses wird einerseits das Fehlerverhalten der numerischen Methoden untersucht, andererseits werden aber auch Ergebnisse der neuen Simulationsplattform in *foam-extend* mit Resultaten der kommerziellen Programme *Cobham Opera 2D* [Cobham 2016b] und *Cobham Opera 3D* [Cobham 2016a] verglichen. Darüber hinaus findet stellenweise ein Vergleich mit analytisch ermittelten Daten statt.

Zur quantitativen Fehlerüberprüfung einer approximativen Testgröße Q , in Bezug auf eine verlässliche Referenzgröße Q_{Ref} , wird für die weitere Verwendung der absolute Fehler

$$\mathcal{E} = Q - Q_{\text{Ref}} , \quad (4.122)$$

sowie die folgenden drei Fehlernormen als Hilfsmittel eingeführt:

$$\|\mathcal{E}\|_\infty = \frac{\max_k |\mathcal{E}_k|}{\max_k |Q_{\text{Ref},k}|} \quad (4.123a)$$

$$\|\mathcal{E}\|_1 = \frac{\sum_{k=1}^n |\mathcal{E}_k|}{\sum_{k=1}^n |Q_{\text{Ref},k}|} \quad (4.123b)$$

$$\|\mathcal{E}\|_2 = \left(\frac{\sum_{k=1}^n |\mathcal{E}_k|^2}{\sum_{k=1}^n |Q_{\text{Ref},k}|^2} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (4.123c)$$

Darin stellt n die Stichprobenmenge mit zugehörigem Iterator k dar. Jedes k repräsentiert so beispielsweise den lokalen Wert von Q , Q_{Ref} oder \mathcal{E} an einem bestimmten Ort. Entsprechend handelt es sich bei Q_k , $Q_{\text{Ref},k}$ und \mathcal{E}_k um die zugehörigen Stichproben. Gegenüber der Maximumsnorm ($\|\mathcal{E}\|_\infty$), welche äquivalent zum maximalen Fehler der Stichprobe ist, repräsentieren die ℓ^1 -Norm ($\|\mathcal{E}\|_1$) und ℓ^2 -Norm ($\|\mathcal{E}\|_2$) jeweils unterschiedlich gewichtete Kenngrößen zur Fehleranalyse.

Im Anschluss wird zunächst das vorrangige Ziel verfolgt, für die MD einen Nachweis über die korrekte Methodenentwicklung und deren Implementierung zu liefern. Darüber hinaus besteht gleichzeitig der Anspruch, das Potential der Methoden vorzustellen sowie den Einfluss der nicht-leitfähigen Region Ω_0 [vgl. Abbildung 4.1] auf die Qualität der Ergebnisse zu untersuchen. Die neu entwickelte Vorgehensweise zur eingebetteten Diskretisierung der Übergangsbedingungen möglicher Materialübergänge wird abschließend beleuchtet.

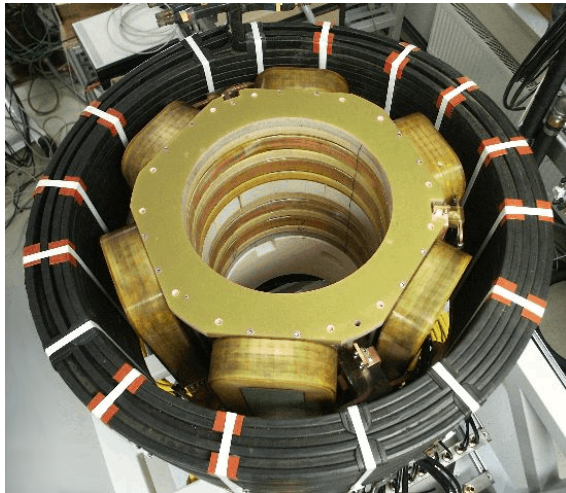
4.5.1 Prozesstechnisch relevante Magnetfelder

Im Bereich der industriellen Metallurgie und Kristallzüchtung hat sich die Anwendung von AC-Feldern zur Strömungsbeeinflussung elektrisch leitfähiger Fluide als wichtiges Hilfsmittel herausgestellt [siehe z. B. Asai 2012]. Dazu werden die Felder in der Regel je nach Anwendungsfall für einen ganz bestimmten Zweck maßgeschneidert und ggf. mit weiteren Feldern überlagert. Zur Umsetzung elektromagnetischer Rühr- und Mischvorgänge kommen zwei wichtige Grundtypen von AC-Feldern zum Einsatz: ein rotierendes Magnetfeld (Rotating Magnetic Field, RMF) und ein wanderndes Magnetfeld (Travelling Magnetic Field, TMF) [Koal 2011; Stiller u. a. 2013; Grants u. a. 2013]. Während sich das TMF durch eine oszillierende elektromagnetische Kraftwirkung entlang einer Achse auszeichnet, spielt hingegen beim RMF ein azimuthales Kraftfeld die vordergründige Rolle, dessen Amplitude zeitlich um eine definierte Achse rotiert. Die technische Umsetzung erfolgt für beide Grundtypen üblicherweise durch eine geeignete Anordnung mehrerer Induktionsspulen, welche gemäß Gleichung (4.40) jeweils mit der Wechselstromdichte \mathbf{j}_0 und untereinander mit einer Phasenverschiebung α_0 betrieben werden.

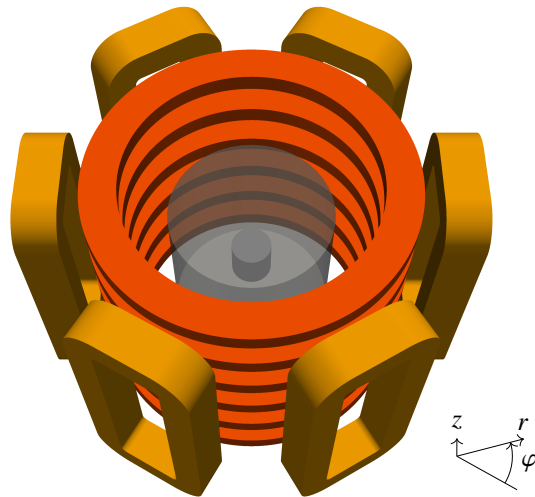
Sowohl beim RMF als auch beim TMF existiert jeweils für eine koaxial ausgerichtete, zylindrische Konduktorregion Ω_C eine analytische Lösung zur Berechnung der zeitgemittelten Lorentz-Kraft $\langle \mathbf{f}_L \rangle_t$ nach Gleichung (4.53) [Gorbachev u. a. 1974; Grants u. Gerbeth 2004]. Allerdings wird dazu in beiden Fällen zum einen eine idealisierte Konfiguration angenommen, und zum anderen nicht nur das strömungsinduzierte Magnetfeld vernachlässigt, sondern der gesamte induzierte Anteil. Diese starke Vereinfachung ist als Näherung jedoch nur zulässig, sofern der Abschirmparameter $S = \mu_0 \omega_0 \sigma R^2$ gemäß Gleichung (4.48) für einen gegebenen Zylinderradius R hinreichend klein ist ($S \ll 1$). Diese Forderung kann in der Praxis allerdings für Werte bis $S \approx 1$ abgeschwächt werden [Stiller u. a. 2013]. In Kombination mit Gleichung (4.13) lässt sich diese Niedrigfrequenz (Low Frequency, LF)-Approximation für kleine magnetische Reynolds-Zahlen folgendermaßen ausdrücken [vgl. Davidson 2001, Abschnitt 12]:

$$\text{Re}_M \ll S < 1. \quad (4.124)$$

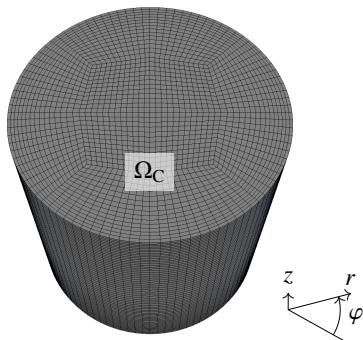
In Grants u. Gerbeth [2004] wird bei der Betrachtung des TMF zusätzlich eine langwellige Anregung vorausgesetzt, was wiederum bedeutet, dass die Wellenlänge des TMF ausreichend groß im Vergleich zur Zylinderhöhe H ist. Unter diesen Voraussetzungen eignen sich die analytischen Berechnungsvorschriften der zeitlich gemittelten Lorentz-Kraft beider Feldtypen für eine grundlegende Überprüfung der in *foam-extend* implementierten Lösungsmethoden.



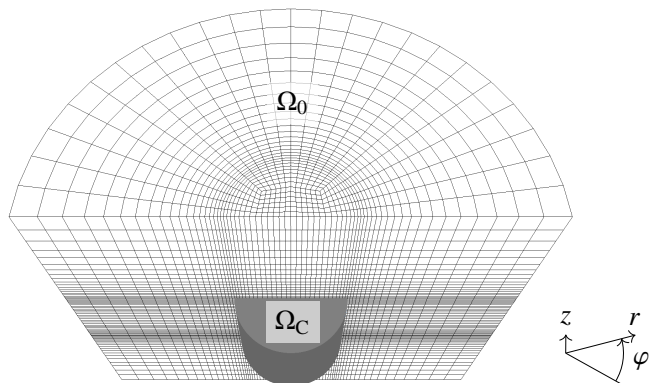
(a) Geometrie der Erregerspulen der MULTIMAG-Versuchsanlage am HZDR [Pal u. a. 2009].



(b) Modell zur numerischen Analyse von RMF und TMF für eine zylindrische Konduktorgeometrie.



(c) Beispiel eines Gitters der leitfähigen Region mit hexaedrischen Zellen.

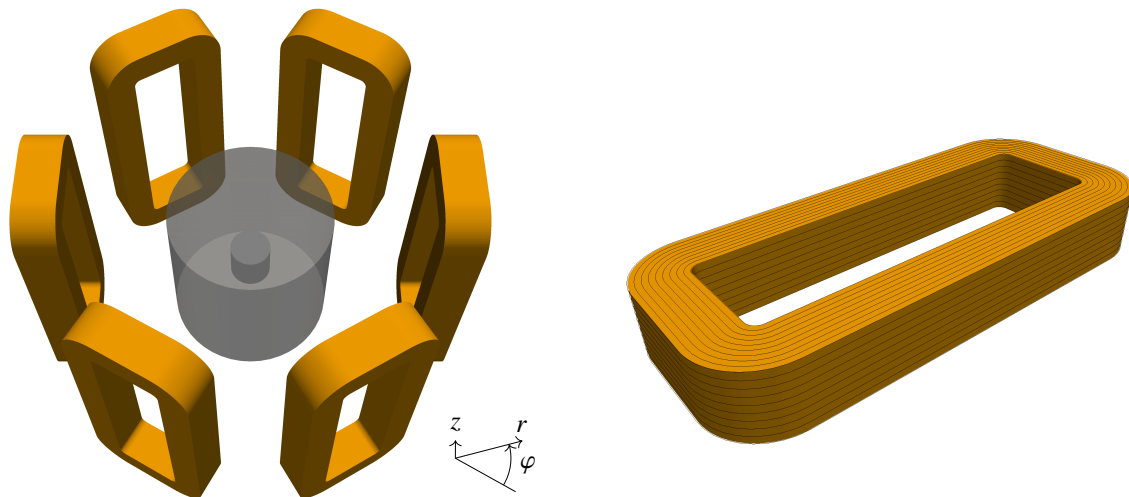


(d) Ein mögliches Gitter der nicht-leitfähigen Region mit hexaedrischen Zellen. Dargestellt ist nur eine Hälfte in Verbindung mit der Geometrie des Konduktors.

Abbildung 4.10: Ableitung eines numerisches Modells zur Analyse von RMF und TMF: Motivation durch eine existierende Versuchsanlage (a), Modell (b) und FVM-Netze der Regionen Ω_C und Ω_0 (c,d).

Am Institut für Fluidodynamik des Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) existiert eine Mehrzweckversuchsanlage zur Untersuchung elektromagnetisch getriebener Strömungen, kurz **Multipurpose Magnetic Fields (MULTIMAG)**-Versuchsanlage [Pal u. a. 2009]. Deren Kernstück ist in Abbildung 4.10a abgebildet. Im Bild lässt sich deutlich erkennen, wie die Grundtypen der elektromagnetischen Felder durch eine entsprechende Spulenanordnung entstehen: Die sechs vertikal angeordneten Ringspulen dienen zur Erzeugung des TMF, und die sechs azimuthal verteilten Rechteckspulen bilden die Grundlage für das RMF. Die äußere Gleichstromspule und weitere Elemente sind für hiesige Zwecke irrelevant. Innerhalb des zylindrischen Hohlraums im Zentrum der Erregerspulen lassen sich experimentelle Untersuchungen durchführen.

Anhand der Spulenkonfiguration der MULTIMAG-Versuchsanlage wurde für diese Arbeit ein numerisches Modell zur Validierung abgeleitet. Dessen geometrische Abmessungen stimmen mit den



(a) Modell zur numerischen Analyse des RMF für eine zylindrische Konduktorgeometrie.

(b) Linienbasierte Modellierung (Gitter) einer einzelnen RMF-Induktorspule.

Abbildung 4.11: RMF-Konfiguration: Modell (a) und linienbasiertes Netz der Spule (b).

Angaben in Pal u. a. [2009, Kapitel 4] überein. Die Abbildung 4.10b zeigt die numerischen Modelle der RMF- und TMF-Spulen in Verbindung mit einer zylindrischen Konduktorgeometrie (kleiner Zylinder) und einer trunkeierten nicht-leitfähigen Region (großer Zylinder). Eine mögliche Vernetzung beider Regionen ist exemplarisch in Abbildungen 4.10c und 4.10d zu sehen.

Die Abmessungen des leitfähigen Zylinders ist mit $R = H/2 = 30$ mm so gewählt, dass sich ein Aspektverhältnis von $H/2R = 1$ ergibt. Der Konduktor ist, wie anhand der Abbildungen 4.10b und 4.10d erkenntlich ist, von einer nicht-leitfähigen Region umgeben, deren äußere Kontur selbst wiederum eine Zylinderform mit gleichem Aspektverhältnis aufweist. Die äußeren Abmessungen erreichen dabei einen Abstand von $R_\infty = 4R$ bzw. $H_\infty = 4H$ bezüglich des gemeinsamen Schwerpunktes mit der leitfähigen Region.

Rotierendes Magnetfeld

Für den Fall eines reinen RMF ist das an die MULTIMAG-Versuchsanlage angelehnte Modell in Abbildung 4.11a dargestellt [vgl. Pal u. a. 2009, Kapitel 4.1]. Im Vergleich zu Abbildung 4.10b fehlen hier offensichtlich die TMF-Spulen. Auf Grund der komplexen Geometrie der RMF-Spulen wird zur Modellierung eine Aufteilung des magnetischen Vektorpotentials in einen aufgeprägten und einen induzierten Anteil vorgenommen. Wie diesbezüglich in Abschnitt 4.3.5 beschrieben wurde, kann damit auf die Abbildung einer Induktorgeometrie über ein FVM-Gitter verzichtet und stattdessen ein linien- bzw. kantenbasiertes Netz genutzt werden. Für eine einzelne RMF-Spule ist in Abbildung 4.11b eine solche Umsetzung gezeigt, wobei dort die Einhüllende als Schar geschlossener, stückweise linearer Kurvenzüge repräsentiert wird. Das vom Induktor erzeugte Erregerfeld \mathbf{B}_0 (bzw. A_0 in Potentialform) kann über das Gesetz von Biot-Savart gemäß Gleichung (4.82) durch Summation über alle linearen Teilsegmente bestimmt werden. Aus Abbildung 4.11a wird deutlich, dass solche, auf Grundlage des

Gesetzes von Biot-Savart modellierten Spulen (Biot-Savart-Induktoren), völlig unabhängig von der FVM-Diskretisierung sind. Im vorliegenden Fall liegen die RMF-Spulen sogar deutlich außerhalb der nicht-leitfähigen Region. Sie werden nur indirekt genutzt, um diskrete Randbedingungen für A_0 auf der Konduktoroberfläche Γ_C zu berechnen. Die Phasenlage des oszillierenden Quellstromes in Gleichung (4.85) ist zwischen den einzelnen RMF Spulen um jeweils $\pi/3$ verschoben. Die azimuthale Homogenität des RMF wird durch die Geometrie der MULTIMAG-Anlage hinreichend gut erfüllt.

Vorausgesetzt die LF-Approximation (4.124) ist zusätzlich gewährleistet, so lautet die über eine analytische Lösung der Maxwell-Gleichungen hergeleitete Berechnungsvorschrift für die zeitlich gemittelte Lorentz-Kraft [Gorbachev u. a. 1974; Pal u. a. 2009]:

$$\langle \mathbf{f}_L \rangle_t = \frac{\sigma \omega_0 B_0^2 R}{2} s_{\text{RMF}}(r, z) \mathbf{e}_\varphi = \frac{\rho v^2}{R^3} \text{Ta}_M s_{\text{RMF}}(r, z) \mathbf{e}_\varphi . \quad (4.125)$$

Ausgedrückt in einem axial am Konduktor ausgerichteten zylindrischen Koordinatensystem (r, φ, z) , dessen Ursprung mit dem Schwerpunkt der leitfähigen Region zusammenfällt, beinhaltet das elektromagnetische Kraftfeld beim RMF im Idealfall nur eine Komponente in azimuthaler Richtung \mathbf{e}_φ . Der Referenzwert $B_0 = |\mathbf{B}(r = 0, z = 0)|$, welcher der Amplitude der magnetischen Flussdichte im Zentrum des Konduktors entspricht, wird so kalibriert, dass sich die magnetische Taylor-Zahl

$$\text{Ta}_M = \frac{\sigma \omega_0 B_0^2 R^4}{2 \rho v^2} \quad (4.126)$$

einstellt. In der dimensionslosen RMF-Formfunktion

$$s_{\text{RMF}}(r, z) = \frac{r}{R} - \sum_{k=1}^{\infty} c_k J_1 \left(\lambda_k \frac{r}{R} \right) \cosh \left(\lambda_k \frac{z}{R} \right) \quad (4.127)$$

aus Gleichung (4.125) tritt die Bessel-Funktion J_1 erster Art und Ordnung auf, wobei die λ_k Nullstellen der ersten Ableitung J_1' darstellen. Für die führenden Koeffizienten in Gleichung (4.127) gilt:

$$c_k = \frac{2}{(\lambda_k^2 - 1) J_1(\lambda_k) \cosh \left(\lambda_k \frac{H}{R} \right)} . \quad (4.128)$$

In Verbindung mit der MULTIMAG-Anlage des HZDR kommt unter anderem die eutektische Legierung Gallium-Indium-Zinn (Ga-In-Sn) für Versuche zum Einsatz. Das silbern glänzende Metall ist bei einer Raumtemperatur von $T_0 = 20^\circ\text{C}$ flüssig und weist dabei eine Dichte von $\rho = 6353 \text{ kg m}^{-3}$, eine kinematische Viskosität von $\nu = 3,436 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und eine elektrische Leitfähigkeit in Höhe von $\sigma = 3,289 \cdot 10^6 \text{ S m}^{-1}$ auf [Plevachuk u. a. 2014]. Wird als charakteristische Kreisfrequenz des Wechselstromes in den Erregerspulen ein praktischer Wert von $\omega_0 = 2\pi \cdot 50 \text{ Hz}$ herangezogen und eine magnetische Taylor-Zahl von $\text{Ta}_M = 1 \cdot 10^5$ angestrebt, so entspricht das für die (konstanten) Stoffeigenschaften von Ga-In-Sn einem Referenzwert von $B_0 = 0,4216 \cdot 10^{-3} \text{ T}$. Durch eine numerische Kalibrierung wurde ermittelt, dass dieser Wert bei einer Amplitude des Quellstromes von $\hat{I}_0 = 432 \text{ A}$ pro RMF-Spule erreicht wird.

Die vier z - r -Konturplots aus Abbildung 4.12 zeigen für die bisher zusammengetragenen Parameter die Ergebnisse der zeitgemittelten Lorentz-Kraft beim RMF, welche auf einer Simulation mit *foam-extend*

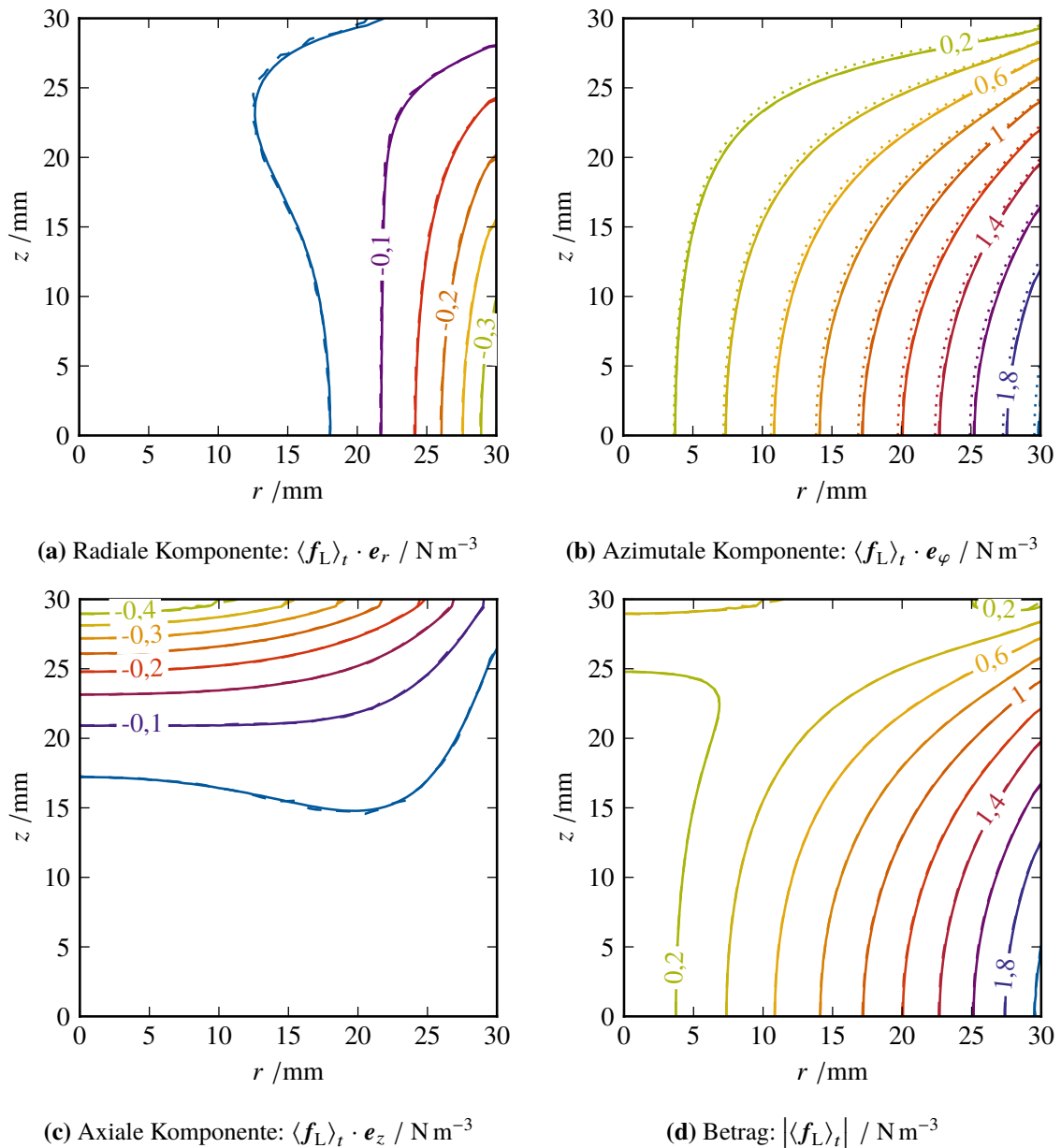


Abbildung 4.12: Zeitgemittelte Lorentz-Kraft $\langle f_L \rangle_t$ beim RMF ohne LF-Approximation: Verglichen werden Ergebnisse basierend auf *foam-extend* (durchgezogene Linien) mit Resultaten der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien). In Abbildung b ist für die azimutale Komponente zusätzlich ein Vergleich mit der analytischen Lösung aus Gleichung (4.125) gemäß LF-Approximation gezeigt (gepunktete Linien).

ohne LF-Approximation basieren (durchgezogene Linien). Die Darstellung beinhaltet zusätzlich einen Vergleich mit Resultaten der kommerziellen FEM-Software *Cobham Opera 3D* für eine identische Konfiguration (gestrichelte Linien). Die Kraftverteilung ist sowohl axialsymmetrisch als auch symmetrisch bezüglich der horizontalen r - φ -Ebene bei $z = 0$. Daher ist in Abbildungen 4.12a bis 4.12d jeweils nur die obere Hälfte des Konduktors abgebildet. Für alle Komponenten [Abbildungen 4.12b bis 4.12c] und den Betrag [Abbildung 4.12d] von $\langle f_L \rangle_t$ ist dabei eine sehr gute Übereinstimmung zwischen beiden Ergebnissen zu erkennen.

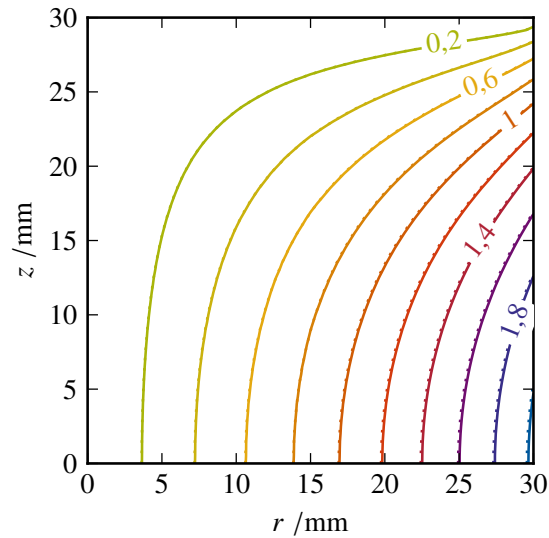


Abbildung 4.13: Vergleich der analytischen Lösung aus Gleichung (4.125) (gepunktete Linien) mit dem Simulationsergebnis der azimuthalen Komponente $\langle f_L \rangle_t \cdot e_\varphi / \text{Nm}^{-3}$ der zeitlich gemittelten Lorentz-Kraft des RMF (durchgezogene Linien): Die Resultate basieren auf einer numerisch umgesetzten LF-Approximation in Verbindung mit sehr hohen RMF-Spulen.

Für die Simulation mit *foam-extend* besteht das zugrundeliegende Gitter (1,000), welches in Tabelle 4.1 hervorgehoben ist, aus $n \approx 7 \cdot 10^5$ Zellen. Davon entfällt eine Anzahl von $n_C \approx 1,2 \cdot 10^5$ auf den leitfähigen Bereich [vgl. mit Abbildungen 4.10c und 4.10d]. Die nötige Rechenzeit bis zur Konvergenz bei einem normierten Zielresiduum von $1 \cdot 10^{-8}$ beträgt bei Verwendung eines einzelnen Prozessors (Central Processing Unit, CPU) ≈ 500 s (*Intel i5-3570*). Das Gitter der Vergleichsrechnung in *Cobham Opera 3D* ist mit $\approx 5 \cdot 10^6$ linearen und $\approx 1,5 \cdot 10^5$ quadratischen Elementen bewusst etwas feiner gewählt. Dort wurde eine Konvergenz bei identischem Zielresiduum jedoch erst nach $\approx 6\,600$ s unter Verwendung von vier CPU-Kernen des selben Typs erzielt.

Der Plot in Abbildung 4.12b stellt den numerischen Ergebnissen für die azimuthale Komponente der Lorentz-Kraft die analytische Lösung unter Annahme der LF-Approximation aus Gleichung (4.125) gegenüber (gepunktete Linien). Obwohl auch hier jeweils eine recht gute Übereinstimmung zu finden ist, so existiert doch eine geringe systematische Abweichung. Diese ist dadurch zu erklären, dass im vorliegenden Fall mit $S = 1,168$ zum einen der Abschirmparameter Gleichung (4.124) widerspricht und zum anderen die Feldverteilung auf Grund der endlichen Höhe der RMF-Spulen nicht dem Idealfall eines rein axialen Erregerfeldes gleichkommt. Weiterhin wird die analytische Lösung auf Basis der Formfunktion (4.127) nur durch eine endliche Anzahl Summanden (hier 40) approximiert.

Allerdings lässt sich die LF-Approximation numerisch leicht nachbilden, indem nur das durch die Spulen aufgeprägte Magnetfeld berücksichtigt und zusätzlich die Höhe der RMF-Spulen so modifiziert wird, dass sie einen extrem großen Wert im Vergleich zur Zylinderhöhe H einnimmt. Das entsprechende Resultat ist im Vergleich zur analytischen Lösung in Abbildung 4.13 gezeigt, wobei vergleichen mit Abbildung 4.12b eine deutlich bessere Übereinstimmung sichtbar ist. Durch die Vernachlässigung des induzierten Feldes $\mathbf{a} \equiv \mathbf{0}$ aus Gleichung (4.77) deckt eine solche Gegenüberstellung mit *foam-extend* allerdings nur die Berechnung des aufgeprägten magnetischen Vektorpotentials A_0 ,

Tabelle 4.1: Numerische Gitter mit unterschiedlicher örtlicher Auflösung: Die erste Spalte beinhaltet Skalierungsfaktoren, Δx und Δ stehen hingegen für eine jeweils charakterisierte und dimensionslose Zellgröße. Bei Δ/Δ_{\max} handelt es sich um deren relative Skalierung bezogen auf das größte Gitter. Mit der Variation der Auflösung ändert sich sowohl die Gesamtanzahl n an finiten Volumina als auch die Anzahl Zellen n_C der leitfähigen Region. In der letzten Spalte findet man den nötigen Rechenaufwand einer RMF-Simulation mit Bezug auf eine CPU.

Gitter	Δx / mm	Δ	Δ/Δ_{\max}	n	n_C	n/n_C	$t_{\text{CPU}} / \text{s}$
0,125	5,000 0	8,00	1,000 0	1 792	384	4,67	1
0,250	2,500 0	4,00	0,500 0	11 832	2 112	5,60	5
0,375	1,666 7	2,67	0,333 3	43 000	8 160	5,27	15
0,500	1,250 0	2,00	0,250 0	91 872	15 840	5,80	40
0,750	0,833 3	1,33	0,166 7	367 200	62 560	5,87	300
1,000	0,625 0	1,00	0,125 0	698 880	120 960	5,77	500
1,500	0,416 7	0,67	0,083 3	2 629 600	454 480	5,79	2 700
2,000	0,312 5	0,50	0,062 5	5 684 352	967 680	5,87	10 800
2,500	0,250 0	0,40	0,050 0	11 325 600	1 908 000	5,94	31 200

des elektrischen Potentials ϕ sowie die Divergenzfreiheit der induzierten Wirbelstromdichte \mathbf{j} in der leitfähigen Region Ω_C ab.

In [Jasak \[1996\]](#) wird ausführlich erläutert, dass die in *OpenFOAM* realisierte Diskretisierung von DGLn üblicherweise zweiter Ordnung genau ist. Einschränkungen gibt es diesbezüglich beim Einsatz schiefer Gitter [vgl. Abschnitt 3.2] und falls zur numerischen Stabilisierung bewusst Verfahren niedriger Ordnung genutzt werden [siehe z. B. Abschnitt 3.3.1]. Die Gitter aus Abbildungen 4.10c und 4.10d weisen zwar gemäß Gleichung (3.12) eine maximale Schiefe von $|\mathbf{O}_f|_{\max} \approx 0,52$ auf, der durchschnittliche Wert ist jedoch vernachlässigbar klein. Damit ist auf diesem Gitter im Mittel eine Fehlerkonvergenz zweiter Ordnung und lokal eine Reduktion dieser Fehlerordnung zu erwarten.

Für alle Gittervariationen aus Tabelle 4.1, mit der jeweiligen dimensionslosen Zellgröße Δ , zeigt Abbildung 4.14 den Verlauf der Fehlernormen (4.123) der in *foam-extend* berechneten zeitgemittelten Lorentz-Kraft ($\mathbf{Q} \hat{=} \langle \mathbf{f}_L \rangle_t$) bezüglich einer Referenzlösung auf dem feinsten Gitter (2,500). Der Darstellung liegt eine Normalisierung auf Basis des globalen Maximalwertes $\|\mathcal{E}\|_{\max}$ aller Fehlernormen und dem Maximum der Zellgrößen Δ_{\max} zugrunde. Wie erwartet liegt die örtliche Fehlerkonvergenz hinsichtlich der Genauigkeit im Bereich zwischen erster Ordnung ($\mathcal{O}(\Delta/\Delta_{\max})$, gepunktete Linie) und zweiter Ordnung ($\mathcal{O}((\Delta/\Delta_{\max})^2)$, gestrichelte Linie). Dabei zeigt die Maximumsnorm tendenziell das schlechteste und die ℓ^1 -Norm, welche einen mittleren Fehler darstellt, das beste Verhalten. Der Verlauf der ℓ^2 -Norm liegt dazwischen, da dort lokale Fehler im Vergleich zur ℓ^1 -Norm durch die quadratische Definition stärker ins Gewicht fallen. Insgesamt korreliert diese Erkenntnis eindeutig mit der zuvor diskutierten Gitterqualität.

In Abschnitt 4.1.3 wurde bereits erwähnt, dass infolge der Unbeschränktheit des Gültigkeitsgebietes der Maxwell-Gleichungen, durch die notwendige Trunkierung des Lösungsgebietes gemäß einer Konfiguration nach Abbildung 4.1, ein numerischer Fehler entsteht. Inwieweit diese zunächst willkürlich

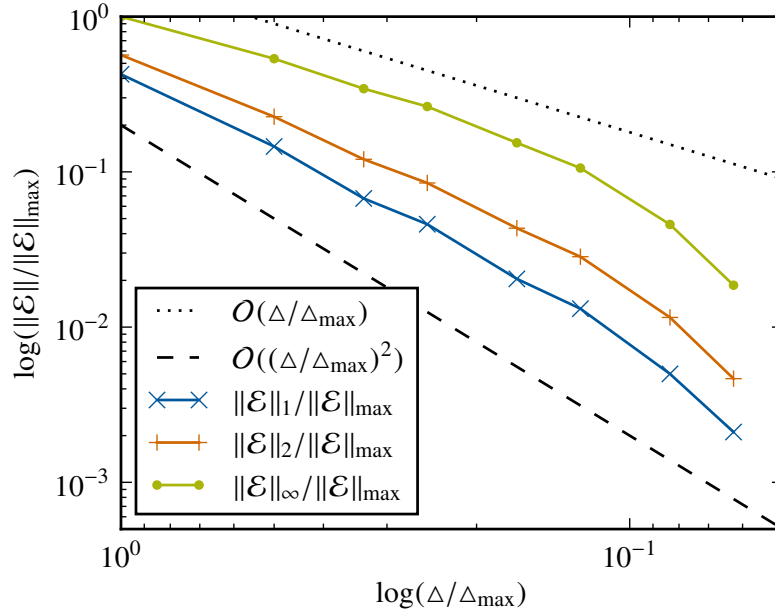


Abbildung 4.14: Fehlernormen (4.123) der in *foam-extend* berechneten zeitgemittelten Lorentz-Kraft ($\mathcal{Q} \hat{=} \langle f_L \rangle_t$) des RMF für eine Variation der Gitterauflösung nach Tabelle 4.1: Als Referenzgröße dient das Ergebnis auf dem feinsten Gitter (2,500). Das Konvergenzverhalten des Fehlers verläuft je nach Norm zwischen erster und zweiter Ordnung.

erscheinende Vereinfachung gerechtfertigt ist, und welchen konkreten Fehlereinfluss die Lage von Γ_∞ bedingt, wird nachfolgend am Beispiel des RMF untersucht.

Dazu wird die gesamte in Ω auftretende Stromdichte \mathbf{j} idealisiert als lokale Verteilung mit der radialen Ausdehnung R_J bezüglich eines örtlichen Zentrums betrachtet. Nach Jackson [1975, Abschnitt 5.6] kann für eine solche Distribution das induzierte Magnetfeld $B(r)$ in einer Entfernung mit Radius $r > R_J$ über

$$B(r) \approx \frac{M_J}{r^3} \quad (4.129)$$

abgeschätzt werden. Die Intensität des Feldes wird darin über das erste magnetische Moment M_J der Stromverteilung abgebildet. Anhand dieser einfachen Approximation ergibt sich das Verhältnis der magnetischen Flussdichten $B_\infty = B(R_\infty)$ und $B_J = B(R_J)$ zu $B_\infty/B_J \approx (R_\infty/R_J)^3$. Umgekehrt findet man für das Verhältnis der Radien demnach den Zusammenhang:

$$\frac{R_\infty}{R_J} \approx \left(\frac{B_\infty}{B_J} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (4.130)$$

Darüber ist es möglich das nötige Verhältnis der Radien abzuschätzen, welches nötig wäre, damit das magnetische Feld von B_J auf B_∞ abklingt. Umgekehrt lässt sich damit aber auch der Einfluss eines bei R_∞ vernachlässigten Restfeldes B_∞ auf die numerische Lösung B_J deuten.

Zur Veranschaulichung dieser Idee ist in Abbildung 4.15 das Fehlerverhalten der in *foam-extend* berechneten zeitgemittelten Lorentz-Kraft, bei Variation der Außenabmessungen von Ω_0 nach Tabelle 4.2, gezeigt. Da in diesem Fall Biot-Savart-Induktoren genutzt wurden, bezieht sich die Abmessung

Tabelle 4.2: Numerische Gitter mit unterschiedlichen Außenabmessungen R_∞ von Ω_0 : Die erste Spalte beinhaltet Skalierungsfaktoren mit Bezug auf das Gitter (1,000) aus Tabelle 4.1, wobei R_∞/R dem Verhältnis von Außenradius zu Zylinderradius entspricht. Während die Gesamtanzahl finiter Volumina n für jedes Gitter variiert, bleibt die Anzahl n_C der Zellen in Ω_C konstant. In der letzten Spalte findet man den nötigen Rechenaufwand einer RMF-Simulation mit Bezug auf eine CPU.

Gitter	R_∞/R	n	n_C	n/n_C	$t_{\text{CPU}} / \text{s}$
0,300	1,2	251 904	120 960	2,08	100
0,375	1,5	342 912	120 960	2,83	140
0,500	2,0	447 744	120 960	3,70	210
0,750	3,0	587 520	120 960	4,85	320
1,000	4,0	698 880	120 960	5,78	400
2,000	8,0	950 400	120 960	7,86	660
4,000	16,0	1 240 320	120 960	10,25	1 000
8,000	32,0	1 534 080	120 960	12,68	1 500
16,000	64,0	1 896 960	120 960	15,68	2 100
32,000	128,0	2 298 240	120 960	19,00	7 800

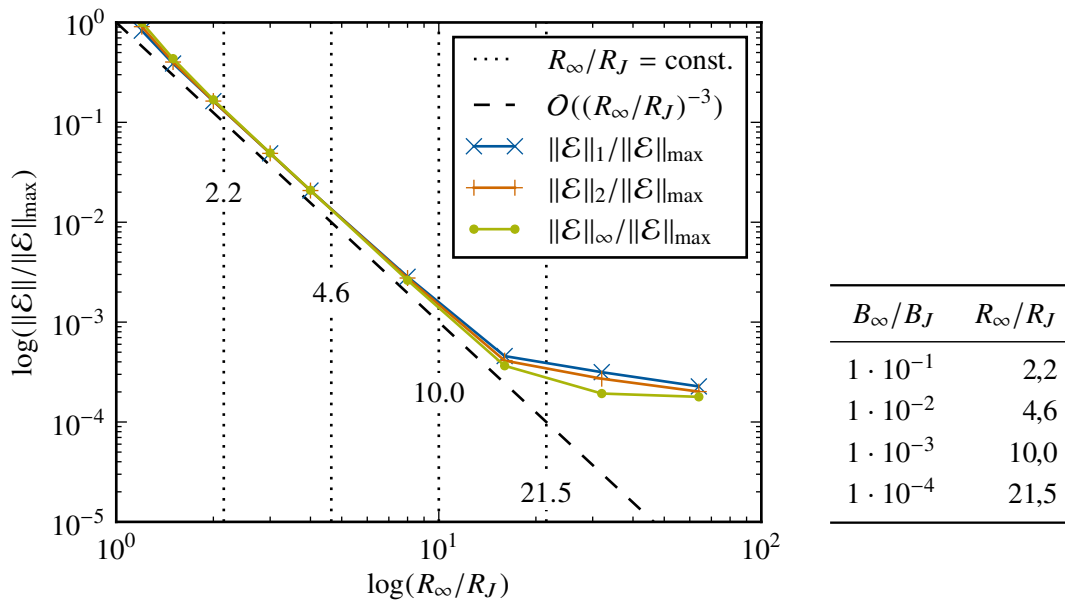
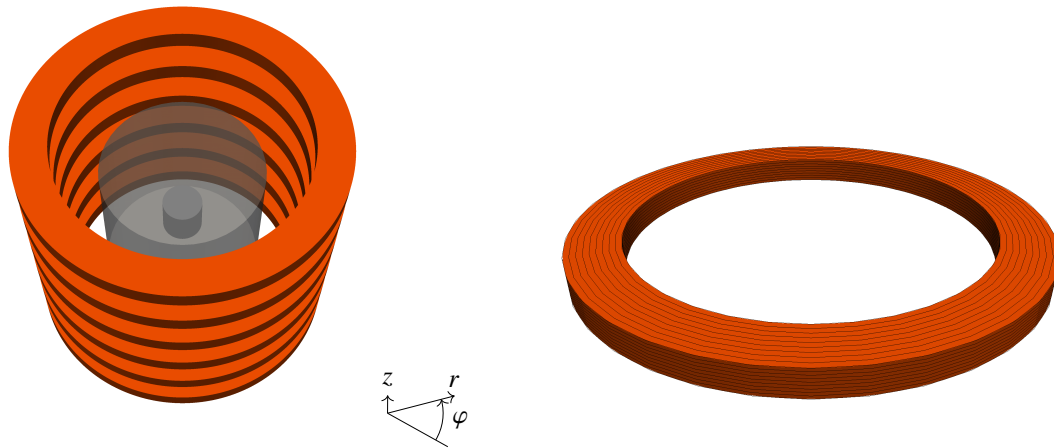


Abbildung 4.15 & Tabelle 4.3: Fehlerverhalten der in *foam-extend* berechneten zeitgemittelten Lorentz-Kraft ($Q \hat{=} \langle f_L \rangle_t$) des RMF bei Variation der Außenabmessungen von Ω_0 nach Tabelle 4.2 ($R_J = R$): Als Referenzgröße dient das Ergebnis auf dem größten Gitter (32,000). Die Fehlernormen verhalten sich in guter Näherung gemäß der Approximation (4.130). Die Tabelle listet ausgewählte Verhältnisse von B_∞/B_J auf, welche mit den entsprechenden Verhältnissen der Radien auch im Plot gezeigt werden.

der idealisierten Stromverteilung auf den Radius des inneren Zylinders $R_J = R$. Anhand der Trends aller drei Fehlernormen (4.123) mit $Q \hat{=} \langle f_L \rangle_t$ wird deutlich, dass Gleichung (4.130) sehr gut geeignet ist um die Größe der nicht-leitfähigen Region näherungsweise für ein gewünschtes Fehlerniveau zu bestimmen. Die vertikalen Linien in Abbildung 4.15 kennzeichnen die ausgewählten Werte von



(a) Modell zur numerischen Analyse des **TMF** für eine zylindrische Konduktorgeometrie.

(b) Linienbasierte Modellierung (Gitter) einer einzelnen **TMF**-Induktorspule.

Abbildung 4.16: **TMF**-Konfiguration: Modell (a) und linienbasiertes Netz der Spule (b).

B_∞/B_J mit entsprechenden Radienverhältnissen nach Tabelle 4.3. Ein relativer Fehler von 1 % wird beispielsweise bei einem Außendurchmesser von $R_\infty \approx 4,6R$ erreicht, und für einen relativen Fehler von 0,1 % ist eine Abmessung von $R_\infty \approx 10,0R$ nötig.

Im Zusammenhang mit dieser Faustregel sei wiederholt darauf hingewiesen, dass die Nutzung von Biot-Savart-Induktoren einen entscheidenden Vorteil bietet, da sich ansonsten die Abmessung der idealisierten Stromverteilung auf den Radius der gesamten Spulenordnung beziehen würde, welche im Allgemeinen größer ausfällt als die des Konduktors.

Wanderndes Magnetfeld

Das Modell zur Simulation eines reinen **TMF** ist in Abbildung 4.16a gezeigt [vgl. Pal u. a. 2009, Kapitel 4.2]. Die nicht genutzten **RMF**-Spulen aus Abbildung 4.10b werden hier nicht berücksichtigt. Analog zum **RMF** basiert die Induktormodellierung hier auf einer von **FVM**-Gitter unabhängigen Beschreibung. Für einen solchen Biot-Savart-Induktor des **TMF** ist das kantenbasierte Modell in Abbildung 4.16b abgebildet. Die Phasenlage der insgesamt sechs **TMF**-Spulen ist, wie schon beim **RMF**, jeweils um $\pi/3$ verschoben. Die unterste Spule weist dabei nach Gleichung (4.40) eine absolute Phasenverschiebung von $\alpha_0 = 0$ auf, und für die oberste Spule gilt $\alpha_0 = 5/3\pi$. Die Wellenlänge des **TMF** beträgt im Einklang mit Pal u. a. [2009, Kapitel 4.2] $\lambda_{\text{TMF}} = 447,6$ mm, womit im Vergleich zur Höhe $H = 60$ mm des leitfähigen Zylinders eine hinreichend langwellige Anregung gewährleistet ist. Aus Abbildung 4.16a ist zudem ersichtlich, dass auch beim **TMF**-Modell in *foam-extend* die Spulen außerhalb der nicht-leitfähigen Region liegen.

Unter der Voraussetzung der eingangs erwähnten **LF**-Approximation (4.124) lautet die analytische Lösung der zeitgemittelten Lorentz-Kraft nach Grants u. Gerbeth [2004] beim **TMF** folgendermaßen:

$$\langle \mathbf{f}_L \rangle_t = \frac{\sigma \omega_0 B_0^2 k_{\text{TMF}} R^2}{4} s_{\text{TMF}}(r) \mathbf{e}_z = \frac{\rho v^2}{R^3} F s_{\text{TMF}}(r) \mathbf{e}_z, \quad (4.131)$$

wobei es sich bei $k_{\text{TMF}} = 2\pi/\lambda_{\text{TMF}}$ um die **TMF**-Wellenzahl handelt. In einem axial am Konduktor ausgerichteten zylindrischen Koordinatensystem (r, φ, z) , dessen Ursprung mit dem Schwerpunkt der leitfähigen Region zusammenfällt, beinhaltet das elektromagnetische Kraftfeld beim idealen **TMF** also nur eine Komponente in axialer Richtung \mathbf{e}_z . Der dimensionslose Kraftparameter

$$F = \frac{k_{\text{TMF}} R}{2} \text{Ta}_M = \frac{\sigma \omega_0 B_0^2 k_{\text{TMF}} R^5}{4\rho v^2} \quad (4.132)$$

lässt sich indirekt auch über die schon bekannte magnetische Taylor-Zahl aus Gleichung (4.126) darstellen. Die **TMF**-Formfunktion ist nicht von der Höhe abhängig und fällt im Vergleich zum **RMF** wesentlich einfacher aus:

$$s_{\text{TMF}}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2. \quad (4.133)$$

Der Referenzwert B_0 der magnetischen Flussdichte im Zentrum der leitfähigen Region resultiert mit $B_0 = 1,988 \cdot 10^{-3} \text{ T}$ aus dem Spulenstrom, welcher für die Validierung am **TMF** konkret $\hat{I}_0 = 704 \text{ A}$ beträgt. Auf Grundlage der zuvor im Rahmen des **RMF**-Testfalls eingeführten Stoffeigenschaften der Legierung Ga-In-Sn und der Kreisfrequenz von $\omega_0 = 2\pi \cdot 50 \text{ Hz}$ ergibt sich damit ein Kraft-Parameter von $F = 4,638 \cdot 10^5$.

Für die genannten **TMF**-Parameter sind, ohne Berücksichtigung der **LF**-Approximation, die mit *foam-extend* erzielten Resultate der zeitgemittelten Lorentz-Kraft in Abbildung 4.17 anhand von zwei z - r -Konturplots dargestellt (durchgezogene Linien). Analog zu Abbildung 4.12 beinhaltet diese Darstellung zusätzlich einen Vergleich mit Ergebnissen der kommerziellen Software *Cobham Opera 2D* (gestrichelte Linien). Die Kraftverteilung ohne **LF**-Approximation weist beim **TMF** zwar eine Achsensymmetrie auf, allerdings keine Spiegelsymmetrie bezüglich der horizontalen r - φ -Ebene bei $z = 0$. Aus diesem Grund ist in Abbildungen 4.17a und 4.17b jeweils die gesamte Hälfte des Konduktors abgebildet. Erneut ist für die gezeigten Komponenten von $\langle \mathbf{f}_L \rangle_t$ eine sehr gute Übereinstimmung beider Ergebnisse zu erkennen. Gerade für die axiale Komponente ist kaum ein Unterschied zu erkennen.

Der numerischen Lösung von *foam-extend* liegt das selbe Gitter zugrunde, welches zuvor auch beim **RMF** zum Einsatz kam. Die Gitterparameter sind dazu in Tabelle 4.1 unter dem hervorgehobenen Eintrag (1,000) zu finden. Dabei umfasst die nötige Rechenzeit bis zur Konvergenz, bei einem normierten Zielresiduum von $1 \cdot 10^{-8}$ unter Verwendung einer einzelnen **CPU**, hier jedoch nur etwa die Hälfte der Zeit $\approx 280 \text{ s}$ (*Intel i5-3570*). Die Vergleichsrechnung aus *Cobham Opera 2D* basiert auf einer zweidimensionalen Modellierung mit $\approx 2 \cdot 10^4$ Knoten bzw. $\approx 4 \cdot 10^4$ Elementen und konvergiert in nur $\approx 5 \text{ s}$. Diese Rechenzeit ist allerdings auf Grund der in Abschnitt 4.1.5 geschilderten Vereinfachung nicht mit der Dauer der dreidimensionalen Simulation aus *foam-extend* vergleichbar.

Die Grafik in Abbildung 4.17b zeigt, neben den numerisch erzielten Ergebnissen aus *foam-extend* und *Cobham Opera 2D*, auch die analytische Lösung der axialen Komponente der zeitgemittelten Lorentz-

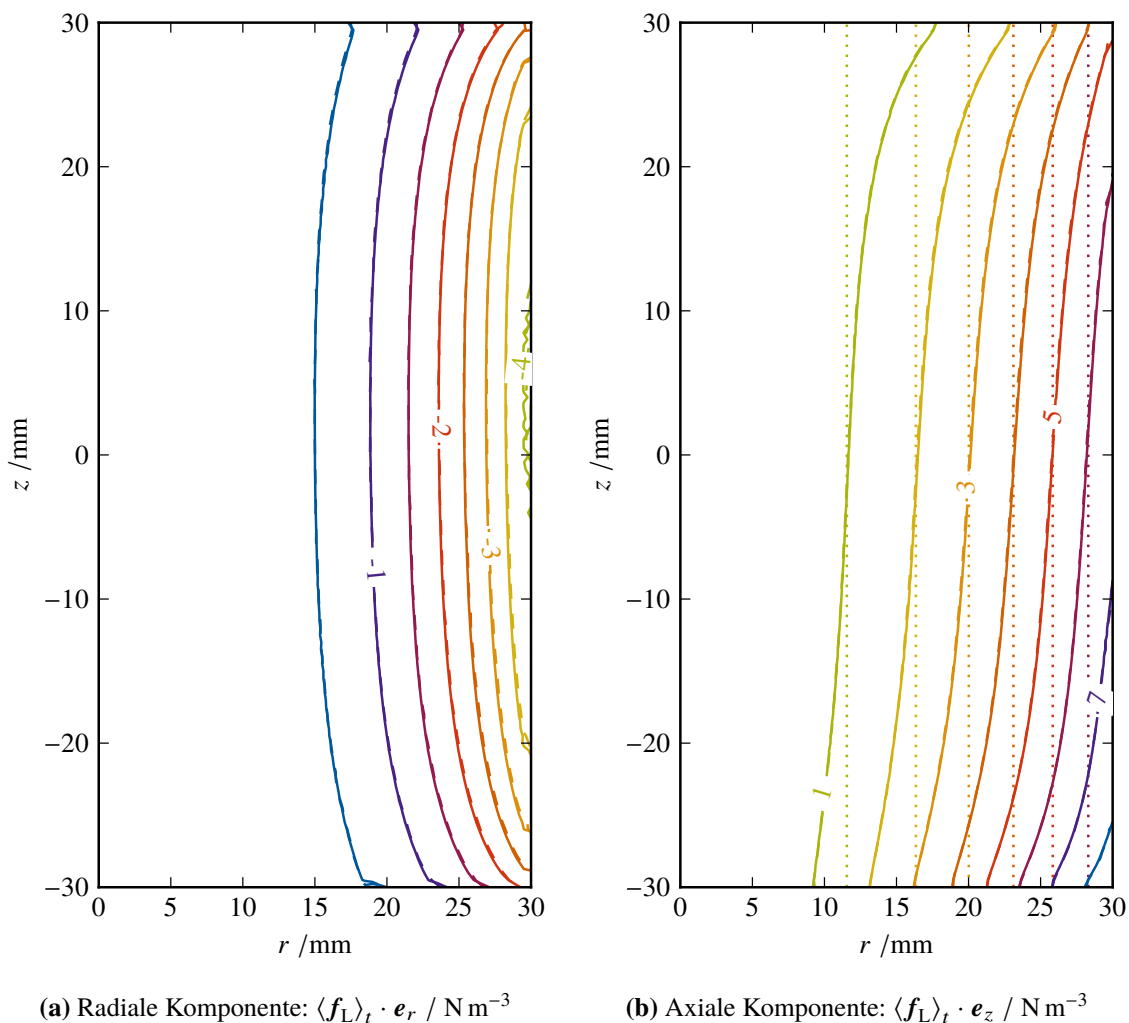


Abbildung 4.17: Zeitgemittelte Lorentz-Kraft $\langle f_L \rangle_t$ beim TMF ohne LF-Approximation: Verglichen werden Ergebnisse basierend auf *foam-extend* (durchgezogene Linien) mit Resultaten der kommerziellen Software *Cobham Opera 2D* (gestrichelte Linien). In Abbildung b ist für die axiale Komponente zusätzlich ein Vergleich mit der analytischen Lösung aus Gleichung (4.131) gemäß LF-Approximation gezeigt (gepunktete Linien).

Kraft unter Annahme der LF-Approximation nach Gleichung (4.131) (gepunktete Linien). Bezüglich der Annahme aus Gleichung (4.124) sticht hier – im Gegensatz zum RMF – der Einfluss durch die bewusst sehr hoch gewählte Kreisfrequenz, bzw. des großen Abschirmparameters von $S = 1,168$, im Zusammenspiel mit der endlichen Höhe der TMF-Spulenordnung deutlich hervor.

Eine numerische Nachbildung der LF-Approximation lässt sich wieder umsetzen, indem zunächst nur das durch die Spulen aufgeprägte Magnetfeld berücksichtigt wird. Eine axial unendlich ausgehende TMF-Spule kann durch eine beidseitig ausreichende Verlängerung des Induktormodells erzielt werden (hier jeweils 6 periodisch verschobene Kopien). Die Folge der auf diese Weise idealisierten Modellierung ist im Vergleich zur analytischen Lösung in Abbildung 4.18 gezeigt. Vergleichen mit Abbildung 4.17b zeichnet sich dabei eine deutlich bessere Übereinstimmung ab. Der dort noch erkennbare Unterschied steht in direktem Zusammenhang mit der unveränderten Wellenlänge λ_{TMF} .

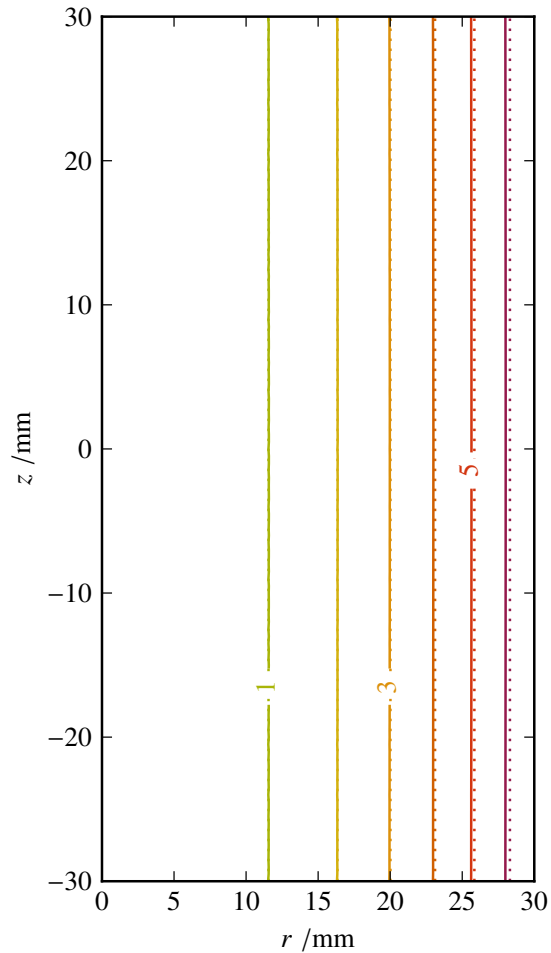


Abbildung 4.18: Vergleich der analytischen Lösung aus Gleichung (4.131) (gepunktete Linien) mit dem Simulationsergebnis der axialen Komponente $\langle f_L \rangle_t \cdot e_z / \text{N m}^{-3}$ der zeitlich gemittelten Lorentzkraft des TMF (durchgezogene Linien): Die Resultate basieren auf einer numerisch umgesetzten LF-Approximation in Verbindung mit sehr weit fortgesetzten TMF-Spulen.

In Analogie zu Abbildung 4.14 ist in Abbildung 4.19, für alle Gittervariationen aus Tabelle 4.1, das Verhalten der Fehlernormen (4.123) der in *foam-extend* berechneten zeitgemittelten Lorentzkraft ($Q \hat{=} \langle f_L \rangle_t$) dargestellt. Die Referenzlösung basiert auf dem feinsten Gitter (2,500). Die Normierung der Achsen orientiert sich jeweils am globalen Maximalwert der Fehlernormen bzw. Zellgrößen. Es zeichnet sich ein identisches Verhalten wie beim RMF ab, welches direkt mit der zuvor diskutierten Gitterqualität im Einklang steht. Damit ist umfänglich bestätigt, dass die grundlegende Modellierung für konstante Materialeigenschaften in *foam-extend* korrekt implementiert ist.

4.5.2 Übergänge zwischen Medien

Zur Validierung der eingebetteten Diskretisierung von Materialübergängen aus Abschnitt 4.4 kommt, im Vergleich zum RMF bzw. TMF, ein eher akademischer Testfall zum Einsatz, welcher sich jedoch stark an der Geometrie des RGS-Modells in Abbildung 2.4 aus Kapitel 2 orientiert [siehe Abbildung 4.20a]. Dazu dient als Konduktorregion nur das Gebiet der innerhalb des Gießrahmens

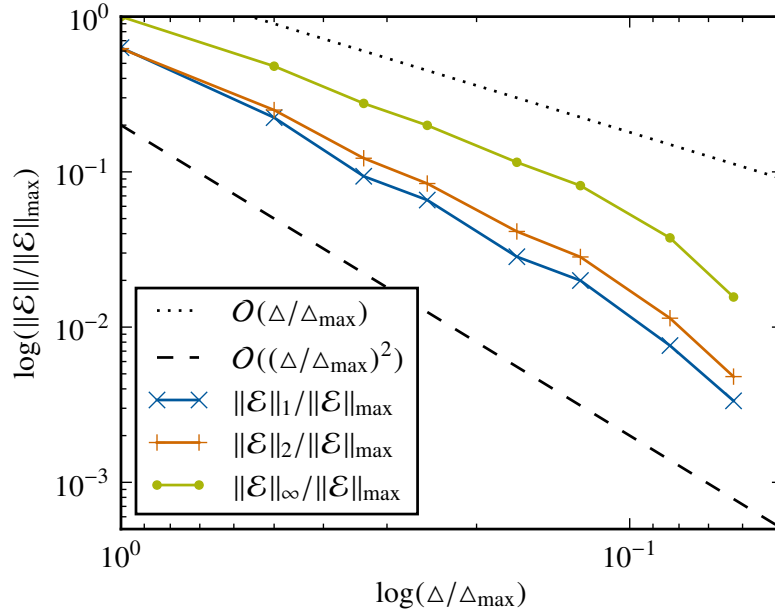
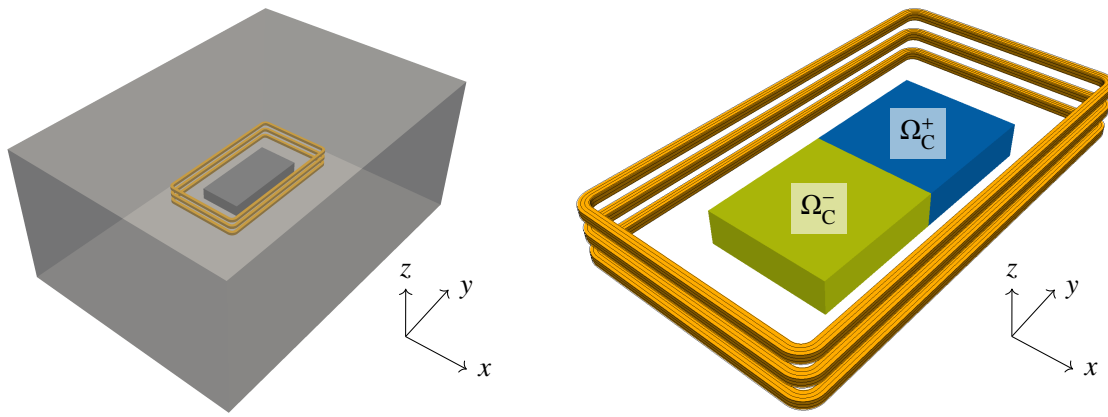


Abbildung 4.19: Fehlernormen (4.123) der in *foam-extend* berechneten zeitgemittelten Lorentz-Kraft ($\mathbf{Q} \hat{=} \langle \mathbf{f}_L \rangle_t$) des TMF für eine Variation der Gitterauflösung nach Tabelle 4.1: Als Referenzgröße dient das Ergebnis auf dem feinsten Gitter (2,500). Das Konvergenzverhalten des Fehlers verläuft je nach Norm zwischen erster und zweiter Ordnung.

liegenden Schmelze, wobei die Abrundungen des folglich quaderförmigen Bereiches nicht berücksichtigt werden. Die Abmessungen der leitfähigen Region belaufen sich damit auf 70 mm in der Tiefe (x -Richtung), 150 mm in der Breite (y -Richtung) und 20 mm in der Höhe (z -Richtung). Der Quader ist dabei so situiert, dass die x - y -Ebene mit dessen Bodenfläche zusammenfällt und der Ursprung des kartesischen Koordinatensystems genau im Zentrum dieser Grundseite liegt. Als Induktor kommt eine Rechteck- bzw. Rennbahnpule mit drei Windungen zur Anwendung, genau wie sie in Abbildung 2.5 bemaßt ist. Die Spule ist bezüglich des Konduktors in der x - y -Ebene zentrisch ausgerichtet, jedoch in der Höhe um 9 mm verschoben. Sie misst 130 mm in der Tiefe, 240 mm in der Breite und weist bei einer Steigung von 13 mm eine Querschnittsfläche von 25 mm² auf. Für den Quellstrom wird, auch analog zum RGS-Modell, ein Effektivwert von 1 000 A vereinbart bzw. eine Amplitude von $\hat{I}_0 = 1\,000 \sqrt{2} \text{ A} \approx 1\,414 \text{ A}$ angesetzt.

Durch eine zentrale Unterteilung des quaderförmigen Konduktors Ω_C in Bereiche unterschiedlicher Materialeigenschaften Ω_C^- und Ω_C^+ , wird für Validierungszwecke ein Materialübergang in Breitenrichtung y realisiert. Die entsprechende Aufteilung ist in Abbildung 4.20b prinzipiell veranschaulicht. Dabei gilt die Vereinbarung, dass Ω_C^- in negativer und Ω_C^+ in positiver y -Richtung liegen. Es werden nachfolgend zwei Testkonfigurationen analysiert: Im ersten Fall verläuft der Materialübergang orthogonal zur x - y -Ebene und das FVM-Gitter des Konduktors beinhaltet ausschließlich orthogonale Flächen [vgl. Abbildung 4.21]. Im zweiten Fall ist der Übergang um 45° geneigt, sodass die örtliche Diskretisierung auch entsprechend nicht-orthogonale Flächen hervorbringt [vgl. Abbildung 4.25]. Die dabei genutzten numerischen Gitter sind mit ihren zugehörigen Merkmalen in Tabelle 4.4 aufgelistet. Das Gitter, welches für Vergleichsrechnungen in *Cobham Opera 3D* zum Einsatz kommt, umfasst



(a) Modell zur numerischen Analyse von Materialübergängen bei quaderförmiger Konduktorgeometrie.

(b) Unterteilung des Konduktors Ω_C in Bereiche unterschiedlicher Materialeigenschaften Ω_C^- und Ω_C^+ .

Abbildung 4.20: Konfiguration zu Validierung der eingebetteten Diskretisierung von Materialgrenzen aus Abschnitt 4.4: Modell (a) und Aufteilung der leitfähigen Region mit Biot-Savart-Induktor (b).

Tabelle 4.4: Numerische Gitter mit unterschiedlicher örtlicher Auflösung: Die erste Spalte beinhaltet Skalierungsfaktoren, Δx und Δ stehen hingegen für eine jeweils charakterisierte und dimensionslose Zellgröße. Bei Δ/Δ_{\max} handelt es sich um deren relative Skalierung bezogen auf das größte Gitter. Mit der Variation der Auflösung ändert sich sowohl die Gesamtanzahl n an finiten Volumina als auch die Anzahl Zellen n_C der leitfähigen Region. In der letzten Spalte findet man den nötigen Rechenaufwand einer Materialübergangs-Simulation mit Bezug auf eine CPU.

Gitter	Δx / mm	Δ	Δ/Δ_{\max}	n	n_C	n/n_C	$t_{\text{CPU}} / \text{s}$
0,125	10,000	8,00	1,000 0	2 580	512	5,00	1
0,250	5,000	4,00	0,500 0	8 068	2 048	3,94	2
0,375	3,750	2,67	0,333 3	21 392	6 416	3,33	6
0,500	2,500	2,00	0,250 0	34 920	10 896	3,20	10
0,750	1,875	1,33	0,166 7	111 776	33 072	3,38	45
1,000	1,250	1,00	0,125 0	173 216	46 368	3,73	80
1,500	0,833	0,67	0,083 3	590 688	142 912	4,13	340
2,000	0,625	0,50	0,062 5	1 151 248	246 288	4,67	840
2,500	0,500	0,40	0,050 0	2 252 544	445 680	5,05	1 830
3,000	0,417	0,33	0,041 7	4 115 248	767 296	5,36	2 710

$\approx 7 \cdot 10^6$ tetraedrische Elemente. Die Rechenzeit bis zur Konvergenz beträgt dort typischerweise ≈ 2000 s unter Verwendung von vier CPU-Kernen.

Orthogonales Gitter

Eine Visualisierung des senkrechten Materialübergangs ist am Beispiel von Gitter (0,500) nach Tabelle 4.4 in Abbildung 4.21 gezeigt. Wie schon zuvor beim RMF und TMF, findet auch hier wieder ein Biot-Savart-Induktor Anwendung. Abbildung 4.21 macht in dieser Hinsicht deutlich, dass dazu eine Verfeinerung der nicht-leitfähigen Region nur im Nahbereich des Konduktors nötig ist, da lediglich das induzierte magnetische Vektorpotential vom FVM-Gitter aufgelöst werden muss. Im Vergleich zu

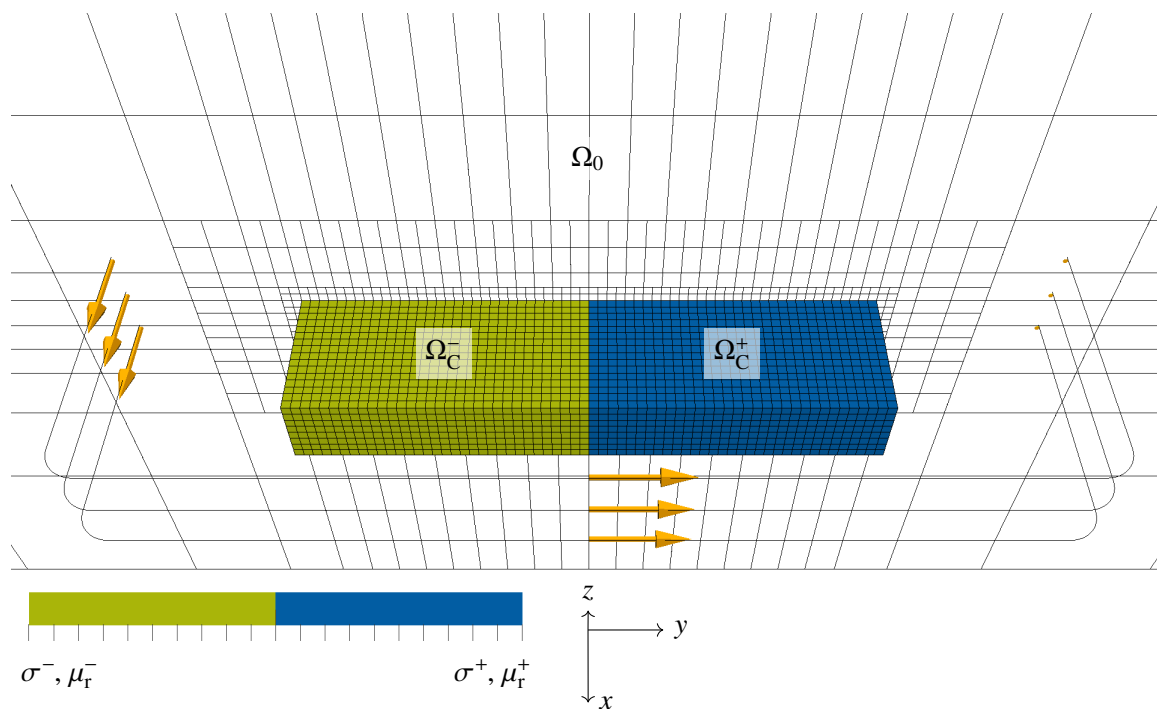


Abbildung 4.21: Orthogonale Grenzfläche am senkrechten Übergang zweier verschiedener Medien Ω_C^- und Ω_C^+ : In der Darstellung ist sowohl für den Konduktor als auch für einen Teil der nichtleitfähigen Region das Gitter (0,500) aus Tabelle 4.4 dargestellt. Obwohl bei Ersterem prinzipiell eine hexaedrische Struktur erkennbar ist, handelt es sich dabei um ein polyedrisches Gitter. Alle Flächen im Inneren von Ω_C sind streng orthogonal.

Abbildung 4.20b wird der Induktor, wie in der Darstellung sichtbar, nur durch einen einzelnen Pfad pro Windung modelliert. Weiterhin soll in vereinfachter Weise angedeutet werden, wie in *foam-extend* durch die Handhabung unstrukturierter Gitter eine maßgeschneiderte Gitterauflösung gelingt.

In den Abbildungen 4.22 bis 4.24 werden, am Beispiel der induzierten Stromdichte \mathbf{j} im Konduktor, die Simulationsergebnisse für eine senkrechte Grenzfläche anhand drei verschiedener Konfigurationen vorgestellt und mit Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* verglichen. In Anlehnung an die charakteristischen Parameter des RGS-Prozesses dient hier in allen Fällen flüssiges Silizium als Referenzmaterial. Die Stoffeigenschaften dieses Halbmetalls sind in Tabelle 2.1 aufgelistet. Die Kreisfrequenz der Erregerspule beträgt im Referenzfall $\omega_0 = 2\pi \cdot 10 \text{ kHz}$. Alle bezüglich der Referenzdaten variierten Parameter sind in Abbildung 4.22a, 4.23a und 4.24a jeweils in der unteren rechten Ecke aufgelistet.

Im ersten der drei Validierungsfälle am senkrechten Übergang fällt die elektrische Leitfähigkeit an der Grenzfläche sprunghaft von $\sigma^- = 1,2 \cdot 10^6 \text{ S m}^{-1}$ auf $\sigma^+ = 1/12 \sigma^- = 1 \cdot 10^5 \text{ S m}^{-1}$ ab. Bei einer reduzierten Kreisfrequenz von $\omega_0 = 2\pi \cdot 1 \text{ kHz}$ beträgt die minimale Skintiefe nach Gleichung (4.47) $\delta \approx 14,53 \text{ mm}$. Abbildung 4.22a zeigt das Ergebnis einer Simulation auf Basis des Gitters (1,000) aus Tabelle 4.4. Der Konturplot stellt den Betrag der Amplitude der induzierten Stromdichte \mathbf{j} dar. Dort lässt sich bereits mit bloßem Auge die zuvor genannte Skintiefe größenordnungsmäßig verifizieren. Darunter, in Abbildung 4.22b, ist der Verlauf aller in *foam-extend* berechneten Komponenten des Phasors von \mathbf{j} entlang des in Abbildung 4.22a gezeigten Pfades im Vergleich zu *Cobham Opera 3D* gezeigt. Der Pfad verläuft zentral und geradlinig in y -Richtung, bei einem konstanten Abstand von

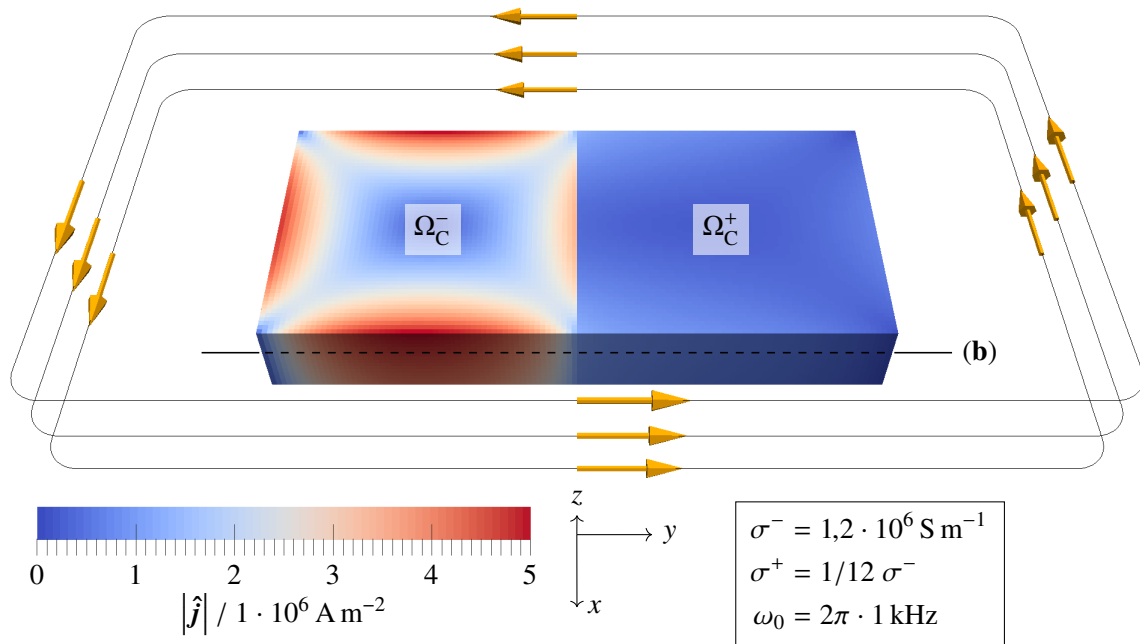
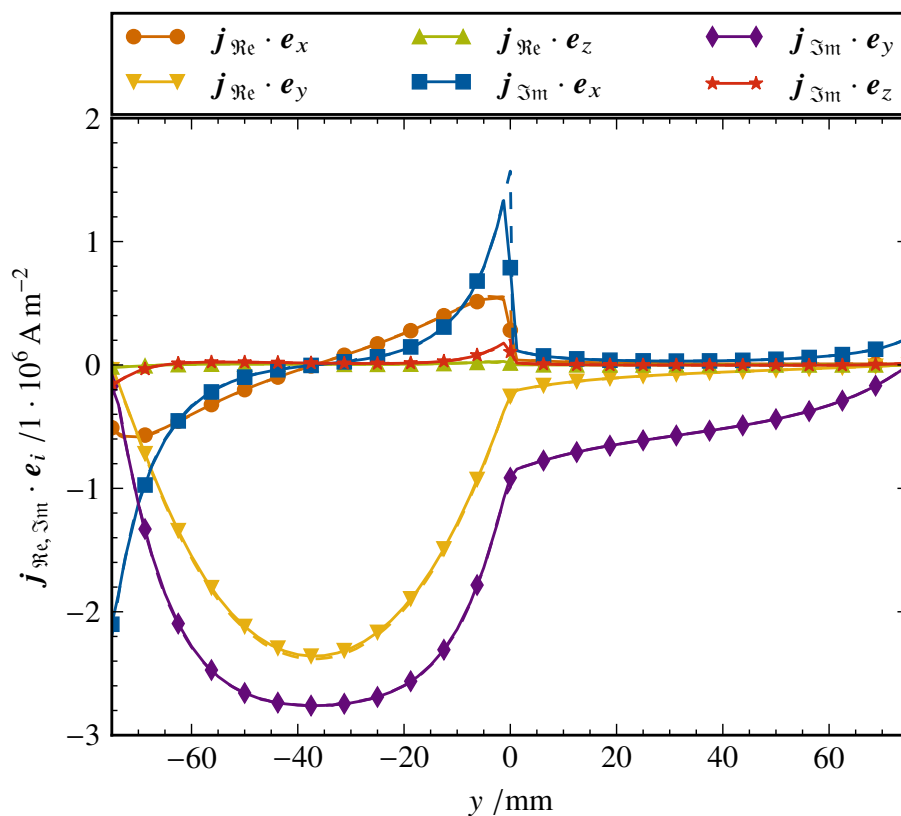
(a) Konturplot des Betrages der Amplitude der induzierten Stromdichte j .(b) Komponenten der komplexen Amplitude \hat{j}_C von j (durchgezogene Linien, Symbole) entlang des in (a) gezeigten Pfades im Vergleich mit lokalen Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien).

Abbildung 4.22: Sprunghafte Änderung der elektrischen Leitfähigkeit σ an einer senkrechten Grenzfläche: Simulationsergebnis (a) aus *foam-extend* für eine mittlere Frequenz auf Basis des Gitters (1,000) aus Tabelle 4.4 und Vergleich mit der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (b).

5 mm zur Stirnseite des Konduktors in x -Richtung. Mit der Gitterweite von $\Delta x \approx 0.1\delta$ des Gitters (1,000) liefern die Simulationen von *foam-extend* und *Cobham Opera 3D* hier nahezu identische Ergebnisse. Die kleineren Abweichungen direkt am Übergang sind der Verarbeitung und Visualisierung zuzuschreiben, da sich die diskreten Daten in *foam-extend*, im Gegensatz zu der knotenbasierten Zuordnung aus *Cobham Opera 3D*, jeweils auf die Schwerpunkte der Zellen beziehen. Sehr anschaulich wird in Abbildung 4.22b illustriert, wie Komponenten senkrecht zur Grenzfläche stetig verlaufen, während die Sprünge paralleler Komponenten numerisch korrekt erfasst werden.

Beim zweiten der drei Validierungsfälle am senkrechtem Übergang, mit einer für das RGS-Verfahren typischen Kreisfrequenz von $\omega_0 = 2\pi \cdot 10 \text{ kHz}$, sind die Resultate in Abbildung 4.23 für das Gitter (2,000) aus Tabelle 4.4 zu finden. Der Sprung der elektrische Leitfähigkeit ist gegenüber Abbildung 4.22 unverändert. Durch die höhere Frequenz beträgt hier die Skintiefe nach Gleichung (4.47) nur $\delta \approx 4,59 \text{ mm}$. Im direkten Vergleich mit Abbildung 4.22a ist in Abbildung 4.23a die geringere Penetration anhand der Amplitude der induzierten Stromdichte \mathbf{j} deutlich erkennbar. Bezüglich einer Referenzlösung aus *Cobham Opera 3D* ergeben sich, bei einer Gitterweite von $\Delta x \approx 0.1\delta$, wie zuvor nahezu identische Ergebnisse für die Komponenten des Phasors von \mathbf{j} . Während die sprunghafte Änderung von tangentialen Komponenten in Abbildung 4.23b deutlich stärker ausgeprägt ist als in Abbildung 4.22b, verlaufen die Normalkomponenten auch hier stetig.

Im letzten Validierungsfall am senkrechtem Übergang ist die elektrische Leitfähigkeit mit $\sigma^- = \sigma^+ = 1,2 \cdot 10^6 \text{ S m}^{-1}$ im gesamten Konduktor konstant, dafür ändert sich die relative magnetische Permeabilität an der Grenzfläche von $\mu_r^- = 1$ auf $\mu_r^+ = 10 \mu_r^-$. Trotz reduzierter Kreisfrequenz von $\omega_0 = 2\pi \cdot 1 \text{ kHz}$ beträgt die minimale Skintiefe nach Gleichung (4.47) hier durch die Magnetisierung auch nur $\delta \approx 4,59 \text{ mm}$. Am Beispiel des Gitters (2,000) aus Tabelle 4.4 ist in Abbildung 4.24a wieder ein Konturplot von Resultaten der induzierten Stromdichte \mathbf{j} aus *foam-extend* dargestellt. Wie bei Abbildung 4.23a wird durch eine Gegenüberstellung mit Abbildung 4.22a die verringerte Skintiefe erkennbar. Im Vergleich zu Abbildung 4.23a ergibt sich jedoch abseits vom Rand des Konduktors eine in beiden Teilgebieten eher gleichmäßig verteilte Stromdichte.

In Abbildung 4.24 ist anhand der Verläufe der berechneten Komponenten des Phasors von \mathbf{j} über die Grenzfläche hinweg wieder eine sehr gute Übereinstimmung von Resultaten aus *foam-extend* und *Cobham Opera 3D* zu erkennen. Im Gegensatz zu einer Diskontinuität in σ ändert sich die Stromdichte hier nicht sprunghaft an der Materialgrenze. Das macht eindrucksvoll deutlich, dass sich die eingebettete Diskretisierung aus Abschnitt 4.4 nicht nur für Fälle diskontinuierlicher elektrischer Leitfähigkeit eignet. Nahezu identische Ergebnisse wurden für die Konfiguration mit der sprunghaften Änderung der relativen magnetischen Permeabilität auch bei einer Gitterweite von $\Delta x \approx 0.1\delta$ erzielt.

Nicht-orthogonales Gitter

Eine Darstellung des schrägen Materialübergangs ist am Beispiel des Gitters (0,500) nach Tabelle 4.4 in Abbildung 4.25 sehen. Dem FVM-Gitter liegt die gleiche Struktur zugrunde wie im orthogonalen Fall, d. h. die Schräge wird dadurch erreicht, dass die Verteilung auf Deck- und Grundfläche des Konduktors jeweils gegenläufig in y -Richtung versetzt werden. Dadurch werden alle Zellen im Inneren gegenüber ihrer Ursprungsform in der y - z -Ebene rhombenförmig geschert. Mit Erinnerung

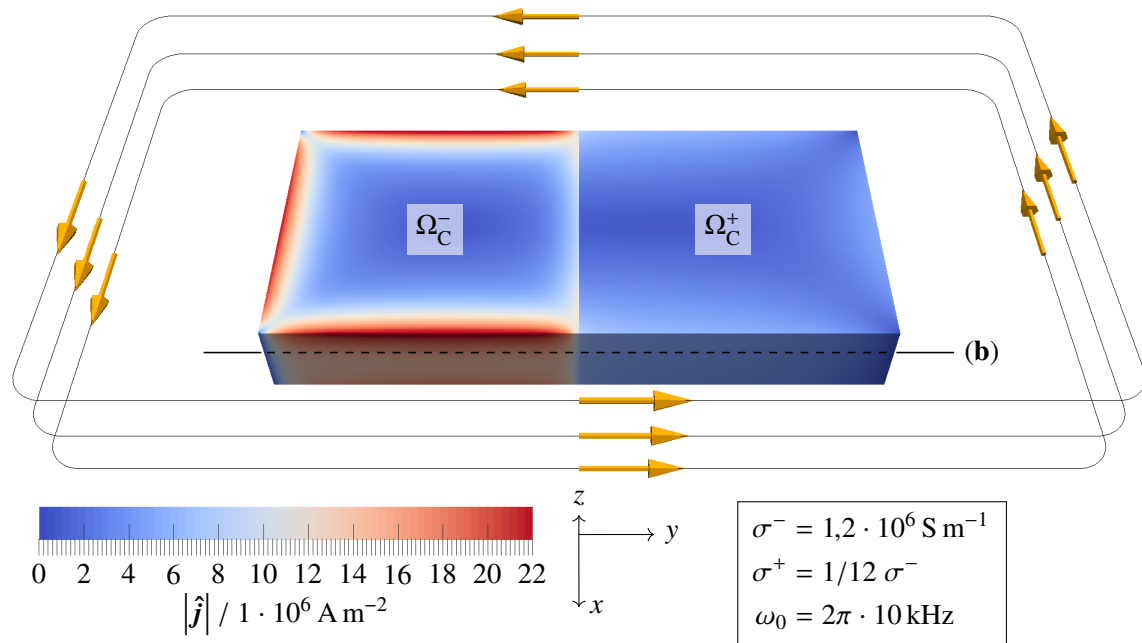
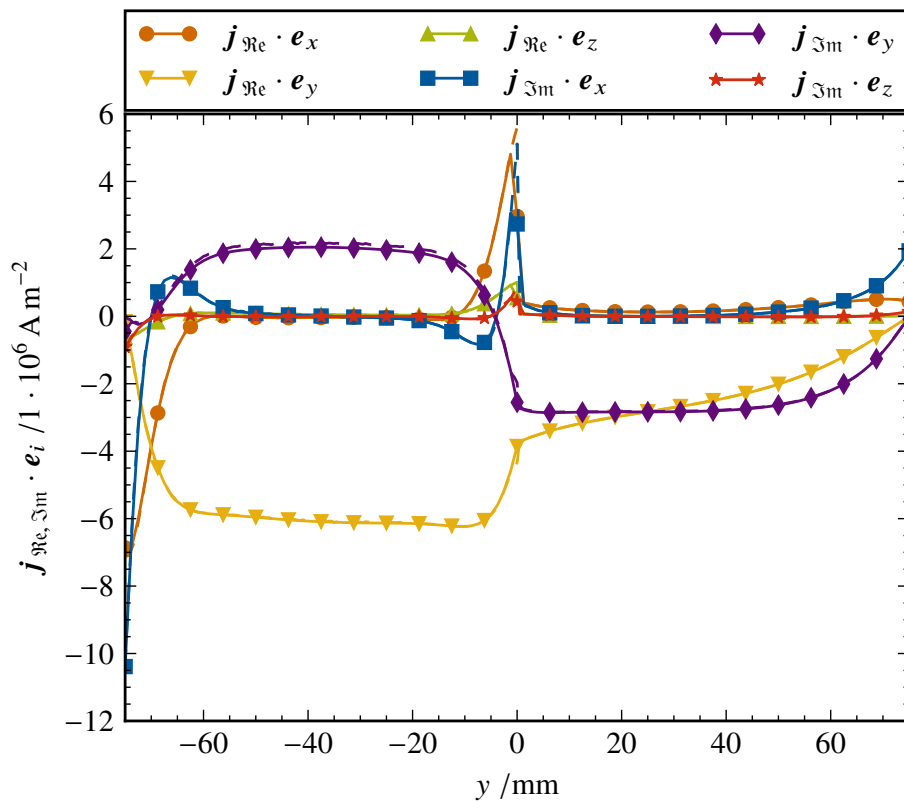
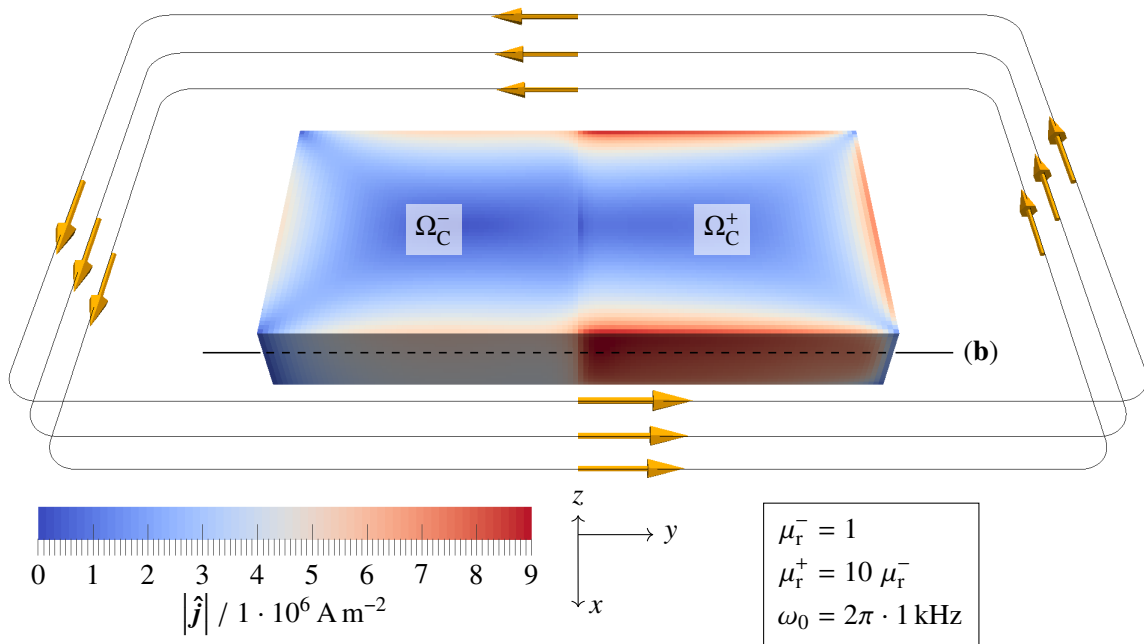
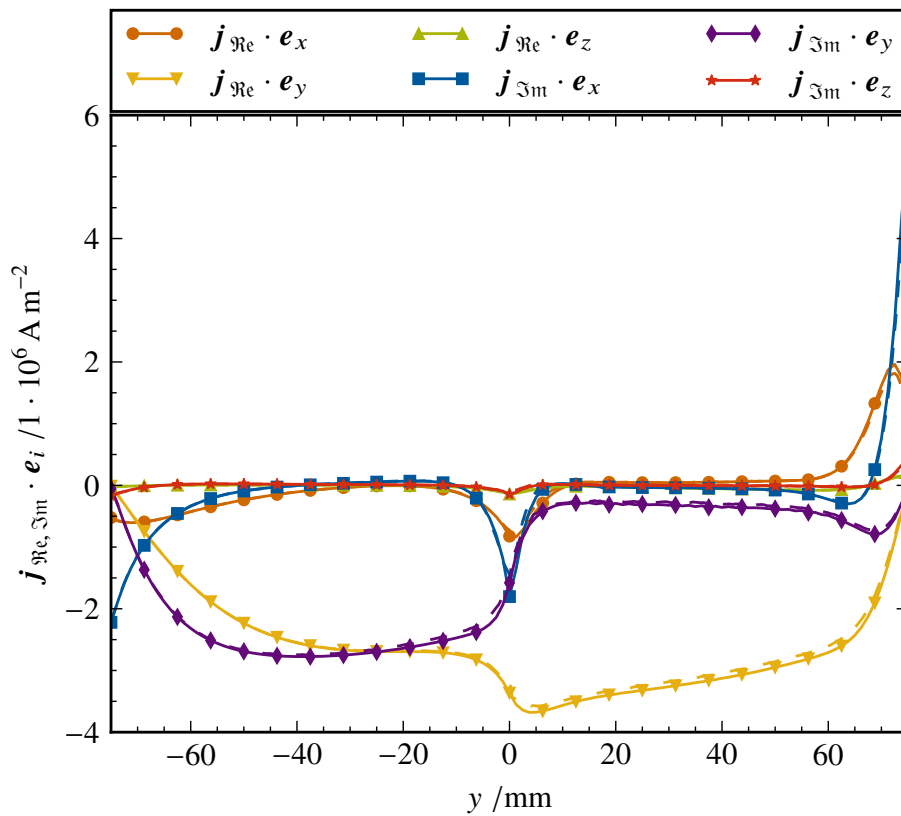
(a) Konturplot des Betrages der Amplitude der induzierten Stromdichte j .(b) Komponenten der komplexen Amplitude \hat{j}_C von j (durchgezogene Linien, Symbole) entlang des in (a) gezeigten Pfades im Vergleich mit lokalen Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien).

Abbildung 4.23: Sprunghafte Änderung der elektrischen Leitfähigkeit σ an einer senkrechten Grenzfläche: Simulationsergebnis (a) aus *foam-extend* für eine hohe Frequenz auf Basis des Gitters (2,000) aus Tabelle 4.4 und Vergleich mit der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (b).



(a) Konturplot des Betrages der Amplitude der induzierten Stromdichte j



(b) Komponenten der komplexen Amplitude \hat{j}_C von j (durchgezogene Linien, Symbole) entlang des in (a) gezeigten Pfades im Vergleich mit lokalen Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien).

Abbildung 4.24: Sprunghafte Änderung der magnetischen Permeabilität μ_r an einer senkrechten Grenzfläche: Simulationsergebnis (a) aus *foam-extend* für eine mittlere Frequenz auf Basis des Gitters (2,000) aus Tabelle 4.4 und Vergleich mit der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (b).

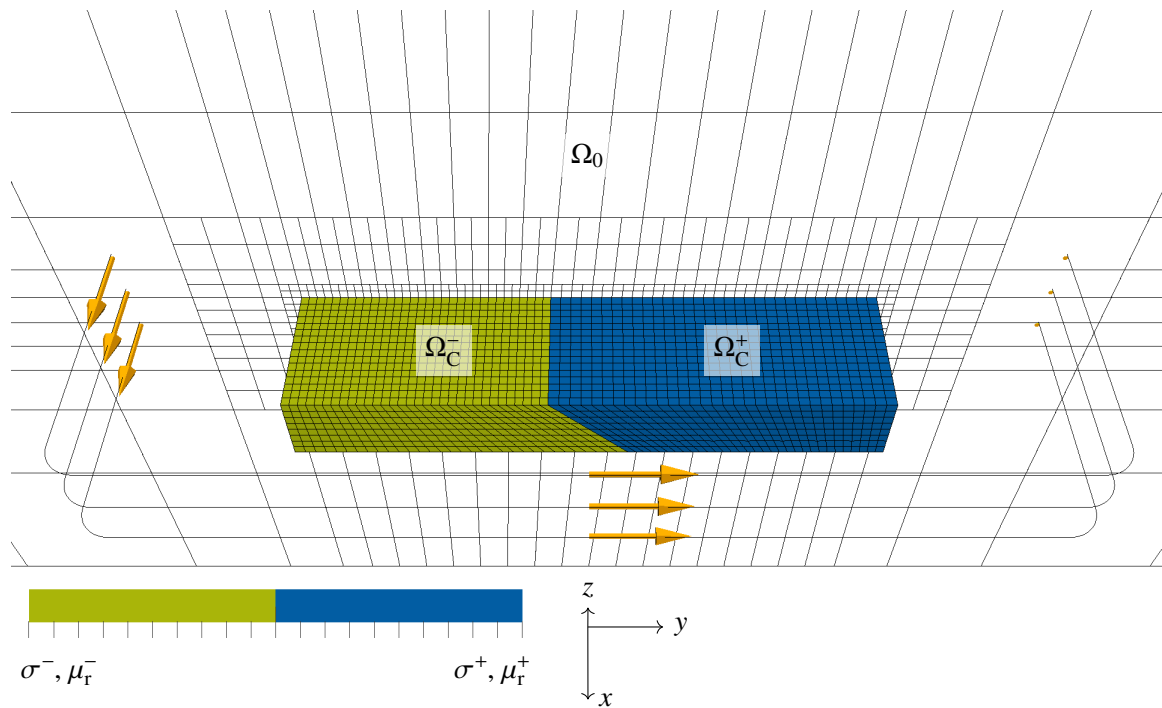
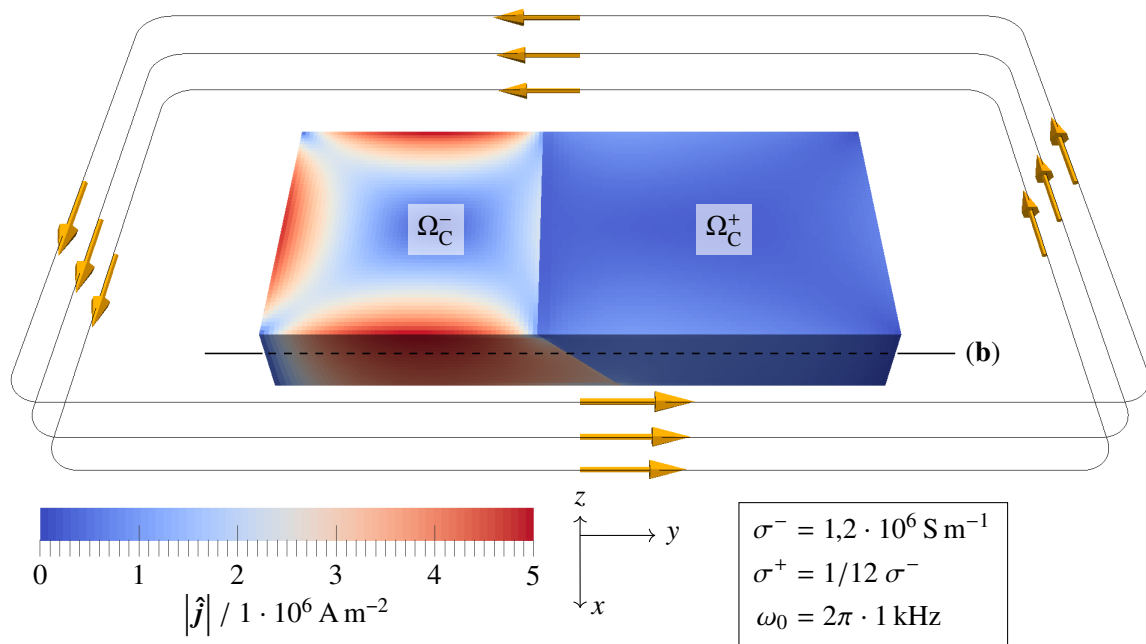


Abbildung 4.25: Nicht-orthogonale Grenzfläche an einem um 45° geneigten Übergang zweier verschiedener Medien Ω_C^- und Ω_C^+ : In der Darstellung ist sowohl für den Konduktor als auch für einen Teil der nicht-leitfähigen Region das Gitter (0,500) aus Tabelle 4.4 dargestellt. Obwohl bei Ersterem prinzipiell eine hexaedrische Struktur erkennbar ist, handelt es sich, genau wie in Abbildung 4.21, um ein polyedrisches Gitter. Alle Flächen im Inneren von Ω_C sind hier jedoch nicht-orthogonal.

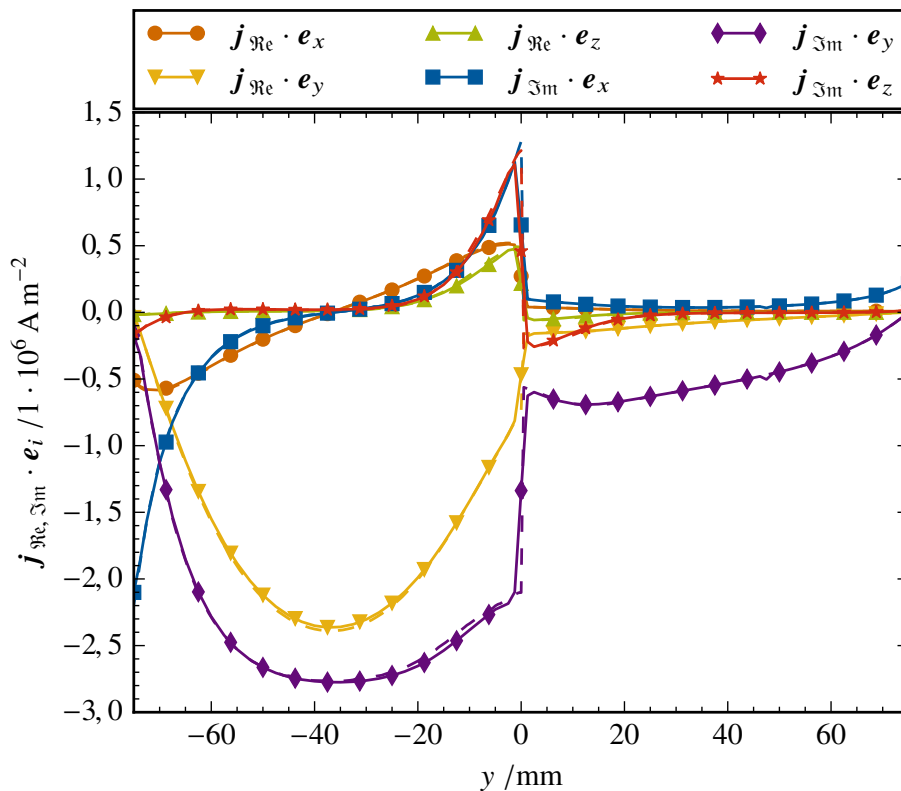
an Kapitel 3 sowie Abschnitt 3.3.2 im Speziellen sollte klar sein, dass damit die Fehlerordnung der Diskretisierung auf Deck- und Grundfläche, welche ja Ränder des Konduktors sind, in Richtung eines Fehlerverhaltens erster Ordnung reduziert wird. Im Inneren wird dafür aber die nicht-orthogonale Korrektur der eingebetteten Diskretisierung aus Abschnitt 4.4.2 auf die Probe gestellt. Die Modellierung der Spulen erfolgt, genau wie bei den zuvor gezeigten orthogonalen Testfällen, über eine kantenbasierte Beschreibung nach dem Gesetz von Biot-Savart.

Anhand der Abbildungen 4.26 bis 4.28 werden für die schräge Grenzfläche Simulationsergebnisse aus *foam-extend* mit Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* verglichen. Dies erfolgt, wie schon bei den senkrechten Validierungsfällen, am Beispiel der im Konduktor induzierten Stromdichte \mathbf{j} für verschiedene Konfigurationen. Hinsichtlich der Vergleichbarkeit kommen dazu auch die selben drei Parametersets zur Anwendung wie zuvor im Zusammenhang mit den Abbildungen 4.22 bis 4.24.

Eine Gegenüberstellung der Abbildungen 4.22a bis 4.24b auf der einen Seite, und der Abbildungen 4.26a bis 4.28b auf der anderen Seite verdeutlicht, dass die eingebettete Diskretisierung aus Abschnitt 4.4.2 auch im Falle der geneigten Grenzfläche korrekte Ergebnisse liefert. Bei abrupten Änderung der elektrischen Leitfähigkeit weisen hier, gegenüber dem orthogonalen Fall, alle sechs Komponenten der komplexen Amplitude von \mathbf{j} Unstetigkeiten auf. Für beide Konfigurationen aus Abbildung 4.26 und Abbildung 4.27 ist in dieser Hinsicht eine sehr gute Übereinstimmung gegeben. Durch die schiefen Zellen ergeben sich kleinere Ungenauigkeiten nahe der Grenzfläche in stärkerem Maße aus Datenextraktion und Interpolation zur Visualisierung, als im orthogonalen Fall. Mit dem



(a) Konturplot des Betrages der Amplitude der induzierten Stromdichte j



(b) Komponenten der komplexen Amplitude \hat{j}_C von j (durchgezogene Linien, Symbole) entlang des in (a) gezeigten Pfades im Vergleich mit lokalen Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien).

Abbildung 4.26: Sprunghafte Änderung der elektrischen Leitfähigkeit σ an einer schrägen Grenzfläche: Simulationsergebnis (a) aus *foam-extend* für eine mittlere Frequenz auf Basis des Gitters (1,000) aus Tabelle 4.4 und Vergleich mit der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (b).

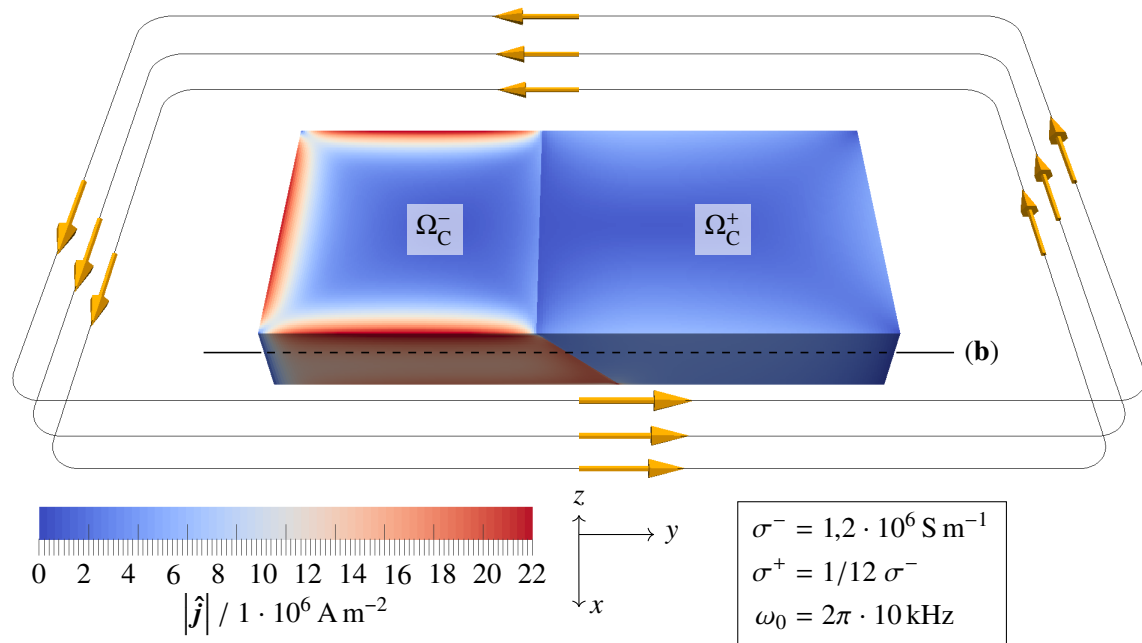
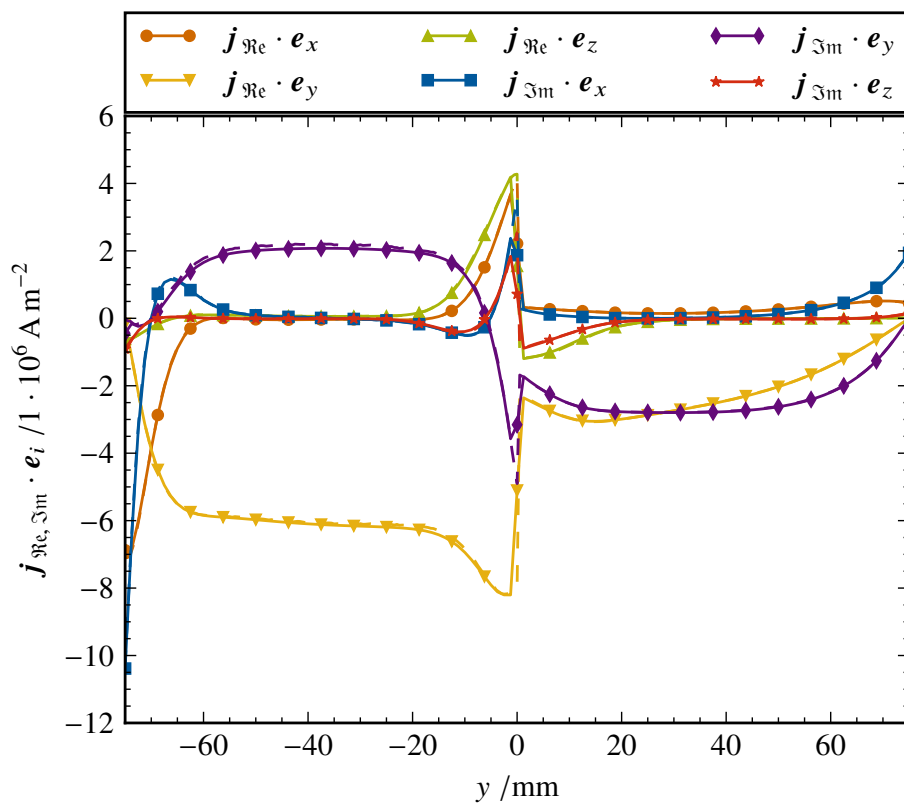
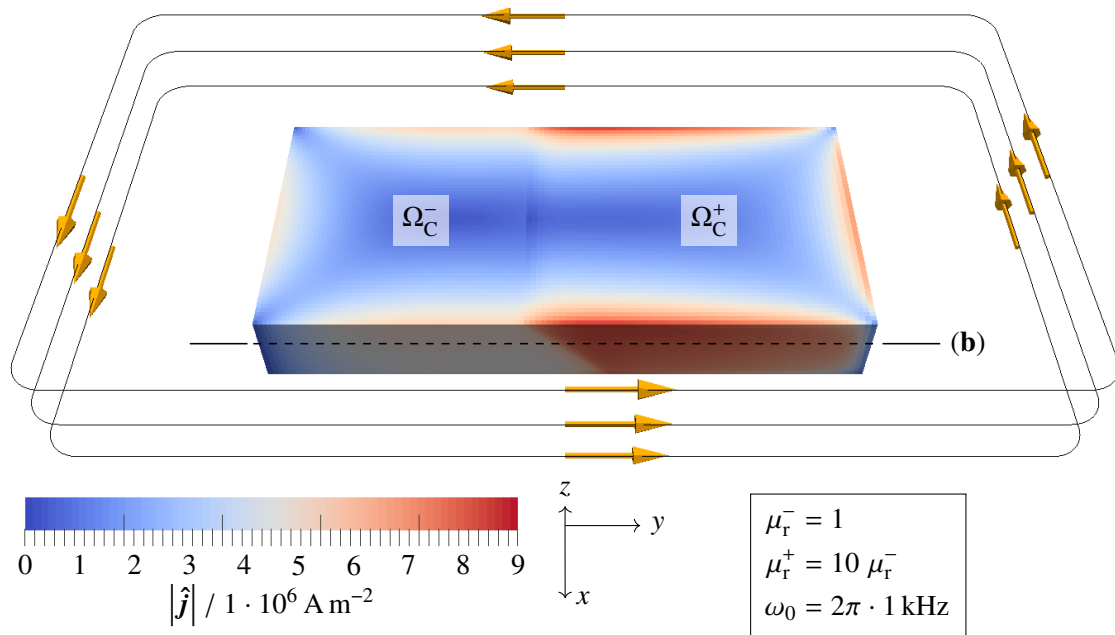
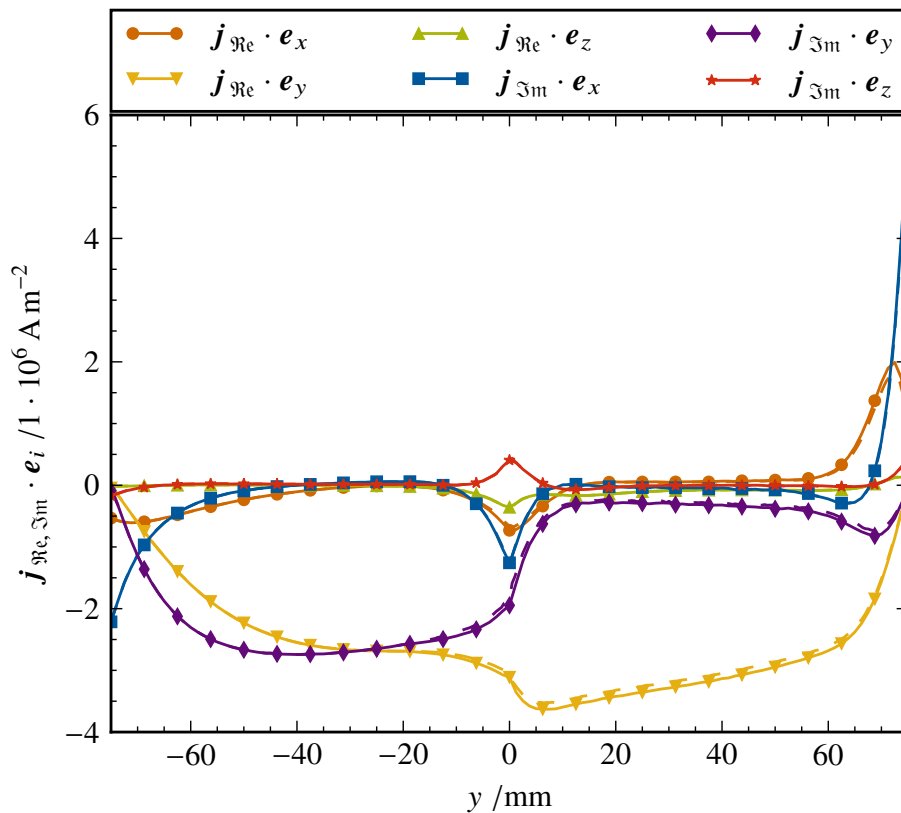
(a) Konturplot des Betrages der Amplitude der induzierten Stromdichte j (b) Komponenten der komplexen Amplitude \hat{j}_C von j (durchgezogene Linien, Symbole) entlang des in (a) gezeigten Pfades im Vergleich mit lokalen Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien).

Abbildung 4.27: Sprunghafte Änderung der elektrischen Leitfähigkeit σ an einer schrägen Grenzfläche: Simulationsergebnis (a) aus *foam-extend* für eine hohe Frequenz auf Basis des Gitters (2,000) aus Tabelle 4.4 und Vergleich mit der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (b).



(a) Konturplot des Betrages der Amplitude der induzierten Stromdichte j



(b) Komponenten der komplexen Amplitude \hat{j}_C von j (durchgezogene Linien, Symbole) entlang des in (a) gezeigten Pfades im Vergleich mit lokalen Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* (gestrichelte Linien).

Abbildung 4.28: Sprunghafte Änderung der magnetischen Permeabilität μ_r einer schrägen Grenzfläche: Simulationsergebnis (a) aus *foam-extend* für eine mittlere Frequenz auf Basis des Gitters (2,000) aus Tabelle 4.4 und Vergleich mit der kommerziellen Software *Cobham Opera 3D* (b).

dritten Testfall, für welchen die Resultate in Abbildung 4.28 zusammengestellt sind, verhält es sich im Detail erstaunlicherweise recht ähnlich wie mit einem vollständig rechtwinkligen Gitter. Aber auch hier liefert das genutzte Lösungsverfahren äußerst befriedigende Ergebnisse.

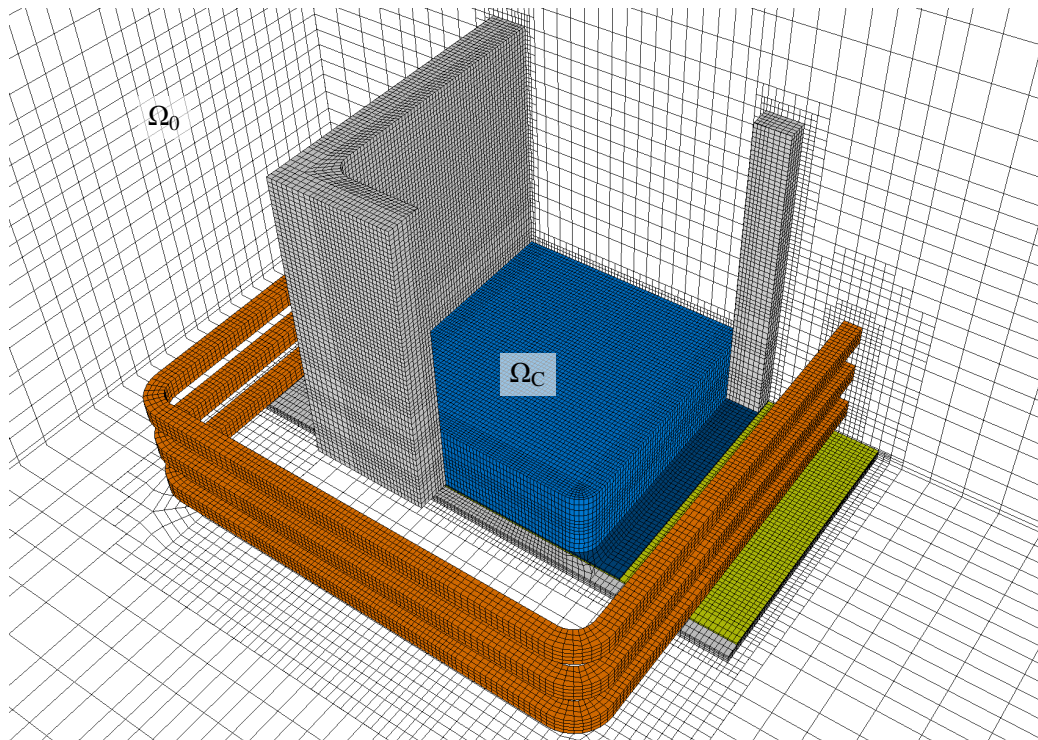
4.6 Elektromagnetische Felder beim RGS-Prozess

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse einer elektromagnetischen Simulation mit dem dreidimensionalen RGS-Modell nach Abbildung 2.4 präsentiert und damit demonstriert, dass sich die zuvor validierte Neuentwicklung aus diesem Kapitel für solche numerischen Berechnungen beim RGS-Prozess bestens eignen. Der harmonische Quellstrom weist beim RGS-Verfahren, wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, eine Amplitude von $\hat{I}_0 = 1000 \sqrt{2} \text{ A} \approx 1414 \text{ A}$ und die Anregungsfrequenz einen Wert von $f_0 = 10 \text{ kHz}$ auf. Hier kommt ein Gitter zum Einsatz, welches über die in *OpenFOAM* und *foam-extend* mitgelieferten Programme (*blockMesh*, *snappyHexMesh*) in einem mehrstufigen Verfahren erstellt wurde. Die Grundlage dieses Gitters bildet eine umfangreiche Blockstruktur aus insgesamt 912 Blöcken, die alle wesentlichen geometrischen Elemente in vereinfachter Form repräsentiert. Durch Unterteilung der Blöcke in Zellen lässt sich, ausgehend von der zugrundeliegenden Struktur, mit anschließend selektiver Verfeinerung die Gitterauflösung gezielt den numerischen Bedürfnissen anpassen. Ein Ausschnitt eines auf diese Weise erstellten Gitters ist in Abbildung 4.29a zu sehen. Zur besseren Visualisierung ist das dort abgebildete Gitter mit $n \approx 1,5 \cdot 10^6$ Kontrollvolumina jedoch nur relativ grob aufgelöst, wohingegen für die Rechnung in diesem Abschnitt ein feineres Gitter mit $n \approx 4,3 \cdot 10^6$ Zellen, davon $n_C \approx 2,1 \cdot 10^6$ in Ω_C eingesetzt wurde.

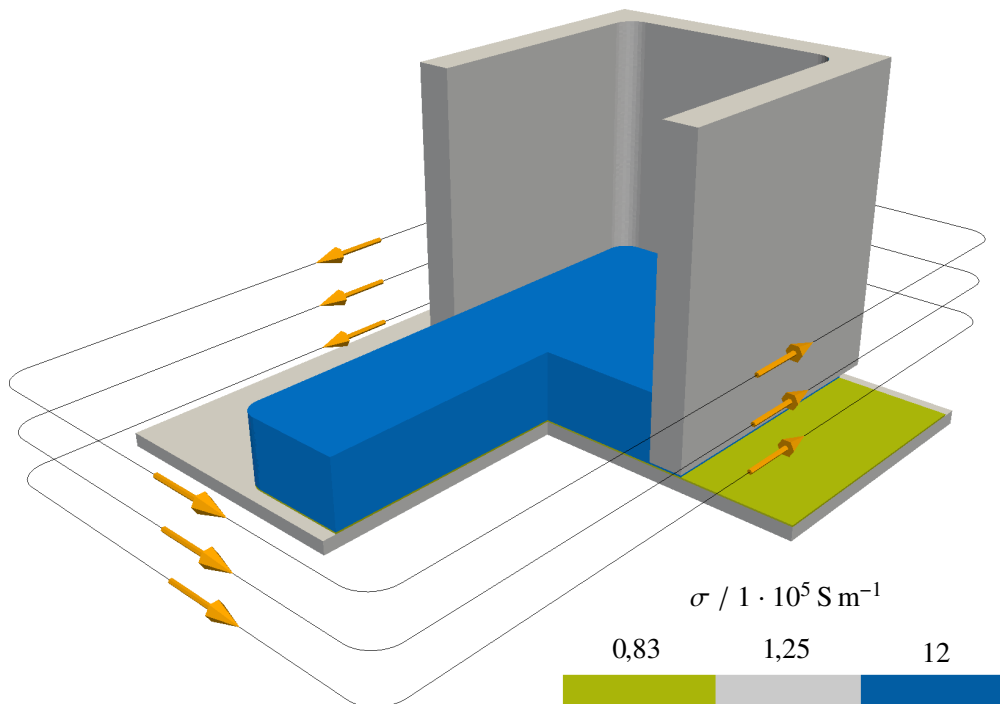
Im Vergleich mit den Validierungsfällen aus dem letzten Abschnitt, setzt sich die leitfähige Region des RGS-Modells aus insgesamt drei verschiedenen Materialbereichen zusammen [siehe Abbildung 2.5]: Der Gießrahmen und das Substrat bestehen aus Grafit, das extrahierte Band aus festem Silizium und die Schmelze aus flüssigem Silizium. Die Teilbereiche sind mit konstant angenommenen Stoffdaten der elektrischen Leitfähigkeit aus Tabelle 2.1 in Abbildung 4.29b visualisiert. Dabei ergeben sich nach Gleichung (4.47) jeweils Skintiefen von $\delta_{\text{Grafit}} \approx 14,24 \text{ mm}$, $\delta_{\text{Si (fest)}} \approx 17,47 \text{ mm}$ und $\delta_{\text{Si (flüssig)}} \approx 4,59 \text{ mm}$.

Abbildung 4.30 stellt die Ergebnisse aus *foam-extend* in Form von Konturplots dar. Die Plots zeigen Beträge der Amplitude der magnetischen Flussdichte $|\hat{\mathbf{B}}|$ und der zeitlich gemittelten Lorentz-Kraft $|\langle \mathbf{f}_L \rangle_t| / \rho$. Für die zugehörige Simulation wurde die Spule, wie in Abbildung 4.29a gezeigt, vollständig über die FVM diskretisiert, um auch diese Art der Induktor-Modellierung zu überprüfen. Im direkten Vergleich mit einer Biot-Savart-Modellierung der Spule mit je einem Pfad pro Windung [vgl. z. B. Abbildung 4.21] haben sich hier nur minimale Unterschiede auf Grund der veränderten Verteilung der Stromdichte ergeben.

Dadurch, dass innerhalb der leitfähigen Region beim RGS-Prozess schon alleine wegen der hohen Temperaturen keine magnetisierbaren Bereiche vorkommen, ist über die Sprungbedingungen aus Gleichung (4.88a) und (4.88b) sofort ersichtlich, dass das Magnetfeld \mathbf{B} über Grenzflächen hinweg in allen Komponenten stetig verläuft. Über einen Vergleich mit Abbildung 4.30a lässt sich dieses Verhalten qualitativ bestätigen. Gleichzeitig können die unterschiedlichen Skintiefen anhand der magnetischen Flussdichte größenordnungsmäßig verifiziert werden: Im Gebiet des flüssigen Siliziums beträgt die

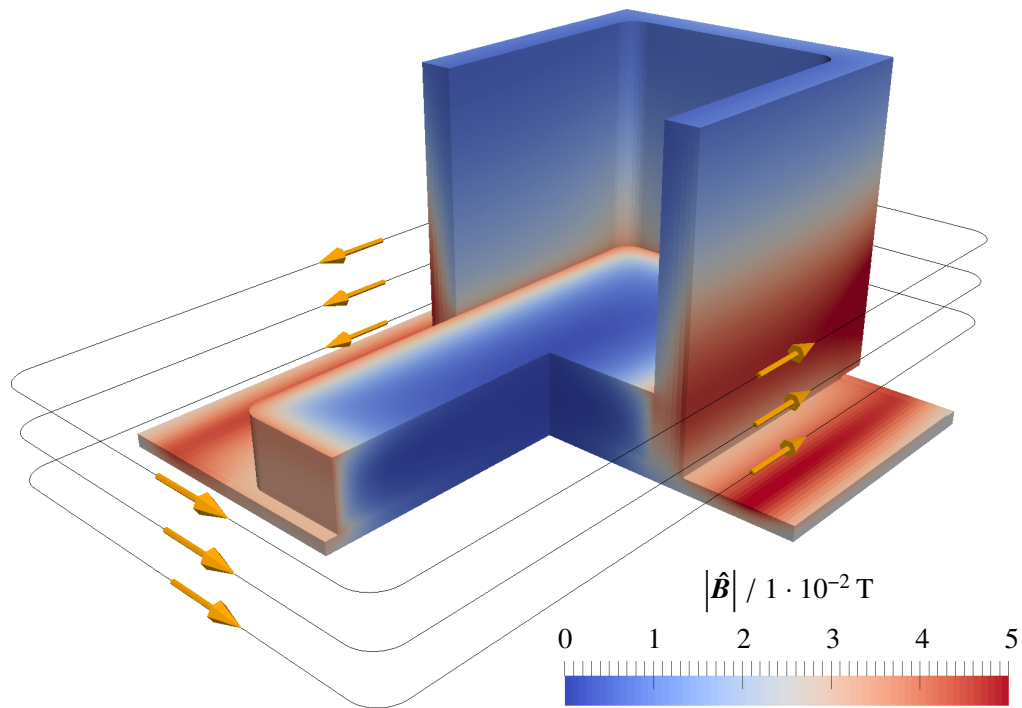


(a) Hexaedrisch dominiertes Gitter: Sowohl für das nicht-leitfähige Gebiet Ω_0 als auch für den Gießrahmen in der leitfähigen Region Ω_C ist das Gitter nur teilweise dargestellt. Im Beispiel ist eine Spule gezeigt, die per FVM modelliert wird.

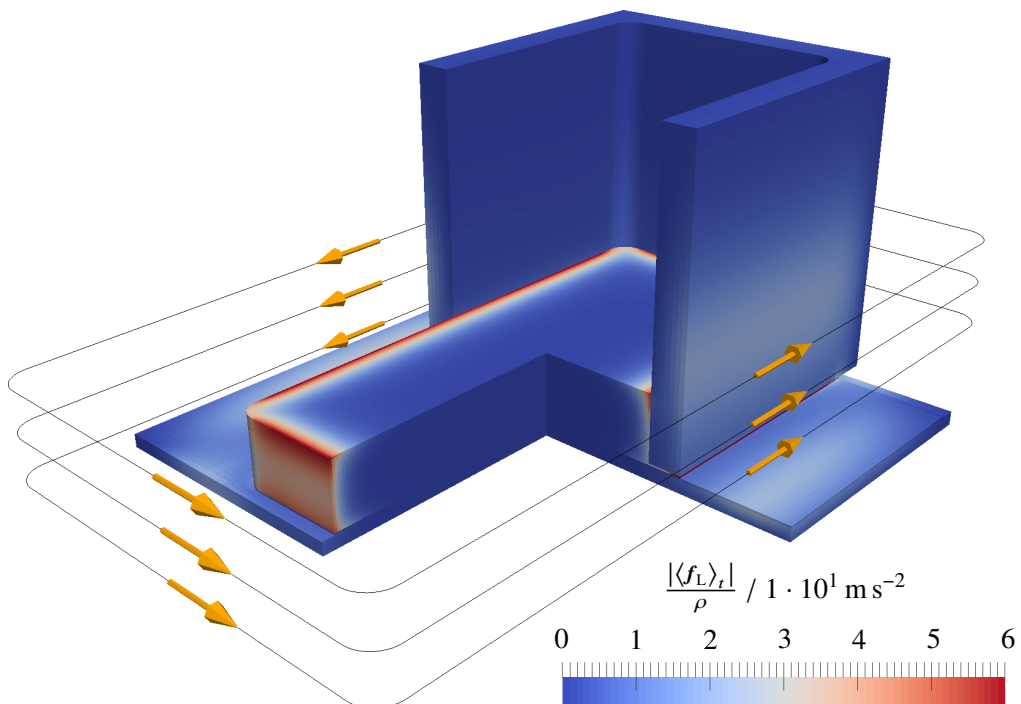


(b) Bereiche verschiedener elektrischer Leitfähigkeit innerhalb des Konduktors.

Abbildung 4.29: Teilbereiche des RGS-Modells nach Abbildung 2.4 (geschnitten): Gezeigt ist ein Beispiel zur Vernetzung (a) und die Verteilung der Leitfähigkeit entsprechend der Materialien gemäß Abbildung 2.5 (b). Die Werte für Graphit (Gießrahmen, Substrat), festes Silizium (Wafer) und flüssiges Silizium (Schmelze) stimmen mit Tabelle 2.1 überein.



(a) Betrag der Amplitude der magnetischen Flussdichte.



(b) Betrag der zeitlich gemittelten Lorentz-Kraft.

Abbildung 4.30: Konturplots mit Ergebnissen einer elektromagnetischen Berechnung des RGS-Modells aus Abbildung 2.4 (geschnitten): Die Daten beziehen sich auf einen harmonischen Quellstrom mit einer Amplitude von $\hat{I}_0 = 1000 \sqrt{2} \text{ A} \approx 1414 \text{ A}$ und eine Anregungsfrequenz von $f_0 = 10 \text{ kHz}$.

Eindringtiefe nur etwa ein Viertel der Höhe, während sowohl die Wände des Gießrahmens als auch das Substrat jeweils vollständig durchdrungen werden. Im Gegensatz zum stetigen Magnetfeld verläuft die Stromdichte \mathbf{j} allgemein nur in Normalenrichtung stetig über eine materielle Grenzfläche. Tangentiale Ströme auf beiden Seiten können je nach elektrischer Leitfähigkeit variieren. Damit weist in der Regel auch die Lorentz-Kraft eine Diskontinuität am Übergang zweier unterschiedlicher Materialien auf. Auch diese Diskontinuitäten in der elektromagnetischen Kraftdichte werden, wie ein Blick auf Abbildung 4.30b qualitativ verrät, durch die Anwendung der eingebetteten Diskretisierung aus Abschnitt 4.4 korrekt wiedergeben. Schließlich findet man auch über einen quantitativen Vergleich mit Ergebnissen aus *Cobham Opera 3D* und *COMSOL Multiphysics* [COMSOL 2016] eine sehr gute Übereinstimmung [vgl. Beckstein u. a. 2015a, Abbildung 2 und 4]. Im Bereich der Schmelze zeigt sich beispielsweise übereinstimmend ein Maximum der Lorentz-Kraft bei $|\langle \mathbf{f}_L \rangle_t| / \rho \approx 60 \text{ m s}^{-2}$. Durch diese elektromagnetische Kraftwirkung ist beim RGS-Verfahren nicht nur mit einer starken Verformung der freien Oberfläche zu rechnen, sondern in der Konsequenz auch mit einer ausgeprägten Interaktion zwischen elektromagnetischen und hydrodynamischen Effekten [siehe Abschnitt 2.1 und 2.2]. Diese Wechselwirkung ist Gegenstand des nächsten Kapitels.

4.7 Zwischenresümee

Rückblickend lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass der in diesem Kapitel vorgestellte Methodenapparat für *foam-extend* hervorragend zur numerischen Berechnung von Induktionsprozessen im Frequenzbereich mit der FVM geeignet ist. Um dieses Teilproblem der MD zu lösen, wurde ein neues Lösungsverfahren entwickelt [Abschnitt 4.3]. Dieses semi-gekoppelte Verfahren nutzt als Grundlage eine zeitharmonische Potentialformulierung der Maxwell-Gleichungen auf Basis des magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A} und des elektrischen Skalarpotentials ϕ . Die Potentiale \mathbf{A} und ϕ werden dazu auf den unterschiedlichen Gültigkeitsgebieten der zwei zugehörigen DGLn durch den Einsatz überlagerter Gitter iterativ gelöst, wobei durch eine identische Topologie überlappender Teilgitter gleichzeitig ein direkter Austausch von Daten ohne Interpolation sichergestellt ist. Zusammen mit den in *foam-extend* verfügbaren Blockmatrizen ist so ein robuster Lösungsalgorithmus entstanden, der auch ohne komplexwertige Algebra bei höheren Frequenzen stabil funktioniert. Darüber hinaus wurde gezeigt, dass mit der Aufteilung des Vektorpotentials in einen ausgeprägten und einen reduzierten Anteil über das Gesetz von Biot-Savart eine vereinfachte Modellierung komplexer Spulengeometrien möglich ist.

In der Regel besteht die leitfähige Region bei technisch relevanten Induktionsprozessen aus einem Verbund unterschiedlicher Materialien, wie etwa zuletzt am Beispiel des RGS-Modells in Abbildung 4.29b evident für die elektrische Leitfähigkeit dargestellt. Müsste man in solch einem Fall zur numerischen Berechnung eine regionale Separation entlang der Materialübergänge vornehmen und physikalische Grenzbedingungen dort explizit verlangen, dann wäre nicht nur das Aufsetzen einer entsprechenden Simulation sehr umständlich, sondern auch die numerische Lösbarkeit stark beeinträchtigt. Alleine schon durch die Vielzahl sich ggf. ergebender Ränder und Teilbereiche ist dieses Vorgehen im Allgemeinen nicht praxistauglich. Aus diesem Grund wurden als Ergänzung zu dem semi-gekoppelten Lösungsverfahren in *foam-extend* spezielle Diskretisierungsschemata abgeleitet, mit welchen sich das Verhalten der elektromagnetischen Felder bei sprunghafter Änderung der elektrischen Leitfähigkeit

σ oder der magnetischen Permeabilität μ indirekt berücksichtigen lässt [Abschnitt 4.4]. Hinsichtlich einer geschlossenen Adressierung beider Materialeigenschaften wurden die Sprungbedingungen derart verallgemeinert, dass sich die daraus abgeleiteten Diskretisierungsschemata sogar für andere physikalische Effekte wie z. B. die Wärmeleitung eignen.

Durch die Lösung des Teilproblems der MD sind in *foam-extend* erstmalig dreidimensionale elektromagnetische Simulationen im Frequenzraum durchgeführt worden. Anhand einer umfangreichen Validierung wurde diese Neuentwicklung auch hinsichtlich Funktionalität und Effizienz überprüft [Abschnitt 4.5]. Im Zuge der durchgeführten Testrechnungen konnte dabei demonstriert werden, dass die zu erwartende Fehlerkonvergenz eingehalten wird. Weiterhin wurden im Vergleich zu den FEM-Programmen *Cobham Opera 2D* und *Cobham Opera 3D* durchweg gleichwertige Ergebnisse erzielt, wobei sich hier sogar tendenziell eine höhere Rechengeschwindigkeit abgezeichnet hat. Im Zusammenhang mit der indirekten Berücksichtigung von Diskontinuitäten hat sich anhand weiterer Tests gezeigt, dass Sprünge in der elektrischen Leitfähigkeit über mehrere Größenordnungen hinweg völlig unproblematisch für die Konvergenz des Lösungsalgorithmus sind. In Verbindung mit der magnetischen Permeabilität lassen sich dagegen aus numerischen Gründen nicht beliebig große Sprünge umsetzen. Die zusätzliche Kopplung der Komponenten des Phasors von A kann den iterativen Lösungsprozess dort im Extremfall destabilisieren oder zumindest eine starke Unterrelaxation erforderlich machen. Für die Untersuchung des RGS-Verfahrens ist diese Einschränkung jedoch unerheblich [Abschnitt 4.6], da dort keine magnetisierbaren Medien involviert sind.

Über die validierte Simulationsplattform für zeitharmonische Induktionsvorgänge ist nun prinzipiell eine Verknüpfung mit anderen Problemen in *foam-extend* möglich. In Bezug auf die Zielstellung dieser Arbeit, die Oberflächendynamik des RGS-Prozesses im Einflussbereich elektromagnetischer Felder zu modellieren, steht im folgenden Kapitel die Zusammenführung von MD und Hydrodynamik (HD) im Mittelpunkt.

5 Modellierung elektromagnetisch getriebener Strömungen mit freier Oberfläche

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Strategie und den Methoden zur Modellierung elektromagnetisch getriebener Strömungen mit freier Oberfläche in *foam-extend* [Wikki 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998]. Für das Ziel einer homogenen Nutzung der Finite-Volumen-Methode (FVM) wurde mit dem neuen Methodenapparat für den Teil der Magnetodynamik (MD) in Kapitel 4 bereits der Grundstein gelegt. Auf dieser Grundlage wird hier nun eine Lösung für die beiden Teilprobleme der Hydrodynamik (HD) und Magnetohydrodynamik (MHD) präsentiert, wobei das vorliegende Kapitel an die eigenen Veröffentlichungen Beckstein u. a. [2016a, b, 2017a, c, b] angelehnt ist. Inhaltlich wendet sich das Kapitel in Abschnitt 5.1 zuerst den Herausforderungen der HD zu. In den Unterabschnitten 5.1.1 und 5.1.2 werden darin die Grundlagen der HD anhand der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben, wobei die Impulserhaltungsgleichung (2.8b) aus numerischen Gründen leicht modifiziert wird. Anschließend wird eine geeignete Technik zur Beschreibung der freien Oberfläche ausgewählt und deren Anforderung an die Diskretisierung in Abschnitt 5.1.3 erläutert. Dabei fließen schon in Vorbereitung auf die Interaktion mit der MD essentielle Weiterentwicklungen mit ein. Schließlich wird in Abschnitt 5.1.4 der zur Technik der Oberflächenbeschreibung gehörende Lösungsalgorithmus aus *foam-extend* skizziert und dabei auch im Hinblick auf die Kopplung mit der MD technisch erweitert und verbessert. Mit Anmerkungen zur Stabilität und Turbulenzmodellierung wird die Thematik der HD in Abschnitt 5.1.5 und 5.1.6 abgeschlossen. Abschnitt 5.2 ist dem verbleibenden Teilproblem der MHD, also der Zusammenführung der Teilprobleme der MD und HD, gewidmet. Zur methodischen Erfassung und Verknüpfung unterschiedlicher Gültigkeitsbereiche der Differentialgleichungen (DGLn) eines Mehrfeldproblems wird dort in Abschnitt 5.2.1 die Idee der überlagerten Gitter aus dem letzten Kapitel wieder aufgegriffen und verallgemeinert. Speziell für die Kopplung von Strömung und Magnetfeld wird das gesamte Konzept aber auch funktional erweitert. Zur Lösung des Mehrfeldproblems aus MD und HD wird in Abschnitt 5.2.2 dann ein iterativer Lösungsalgorithmus vorgestellt, der sich auf das Prinzip der überlagerten Gitter stützt und leicht erweiterbar ist. Die Parallelisierung beziehungsweise (bzw.) Parallelisierbarkeit als Voraussetzung zur Durchführung großer Simulationen ist erst Thema von Abschnitt 5.2.3. Mit einer Untersuchung des Anlaufverhaltens beim Ribbon Growth on Substrate (RGS)-Prozess wird in Abschnitt 5.3 abschließend ein Nachweis zur Funktionalität und Lösung aller Teilprobleme erbracht und so ein erster Einblick in die dort ablaufenden Effekte der metallurgischen MHD vermittelt.

Am Beispiel des RGS-Prozesses zeigt Abbildung 5.1 ein idealisiertes, zweidimensionales Schnittmodell [vgl. Abbildung 2.5a]. Abgesehen von der Geometrie, liegt der Unterschied gegenüber Abbildung 4.1 bzw. Abbildung 4.7 lediglich in der hinzugekommenen Fluidregion $\Omega_F \in \Omega_C$ mit der

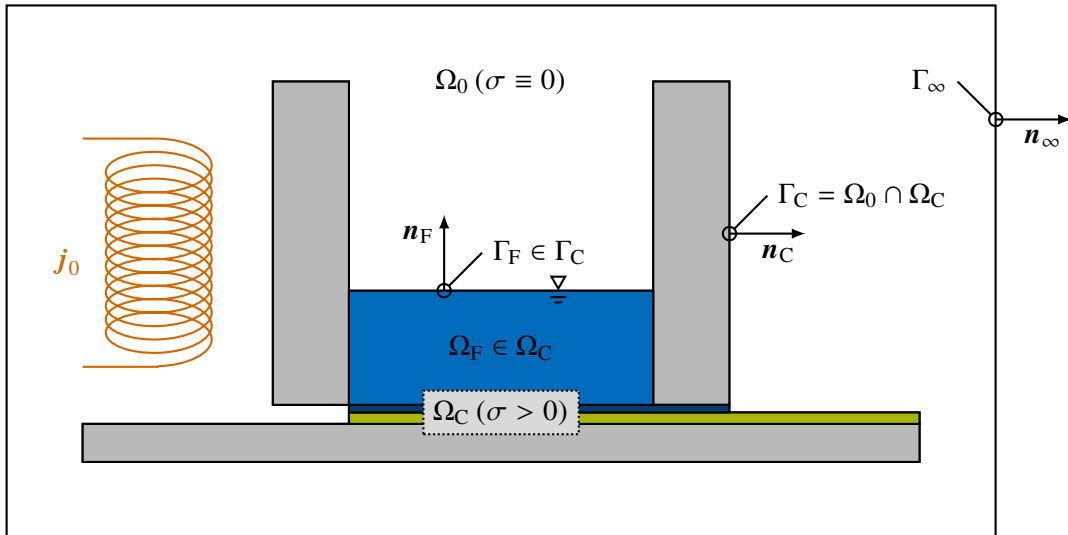


Abbildung 5.1: Induktionsprozesses mit Fluidregion Ω_F am Beispiel eines zweidimensionalen Schnittmodells des RGS-Prozesses nach Abbildung 2.5a: Eine Erregerspule erzeugt über ein magnetisches Wechselfeld einen induzierten Strom innerhalb der leitfähigen Region Ω_C [vergleiche (vgl.) Abbildung 4.1]. Letztere besteht aus Teilbereichen leitfähiger Materialien [vgl. Abbildung 4.7], wobei die Fluidregion durch eine freie Oberfläche Γ_F begrenzt wird. Durch deren Dynamik verformt sich gegebenenfalls (ggf.) ein Teil der Konduktoroberfläche Γ_C , sodass die räumliche Umverteilung der Leitfähigkeit wiederum das Magnetfeld beeinflussen kann.

freien Oberfläche $\Gamma_F \in \Gamma_C$ und zugehörigem Normalenvektor \mathbf{n}_F . Von Interesse ist dabei im Weiteren die Interaktion von Magnetfeld und Strömung infolge der räumlichen Umverteilung der elektrischen Leitfähigkeit σ durch Verformung von Ω_F bzw. Ω_C .

Was die Wirkung der MD auf die HD angeht, so sei mit der quasistatischen Approximation der Maxwell-Gleichungen zunächst auf Abschnitt 4.1.1 verwiesen. Dort wurde gezeigt, dass unter der Annahme einer kleinen magnetischen Reynolds-Zahl [vgl. Gleichung (4.12)] das strömungsinduzierte Magnetfeld vernachlässigt werden kann [siehe auch Abschnitt 2.2]. Bei ausreichend großer Trägheit des Fluides gegenüber der Frequenz des zeitharmonisch oszillierenden Induktorstromes genügt es außerdem, ausschließlich die zeitgemittelte Lorentz-Kraft (4.53) in Betracht zu ziehen [siehe Gleichung (4.52)], wobei sich die zeitliche Mittelung dabei auf die Zeitskala bzw. die Periodendauer $T_0 = 1/f_0$ des Erregerfeldes nach Gleichung (4.50) bezieht.

Durch die Vernachlässigung des oszillatorischen Anteils der Lorentz-Kraft wird letztlich die gesamte Zeitabhängigkeit de facto alleine über das hydrodynamische Teilproblem bestimmt. Das bedeutet aber keinesfalls, dass damit die Wirkung des Magnetfeldes zeitunabhängig ist, sondern nur, dass sich die über die elektromagnetische Periodendauer gemittelte Kraft quasistatisch bezüglich einer gegebenen räumlichen Verteilung von σ verhält. Bedingt durch eine mögliche Fluidströmung ändert sich die Verteilung der elektrischen Leitfähigkeit – und damit auch die effektive Wirkung der MD auf diese Strömung – mit der Zeitskala der HD. Zur Lösung dieses Mehrfeldproblems eignet sich ein iterativer Lösungsprozess.

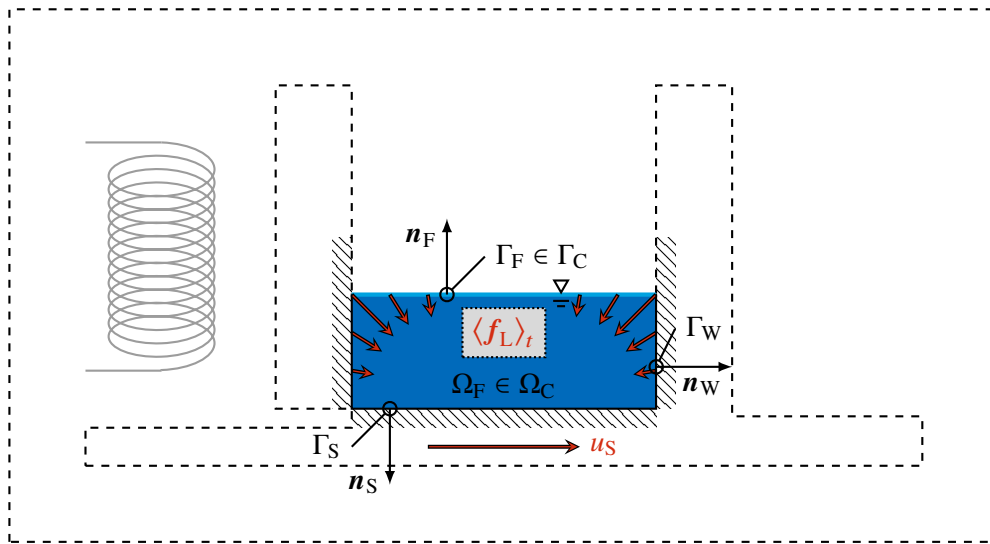


Abbildung 5.2: Konfiguration des hydrodynamischen Teilproblems am Beispiel des RGS-Prozesses: Eine Strömung innerhalb der flüssigen Teils Ω_F der leitfähigen Region [vgl. Abbildung 5.1] mit freier Oberfläche Γ_F wird bei durch die Lorentz-Kraft $\langle f_L \rangle_t$ im Volumen und Substratgeschwindigkeit u_S am Rand Γ_S angetrieben. Die Lorentz-Kraft ist abhängig von der augenblicklichen Geometrie von Ω_F .

Diesbezüglich sei mit Verweis auf Abschnitt 4.3.1 daran erinnert, dass bei zur numerischen Berechnung zeitharmonischer Induktionsprozesse in *foam-extend* überlagerte Gitter, bestehend aus einem Hauptgitter für $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_C$ und einem Teilgitter für Ω_C , zum Einsatz kommen. Diese Überlagerung wird dort genutzt, um die unterschiedlichen Gültigkeitsgebiete der Maxwell'schen Gleichungen numerisch zu erfassen. Durch das Hinzufügen weiterer Teilgitter lässt sich dieses Konzept aber prinzipiell für beliebig viele Gültigkeitsgebiete zusätzlicher DGLn, wie beispielsweise die Fluidregion Ω_F , ausbauen.

5.1 Strömungen mit freier Oberfläche

Innerhalb dieses Abschnittes wird im Rahmen des Teilproblems der HD zunächst die Thematik der Strömungsmechanik im Kontext von *foam-extend* geschildert, bevor im darauffolgenden Abschnitt dann die eigentliche Kopplung von MD und HD aufgegriffen wird. Anhand einer Konfiguration, wie sie in Abbildung 5.2 gezeigt ist, werden im Weiteren die Grundlagen zur numerischen Simulation von Strömungsvorgängen mit freier Oberfläche zusammengetragen. Auf diesem Wege fließen aber gleichzeitig auch technische Verbesserungen und Weiterentwicklungen der standardmäßig in *foam-extend* implementierten Methoden mit ein, welche sich in dieser Arbeit im Hinblick auf die Zusammenführung mit dem Teilproblem der MD als essentiell herausgestellt haben.

5.1.1 Inkompressible Navier-Stokes-Gleichungen

Das räumlich-zeitliche Verhalten einer Strömung innerhalb von Ω_F [vgl. Abbildung 5.2] wird im Sinne der Kontinuumsmechanik durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben [Batchelor 1967;

Ferziger u. Perić 2002; Versteeg u. Malalasekera 2007; Cohen u. a. 2012]. Da es hier speziell um die Dynamik von elektrisch leitfähigen Flüssigkeiten wie Metallschmelzen oder Halbmetschmelzen geht, deren Kompressibilität vernachlässigbar ist [Batchelor 1967, Abschnitt 1.8; siehe zum Beispiel (z. B.) auch Marcus 2017], beschränkt sich die weitere Abhandlung ausschließlich auf die inkompressible Form der Navier-Stokes-Gleichungen [vgl. Gleichung (2.8b)]:

$$\Omega_F: \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5.1a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} . \quad (5.1b)$$

Die darin enthaltenen Größen sind die Dichte ρ , die Geschwindigkeit \mathbf{u} und die allgemeine Volumenkraft bzw. Volumenkraftdichte \mathbf{f} und der Spannungstensor für inkompressible Strömungen:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta \mathbf{D}_u - p\mathbf{I} . \quad (5.2)$$

Letzterer setzt sich wiederum aus der dynamischen Viskosität $\eta = \nu\rho$, dem skalaren Druck p und dem Deformationstensor

$$\mathbf{D}_u = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \quad (5.3)$$

zusammen. Im Rahmen einer isothermen Modellierung wird zur Vereinfachung die Energiegleichung vernachlässigt [siehe Abschnitt 2.2]. Stattdessen werden alle Stoffeigenschaften von unterschiedlichen Materialien in der Konduktorregion Ω_C [vgl. Abbildung 5.1] auf Basis einer Referenztemperatur T_{Ref} bestimmt. Als Referenztemperatur eignet sich dabei z. B. die Prozesstemperatur des Fluides. In diesem Sinne handelt es sich bei den Stoffparametern, wie $\sigma = \sigma(T_{\text{Ref}})$, $\mu = \mu(T_{\text{Ref}})$, $\rho = \rho(T_{\text{Ref}})$ und $\eta = \eta(T_{\text{Ref}})$, um gebietsweise konstante Größen. Die Momentenbilanz in Gleichung (5.1b) entspricht der aus Kapitel 3 bekannten Transportgleichung (3.19) für die Geschwindigkeit selbst ($\psi \hat{=} \mathbf{u}$). Eine Besonderheit dabei ist jedoch, dass der Konvektionsterm gegenüber z. B. einer passiv transportierten Größe einen nicht-linearen Charakter hat.

Das Gültigkeitsgebiet Ω_F der Gleichungen (5.1a) und (5.1b) umfasst nur den flüssigen Teil des Konduktors Ω_C und ist mit allen zugehörigen Berandungen in Abbildung 5.2 am Beispiel des RGS-Prozesses simplifiziert dargestellt. Das Strömungsgebiet hat dabei mit der freien Oberfläche $\Gamma_F \in \Gamma_C$ eine gemeinsame Berandung mit dem Konduktor Ω_C . Zusätzlich wird der Bereich von Ω_F seitlich mit $\Gamma_W \in \Omega_C$ durch feste Wände und am Boden mit $\Gamma_S \in \Omega_C$ durch die tangential mit u_S bewegte Substratwand begrenzt. Die verschiedenen Typen der Ränder decken im Hinblick auf andere, ähnliche Anwendungen bereits ein sehr großes Spektrum von Möglichkeiten ab: Beispielsweise genügen Γ_F und Γ_W bereits zur Modellierung einer Schmelze in einem (ruhenden) Behälter, oder auch nur Γ_F , falls ein levitierter Tropfen eines leitfähigen Fluides modelliert werden soll [vgl. Beckstein u. a. 2017c].

Die vollständige Volumenkraftdichte \mathbf{f} in Gleichung (5.1b) setzt sich aus Gewichts- und zeitlich gemittelter Lorentz-Kraft zusammen, wobei sich die Zeitmittlung nach Gleichung (4.50) auf die Zeitskala des harmonischen elektromagnetischen Teilproblems bezieht:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_G + \langle \mathbf{f}_L \rangle_t = \rho \mathbf{g} + \langle \mathbf{j} \times \mathbf{B} \rangle_t . \quad (5.4)$$

Durch die innerhalb von Ω_F als konstant angenommene Dichte stellt der erste Term in Gleichung (5.4), mit dem Gravitationsvektor \mathbf{g} , nur den hydrostatischen Druck dar. Auftriebseffekte werden durch diese vereinfachte Modellierung selbstverständlich nicht abgebildet. Nichtsdestotrotz kommt der Gewichtskraft eine entscheidende Bedeutung zu, da das Strömungsgebiet durch die (bewegliche) freie Oberfläche Γ_F begrenzt ist. Dazu sei zunächst die volumetrische Kraftdichte aus Gleichung (5.4) weiter Gegenstand der Betrachtung: Diese kann nämlich nach dem Fundamentalsatz der Vektoranalysis (Helmholtz-Theorem) [Van Bladel 1958] durch Superposition eines Gradienten- und Rotationsfeldes $\tilde{\mathbf{f}}$ dargestellt werden. Der konservative Anteil lässt sich als Gradient eines skalaren Potentials p_f beschreiben. Somit gilt [siehe ergänzend Anhang A.3.5, Gleichung (A.37i)]:

$$\mathbf{f} = \tilde{\mathbf{f}} - \nabla p_f = \tilde{\mathbf{f}} - \nabla \cdot p_f \mathbf{I} . \quad (5.5)$$

Dieser effektive Druck p_f kann dann über die Modifikation

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta \mathbf{D}\mathbf{u} - \tilde{p} \mathbf{I} \quad \text{mit} \quad \tilde{p} = p + p_f \quad (5.6)$$

in Form einer Reduzierung des physikalischen Druckes in den Spannungstensor überführt werden. Daraus ergibt sich schließlich die modifizierte Impulserhaltungsgleichung:

$$\Omega_F: \quad \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} + \tilde{\mathbf{f}} , \quad (5.7)$$

in welcher nur noch der nicht-konservative Anteil $\tilde{\mathbf{f}}$ der Volumenkraftdichte \mathbf{f} vorkommt. Unter der Annahme konstanter Stoffeigenschaften und einer verschwindenden Magnetisierung ($\mu = \mu_0$) innerhalb des Fluides, erhält man speziell für die Volumenkraftdichte aus Gleichung (5.4), über die indirekte Anwendung der Produktregel gemäß

$$\rho \mathbf{g} = \rho \nabla (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) = \nabla (\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho , \quad (5.8)$$

mit Gleichung (4.34) folgende Aufteilung:

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &= \nabla (\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - \underbrace{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho}_{=0} + \left\langle \frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot (\mathbf{B}\mathbf{B}) \right\rangle_t - \left\langle \nabla \left(\frac{|\mathbf{B}|^2}{2\mu_0} \right) \right\rangle_t \\ &= \underbrace{\frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot \langle \mathbf{B}\mathbf{B} \rangle_t}_{\tilde{\mathbf{f}}} - \nabla \left(\underbrace{\frac{\langle |\mathbf{B}|^2 \rangle_t}{2\mu_0} - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}}_{p_f} \right) . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Damit lässt sich das zugehörige statische Potential aus Gleichung (5.5) und die verbleibende modifizierte Volumenkraft direkt identifizieren:

$$\tilde{\mathbf{f}} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot \langle \mathbf{B}\mathbf{B} \rangle_t \quad (5.10a)$$

$$p_f = \frac{\langle |\mathbf{B}|^2 \rangle_t}{2\mu_0} - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} . \quad (5.10b)$$

Das Zerlegen der volumetrischen Kraftdichte hat den Vorteil, dass statische Gradienten gar nicht erst in der Momentenbilanz (5.7) auftauchen. Somit muss man bei der numerischen Lösung eines Problems auch nicht dafür Sorge tragen, dass der diskrete Druckgradient mit einer Volumenkraft im Gleichgewicht steht, was wiederum zu einer erhöhten Stabilität führt und numerische Fehler reduziert. Mit der Modifikation gemäß Gleichung (5.6) in Verbindung mit den Gleichungen (5.10a) und (5.10b) ist nun die Grundlage für die Diskussion der in Abbildung 5.2 gezeigten Randbedingungen für die Navier-Stokes-Gleichungen (5.1) gelegt.

5.1.2 Randbedingungen

Sowohl die stationären Wände Γ_W als auch die sich bewegende Substratwand Γ_S [vgl. Abbildung 5.2] können über Haftbedingungen für das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} modelliert werden:

$$\Gamma_W: \quad \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (5.11)$$

und

$$\Gamma_S: \quad \mathbf{u} = u_S \mathbf{e}_S . \quad (5.12)$$

Darin bezeichnet u_S die Prozessgeschwindigkeit des Substrates und der Vektor \mathbf{e}_S , als normierter Einheitsvektor ($|\mathbf{e}_S| = 1$), die zugehörige tangentielle ($\mathbf{e}_S \cdot \mathbf{n}_S = 0$) Richtung. Separat spezifizierte Randbedingungen für den (modifizierten) Druck sind bei inkompressiblen Strömungen nicht notwendig [Fröhlich 2006, Abschnitt 2.1.1]. Die zugehörigen Druckrandbedingungen für den modifizierten Druck \tilde{p} lassen sich zwar theoretisch aus der Kontinuitätsgleichung (5.1a) und modifizierten Momentenbilanz (5.7) ableiten, allerdings können diese in *OpenFOAM* [OpenFOAM Foundation 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998] auch indirekt, das heißt (d. h.) bei der diskreten Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen, berücksichtigt werden [siehe Abschnitt 5.1.4].

Die Dynamik der freien Oberfläche Γ_F wird im Rahmen dieser Arbeit mit der *Interface-Tracking Technik* (*Interface-tracking technique, ITT*) erfasst [Ferziger u. Perić 2002, Kapitel 12.5.1]. Dabei wird die Grenzfläche als bewegliche Berandung modelliert und im zeitlichen Verlauf verfolgt [Muzaferija u. Perić 1997]. Von Tuković u. Jasak [2012] wurde die ITT für rein hydrodynamische Problemstellungen bereits in die Software-Bibliothek *foam-extend* implementiert und validiert. Einen weiteren Validierungsfall findet man in Marschall u. a. [2014]. Im Gegensatz zu Tuković u. Jasak [2012] wird hier jedoch nur die Seite $\Gamma_F \cap \Omega_F$ der freien Oberfläche berücksichtigt [siehe Abbildung 5.2]. Die Druck- und Schubspannungen, welche auf der Seite $\Gamma_F \cap \Omega_0$ durch die Atmosphäre auf das Fluid in Ω_F wirken, werden auf Grund der sehr kleinen Viskosität gegenüber z. B. einem Flüssigmetall vernachlässigt.

Die entsprechenden Randbedingungen für den modifizierten Druck und die Geschwindigkeit ergeben sich, wie beispielsweise in Ferziger u. Perić [2002, Abschnitt 12.5, Gleichung (12.25) und (12.26)], Cohen u. a. [2012, Abschnitt 8.2] erklärt wird, aus der kinematischen und dynamischen Bedingung der freien Oberfläche [zur Herleitung siehe Anhang B]. Die Randbedingungen eines solchen externen, reibungsfreien Fluid-Interfaces lauten mit konstanter Oberflächenspannung [vgl. Anhang B.2.6,

Gleichung (B.22)]:

$$\Gamma_F: \quad \mathbf{n}_F \cdot \nabla \mathbf{u} = - (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n}_F - \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_F \quad (5.13a)$$

$$\tilde{p} = p_f - 2\eta (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) - \zeta \kappa \quad \text{mit} \quad \kappa = -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n}_F. \quad (5.13b)$$

Darin kommt der Oberflächen-Nabla-Operator $\bar{\nabla} = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla$ zum Einsatz [siehe Gleichung (A.24), Gleichung (A.24)]. Auf dessen Basis ist die doppelte mittlere Krümmung κ der Oberfläche definiert. Bei der skalaren Größe ζ handelt es sich um die konstante angenommene Oberflächenspannung ($\bar{\nabla} \zeta = 0$). Insgesamt stellt Gleichung (5.13a) und (5.13b) damit einen leicht erweiterten Sonderfall der in [Tuković u. Jasak \[2012, Abschnitt 2, Gleichung \(5\) und \(6\)\]](#) beschriebenen Übergangsbedingungen dar. Die wesentlichen Unterschiede bestehen im Wegfallen der benachbarten Fluidregion und in der Berücksichtigung des konservativen Anteils der Lorentz-Kraft in p_f . An der Kontaktlinie $\partial\Gamma_F = \Gamma_F \cap \Gamma_W$ [vgl. [Abbildung 5.2](#)] wird für diese Arbeit ein dynamischer Kontaktwinkel angenommen, welcher im Gleichgewicht $\alpha_{\partial\Gamma_F} = 90^\circ$ beträgt. Die Details zur Handhabung und Auswertung der Oberflächen-Differentialoperatoren aus Gleichung (5.13a) und (5.13b) in *foam-extend* wird in [Abschnitt 5.1.4](#) erklärt.

Spätestens mit der Geschwindigkeitsrandbedingung aus Gleichung (5.13a) wird deutlich, dass das zur freien Oberfläche gehörende Gitter bei Anwendung der [ITT](#) bewegt bzw. angepasst werden muss. Die Bevorzugung der [ITT](#) gegenüber z. B. der in *foam-extend* direkt verfügbaren [Volume-of-Fluid-Methode \(Volume of fluid, VOF\)](#) als Vertreter der flexibleren [Interface-Capturing Technik \(Interface-capturing technique, ICT\)](#) [siehe [Abschnitt 2.3](#)] hat in dieser Arbeit mehrere Gründe: Zum einen ist das Aufbrechen der freien Oberfläche in den meisten technischen Anwendung von Induktionsprozessen unerwünscht, sodass mögliche topologische Änderungen der Oberfläche eher als nebensächlich zu betrachten sind. Zum anderen ist, wie in [Abschnitt 4.2.1](#) angedeutet, die Verteilung der Lorentz-Kraft auf einen schmalen Bereich unterhalb der Konduktoroberfläche beschränkt. Durch eine Regularisierung der Phasengrenze würde daher die Genauigkeit numerischer Berechnungen leiden. Zusätzlich tritt bei Flüssigmetallen oder flüssigen Halbmetallen in der Regel eine sehr hohe Oberflächenspannung (typischerweise im Bereich von $0,5 \text{ N m}^{-1}$ bis $1,0 \text{ N m}^{-1}$) auf [vgl. [Tabelle 2.1](#)], wobei diese wiederum gerade in den primären Wirkungsbereich der Lorentz-Kraft fällt [siehe [Abschnitt 4.2.1](#)]. Da die [ITT](#) im Vergleich zur [ICT](#) diesbezüglich eine höhere Genauigkeit bietet [[Scardovell u. Zaleski 1999](#)], scheint die [ITT](#) besser geeigneter zu sein. Zudem kann bei der [ITT](#), im Hinblick auf zukünftige Erweiterungen, die Abhängigkeit der Oberflächenspannung direkt berücksichtigt werden. Als Ursache für solch eine Änderung Oberflächenspannung kommen z. B. oberflächenaktive Substanzen oder eine Temperaturabhängigkeit in Frage. Zu beiden Aspekten findet man bereits geeignete Umsetzungen in *foam-extend* [[Qin u. a. 2015](#); [Pesci u. a. 2016](#); [Weber u. a. 2017c](#)]. Ein weiterer Vorteil, durch welchen sich die Häufigkeit der periodisch wiederkehrenden Neuberechnungen der Lorentz-Kraft reduzieren lässt, wird erst in [Abschnitt 5.2.2](#) beschrieben.

Maßgeblich für die Bewegung der freien Oberfläche Γ_F ist deren Geschwindigkeit in Normalenrichtung $\mathbf{n}_F \cdot \mathbf{u}$, die sich mit den Gleichungen (5.13a) und (5.13b) als Lösung von Gleichung (5.1) ergibt. Im nächsten Abschnitt wird erklärt, welche Anforderungen eine Modellierung mittels [ITT](#) an die Diskretisierung stellt. Dabei fließen schon in Vorbereitung auf die Interaktion mit der [MD](#) essentielle Weiterentwicklungen dieser Arbeit mit ein.

5.1.3 Dynamisch bewegtes Gitter

In Abschnitt 3.2 wurde dargelegt, wie man im Rahmen der FVM eine Diskretisierung des Lösungsgebietes vornimmt und wie daraus ein numerisches Gitter entsteht. Auch die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen (5.1a) und (5.7) mit den im letzten Abschnitt aufgeführten Randbedingungen setzt ein solches Gitter voraus. Zur Realisierung der ITT, wo die freie Oberfläche Γ_F mit der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} aus Ω_F bewegt wird, muss sich demzufolge auch das zugrundeliegende Gitter dynamisch mit einer identischen Gittergeschwindigkeit \mathbf{v} mitbewegen. Zunächst betrifft das nur die Lage der den Rand Γ_F repräsentierenden Gitterpunkte:

$$\Gamma_F: \quad \mathbf{n}_F \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n}_F \cdot \mathbf{u} . \quad (5.14)$$

Damit jedoch bei größeren Verformungen eine entsprechende Gitterqualität gewahrt bleibt [vgl. Gleichung (3.13)], ist im Allgemeinen mit

$$\Gamma_W: \quad \mathbf{n}_W \cdot \mathbf{v} = 0 ; \quad (\mathbf{I} - \mathbf{n}_W^2) \cdot \nabla \mathbf{v} = \mathbf{0} . \quad (5.15)$$

sowohl eine tangentielle Verschiebung der Randpunkte auf angrenzenden Wänden als auch eine Anpassung der bezüglich Ω_F innen liegenden Gitterpunkte notwendig, sodass die äußere Bewegung möglichst gleichmäßig im Inneren kompensiert wird. Was die Bewegung des Gitters anbelangt, so hat die exakte Position der Gitterpunkte im Inneren dank der Arbitrary-Lagrangian-Eulerian (ALE)-Formulierung der Transportgleichung (3.21) nur indirekt, d. h. im Falle einer veränderten Gitterqualität, einen Einfluss auf die Genauigkeit der darauf berechneten Lösung. Dazu muss jedoch sichergestellt sein, dass das Volumenerhaltungsgesetz (Space conservation law, SCL) (3.22) nicht verletzt ist. Da nun aber das Strömungsgebiet Ω_F gleichzeitig Teil des Konduktors Ω_C ist [siehe Abbildung 5.1 und Abbildung 5.2], ist auch eine Anpassung der Geometrie der leitfähigen Region erforderlich. Zudem muss schließlich noch die Form der nicht-leitfähigen Region Ω_0 angeglichen werden, da diese ja die Konduktorregion vollständig umschließt und für das elektromagnetische Teilproblem essenziell ist. Bei dieser besteht ferner das Problem, dass die Spulen dabei, falls keine Modellierung über das Gesetz von Biot-Savart zum Einsatz kommt [vgl. Abschnitt 4.3.5], an Ort und Stelle verbleiben müssen.

Für eine nicht-leitfähige Region mit hinreichender Größe macht es wenig Sinn die Bewegung von Γ_F auf dem gesamten Gebiet zu kompensieren. Zur Reduktion des dynamisch bewegten Bereiches wird daher eine Pufferregion Ω_B eingeführt, die gerade so groß ist, dass eine Kompensation der Oberflächenbewegung bei minimalem Verlust an Gitterqualität möglich ist. Genau wie die Fluidregion wird auch die Pufferregion aus numerischer Sicht über ein eigenständiges Teilgitter abgebildet. Eine Illustration dieser Idee ist in Abbildung 5.3 gezeigt. Alle sonstigen Ränder von Ω_F und Ω_B am Übergang zu statischen Gitteranteilen werden festgehalten:

$$\Gamma_S \cup \Gamma_B: \quad \mathbf{v} = \mathbf{0} . \quad (5.16)$$

Auf diese Weise können auch modellierte Induktorspulen, falls sie denn auf einem FVM-Gitter basieren, ausgespart werden. Obwohl sich durch die Nutzung der Pufferregion der Rechenaufwand bei der Bewegung des Gitters stark reduzieren lässt, ist für das Vorgehen die Festlegung einer optimalen Form

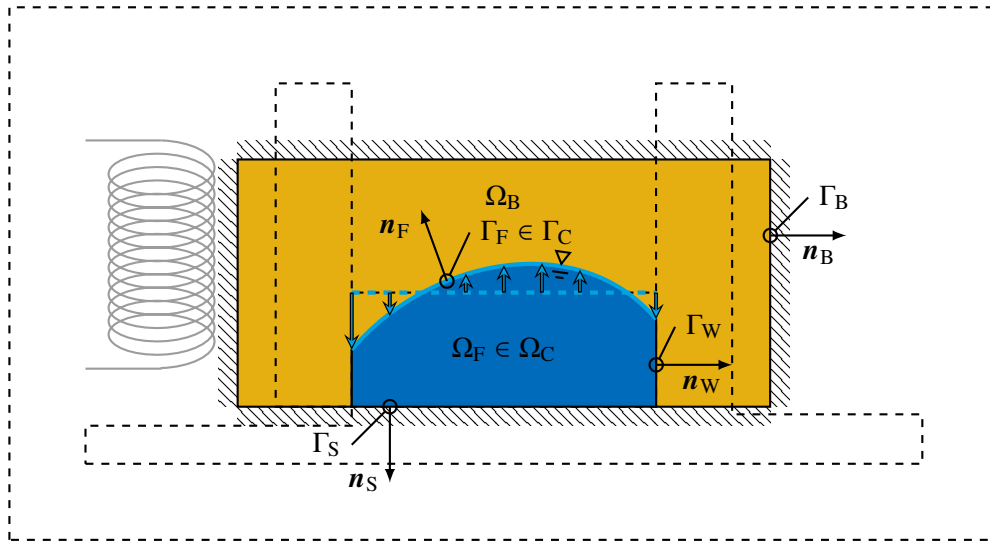


Abbildung 5.3: Konfiguration zur Gitterbewegung im Kontext der ITT am Beispiel des RGS-Prozesses: Die Bewegung der freien Oberfläche Γ_F infolge einer Strömung wird durch eine Anpassung des Strömungsgebietes Ω_F verfolgt. Außerhalb der Fluidregion erfolgt die Kompensation der Bewegung von Γ_F durch eine Pufferregion Ω_B , welche sowohl anzupassende Teilbereiche der restlichen Konduktorregion beinhaltet als auch einen hinreichen großen Teil der nicht-leitfähigen Region.

von Ω_B im Allgemeinen a priori nicht möglich, da sie teilweise von der Gitterverformung abhängt, die ja gerade Bestandteil der numerischen Lösung ist. In der Regel genügt aber eine Abschätzung der Gestalt. Bei Bedarf kann die Form des Pufferbereiches durch Testrechnungen verbessert werden.

Die größte Schwierigkeit bei der automatisierten Gitterbewegung liegt grundsätzlich in der Aufrechterhaltung der Gitterqualität und Gittervalidität [Jasak u. Tuković 2007]. Qualitativ sind dabei in erster Linie die in Abschnitt 3.2 diskutierte Nicht-Orthogonalität und die Schiefe gemeint, jedoch besteht auch ein großes Interesse in der Wahrung relativer Zellabmessungen. Hinsichtlich der Validität geht es vorrangig darum Zellen mit negativem Volumen und Überschneidungen zu verhindern. In Jasak u. Tuković [2007, Abschnitt 1] werden mit Bezug auf *foam-extend* verschiedene verfügbare Verfahren bzw. Ansätze zur Umverteilung der Gitterpunkte diskutiert. Die beiden dort gezeigten Techniken sind in *foam-extend* implementiert und werden im Folgenden kurz vorgestellt.

Eine Methode zur Glättung basiert auf der Lösung einer vektoruellen Laplace-Gleichung für die Gittergeschwindigkeit \mathbf{v} [Loöhner u. Yang 1996; Jasak u. Weller 2000; Jasak u. Tuković 2007]:

$$\Omega_F \cup \Omega_B: \quad \nabla \cdot (\gamma \nabla \mathbf{v}) = \mathbf{0}. \quad (5.17)$$

Darin lässt sich über die frei skalierbare Diffusivität γ die Flexibilität des Gitters an spezielle Bedürfnisse anpassen. Tendenziell ist es von Vorteil, nahe der bewegten Ränder eine wesentlich höhere Beweglichkeit zuzulassen als in weiter Entfernung. Konkrete Beispiele, deren Wirkung und Vergleiche zur Definition der Gitterflexibilität (Diffusivität) findet sich in Jasak u. Tuković [2007]. Eine markante Charakteristik der Laplace-Gleichung ist die fehlende Kopplung zwischen den einzelnen Komponenten des vektorwertigen Feldes \mathbf{v} . Diese Eigenschaft wirkt sich hinsichtlich der Erhaltung der Gitterqualität eher nachteilig aus, bietet jedoch andererseits auch den Vorteil, dass das Gitter bei

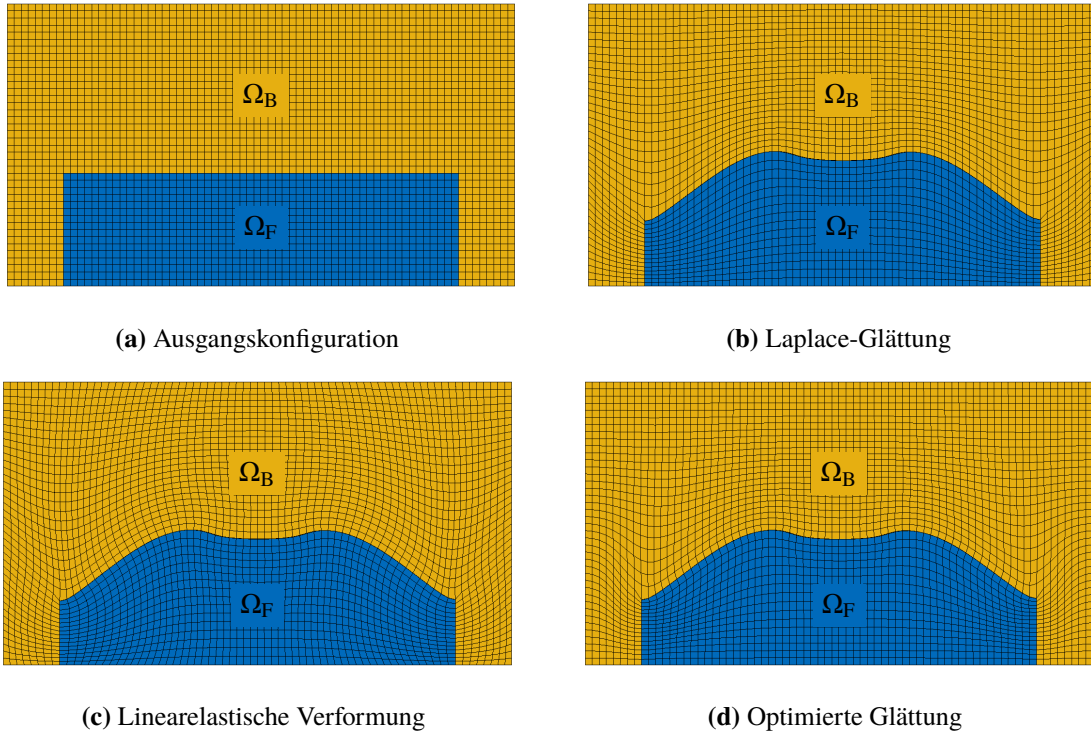


Abbildung 5.4: Verschiedene Verfahren zur Umverteilung/Glättung der Gitterpunkte: Ausgehend von der ursprünglichen Geometrie aus Abbildung 5.2 mit gleichmäßig orthogonalem Gitter (a) wird eine Verformung entweder über die Lösung einer Laplace-Gleichung (b) oder die Lösung eines linearelastischen Problems für ein Pseudo-Festkörper (c) realisiert. Die beiden zuvor genannten Verfahren lassen sich zu einer optimierten Methode kombinieren, wenn die linearelastische Verformung nur auf den Randbereich beschränkt und die Flexibilität an allen Rändern erhöht wird (d).

Bedarf nur in eine bestimmte Richtung deformiert werden kann, sofern die aufgeprägte Bewegung der Ränder kompatibel ist. In Abbildung 5.4b ist ein typisches Beispiel eines über die Lösung von Gleichung (5.17) dynamisch bewegten Gitters mit Bezug auf Abbildung 5.3 illustriert. In der Darstellung ist zu erkennen, dass die gerichtete Glättung die vertikale Wandkontur des Konduktors in der Pufferregion erhält. Durch die unidirektionale Verschiebung nimmt jedoch gerade im Bereich der freien Oberfläche die Nicht-Orthogonalität stark zu, was die Fehlerordnung der Diskretisierung negativ beeinflusst [vgl. Abschnitt 3.2].

Alternativ bietet es sich an, die zu bewegende Geometrie als einen Pseudo-Festkörper mit isotropen Eigenschaften aufzufassen und diesen beispielsweise einer linearelastische Verformung zu unterziehen [Johnson u. Tezduyar 1994; Jasak u. Tuković 2007]. Dazu wird die stationäre Momentenbilanz [Betten 1986] auf Basis des Cauchyschen Spannungstensors σ mit isotropem Hookschen Gesetz zeitlich abgeleitet, um die Verschiebungsgradienten im Dehnungstensor ϵ durch Geschwindigkeitsgradienten der Gittergeschwindigkeit \mathbf{v} zu ersetzen [siehe auch Anhang A.3.5, Gleichung (A.37a)]:

$$\begin{aligned}
 \Omega_F \cup \Omega_B: \quad & \nabla \cdot \dot{\sigma} = \mathbf{0} \quad \text{mit} \quad \dot{\sigma} = 2\gamma \dot{\epsilon} + \nu \text{Sp}(\dot{\epsilon}) \mathbf{I} \\
 & \nabla \cdot (2\gamma \dot{\epsilon} + \nu \text{Sp}(\dot{\epsilon}) \mathbf{I}) = \mathbf{0} \quad \text{mit} \quad \dot{\epsilon} = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) \\
 & \nabla \cdot \left(\gamma \nabla \mathbf{v} + \gamma (\nabla \mathbf{v})^T + \nu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right) = \mathbf{0}.
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Dabei entspricht ν der ersten und γ der zweiten Lamé-Konstante (Schubmodul) [Betten 1986; Bathe 1996, Abschnitt 6.6.1, Seite 584], wobei die Einheiten hier unbedeutend sind. Die beiden (dimensionslosen) Lamé-Konstanten lassen sich bei Bedarf auch über einen Elastizitätsmodul und eine Querkontraktionszahl (Poissonzahl) darstellen. Im Gegensatz zu Gleichung (5.17) sorgen die beiden zusätzlichen Terme in Gleichung (5.18) für eine Kopplung der Komponenten von \mathbf{v} . Dies wirkt sich für kleine Deformationen des Gitters gegenüber der Laplace-Glättung sehr positiv aus. In Abbildung 5.4c ist z. B. erkennbar, dass besonders im Nahbereich der freien Oberfläche die Orthogonalität des Gitters nahezu erhalten bleibt. Durch die Kopplung kommt es jedoch fernab der Ränder wiederum zu unerwünschten Verformungen quer zur Richtung der Oberflächenbewegung, welche sich gerade bei sehr großen Verschiebungen äußerst negativ auf die Gitterqualität auswirken können. Zudem müssen zusätzliche Maßnahmen ergriffen werden um in der Pufferregion geometrische Zwangsbedingungen umzusetzen. Beispielsweise ist in der Darstellung Abbildung 5.4c zu erkennen, dass die vertikale Wandkontur des Konduktors in der Pufferregion im Gegensatz zu Abbildung 5.4b nicht erhalten bleibt.

Um bei der Gitterbewegung eine möglichst hohe Gitterqualität zu erreichen, liegt es für eine Konfiguration wie in Abbildung 5.3 nahe, eine Laplace-Glättung im Inneren und die linearelastische Verformung in den Randbereichen einzusetzen. Diese neue Idee wurde in dieser Arbeit durch eine Kombination der beiden Gleichungen (5.17) und (5.18) verwirklicht:

$$\Omega_F \cup \Omega_B: \quad \nabla \cdot (\gamma \nabla \mathbf{v}) + \beta_v \nabla \cdot (\gamma (\nabla \mathbf{v})^T + \nu (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I}) = \mathbf{0}. \quad (5.19)$$

Über das Mischfaktorfeld $\beta_v \in [0, 1]$ kann lokal die Laplace-Glättung mit $\beta_v = 0$, die linearelastische Vorformung mit $\beta_v = 1$ oder ein Mischbereich mit $0 < \beta_v < 1$ realisiert werden. Dadurch lassen sich die Vorteile beider Methoden kombinieren, indem ausgehend von $\beta_v = 0$ der volle linearelastische Anteil nur im Nahbereich von Rändern aktiviert wird. Damit wird die Nicht-Orthogonalität vom Rand ins Innere verschoben, wo sie im Zuge der Diskretisierung leichter korrigiert werden kann. Wird zusätzlich auch noch die Gitterflexibilität γ in Randbereichen stark erhöht, ergibt sich für hiesige Zwecke insgesamt ein sehr robustes Verfahren. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.4d im direkten Vergleich zu Abbildung 5.4b und Abbildung 5.4c dargestellt.

Die drei Gleichungen (5.17) bis (5.19) können alle über die FVM in *foam-extend* gelöst werden. Dazu wurden im Rahmen dieser Arbeit fehlende Löser für die Gleichung (5.18) und (5.19) anhand des in Jasak u. Weller [2000] geschilderten Vorgehens auf Grundlage der FVM neu implementiert. Die gewöhnlichen Matrizen, die auch in *OpenFOAM* zur Verfügung stehen, ermöglichen jedoch durch die Kopplung der Geschwindigkeitskomponenten in Gleichung (5.18) und (5.19) keine vollständig implizite Lösung. Darüber hinaus kann die explizite nicht-orthogonale Korrektur bei der Berechnung der Gitterdeformation auf Grund der Unbeschränktheit Probleme bereiten. Um diese und weitere Limitierungen bei der Interpolation zwischen Zellzentren und Gitterpunkten zu vermeiden ist in *foam-extend* alternativ eine Lösung auf Basis einer speziellen tetraedrischen Finite-Elemente-Methode (FEM) möglich [Jasak u. Tuković 2007, Abschnitt 3.3] Diese tetraedrische FEM ist in *foam-extend* derart implementiert, dass trotz unterschiedlicher Technik keine aufwändigen Suchalgorithmen zum Datenaustausch mit der FVM nötig sind. Obwohl die Nutzung dieser Methode im Allgemeinen zwar etwas zuverlässiger ist, verursacht der Ansatz im Gegensatz zur FVM wesentlich mehr Rechenaufwand

und ist zudem nicht optimiert. Die Erfahrung hinsichtlich der Simulation des RGS-Prozesses hat auch gezeigt, dass der Weg über die FEM nicht nötig ist. Für andere Anwendungsfälle wäre diese Möglichkeit aber beispielsweise in zukünftigen Arbeiten durchaus interessant.

5.1.4 Lösungsverfahren im Zeitbereich

In diesem Abschnitt wird im Zusammenhang mit dem Teilproblem der HD und der ITT ein Lösungsalgorithmus beschrieben der, ausgehend von dem in *foam-extend* implementierten Algorithmus zur numerischen Berechnung von gewöhnlichen Strömungen mit freier Oberfläche, in dieser Arbeit im Hinblick auf die Kopplung mit der MD technisch erweitert und verbessert wurde. Zur diskreten Lösung des instationären Teilproblems mit dynamisch angepasstem Gitter [Abschnitt 5.1.1 bis 5.1.3] kommt eine erweiterte Form des in Tuković u. Jasak [2012, Abschnitt 3] beschriebenen semi-impliziten Verfahrens zum Einsatz. Dazu werden die Navier-Stokes-Gleichungen und Randbedingungen an der freien Oberfläche aus Gleichung (5.13b) bei gegebener Lorentz-Kraft zusammen mit der Gitterbewegung in Ω_F und Ω_B iterativ gelöst. Der iterative Prozess beinhaltet dabei je Zeitschritt die folgenden wichtigen Teilschritte, wobei der gesamte Ablauf von Punkt 1 bis 7 auch in Abbildung 5.5 veranschaulicht ist:

1. Zum m -ten Iterationsschritt wird für eine gegebene Position der freien Oberfläche Γ_F zum vorherigen Iterationsschritt ($m - 1$) der statische Druck $p_f^{\{m\}}$ auf Γ_F nach Gleichung (5.10b) bestimmt.
2. Anhand des Geschwindigkeitsfeldes $\mathbf{u}^{\{m-1\}}$ vom letzten Iterationsschritt werden daraufhin mit $p_f^{\{m\}}$ die Randbedingungen für den Normalengradienten der Geschwindigkeit $(\mathbf{n}_F \cdot \nabla \mathbf{u})^{\{m\}}$ und den modifizierten Druck $\tilde{p}^{\{m\}}$ auf Γ_F nach Gleichung (5.13a) und (5.13b) mit der Finite-Flächen-Methode (Finite Area Method, FAM) [Tuković 2005] aktualisiert.
3. Dann werden zur Gewährleistung von Masse- und Impulserhaltung die Navier-Stokes-Gleichungen (5.1a) und (5.7) im Sinne der ALE-Methode mit der Gittergeschwindigkeit $\mathbf{v}^{\{m-1\}}$, der Volumenkraft $\tilde{\mathbf{f}}$ und den aktuellen Randbedingungen über das Pressure-Implicit with Splitting of Operators (PISO)-Verfahren [Issa 1986] gelöst. Damit werden konsistente Felder sowohl des modifizierten Druckes $\tilde{p}^{\{m\}}$ als auch der Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}^{\{m\}}$ generiert.
4. Im Anschluss wird die Position der freien Oberfläche unter Berücksichtigung des SCL durch Verschiebung der Gitterpunkte angepasst, sodass die Normalgeschwindigkeit $(\mathbf{n}_F \cdot \mathbf{v})^{\{m\}}$ gemäß Gleichung (5.14) der aktuellen Normalkomponente der Strömungsgeschwindigkeit $(\mathbf{n}_F \cdot \mathbf{u})^{\{m\}}$ entspricht. Die Tangentialkomponente $((\mathbf{I} - \mathbf{n}_F^2) \cdot \mathbf{v})^{\{m\}}$ ergibt sich dabei ggf. aus dem konkreten Verfahren zur Anpassung des Gitters.
5. Ist die Änderung der Strömungs- oder Gittergeschwindigkeit bzw. die Oberflächenbewegung gegenüber dem letzten Iterationsschritt kleiner als ein zuvor festgelegtes Konvergenzkriterium, so ist der Iterationsprozess abgeschlossen.
6. Erreicht die Deformation der Oberfläche einen sehr großen Wert in Relation zur charakteristischen lokalen Zellgröße, oder unterschreitet die Gitterqualität einen definierten Grenzwert, so

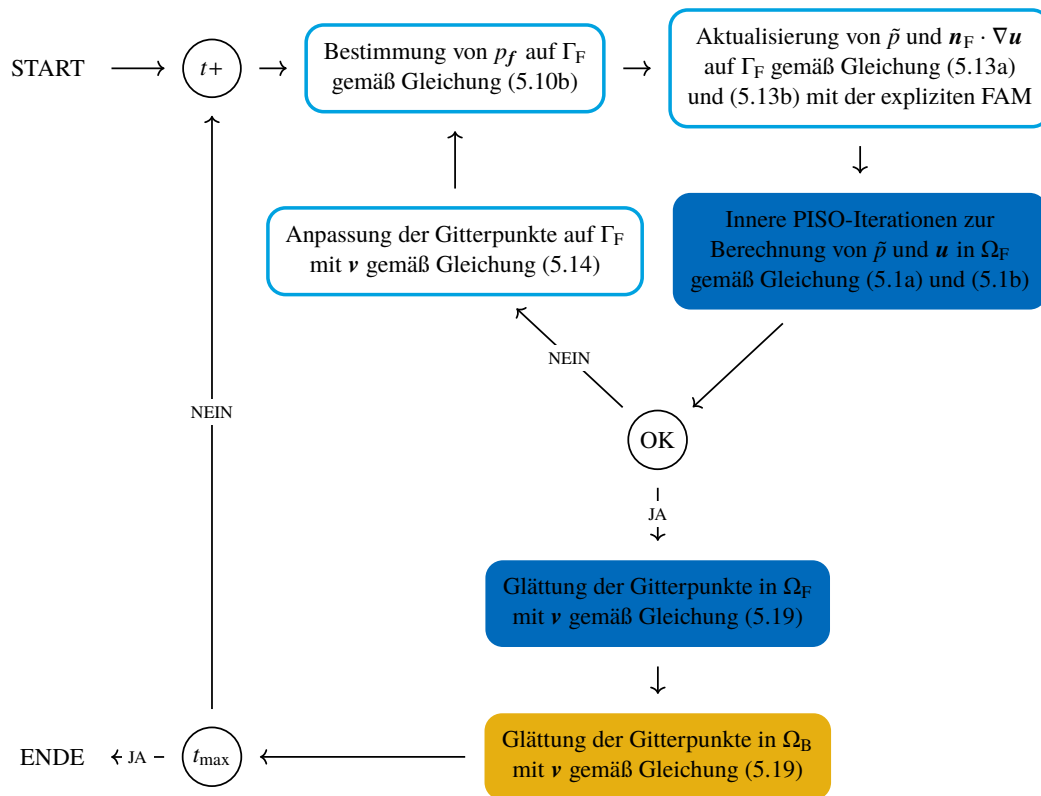


Abbildung 5.5: Ablaufplan zur semi-impliziten Lösung des hydrodynamischen Teilproblems mit dynamisch angepasstem Gitter in Ω_F und Ω_B aus Abschnitt 5.1.1 bis 5.1.3: Die Kurzform „ $t+$ “ bezeichnet den Übergang zum nächsten Zeitschritt, das Kürzel „OK“ steht für einen Konvergenztest und „ t_{\max} “ beschreibt den Test über das Erreichen des Simulationsendes.

werden im aktuellen Zeitschritt auch die Gitterpunkte im Inneren von Ω_F über die Lösung von Gleichung (5.19) über die Aktualisierung von $v^{\{m\}}$ entsprechend geglättet.

- Falls die Gitterpunkte in Ω_F geglättet wurden, wird zum Abschluss auch das Gitter in Ω_B anhand von Gleichung (5.19) bewegt.

Grundlagen der expliziten FAM

Bei der Berechnung der Randbedingungen aus Gleichung (5.13) [Punkt 2 auf Seite 142] sind Oberflächen-Ableitungen der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} auf Γ_F involviert. Neben der Oberflächen-Divergenz $\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}$ und dem Oberflächen-Gradienten $\bar{\nabla} \mathbf{u}$ ist dabei zusätzlich auch die Krümmung $\kappa = -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n}$ von großer Bedeutung. In *foam-extend* werden diese auf Grundlage des Gaußschen Integralsatzes in Oberflächen-Form [Anhang A.3.6, Gleichung (A.43)] diskretisiert und explizit berechnet [Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.4]. Die FAM ist im Prinzip nichts weiter als eine Übertragung der FVM auf polygonale Kontrollflächen und deren Kanten, anstelle von Kontrollvolumina und Flächen.

Unter der Annahme einer lokal nur linear variierenden Funktion ψ [Gleichung (3.16)] lässt sich, wie schon bei der FVM für Volumina [Gleichung (3.17)] und Flächen [Gleichung (3.18)], ebenso für eine

Kante e der Wert im Schwerpunkt \mathbf{x}_e als Mittelwert darstellen:

$$\psi_e = \psi(t, \mathbf{x}_e) \approx \frac{1}{L_e} \int_{\Lambda_e} \psi(t, \mathbf{x}) dL. \quad (5.20)$$

Darin beschreibt L_e die Kantenlänge und Λ_e ist das zugehörige Gebiet der Kante e . In Analogie zur FVM lassen sich damit Flächenintegrale [vgl. Gleichung (3.26)]

$$\int_{\Gamma_f} \psi dS \approx \psi_f S_f \quad (5.21)$$

und Linienintegrale [vgl. Gleichung (3.27)]

$$\int_{\partial\Gamma_f} d\mathbf{L} \circ \psi = \sum_e \int_{\Lambda_e} d\mathbf{L} \circ \psi \approx \sum_e \mathbf{L}_e \circ \psi_e \quad (5.22)$$

durch die Schwerpunktregel approximieren, wobei hinsichtlich der Summation bezüglich inneren (\times), äußeren (\square) und allen (\boxtimes) Kanten des Rechengebietes Ω unterschieden werden kann [vgl. Gleichung (3.28)]. Weiterhin bezeichnet in Gleichung (5.22) ψ_e den Wert des Feldes und $\mathbf{L}_e = \mathbf{m}_e L_e$ den mit der Kantenlänge L_e gewichteten Binormalenvektor im Schwerpunkt \mathbf{x}_e der Kante e . Der normierte Binormalenvektor $\mathbf{m}_e = \mathbf{t}_e \times \mathbf{n}_e$ mit $|\mathbf{m}_e| = 1$ wird aus dem in Richtung der Kante zeigenden Tangentialvektor \mathbf{t}_e und dem mittleren Normalenvektor im Schwerpunkt der Kante $\mathbf{n}_e = \mathbf{n}_{e,0} + \mathbf{n}_{e,1} / |\mathbf{n}_{e,0} + \mathbf{n}_{e,1}|$ berechnet. Letzterer setzt sich wiederum aus den über benachbarte Flächen gemittelten Normalenvektoren $\mathbf{n}_{e,0}$ und $\mathbf{n}_{e,1}$ am Anfangspunkt $\mathbf{x}_{e,0}$ bzw. Endpunkt $\mathbf{x}_{e,1}$ der entsprechenden Kante zusammen [siehe Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.4, Gleichung (48) und (58)].

Werte von ψ im Schwerpunkt einer Kante lassen sich grundsätzlich – genau wie bei der FVM – über eine (lineare) Interpolation ermitteln [vgl. Gleichung (3.31)]. Bei der FAM wird jedoch auf Grund einer möglichen Krümmung die lokale Ausrichtung benachbarter Flächen über Transformationstensoren berücksichtigt [siehe Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.4, Gleichung (49) und (50) sowie Abbildung 6]. Daraus lassen sich mit dem Gaußschen Integralsatz in Oberflächen-Form

$$\int_{\Gamma_f} \bar{\nabla} \circ \psi dS = \int_{\partial\Gamma_f} \mathbf{m} \circ \psi dL - \int_{\Gamma_f} \kappa \mathbf{n} \circ \psi dS = \int_{\partial\Gamma_f} d\mathbf{L} \circ \psi - \int_{\Gamma_f} \kappa \mathbf{n} \circ \psi dS, \quad (5.23)$$

wie zur expliziten Berechnung von Gradient, Divergenz und Rotation bei der FVM [vgl. Gleichung (3.74)], die in Gleichung (5.13) benötigten Oberflächen-Ableitungen durch Anwendung von Gleichung (5.21) und (5.22) numerisch bestimmen [siehe Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.4, Gleichung (46) und (47)]:

$$\{\bar{\nabla} \circ \psi\}_f \approx \frac{1}{S_f} \int_{\Gamma_f} \bar{\nabla} \circ \psi dS \approx \frac{1}{S_f} \sum_e^{\times} \mathbf{L}_e \circ \psi_e + \frac{1}{S_f} \sum_e^{\square} \mathbf{L}_e \circ \psi_e - \kappa_f \mathbf{n}_f \circ \psi_f. \quad (5.24)$$

Die Werte ψ_e auf inneren Kanten (\times) werden linear interpoliert und die Werte von ψ auf äußeren Kanten (\square) müssen in Form der Randwerte v_e vorgegeben sein. Der wesentliche Unterschied von Gleichung (5.24) und ihrem Pendant der FVM in Gestalt von Gleichung (3.74) besteht in dem zusätzlichen Term, welcher die Krümmung κ_f im Schwerpunkt der Fläche f beinhaltet.

Die Krümmung lässt sich anhand von Gleichung (5.24) mit $\psi \hat{=} \mathbf{n}$ und der Interpretation von „ \circ “ als inneres Produkt, d. h. auf Basis der Normalenvektoren \mathbf{n}_e im Schwerpunkt der Kanten, nicht bestimmen, da der Gaußsche Integralsatz in Oberflächen-Form ja mit $\mathbf{m}_e \cdot \mathbf{n}_e = 0$ und $\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{n}_f = 1$ für beliebige Krümmungen gilt. Mit $\psi \hat{=} 1$ und der Deutung von „ \circ “ als äußeres Produkt findet man dagegen eine geeignete Approximation anhand der Normalenvektoren \mathbf{n}_f in den Schwerpunkten der Flächen [vgl. Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.5]:

$$\kappa_f = -\{\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n}\}_f \approx \frac{1}{S_f} \sum_e^{\boxtimes} \mathbf{L}_e \cdot \mathbf{n}_f. \quad (5.25)$$

Zur Berechnung der Oberflächen-Divergenz $\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}$ und dem Oberflächen-Gradienten $\bar{\nabla} \mathbf{u}$ für Gleichung (5.13) wird die Geschwindigkeit im Kontext der FAM von den Schwerpunkten der Flächen (\mathbf{u}_f) auf die Kanten des Gitters der freien Oberfläche interpoliert (\mathbf{u}_e). Es stellt sich also noch die Frage, auf welchem Weg man über die Zellwerte \mathbf{u}_P der FVM an die Flächenwerte gelangt. Hier können wieder die Methoden aus Abschnitt 3.3.2 eingesetzt werden. Nach Gleichung (3.39b) lassen sich über die aktuellen Randwerte des Geschwindigkeitsgradienten auch die Randwerte der Geschwindigkeit durch lineare Extrapolation berechnen. Diesbezüglich sei jedoch noch mal darauf hingewiesen, dass in *OpenFOAM* die Schiefe bzw. Nicht-Orthogonalität des Gitters an Rändern nicht berücksichtigt wird. Insofern ist nahe des Randes Γ_F eine besonders hohe Gitterqualität gewünscht.

Das PISO-Verfahren

Bezüglich der eigentlichen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen (5.1) [Punkt 3 auf Seite 142] wurden alle wichtigen Grundlagen bereits in Abschnitt 3.3 vorgestellt. Letzten Endes handelt es sich bei der Impulserhaltungsgleichung (5.1b) bzw. der modifizierten Version (5.7) auch um eine spezielle Art der Transportgleichung (3.19), bei welcher mit $\psi \hat{=} \mathbf{u}$ und $\gamma \hat{=} \eta$ zum einen die Geschwindigkeit selbst transportiert wird und zum anderen der Druckgradient im Quellterm $s(\mathbf{u}) \hat{=} \tilde{\mathbf{f}} - \nabla \tilde{p}$ steht. Ersteres gibt der Gleichung einen nicht-linearen Charakter und Letzteres bringt eine zusätzliche Problematik mit sich: Für den Druck inkompressibler Fluide existiert nämlich keine Zustandsgleichung. Stattdessen wirkt der Gradient des Druckes in der Impulsbilanz nur als eine Art Nebenbedingung zur Erfüllung der Massenerhaltung (5.1a). Eine kurze Übersicht existierender Lösungsverfahren für diese spezielle Art der Druck-Geschwindigkeitskopplung findet sich beispielsweise in Fröhlich [2006, Abschnitt 4.4].

In *foam-extend* wird das semi-implizite PISO-Projektionsverfahren nach Issa [1986] in der ALE-Methodik aus Gleichung (3.21) auf einem kollozierten Gitter angewendet, d. h. die diskreten Daten von Druck und Geschwindigkeit beziehen sich dabei jeweils auf den Schwerpunkt der Kontrollvolumina [Jasak 1996, Abschnitt 3.8; Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2]. Das Verfahren umfasst mehrere Teilschritte, wobei letztlich die Operatoren für Druck und Geschwindigkeit getrennt werden.

Zur Umsetzung wird zunächst der Konvektionsterm in Gleichung (5.7) anhand eines bekannten Massen- \dot{m}_f und Volumenstromes \dot{V}_f auf den Flächen der Kontrollvolumina linearisiert [siehe Gleichung (3.36)] und alle Terme bis auf den Druckgradienten im Sinne der Abschnitte 3.3.4 bis 3.3.7 diskretisiert. Die Diskretisierung liefert dann, wie in Abschnitt 3.3.3 gezeigt, pro Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem

$$a_P \mathbf{u}_P + \sum_f a_{N_f} \mathbf{u}_{N_f} = r_P - \{\nabla \tilde{p}\}_P, \quad (5.26)$$

wobei hier aus didaktischen Gründen nur eine einzelne Gleichung aufgegriffen und auf den Zellindex $k = 1, \dots, n$ verzichtet wird. Der Druckgradient ist in Gleichung (5.26) nur formell in eine diskrete Form gebracht worden. Über einen alten Wert des modifizierten Druckes kann die Geschwindigkeit in einem Prädiktor-Schritt an dieser Stelle theoretisch bereits abgeschätzt werden, sofern die Diskretisierung von Gleichung (5.26) vervollständigt wird. Zur weiteren Berücksichtigung der Massenerhaltung wird der Term des Druckgradienten in Gleichung (5.26) aber vorerst so belassen. Die Abschätzung in Verbindung mit einem iterativen Lösungsprozess ist auch nicht zwingend nötig.

Die Nebendiagonalbeiträge und den konstanten Anteil der diskreten Impulsbilanz fasst man üblicherweise durch die Einführung des diskreten \mathbf{H} -Operators zusammen:

$$a_P \mathbf{u}_P = \mathbf{H}_P(\mathbf{u}) - \{\nabla \tilde{p}\}_P \quad \text{mit} \quad \mathbf{H}_P(\mathbf{u}) = r_P - \sum_{f \in \partial\Omega_{P_k}} a_{N_f} \mathbf{u}_{N_f} = r_P - \sum_f a_{N_f} \mathbf{u}_{N_f}. \quad (5.27)$$

Somit kann die Geschwindigkeit in den Zellzentren, nach Invertierung des diagonalen Anteils, über

$$\mathbf{u}_P = \frac{\mathbf{H}_P(\mathbf{u})}{a_P} - \frac{1}{a_P} \{\nabla \tilde{p}\}_P = \mathbf{u}_P^* - \frac{1}{a_P} \{\nabla \tilde{p}\}_P \quad (5.28)$$

ausgedrückt werden. Diese Art der Matrix-Zerlegung wird auch beim Jacobi-Verfahren Saad [2003, Abschnitt 4.1, Gleichung (4.5)] zur iterativen Lösung von linearen Gleichungssystemen genutzt. In diesem Sinne kann der Term $\mathbf{u}_P^* = \mathbf{H}_P(\mathbf{u})/a_P$, wie in Gleichung (5.28) dargestellt, als eine Art diskrete Zwischengeschwindigkeit ohne den Einfluss des Druckes interpretiert werden.

Die Motivation zur Darstellung der Momentenbilanz nach Gleichung (5.28) wird erst im Hinblick auf deren Kombination mit der inkompressiblen Massenerhaltungsgleichung (5.1a) ersichtlich. In diskreter Form lautet die Divergenzfreiheit der Geschwindigkeit für eine Zelle P [vgl. Abschnitt 3.3.5 und Gleichung (3.60)]:

$$\sum_f \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f = \sum_f \frac{\dot{m}_f}{\rho_f} = 0. \quad (5.29)$$

Wird nun Gleichung (5.28) von den Zellzentren auf die Flächen interpoliert und in Gleichung (5.29) eingesetzt, so erhält man eine Gleichung für den modifizierten Druck:

$$\sum_f \mathbf{S}_f \cdot \left(\left\{ \frac{1}{a} \right\}_f \{\nabla \tilde{p}\}_f \right) = \sum_f \mathbf{S}_f \cdot \left\{ \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a} \right\}_f = \sum_f \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f^*. \quad (5.30)$$

Nimmt man formal an, $1/a$, $\mathbf{H}(\mathbf{u})/a$ und damit auch \mathbf{u}^* seien kontinuierliche Koeffizientenfelder, so ist durch eine gedankliche Umkehrung der Diskretisierung leicht zu erkennen, dass es sich dabei um eine Art Poisson- bzw. Diffusions-Gleichung

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{a} \nabla \tilde{p} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (5.31)$$

mit variabler Diffusivität handelt, deren Inhomogenität äquivalent zur Divergenz der Zwischengeschwindigkeit ist. Zur selben Erkenntnis kommt man auch, indem man den Divergenz-Operator formal auf Gleichung (5.28) anwendet. Die Gleichung (5.31) ist mit $\rho \hat{=} 1$, $\psi \hat{=} -\tilde{p}$ und $s(\tilde{p}) \hat{=} \nabla \cdot \mathbf{u}^*$ wieder eine spezielle Art einer stationären Transportgleichung ohne Konvektionsterm und lässt sich entsprechend numerisch lösen. Mit einem aktualisierten Druck gelangt man damit letztlich auch an einen Massenstrom, der die diskrete Massenerhaltung gemäß Gleichung (5.29) exakt erfüllt:

$$\dot{m}_f = \rho_f \left(\mathbf{S}_f \cdot \left\{ \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a} \right\}_f - \mathbf{S}_f \cdot \left(\left\{ \frac{1}{a} \right\}_f \{ \nabla \tilde{p} \}_f \right) \right) \quad (5.32)$$

Auf dessen Basis erfolgt wiederum die Berechnung des Flusses F_f [vgl. Gleichung (3.36)], welcher zur Linearisierung und Diskretisierung des Konvektionsterms benötigt wird. Die Geschwindigkeit in den Zellzentren kann durch eine explizite Berechnung des Druckgradienten in Gleichung (5.28) ermittelt werden [vgl. Abschnitt 3.4].

Für nicht durchlässige Ränder, mit Randbedingungen wie z. B. Gleichung (5.11) oder (5.12), kann über Gleichung (5.32) auch eine Druckrandbedingung für den Normalengradienten des (modifizierten) Druckes abgeleitet werden, wenn man an entsprechenden Grenzflächen einen verschwindenden Massenstrom voraussetzt. Dadurch werden die Abhängigkeiten aus der Impulserhaltungsgleichung indirekt über die diskreten Koeffizientenfelder \mathbf{H} und a erfüllt.

Das Gesamtkonzept zur numerischen Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen ergibt sich also insgesamt über die iterative Wiederholung der folgenden Schritte:

1. Linearisierung und Assemblierung von Gleichung (5.26) für $\mathbf{u}^{\{m-1\}}$ mit $\dot{m}^{\{m-1\}}$ und $\dot{V}_f^{\{m-1\}}$,
2. Durchführung eines optionalen Prädiktor-Schrittes für $\mathbf{u}^{\{m\}}$ durch Lösen der diskreten Gleichung (5.26) mit dem Gradienten von $\tilde{p}^{\{m-1\}}$,
3. Berechnung der diskreten Koeffizientenfelder a und $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ aus Gleichung (5.27) in den Zellzentren der Kontrollvolumina,
4. Interpolation der Koeffizientenfelder $1/a$ und $\mathbf{H}(\mathbf{u})/a$ auf die Flächen nach Rhie u. Chow [1983] bzw. Tuković u. Jasak [2012, Abschnitt 3.2, Gleichung (22)],
5. Assemblierung und Lösung des linearen Gleichungssystems zu Gleichung (5.30) zur Aktualisierung des modifizierten Druckes $\tilde{p}^{\{m\}}$,
6. Bestimmung des konsistenten Massenstromes $\dot{m}^{\{m\}}$ nach Gleichung (5.32) und
7. Aktualisierung der Geschwindigkeit $\mathbf{u}^{\{m\}}$ in einem Korrektor-Schritt nach Gleichung (5.28).

Durch die Iterationen werden explizite Bestandteile, wie die Nicht-Linearität des Konvektionsterms in Gleichung (5.26), die Nicht-Orthogonalität des Gitters und die Abhängigkeit des $\mathbf{H}(\mathbf{u})$ -Operators von der Geschwindigkeit berücksichtigt.

Bewegung des Oberflächengitters im Zuge der ITT

Zur Gitterbewegung der Oberfläche Γ_F [Punkt 4 auf Seite 142] ist in *foam-extend* das in [Tuković u. Jasak \[2012, Abschnitt 3.3\]](#) beschriebene Verfahren als Erweiterung von [Muzaferija u. Perić \[1997\]](#) implementiert. Beide Verfahren weisen allerdings auf Grund ihrer lokalen Natur einen erheblichen Schwachpunkt auf, der zu massiven numerischen Problemen führen kann. Daher wird deren grundsätzliche Umsetzung kurz dargelegt und anschließend eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte methodische Verbesserung vorgestellt, welche diese Schwachstelle in *foam-extend* behebt.

Ausgangspunkt für die Verfolgung der freien Oberfläche mittels der ITT ist die kinematische Bedingung [siehe Anhang B.1] bzw. die Randbedingung aus Gleichung (5.14). Durch Multiplikation mit dem Flächeninhalt S_f ergibt sich daraus für jede Fläche f des Gitters von Γ_F folgende Bedingung [[Muzaferija u. Perić 1997, Gleichung \(9\)](#)]:

$$\dot{V}_f = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{v}_f \stackrel{!}{=} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f = \frac{\dot{m}_f}{\rho_f} . \quad (5.33)$$

Die Bewegung ist demnach an den über Gleichung (5.32) ermittelbaren Massestrom der Strömung gebunden. Der Volumenstrom \dot{V}_f ergibt sich dagegen, unter Berücksichtigung des diskreten SCL gemäß Gleichung (3.25), je nach gewählter Zeitdiskretisierung aus entsprechenden geometrischen Berechnungen [z. B. [Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Gleichung \(28\)](#)].

Die Gewährleistung von Gleichung (5.33) ist damit eine große Herausforderung, denn die Navier-Stokes-Gleichungen (5.1a) und (5.7) sind über die Randbedingung aus Gleichung (5.13a) und (5.13b) geometrisch mit dem zugrundeliegenden Gitter gekoppelt. Um bei der Lösung von \mathbf{u} und \tilde{p} eine gleichzeitige Adaption des Gitters zu vermeiden, kommt zur Anpassung der Position von Γ_F eine iterative Vorgehensweise im Sinne von

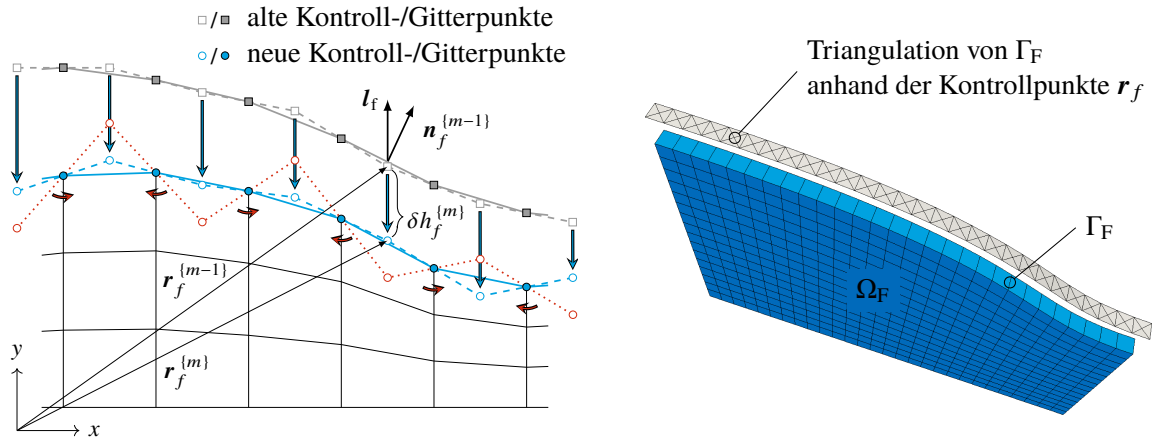
$$\dot{V}_f^{\{m\}} = \dot{V}_f^{\{m-1\}} + \delta\dot{V}_f^{\{m\}} = \frac{\dot{m}_f^{\{m\}}}{\rho_f} \quad (5.34)$$

zur Anwendung [vgl. [Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Gleichung \(37\)](#)]. Für eine hinreichend große Anzahl von Iterationsschritten wird der Korrekturvolumenstrom

$$\delta\dot{V}_f^{\{m\}} = \frac{\dot{m}_f^{\{m\}}}{\rho_f} - \dot{V}_f^{\{m-1\}} \quad (5.35)$$

näherungsweise verschwinden. Aus der Korrektur des Volumenstromes pro Schritt resultiert, je nach Zeitdiskretisierung und Zeitschrittweite Δt , eine absolute Volumenänderung bezüglich der Fläche f [[Muzaferija u. Perić 1997, Gleichung \(10\)](#); [Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Gleichung \(38\)](#)]:

$$\delta V_f^{\{m\}} = c_V \delta\dot{V}_f^{\{m\}} \Delta t . \quad (5.36)$$



(a) Bewegung der Gitterpunkte durch Verschieben der Kontrollpunkte \mathbf{r}_f nach Gleichung (5.38). Die lineare Rekonstruktion erlaubt fehlerhafte Massenflüsse der Strömung bei gleichmäßig abwechselnder Verschiebung der \mathbf{r}_f (gestrichelte Linie).

(b) Die zusätzliche Triangulation des Gitters zur Krümmungsberechnung nach Gleichung (5.25) verhindert fehlerhafte Massenflüsse bei der Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen und verbessert das Konvergenzverhalten drastisch.

Abbildung 5.6: Anpassung des Gitters der freien Oberfläche: Grundprinzip nach Muzafertija u. Perić [1997] bzw. Tuković u. Jasak [2012, Abschnitt 3.3] (a) und Vorgehen zu Stabilisierung der iterativen Anwendung des Verfahrens (b) zur numerischen Berechnung der Strömung.

Der Koeffizient c_V kann zwar aus der zeitlichen Diskretisierung für einen vollen Zeitschritt abgeleitet werden, ist aber im Grenzfall der vollständigen Konvergenz von Gleichung (5.35) theoretisch beliebig wählbar. Sein Wert hat jedoch einen Einfluss auf das Konvergenzverhalten, sodass sich anhand dieses Parameters leicht eine Über- oder Unterrelaxation umsetzen lässt. Basierend auf dem Flächeninhalt S_f entspricht die absolute Volumenänderung nach Gleichung (5.36) wiederum einer ausgetragenen Länge bzw. der Höhe eines Prismas [Muzafertija u. Perić 1997, Gleichung (10); Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Gleichung (39)] bezüglich der Grundfläche f :

$$\delta h_f^{(m)} = \frac{\delta V_f^{(m)}}{S_f^{(m-1)} \mathbf{n}_f^{(m-1)} \cdot \mathbf{l}_f} = \frac{\delta V_f^{(m)}}{S_f^{(m-1)} \cdot \mathbf{l}_f}. \quad (5.37)$$

Über den zusätzlich eingeführten Vektor \mathbf{l}_f kann die Bewegungsrichtung bei Bedarf individuell restringiert werden. Laut Muzafertija u. Perić [1997] sollte der Richtungsvektor \mathbf{l}_f dabei möglichst parallel zur effektiv an der Oberfläche wirkenden Kraft sein. Im Falle einer Konfiguration, wie sie in Abbildung 5.2 gezeigt ist, erhält man gute Ergebnisse mit $\mathbf{l}_f = \pm \mathbf{g}$, wobei \mathbf{g} den Gravitationsvektor aus Gleichung (5.4) darstellt. Für eine geschlossene freie Oberfläche ohne Rand fehlt eine Vorzugsrichtung. Dort ist der Normalenvektor jeder individuellen Fläche mit $\mathbf{l}_f = \mathbf{n}_f$ eine bessere Wahl.

Anstelle die Gitterflächen direkt zu verschieben, werden Kontrollpunkte \mathbf{r}_f eingeführt [Muzafertija u. Perić 1997, Abbildung 2; Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Abbildung 4]. Sie dienen als Hilfsmittel zur Aktualisierung der Gitterpunkte, da auf Grund der diskreten Werte von δh_f bei direkter Manipulation der Gitterflächen kein glatter Oberflächenverlauf gewährleistet wäre. Mit der in

Abbildung 5.6a illustrierten Verschiebung der Kontrollpunkte

$$\mathbf{r}_f^{\{m\}} = \mathbf{r}_f^{\{m-1\}} + \delta h_f^{\{m\}} \mathbf{l}_f \quad (5.38)$$

wird die eigentliche Volumenänderung pro Fläche abgebildet [Muzafertija u. Perić 1997, Gleichung (11); Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Gleichung (41)]. Eine Initialisierung der Kontrollpunkte geschieht über die Schwerpunkte der Flächen: $\mathbf{r}_f^{\{0\}} = \mathbf{x}_f$. Man verschiebt also zunächst gedanklich jede Fläche von ihrer Ausgangsposition um eine Strecke δh_f in Richtung von \mathbf{l}_f , sodass der Volumeninhalt des mit S_f gebildeten Prismas gerade der Änderung δV_f gleicht. Die Anpassung der Gitterpunkte wird in *foam-extend* dann anhand der Position der Kontrollpunkte benachbarter Flächen über eine lineare Regressionsebene mit Hilfe der **Kleinste-Quadrate-Methode (KQM)** realisiert [vgl. Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.2, Gleichung (41) bis (44)]. Im Zweidimensionalen entspricht das einer linearen Interpolation [vgl. Muzafertija u. Perić 1997, Gleichung (12)]. Das entscheidende dabei ist, dass die tatsächlich berechnete Volumenänderung pro Fläche nur approximativ erfüllt wird [vgl. Muzafertija u. Perić 1997, Abbildung 3]. Da im Grenzfall der vollständigen Konvergenz δV_f allerdings verschwindet, scheint das Vorgehen gerechtfertigt.

Die Erfahrung hat jedoch gezeigt, dass es durch die lineare Rekonstruktion unter gewissen Umständen sogar zur Entkopplung von Druck und Geschwindigkeit an der freien Oberfläche kommen kann. Die Ursache dafür ist prinzipiell vergleichbar mit dem Entkopplungsmechanismus im Zusammenhang mit dem Divergenz-Operator auf kollokierten Gittern [Moukalled u. a. 2016, Abschnitt 15.2.3], welcher in *foam-extend* im Sinne der Interpolation nach Rhie u. Chow [1983] verhindert wird. Hier entspringt das Problem aber aus der lokalen Natur der Rekonstruktion.

In Abbildung 5.6a ist an einem zweidimensionalen Beispiel veranschaulicht, dass sich die aus der Rekonstruktion ergebende Gestalt der Oberfläche vollständig unsensibel gegenüber einer alternierend äquidistanten Verschiebung der Kontrollpunkte und damit auch einer entsprechenden Veränderung des Massenflusses \dot{m}_f verhält (gestrichelte Linie). Gleichzeitig kann für solch eine abwechselnde Schwankung der Normalgeschwindigkeit die lokale Massenerhaltung erfüllt sein, da sich resultierende Flüsse jeweils zur Hälfte über benachbarte Zellen unterhalb der Oberfläche ausgleichen können (gebogene Pfeile). Aus der Druckrandbedingung (5.13b) wird weiterhin deutlich, dass sich bei unveränderter Geometrie durch die gleichbleibende Krümmung κ_f weder ein dem Massenstrom entgegenwirkender Druck aufbaut, noch ist eine Änderung des Volumenstromes \dot{V}_f zu erwarten. Damit ist letztlich eine Konvergenz bei der iterativen Lösung von Gleichung (5.34) ausgeschlossen.

Für eine Simulation ist dagegen eine idealisierte, d. h. gleichzeitige und gleichmäßige Änderung der Massenströme wie sie in Abbildung 5.6a exemplarisch illustriert ist, sehr unwahrscheinlich. Verschiedene numerische Tests im Rahmen dieser Arbeit deuten darauf hin, dass dort dieselbe Art der Destabilisierung nur in anderer Form erscheint. Sie tritt vor allem bei einer hohen Tangentialgeschwindigkeit bzw. einer tangentialen Änderung der Geschwindigkeit ein und kann innerhalb weniger Zeitschritte zur Divergenz des Lösungsalgorithmus führen. Die Tests haben auch aufgezeigt, dass mit dem Versagen tatsächlich ein deutlich abwechselndes Abdriften der Kontrollpunkte in Verbindung mit einer oszillatorischen Verformung der Grenzfläche einhergeht. Obgleich dieses Aufrichten der freien Oberfläche stark an die Kelvin-Helmholtz-Instabilität [Helmholtz 1868] erinnert, so ist der ge-

naue Mechanismus der Destabilisierung durch die eigenen Untersuchungen noch nicht abschließend geklärt.

Unglücklicherweise treten gerade bei Induktionsprozessen, bedingt durch die Lorentz-Kraft und den Skineffekt, häufig hohe Tangentialgeschwindigkeiten auf, sodass eine Verbesserung des Verfahrens bei der Modellierung elektromagnetisch getriebener Strömungen mit freier Oberfläche zwingend nötig ist. Zur Vermeidung der geschilderten Probleme wurde für diese Arbeit die Idee umgesetzt, ein zusätzlich mitbewegtes Oberflächengitter zu nutzen, welches über eine Triangulation der Teilflächen des ursprünglichen Gitters mit den Kontrollpunkten \mathbf{r}_f entsteht. Ein Beispiel ist in Abbildung 5.6b zu finden. Das Zusatzgitter dient dabei ausschließlich zur diskreten Berechnung der Krümmung nach Gleichung (5.25), welche dann flächengewichtet auf des originale Gitter übertragen wird. Durch die direkte Kopplung an die Kontrollpunkte führt eine Bewegung der Kontrollpunkte dann unweigerlich zur Änderung der Geometrie, was sich folglich auch in der Randbedingung für den Druck bemerkbar macht. Auf diese Weise konnte nicht nur das gesamte Konvergenzverhalten der in *foam-extend* implementierten ITT drastisch verbessert, sondern sogar bei vorher scheinbar stabilen Testrechnungen die Anzahl der Iterationen zur Erfüllung von Gleichung (5.34), bei gleichbleibender Genauigkeit, um teilweise mehr als die Hälfte reduziert werden.

5.1.5 Begrenzung der Zeitschrittweite

Wie in Tuković u. Jasak [2012, Abschnit 3.6] beschrieben, darf zur Wahrung der Stabilität des Lösungsalgorithmus aus dem letzten Abschnitt eine kritische Zeitschrittweite nicht überschritten werden. Die maximale Zeitschrittweite ergibt sich dabei als Minimum zweier Stabilitätskriterien, die nachfolgend zusammengefasst werden.

Durch die explizite Vorgehensweise zur Anpassung der Position der freien Oberfläche muss zunächst das Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)-Kriterium

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{U}, \quad (5.39)$$

in jeder Zelle bzw. für jede Fläche des Gitters erfüllt sein. Das gilt sowohl für die bezüglich des bewegten Gitters relative Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u} - \mathbf{v}$ nach Gleichung (3.53) als auch für die Gittergeschwindigkeit \mathbf{v} selbst. Letzteres ist leicht verständlich, denn bei Nichteinhaltung könnte eine Anpassung der Gitterpunkte von Γ_F schon innerhalb eines Zeitschrittes zu Überschneidungen von Zellflächen des Gitters führen.

Gleichzeitig sollte die Zeitschrittweite aber auch hinreichend klein sein, um die Bewegung möglicher Kapillarwellen entlang der freien Oberfläche aufzulösen. Diese Wellen entstehen durch Druckänderungen infolge der Oberflächenspannung ζ und breiten sich, je nach Wellenlänge λ_ζ bzw. Wellenzahl $k_\zeta = 2\pi/\lambda_\zeta$, mit einer Geschwindigkeit von $c_\zeta = \sqrt{\zeta k_\zeta / \rho} = \sqrt{2\pi\zeta / \rho\lambda_\zeta}$ aus [Elmore u. Heald 1969]. Im diskreten Sinne ist demnach die größtmögliche Wellengeschwindigkeit genau diejenige, welche der kleinsten noch vom Gitter auflösbaren Wellenlänge $\lambda_\zeta = 2\Delta x$ entspricht. Hinsichtlich der

Zeitschrittweite muss also mindestens die Ungleichung

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{c_s} = \sqrt{\frac{\rho \Delta x^3}{\pi \zeta}} \quad (5.40)$$

eingehalten werden. Über einen Sicherheitsfaktor wird in Brackbill u. a. [1992, Abschnitt III.E, Gleichung (59)], durch Berücksichtigung von eventuell (evtl.) gegenläufigen Wellen, eine noch restriktivere Bedingung begründet. Darüber hinaus findet man in Denner u. van Wachem [2015, Abschnitt 5, Gleichung (45)] eine verallgemeinerte Beziehung, die Dopplereffekte durch eine bestehende tangentielle Geschwindigkeit miteinbezieht.

Für im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Simulationen haben sich die beiden Kriterien nach Gleichung (5.39) und (5.40) gemäß der Zeitschrittweite

$$\Delta t = \min \left(C \max_f \left(\frac{S_f \rho_f}{\delta_f (\dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f)} \right), C \max_f \left(\frac{S_f}{\delta_f \dot{V}_f} \right), C_s \max_f \sqrt{\frac{\rho_f}{\pi \zeta_f \delta_f^3}} \right) \quad (5.41)$$

mit $C < 1 \wedge C_s < 1$ als ausreichend erwiesen [vgl. Kapitel 3]. Für eine Fläche f des FVM-Gitters ist dabei S_f der Flächeninhalt [siehe Abschnitt 3.2], δ_f der Delta-Koeffizient nach Gleichung (3.5), \dot{V}_f der durch die Gittergeschwindigkeit \mathbf{v} verursachte Volumenstrom gemäß Gleichung (3.36) und (5.33) sowie \dot{m}_f der Massenstrom aus Gleichung (3.36) und (5.32) bezogen auf die Relativgeschwindigkeit $\mathbf{u} - \mathbf{v}$. Die Koeffizienten C und C_s in Gleichung (5.41) stellen die CFL-Zahl nach Gleichung (3.52) und eine ähnliche Kennzahl für die Ausbreitung von Kapillarwellen dar. Eine adaptive Zeitschrittbegrenzung auf Basis der beiden Kennzahlen wurde für diese Arbeit in *foam-extend* implementiert.

5.1.6 Anmerkungen zur Turbulenzmodellierung

Bei numerischen Simulationen mit der FVM können Strukturen, die kleiner als die Abmessung der Kontrollvolumina sind, auf Grund der Volumenmittelung nicht aufgelöst werden. Für physikalische Größen, deren Dynamik durch eine Form der Transportgleichung (3.19) bestimmt ist, lassen sich die kleinsten auftretenden Längenskalen bzw. räumliche Moden anhand der Materialeigenschaften untereinander in Relation setzen und so ggf. durch das Ähnlichkeitsprinzip größenordnungsmäßig abschätzen. Z. B. bei Strömungen ist diesbezüglich – als Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Transport – die Reynolds-Zahl $Re = \rho UL/\eta = UL/\nu$ maßgeblich, wobei U und L typische Geschwindigkeit und Länge darstellen. D. h. je größer die Reynolds-Zahl ausfällt, desto weniger macht sich die Diffusion bemerkbar und desto feinere Strukturen (Wirbel) können demzufolge existieren.

Was die Geometrie des dreidimensionalen RGS-Modells aus Abbildung 2.4 angeht, ist eine sinnvolle Definition der Reynolds-Zahl zur Abschätzung turbulenter Effekte auf Grund der räumlichen Mehrskaligkeit schwierig. Wählt man beispielsweise die mittlere Höhe der freien Oberfläche mit $L = 0,02$ m als charakteristische Länge, dann ergäbe sich in Verbindung mit der typischen Substratgeschwindigkeit von $U = u_s = 0,1$ m s⁻¹ [siehe Abschnitt 2.1] sowie der Dichte und der dynamischen Viskosität von flüssigem Silizium bei Schmelztemperatur mit $\rho = 2580$ kg m⁻³ und $\eta = 0,86$ Pa s [vgl. Tabelle 2.1] eine Reynolds-Zahl von $Re = 6000$. Verglichen mit existierender Literatur zu Nischenströmungen in

einem Hohlraum, wie z. B. [Shatrov u. a. \[2003\]](#) oder [Bouffanais u. a. \[2007\]](#), erscheint dieser Wert noch moderat, doch in Abschnitt 2.1 wurde bereits darauf hingewiesen, dass die elektromagnetisch angetriebene Strömung in der Hauptregion des RGS-Modells Geschwindigkeiten bis zu $U = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ erreicht [[Beckstein u. a. 2014, 2015a](#)]. Zieht man diesen, aus Testrechnungen ermittelten Wert zu Vergleichszwecken heran, gelangt man schnell in den Bereich von bis zu $Re = 30\,000$. Auch wenn diese Kennzahl nicht direkt mit reinen Nischenströmungen vergleichbar ist, sollte damit trotzdem deutlich werden, dass beim RGS-Prozess innerhalb der Schmelze eine turbulente Strömung vorliegt. Wie bereits in der Einleitung dieser Arbeit angedeutet, ist das Auftreten von Turbulenz bei der induktiven Prozessierung von Metallen und Halbmetallen generell eher die Regel als die Ausnahme [[Davidson 2001](#)].

Die Verfahren zur Berechnung turbulenter Strömungen lassen sich im Wesentlichen in drei große Grundtypen aufteilen [[Fröhlich 2006](#), Abschnitt 1.2 und Abbildung 1.3]:

- Bei der **direkten numerischen Simulation (Direct Numerical Simulation, DNS)** stellt man den Anspruch einer so feinen Gitterauflösung, dass selbst die kleinstmöglichen Wirbel vollständig erfasst werden. Diese Art der Modellierung ist jedoch extrem aufwändig und wird bei hinreichend großen Reynolds-Zahlen bzw. Geometrien praktisch unmöglich.
- Alternativ bietet sich die **Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation, LES)** als ein Verfahren an, bei welchem gegenüber der DNS die kleinsten Strukturen, z. B. durch eine Vergrößerung des Gitters, räumlich herausgefiltert werden. Stattdessen approximiert man deren Wirkung auf die Strömung durch Feinstrukturmodelle. Im statistischen Mittel wird die turbulente kinetische Energie einer dreidimensionalen Strömung von großen, energietragenden Wirbeln zu immer kleineren Strukturen transportiert, wobei mit abnehmender Längenskala die energetische Dissipation kontinuierlich zunimmt. Die Feinstrukturmodelle konzentrieren sich demnach schwerpunktmäßig, aber nicht ausschließlich, auf diese dissipative Eigenschaft [[Fröhlich 2006](#), Abschnitt 6.1.2]. Die LES ist somit zwar weit weniger aufwändig als eine entsprechende DNS, doch die Filterung kann zur Verringerung des Rechenbedarfs nicht beliebig vergrößert werden [vgl. [Fröhlich 2006](#), Abbildung 6.2].
- Die vor allem bei technischen Anwendungen und komplexen Geometrien am weitesten verbreitete Technik findet man im Rahmen der **Reynolds-gemittelten Simulation (Reynolds-Averaged simulation, RAS)** bzw. **Reynolds-gemittelten Navier-Stokes (Reynolds-Averaged Navier-Stokes, RANS)**-Modellierung. Dazu werden die Navier-Stokes-Gleichungen zeitlich gemittelt und so streng genommen jegliche Zeitabhängigkeit entfernt. Der in dieser stationären Beschreibung jedoch verbleibende Einfluss mittlerer turbulenter Fluktuationen im Reynolds-Spannungstensor wird über Turbulenzmodelle abgebildet. Da die gemittelten Größen räumlich gesehen viel glatter sind als deren Schwankungen, genügt bei der RAS eine im Vergleich zur LES wesentlich geringere Gitterauflösung, was sich wiederum direkt in kleineren Rechenzeiten bemerkbar macht. Eine formelle Beschränkung der zeitlichen Mittelung auf die turbulenten Zeitskalen im Sinne der **instationären Reynolds-gemittelten Navier-Stokes (Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes, URANS)**-Modellierung, ermöglicht aber auch im Kontext der RAS eine instationäre Beschreibung von Strömungen. Obwohl sich über den URANS-Ansatz damit prinzipiell

ein zeitabhängiges Verhalten langwelliger Effekte, wie z. B. ein globales intermittierendes Verhalten oder die Bewegung der freien Oberfläche beim RGS-Prozess, auflösen lässt, bewegt sich der Ansatz laut Fröhlich [2006, Abschnitt 1.2] bisher auf unsicherem Grund, da keine direkte Kontrolle über die Balance zwischen modellierten und aufgelösten Anteilen besteht.

Die Qualität einer LES oder RAS ist somit von der Auflösung des Gitters abhängig, wobei speziell bei der FVM natürlich die lokale Verteilung von Kontrollvolumina eine Rolle spielt. Üblicherweise treten bei Induktionsprozessen, bzw. allgemein im Zusammenhang mit leitfähigen Metallen und Halbmetallen, eher sehr kleine magnetische Prandtl-Zahlen in der Größenordnung von $Pr_M \sim 1 \cdot 10^{-5}$ bis $1 \cdot 10^{-7}$ auf [Moreau 1990, Abschnitt III.VI, Seite 100]. Werden nur Transportprozesse der MD und HD und das magnetische Feld näherungsweise als eine passiv transportierte Größe betrachtet, so sind über einen Vergleich von Kolmogorov- und Batchelor-Länge [Fröhlich 2006, Abschnitt 2.4.4 bis 2.4.7] die kleinsten Strukturen in der Strömung zu erwarten. Zusätzlich sollte auf Seite der HD auch die Wandauflösung [Fröhlich 2006, Abschnitt 2.5 und Kapitel 8] und bei der MD der Skineffekt [siehe Abschnitt 4.2.1] sowie ggf. Besonderheiten der MHD-Turbulenz [Davidson 2001, Abschnitt 7] beachtet werden.

In Kirpo [2008] und Spitans [2015] wird an mehreren Stellen auf die große Bedeutung der Turbulenz bei der Berechnung von Induktionsprozessen mit Strömung verwiesen. Der Tenor, der sich vor allem in Spitans [2015] in Bezug auf die elektromagnetische Levitation – bei der die Fluidregion mit $\Omega_F \equiv \Omega_C$ und $\Gamma_F \equiv \Gamma_C$ durch keinerlei Wände begrenzt wird – abzeichnet ist, dass die RAS Geschwindigkeiten dort systematisch unterschätzt, während die LES im Vergleich mit Experimenten weit bessere Ergebnisse liefert. In Spitans [2015, Abschnitt 1.1] werden in dieser Hinsicht sowohl das $k-\varepsilon$ - [Jones u. Launder 1972], das $k-\omega$ - [Wilcox 1988, 1998] als auch das $k-\omega$ -SST-Turbulenzmodell [Menter 1994] vergleichend genannt. Als Feinstrukturmodell wird dort nur das Smagorinsky-Modell [Smagorinsky 1963] eingesetzt. Alle diese Modelle haben gemeinsam, dass sie auf dem Boussinesq-Ansatz [Boussinesq 1897; Fröhlich 2006, Abschnitt 3.2.2 und 6.2.2; Moukalled u. a. 2016, Abschnitt 17.3] basieren. Demnach kann die Turbulenzmodellierung über eine skalare Wirbelviskosität ν_t oder η_t realisiert werden, welche die dissipative Wirkung nicht aufgelöster Strukturen repräsentiert [Pope 2000, Kapitel 10]. Durch Superposition mit der molekularen Viskosität ergibt sich daraus eine effektive Viskosität, die sich dann anstelle von ν bzw. η im Spannungstensor nach Gleichung (5.2) oder Gleichung (5.6) sowie in der Randbedingung (5.13) nutzen lässt. In OpenFOAM steht für diese Klasse von Modellen bereits eine fertige Schnittstelle zur Verfügung [Weller u. a. 1998], so dass eine vollständige Integration in den für diese Arbeit entwickelten Methodenapparat sehr einfach umgesetzt werden konnte. Zur Demonstration dieser Neuentwicklung wird in Abschnitt 5.3 das $k-\omega$ -SST-Turbulenzmodell genutzt.

5.2 Konzept zur Lösung des Mehrfeldproblems

Ausgehend von den Umsetzungen der magnetodynamischen und hydrodynamischen Modellierung aus Kapitel 4 und Abschnitt 5.1 wird im Folgenden das in dieser Arbeit neu entwickelte und technisch realisierte Konzept zur Zusammenführung beider Teilprobleme und damit die Lösung des Teilproblems der MHD beschrieben. Dabei gilt es die verschiedenen Gültigkeitsbereiche aller beteiligter DGLn des

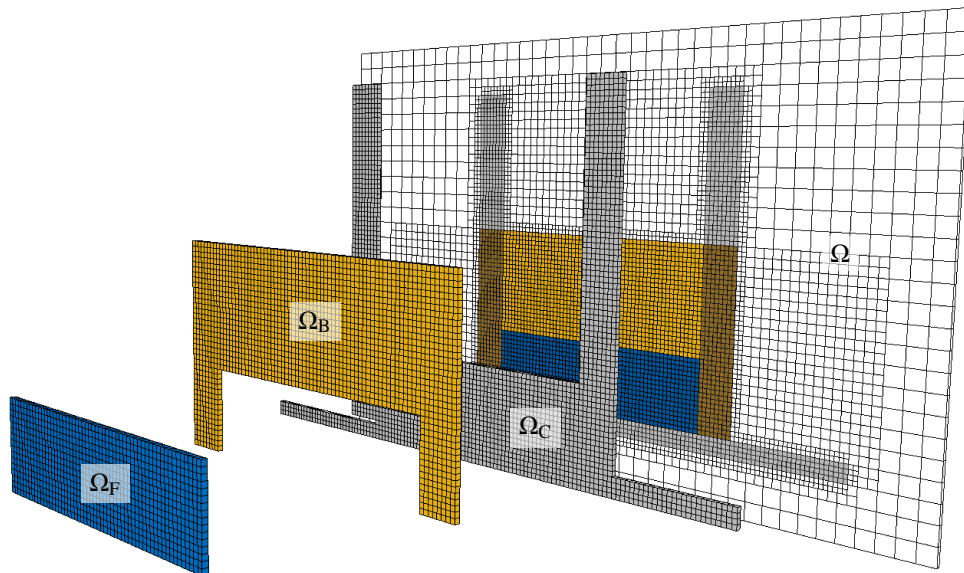


Abbildung 5.7: Eingesetzte überlagerte Gitter für das Schnittmodell nach Abbildung 5.1: Dargestellt sind das Hauptgitter Ω und die Teilgitter der Konduktorregion Ω_C , der Pufferregion Ω_B und der Fluidregion Ω_F .

Mehrfeldprobleme zu erfassen und diese auch geschickt untereinander zu verknüpfen. Im Hinblick darauf, Simulationszeiten umfangreicher Berechnungen zu verkürzen, ist weiterhin die Parallelisierung bzw. Parallelisierbarkeit des Vorgehens von großer Wichtigkeit. Insgesamt geht es in diesem Abschnitt also vorrangig um eine effiziente Verknüpfung und Verwaltung numerischer Daten und den Austausch dieser. Speziell bei der Parallelisierung ist dabei die Lokalität der Daten entscheidend, um bei der Durchführung von Simulationsrechnungen die Kommunikation minimal zu halten [Dongarra u. a. 2003].

5.2.1 Überlagerte Gitter

Zur Modellierung des RGS-Prozesses nach Abbildung 2.4 werden, neben dem Hauptgitter für $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_C$, drei Teilgitter für Ω_F , Ω_B und Ω_C eingesetzt. Jedes der insgesamt vier Gitter repräsentiert dabei das Gebiet einer oder mehrerer DGLn mit entsprechenden Randbedingungen für die zugehörigen physikalischen Felder:

- Die Fluidregion Ω_F mit Gleichung (5.1) und (5.19) für \mathbf{u} , \mathbf{v} und p ,
- die Pufferregion Ω_B mit Gleichung (5.19) für \mathbf{v} ,
- die Konduktorregion Ω_C mit Gleichung (4.29) für ϕ sowie
- die Gesamtregion Ω mit Gleichung (4.27) bzw. (4.22) für A .

Abbildung 5.7 zeigt diese Aufstellung für das zweidimensionale RGS-Modell aus Abbildung 5.1 in einer Art Explosionsdarstellung. Damit wird veranschaulicht, dass überall dort, wo sich mindestens zwei Gitter überlappen bzw. überlagert sind, mehrere physikalische Phänomene interagieren können.

Im Gegensatz zu „Overset“- oder „Chimera“-Gittern [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 2.4.4], die in *ANSYS CFX* [ANSYS 2017b] und *ANSYS Fluent* [ANSYS 2017c] nutzbar sind, werden hier nicht unterschiedliche geometrische Details aufgelöst, sondern verschiedene Gleichungen bedient. Das Besondere dabei ist, dass jedes Teilgitter als exakte Projektion im Hauptgitter erscheint und alle Gitter den selben Ursprung und das selbe Koordinatensystem haben. Diese Deckungsgleichheit bewirkt, dass numerische Daten direkt und bidirektional, also ohne Interpolation zwischen verschiedenen Gittern, transferiert werden können. Dieser Vorteil bildet das Rückgrat der gesamten Modellierung der vorliegenden Arbeit, denn dadurch wird eine Interpolation von Daten zwischen unterschiedlichen Gittern, und in diesem Zusammenhang vor allem aufwändige Suchalgorithmen, obsolet.

Obwohl der prinzipielle Einsatz mehrerer Gitter in dieser Art an sich keine vollständige Neuerung ist, man findet die Umsetzung dieses Ansatzes z. B. schon in Beale u. a. [2015, Abschnitt 3.1], so wurde die Grundidee bisher noch nicht zur Lösung von Problemstellungen der MHD genutzt. Des Weiteren ist die Idee hier in alternativer Form umgesetzt und hinsichtlich der Funktionalität weiter entwickelt. Letzteres betrifft eine verallgemeinerte bzw. direkte Zuordnung der Teilgitter untereinander, die zusätzliche Zuordnung von Gitterpunkten und Grenzflächen, erweiterte Methoden im Umgang mit innerhalb des Hauptgitters liegenden Rändern, die Synchronisation von Gitterbewegungen und schließlich die Vorgehensweise zur Parallelisierung.

Es lohnt sich an dieser Stelle wiederholt darauf hinzuweisen, dass die Ergänzung des MHD-Mehrfeldproblems um weitere Teilprobleme im Kontext der überlagerten Gitter problemlos möglich ist. So könnten beispielsweise thermodynamische Phänomene zur Modellierung hinzugefügt werden, indem in Ω_C eine Transportgleichung für das Feld der Temperatur T (oder einer anderen thermodynamischen Zustandsgröße) mit geeigneten Randbedingungen gelöst wird. Dazu ließe sich die zeitlich gemittelte Joule-Wärme $\langle \dot{q} \rangle_t$ gemäß Gleichung (4.55) direkt als Quellterm nutzen, während die Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} aus Ω_F nach Ω_C übertragen würde. Bildet man die Temperatur wiederum auf alle anderen Teilgitter ab, ließe sich die Temperaturabhängigkeit der Stoffparameter, wie σ , ρ , η und so weiter (usw.) sehr einfach realisieren.

Grundsätzlich könnte, sofern einzelne DGLn des Mehrfeldproblems eine höhere räumliche Auflösung erforderlich machen, bei Bedarf auch die jeweils zugehörigen Teilgitter verfeinert werden, ohne dabei das vorteilhafte Prinzip der überlagerten Gitter zu verlieren. Sofern die ursprünglich eindeutige Zuordnung zu anderen Gittern bestehen bleibt, lassen sich die Daten nach Verfeinerung dann in einer Richtung gewichtet und in der anderen über Kopien abbilden.

5.2.2 Lösungsalgorithmus

Der Ablauf zur Lösung des magnetohydrodynamischen Gesamtproblems erfolgt iterativ, wobei der hydrodynamische Teil die Zeitintegration bestimmt. Die einzelnen Iterationsschritte für eine instationäre Simulation sind in Abbildung 5.8 dargestellt. In der Regel genügt es hierbei, wie bei ähnlichen Fällen mit schwach zur Strömung gekoppeltem Massen- oder Energietransport [Ferziger u. Perić 2002, 12.2], die elektromagnetischen Felder nur einmal pro Zeitschritt zu aktualisieren. Da eine kleine geometrische Änderung des Konduktors nur eine geringe Rückwirkung verursacht, ist es sogar gerechtfertigt die Aktualisierung für mehrere Zeitschritte auszusetzen [vgl. Spitans 2015; Vencels u. a. 2017]. Das

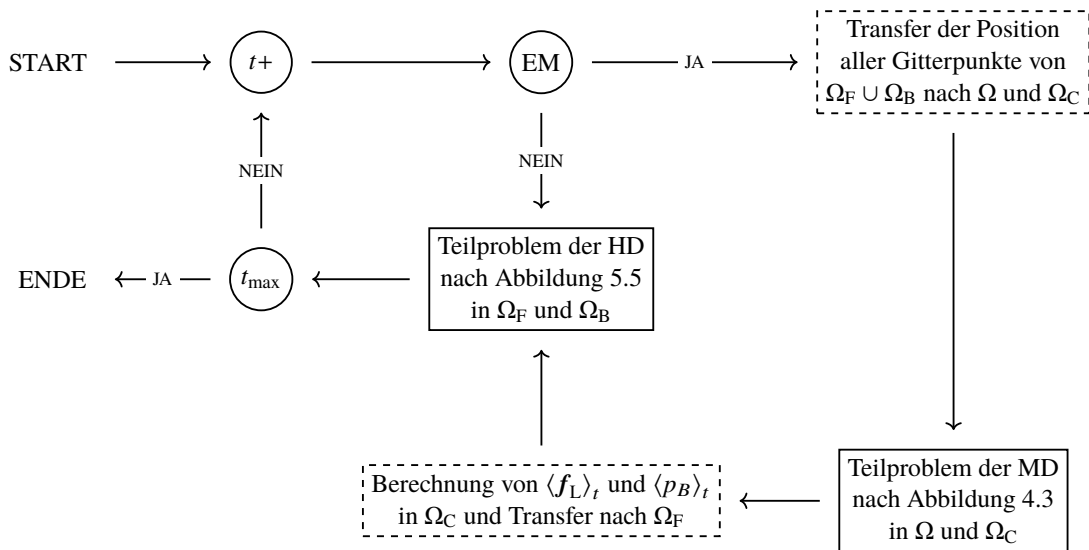


Abbildung 5.8: Ablaufplan zur iterativen Lösung des magnetohydrodynamischen Gesamtproblems mit den Teilproblemen der MD aus Kapitel 4 und der HD aus Abschnitt 5.1.1: Die Kurzform „ $t+$ “ bezeichnet den Übergang zum nächsten Zeitschritt, das Kürzel „EM“ steht für eine elektromagnetische Fehlerabschätzung und „ t_{\max} “ beschreibt den Test über das Erreichen des Simulationsendes.

dadurch in Summe betroffene Zeitintervall sollte jedoch hinreichend klein sein. Im Gegensatz zur ICT bietet die ITT mit dynamisch bewegtem Gitter dabei insofern einen Vorteil, als dort mit \mathbf{v} zum einen ein direktes Maß für die geometrische Veränderung der freien Oberfläche Γ_F greifbar ist und sich damit zum anderen alle numerischen Daten automatisch einer aktualisierten Konduktorgeometrie anpassen. D. h. selbst Felder wie die Lorentz-Kraft, so sie in Lagrangescher Betrachtungsweise unverändert bleiben, werden aus Eulerscher Sicht – also von einem festen Bezugssystem aus gesehen – kontinuierlich räumlich mitbewegt. Somit ist bei der ITT methodisch sichergestellt, dass diskrete Daten stets in ihrem anfänglich zugeordnetem Gebiet, wie etwa der Fluidregion Ω_F , verbleiben. Bei der ICT sind die Kontrollvolumen hingegen prinzipiell ortsfest und die Position von Γ_F wird über einen skalaren Phasenanteil erfasst [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 12.5]. Dort kann es also passieren, dass Daten, die über mehrere Zeitschritte unverändert bleiben, durch die Bewegung der freien Oberfläche hinterher mit einem anderen Gebiet assoziiert sind. Um bei der ICT unphysikalische Strömungen zu verhindern, ist demnach eine Entscheidung über die Neuberechnung der elektromagnetischen Felder an die Änderung des Phasenanteils gebunden [siehe z. B. Vencels u. a. 2017, Gleichung (4)]. Gegebenenfalls sind sogar weitere technische Tricks zur Reduktion von Rechenaufwand erforderlich [vgl. Spitans u. a. 2013, Abschnitt III.C; Spitans u. a. 2014, Abschnitt 2.2]. Dagegen ist mit der ITT im Extremfall sogar eine einmalige Berechnung der elektromagnetischen Felder möglich.

Mit der Geometrie des Konduktors wird das magnetodynamische Teilproblem mit der Induktor-Stromdichte \mathbf{j}_0 zu einem gegebenen Zeitpunkt über die in Abbildung 4.3 gezeigten Schritte im Frequenzbereich gelöst. Eigene empirische Untersuchungen haben hier offenbart, dass sich bei der zyklischen Korrektur der komplexen Amplituden von \mathbf{A} und ϕ gemäß Gleichung (4.58) in Ω und (4.60) in Ω_C ein optimales Konvergenzverhalten einstellt, wenn jeweils relative Zielresiduen im Bereich von etwa 0,05 bis 0,2 zur Lösung der Gleichungen genutzt werden [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 5.4.2]. Darüber hinaus hat sich bei allen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen gezeigt, dass eine Unterrelaxation der beteiligten Gleichungen unnötig ist, sofern keine Magnetisierungsef-

fekte auftreten. In Abschnitt 4.4.2 und Abschnitt 4.5 wurde diesbezüglich schon darauf hingewiesen, dass Diskontinuitäten in der magnetischen Permeabilität μ eine explizite Kopplung der kartesischen Komponenten des magnetischen Vektorpotentials bewirken. Bei größeren Sprüngen in μ kann eine stärker ausgeprägte Kopplung ggf. durch Unterrelaxation ausgeglichen werden [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 5.4.3]. Die Anzahl der insgesamt bis zur Konvergenz erforderlichen Iterationsschritte ist stark problemabhängig.

Sobald die Berechnung von Real- und Imaginärteil der komplexen Amplituden A und ϕ abgeschlossen ist, lassen sich sekundäre Effekte, wie die gemittelte Lorentz-Kraft $\langle f_L \rangle_t$ aus Gleichung (4.53), der magnetische Druck $\langle p_B \rangle_t$ nach Gleichung (4.54) und ggf. auch die thermische Leistungsdichte $\langle \dot{q} \rangle_t$ gemäß Gleichung (4.55), in Ω_C berechnen. Die Daten der diskreten Felder werden dann im Anschluss, je nach dem zu welchen Regionen Kopplungen bestehen, in die zugehörigen Teilgitter transferiert. Konkret bei der Kombination aus MD und HD wird nur die gemittelte Lorentz-Kraft und der magnetische Druck von Ω_C nach Ω_F übertragen. Die Randwerte in der Fluidregion werden, falls sie nicht direkt einer äußeren Fläche in Ω_C zugeordnet sind, entweder durch vorherige Interpolation in Ω_C bestimmt, oder im Nachgang in Ω_F mit der KQM auf die Randflächen extrapoliert. Beide Möglichkeiten sind zweiter Ordnung genau und damit als qualitativ gleichwertig zu betrachten.

Nachdem die benötigten Felder $\langle f_L \rangle_t$ und $\langle p_B \rangle_t$ von der Konduktor- in die Fluidregion übertragen wurden, folgt die Lösung des hydrodynamischen Teilproblems in Ω_F zusammen mit der dynamischen Gitterbewegung in $\Omega_F \cup \Omega_B$ über die in Abbildung 5.5 gezeigten Schritte. Typischerweise sind dabei bis zur Konvergenz etwa 2 bis 5 äußere Iterationen notwendig, bis Gleichung (5.33) hinreichend gut erfüllt ist. Erfahrungsgemäß haben bis dahin auch meistens die Residuen von Kontinuitäts- und Impulserhaltungsgleichung akzeptable Werte erreicht. Auf Grund der äußeren Iterationen können die inneren PISO-Iterationen auf ein Minimum reduziert werden (z. B. ≈ 3), sodass sie gerade die Aufgabe der nicht-orthogonalen Korrektor übernehmen. Ein Prädiktor-Schritt für die Geschwindigkeit hat sich darin als vollständig unnötig herausgestellt. Weiterhin genügt es, die Glättung der Gitterpunkte in Ω_B – entgegen der Darstellung in Abbildung 5.5 – nur Durchzuführen, wenn eine Neuberechnung der elektromagnetischen Felder notwendig wird.

Diesbezüglich symbolisiert das Kürzel „EM“ in Abbildung 5.8 die Durchführung einer elektromagnetischen Fehlerabschätzung während der Simulation. Die Entscheidung darüber, ob die Felddaten der MD noch ausreichend aktuell sind, lässt sich am besten anhand einer Kombination mehrerer Kriterien fällen. Dazu eignet sich einerseits eine qualitative Schätzung, wie die Beurteilung anhand verstrichener Zeit bzw. der Anzahl Zeitschritte seit der letzten Aktualisierung. Durch die ITT sind aber andererseits auch quantitative Berechnungen im diskreten Sinne möglich. Zum Beispiel lässt sich die relative Änderung der Lorentz-Kraft $|\delta f_L| / |f_L|$ infolge einer kleinen räumlichen Verschiebung $|\delta \mathbf{x}|$ durch eine Dimensionsanalyse von Gleichung (4.53) im Schwerpunkt einer Zelle P abschätzen:

$$|f_L| \sim \frac{|A|^2}{\mu L^3} \Rightarrow \frac{|\delta f_L|_P}{|f_L|_P} \approx \frac{|A|_P^2}{\mu_P |f_L|_P} |\delta \mathbf{x}|_P^{-3} . \quad (5.42)$$

Auf die selbe Art und Weise findet man mit Gleichung (4.55) auch einen Ausdruck für die relative Änderung $|\delta\dot{q}|/|\dot{q}|$ der thermische Leistungsdichte:

$$|\dot{q}| \sim \frac{\lambda |A|^2}{\mu L^4} \Rightarrow \frac{|\delta\dot{q}|_P}{|\dot{q}|_P} \approx \frac{\lambda_P |A|_P^2}{\mu_P |\dot{q}|_P} |\delta\mathbf{x}|_P^{-4}. \quad (5.43)$$

Dabei bezeichnet $\lambda = 1/\mu\sigma$ die bekannte magnetische Diffusivität aus Gleichung (4.14). Dann – und nur dann – wenn anhand der zuvor genannter Kriterien die Notwendigkeit einer Aktualisierung des magnetodynamischen Teilproblems diagnostiziert wird, müssen vor der eigentlichen Neuberechnung von \mathbf{A} und ϕ die Positionen aller Gitterpunkte von $\Omega_F \cup \Omega_B$ mit Ω und Ω_C synchronisiert werden. Auch dabei wird, analog zu zellinternen Felddaten, durch die speziell überlagerten Gitter ein direkter Transfer der Daten ermöglicht.

5.2.3 Parallelisierung

In Abschnitt 5.1.6 wurde bereits dargelegt, dass auf Seite der Strömungsmechanik ein möglichst hoch aufgelöstes Gitter für Ω_F wünschenswert ist. Dieses Begehren gilt sowohl für die RAS als auch erst recht im Hinblick auf die Realisierung einer LES. Vor dem Hintergrund eines noch viel größeren Mehrfeldproblems sollte damit klar sein, dass so schnell eine enorme Menge an Kontrollvolumina zusammen kommt. Für Simulationen mit einer solch umfangreichen Anzahl von Zellen ist es jedoch von essentieller Bedeutung in der Lage zu sein, das gegebene Problem unter Zuhilfenahme der Rechenleistung mehrerer Prozessoren (Central Processing Units, CPUs) zu parallelisieren [Ferziger u. Perić 2002, Abschnitt 11.5]. Bei der numerischen Simulation mit einem modernen Code wie *OpenFOAM* oder *foam-extend*, wird das gesamte Lösungsgebiet einer zu lösenden DGL schon im Vorhinein in entsprechend viele Partitionen zerlegt. Über diesen Ansatz lässt sich der serielle Anteil des Lösungsalgorithmus auf ein Minimum reduzieren. Jeder CPU wird beim Start der Rechnung dann genau eines dieser Teilgebiete zugewiesen. Da zur Lösung jeder DGLn numerische Differentialoperatoren (Differenzensterne) zum Einsatz kommen, die wiederum auf der räumlichen Nachbarschaft diskreter Werte basieren, ist an Schnittflächen, welche bei der Partitionierung des Gesamtgebietes entstehen, eine Kommunikation mit Nachbarprozessoren unvermeidbar.

Damit diese Art der Parallelisierung insgesamt effizient funktioniert, sind zwei wesentliche Punkte zu bedenken [siehe z. B. Dongarra u. a. 2003, Kapitel 4]:

- Zum einen muss die Rechenlast der gesamten Simulation möglichst gleichmäßig auf alle beteiligten CPUs verteilt oder ggf. gewichtet an die individuelle Rechenleistung einzelner CPUs angepasst werden,
- und zum anderen ist die Minimierung des totalen Kommunikationsvolumens erstrebenswert.

Liegt eine homogene Verteilung der Rechenleistung vor, dann ist es für die gleichmäßige Lastverteilung eines Rechengebietes in der Regel ausreichend jedem Prozessor circa (ca.) die gleiche Anzahl Kontrollvolumina zuzuweisen. Die nötige Kommunikation zur Lösung einer DGL skaliert in *OpenFOAM* im besten Fall etwa linear zur Anzahl ursprünglich interner Zellflächen, die nach der Gebietsaufteilung an zwei verschiedene Prozessorbereiche angrenzen. Deren Menge gilt es demnach minimal zu halten.

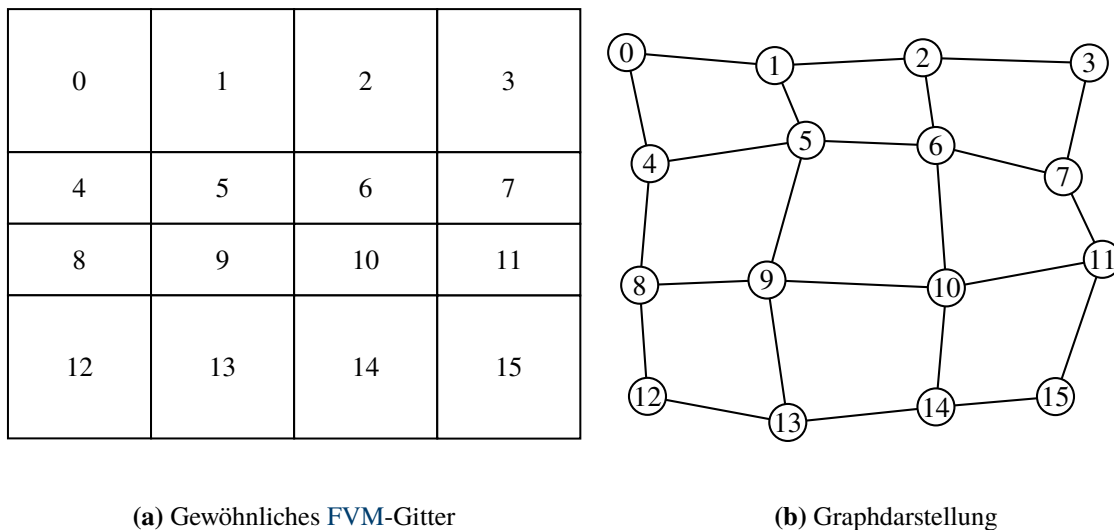
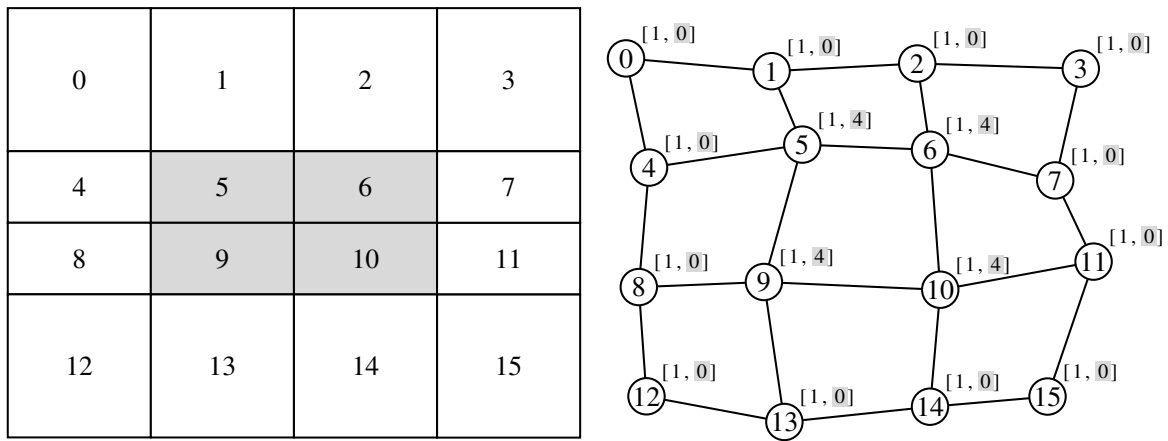


Abbildung 5.9: Prinzip der Auffassung eines FVM-Gitters als Graph: Jeder Knoten des Graphen in (b) repräsentiert eine Zelle des FVM-Gitters in (a). Jede Kante des Graphen repräsentiert eine gemeinsame Fläche zweier benachbarter Zellen des FVM-Gitters. Die Nummern stehen für eindeutige Zellindizes.

Für einfache Geometrien, wie Quader, Zylinder usw., ist diese Aufgabe meist trivial. Gerade mit einer oftmals noch zusätzlich vorhandenen Gitterstruktur können beispielsweise Symmetrien ausgenutzt werden, sodass die Partitionierung in vielen dieser Fälle manuell umsetzbar ist. Doch schon bei der Verwendung unstrukturierter Gitter wird die Situation etwas komplizierter. Für beliebig komplexe polyedrische Gitter eines nicht einfach zusammenhängenden Gebiets steht man mitunter schon einer gewaltigen Herausforderung entgegen.

Im Bereich der Mathematik und Informatik ist solch eine Aufgabe als Graphpartitionierung bekannt [Bichot u. Siarry 2013]. Inwieweit das FVM-Gitter etwas mit einem Graph – einer abstrakten Struktur aus über Kanten verbundenen Knoten – zu tun hat, wird aus Abbildung 5.9 ersichtlich. In der Graphdarstellung des FVM-Gitters entsprechen die Knoten schlicht den Kontrollvolumen und die Kanten repräsentieren eine gemeinsame Fläche zweier benachbarter Zellen. Die räumliche Position der Knoten spielt dabei keine Rolle. Der Graph ist damit in erster Linie eine simplifizierte Abbildung der Konnektivität des Gitters. Jede Kante symbolisiert darin einen notwendigen Informationsfluss der diskreten Differentialoperatoren. Beispielsweise wären zur Berechnung von Ableitungen in Zelle 9 mit Gleichung (3.74) zusätzlich die Daten aus den Zellen 5, 8, 10 und 13 erforderlich. Zu diagonalen Nachbarn ist bei einem FVM-Gitter (im Vergleich zur FEM) kein Informationsaustausch nötig.

Das Ziel einer Gitterpartitionierung mit minimalem Kommunikationsvolumen entspricht also im übertragenen Sinne einem Optimierungsproblem mit der Zielfunktion, den Graphen so in einzelne Teilbereiche zu zerlegen, dass dabei die Anzahl geschnittener Kanten minimiert wird [siehe Don-garra u. a. 2003, Kapitel 18]. Eine gleichmäßige Lastverteilung, bzw. eine homogene Anzahl von Knoten pro Partition, erreicht man bei der Optimierung über eine Nebenbedingung. Dafür lässt sich jedem Knoten des Graphen im einfachsten Falle ein identisches Gewicht zuordnen, welches den Rechenaufwand einer Zelle bei der Lösung einer DGL mit der FVM widerspiegelt. Für diese und ähnliche Optimierungsaufgaben gibt es nur heuristische Verfahren [Naumann u. Schenk 2012; Bichot



(a) Hauptgitter mit projiziertem Teilgitter

(b) Graphdarstellung mit vektoriellen Gewichten

Abbildung 5.10: Prinzip zur Auffassung überlappender FVM-Gitter als vektoriell gewichteter Graph am Beispiel von Ω (alle Zellen) und Ω_C (Zellen 5, 6, 9, 10): Die Gitter aller Teilgebiete werden auf das Hauptgitter projiziert und in Form vektorieller Gewichte im Graphen des Hauptgitters berücksichtigt. Jedes Teilgitter ist dabei mit einem dedizierten Vektoreintrag verknüpft.

u. Siarry 2013]. Daher werden sowohl Zielfunktion als auch die Nebenbedingung in der Regel nur näherungsweise erfüllt [vgl. Dongarra u. a. 2003, Kapitel 18, Abbildung 18.18 und Abschnitt 18.6]. Die wohl bekanntesten Implementierungen entsprechender Algorithmen in frei verfügbaren Software-Bibliotheken sind *SCOTCH* [Pellegrini 2012b; Pellegrini u. Roman 1996; Pellegrini 2012a], *METIS* [Karypis 2013a; Karypis u. Kumar 1998] und *KaHIP* [Sanders u. Schulz 2017, 2013]. Sowohl in *OpenFOAM* als auch in *foam-extend* lassen sich zur Partitionierung standardmäßig Schnittstellen für *SCOTCH* und *METIS* nutzen.

Als Basis zur Modellierung von Mehrfeldproblemen kommt mit der Gitterüberlagerung erschwerend hinzu, dass im Rahmen der Parallelisierung mehrere in Relation stehende Gitter partitioniert werden müssen. Durch die direkte Zuordnung der Gebiete untereinander tritt eine neue Kommunikationsrichtung hervor. Ein Austausch von Zelldaten geschieht hier nicht nur mit der Nachbarschaft innerhalb eines Gebietes, sondern auch mit assoziierten Kontrollvolumina anderer Regionen. Um weitere Interprozesskommunikation auszuschließen, sollten also Zellen, die in mehr als einem Gitter vorkommen, idealerweise auf all diesen Gittern ein und der selben Partition zugeordnet sein. Neben dieser Lokalität der Daten ist es für eine homogene Verteilung der Rechenlast aber auch unabdingbar, dass jedes Gebiet für sich genommen gleichmäßig aufgeteilt wird. Es sollte leicht verständlich sein, dass man mit diesem Anspruch durch unabhängige Zerlegung der einzelnen Gitter im Allgemeinen scheitert. Ein einfacher Graph wie in Abbildung 5.9b reicht für diese Anforderung nicht aus. Selbst mit einer Erweiterung um zusätzliche Knoten und Kommunikationswege ließen sich damit nicht mehrere Nebenbedingung umsetzen [siehe Dongarra u. a. 2003, Kapitel 18.5].

In dieser Hinsicht weist *METIS*, als einzige frei verfügbare Software mit speziellen Algorithmen zur Graphpartitionierung mit vektoriellen Knotengewichten, ein Alleinstellungsmerkmal auf [Karypis u. Kumar 1998; Karypis 2003]. Wie man mit *METIS* die gewünschte Partitionierung der überlagerten

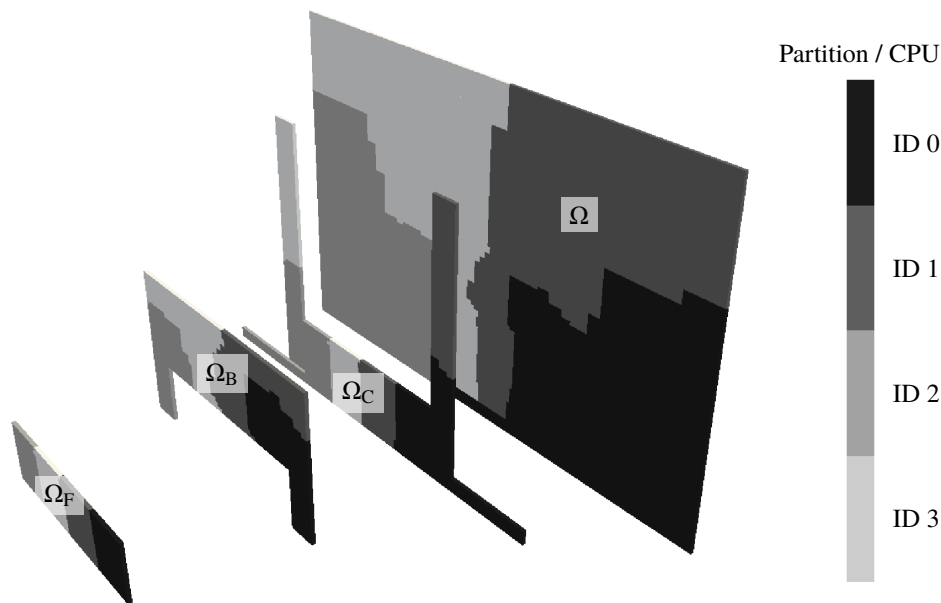


Abbildung 5.11: Beispiel zur Partitionierung der überlagerten Gitter für das Schnittmodell nach Abbildung 5.1: Dargestellt sind das Hauptgitter Ω und die Teilgitter der Konduktorregion Ω_C , der Pufferregion Ω_B und der Fluidregion Ω_F . Jede ID ist mit einer CPU assoziiert.

Gitter erreicht, ist in Abbildung 5.10 anhand eines stark vereinfachten Beispiels mit Ω und Ω_C illustriert [vgl. Abbildung 4.1]. Ausgehend vom Graphen des Hauptgitters aus Abbildung 5.9b wird jedem Knoten dazu ein Vektor als Gewicht zugeordnet. Die Dimension dieser Vektoren richtet sich nach der Anzahl beteiligter Teilgitter, wobei der erste Vektoreintrag immer mit dem Hauptgitter verknüpft ist [siehe Karypis 2013b, Abbildung 2(d)]. *METIS* interpretiert bei der Partitionierung dann jede vorhandene Komponente als separate Nebenbedingung. Dadurch ist eine gleichmäßige Zerlegung aller Gitter prinzipiell möglich, indem für die Teilgitter diejenigen Knotengewichte auf Null gesetzt werden, wo zugehörige Knoten nicht mit einer Zelle assoziiert sind. Es hat sich gezeigt, dass es dabei von Vorteil ist, wenn die Summe der Gewichte für alle Gitter in etwa übereinstimmt.

Zur Nutzung der vektoriellen Knotengewichte von *METIS* mit *foam-extend* musste für diese Arbeit die Schnittstelle zwischen beiden Bibliotheken nahezu vollständig neu implementiert werden. Das Resultat ist am Beispiel des zweidimensionalen RGS-Modells nach Abbildung 5.1 in Abbildung 5.11 dargestellt. Im Grunde wird in der praktischen Umsetzung nur das Hauptgitter direkt mit *METIS* partitioniert. Die Zerlegung der Teilgitter erfolgt dagegen indirekt auf Basis der zugehörigen IDs der Partitionen im Hauptgitter. Die Methode zur Partitionierung eignet sich sowohl für zweidimensionale als auch dreidimensionale Gitter.

5.3 Anlaufverhalten des RGS-Prozesses

Die Modellierung in dieser Arbeit wurde in erster Linie durch den Wunsch motiviert, das RGS-Verfahren näher untersuchen zu können. In dem Bestreben, den Fortschritt in dieser Richtung zu belegen, werden im Folgenden grundlegende Simulationsergebnisse für ein zweidimensionales Schnittmodell

nach Abbildung 2.5a und das dreidimensionale Modell aus Abbildung 2.4 gezeigt. Dabei werden wieder die typischen Parameter des RGS-Prozesses, d. h. eine Substratgeschwindigkeit von $u_S = 0,1 \text{ m s}^{-1}$, ein harmonischer Induktorstrom mit einer Amplitude von $\hat{I}_0 = 1000 \sqrt{2} \text{ A} \approx 1414 \text{ A}$ und eine Anregungsfrequenz von $f_0 = 10 \text{ kHz}$, zugrunde gelegt. Ein Großteil der mit Tabelle 2.1 übereinstimmenden Materialdaten wurde auch bereits in Abschnitt 4.6 und Abschnitt 5.1.6 genutzt, wobei speziell die Verteilung der elektrischen Leitfähigkeit innerhalb des Konduktors in Abbildung 4.29b veranschaulicht ist. Für die Dichte und Viskosität des flüssigen Siliziums bei Schmelztemperatur werden Werte von $\rho = 2580 \text{ kg m}^{-3}$ und $\eta = 0,86 \text{ Pa s}$ genutzt, als Oberflächenspannung am Übergang von Silizium zur umgebenden Atmosphäre ein konstanter Wert von $\zeta = 0,733 \text{ N m}^{-1}$.

Die Annahmen, die für vektorielle Felder bei der zweidimensionalen Betrachtung getroffen werden, unterscheiden sich in Bezug auf die Teilprobleme der MD und HD. Für den elektromagnetischen Teil weist, wie in Abschnitt 4.1.5 beschrieben, das magnetische Vektorpotential \mathbf{A} und die elektrische Stromdichte \mathbf{j} nur kartesische Komponenten senkrecht zur Schnittebene auf. Dagegen liegen alle Komponenten der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} , der Lorentz-Kraft \mathbf{f}_L sowie der Gitter- \mathbf{v} und Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} vollständig in der Ebene. Für die MD stimmen diese Bedingungen in der Symmetrieebene, auf welche sich das RGS-Schnittmodell bezieht, durch die horizontale Anordnung und laterale Ausdehnung der Induktionsspule in sehr guter Näherung mit dem dreidimensionalen Fall überein [vgl. Abbildung 4.30]. Auf der Seite der Strömungsmechanik ist mit dem Wegfall der dritten Dimension jedoch ein größerer Unterschied zwischen beiden Modellansätzen zu erwarten. Auf Grund des verringerten Rechenaufwandes ist das Schnittmodell für Vergleichszwecke aber durchaus zweckdienlich, denn es sind zumindest ähnliche Größenordnungen beteiligter Felder zu erwarten.

5.3.1 Zweidimensionales Modell

Eine Prinzipdarstellung des zweidimensionalen Gitters wurde bereits in Abbildung 5.7 bei sehr geringer Auflösung mit gerade einmal $n \approx 8 \cdot 10^3$ Zellen angeführt, wobei dort in der Fluidregion mit nur $n_F \approx 9 \cdot 10^2$ Kontrollvolumina eine mittlere Gitterweite von $\Delta x \approx 1,25 \text{ mm}$ erreicht wird. Für ein gleichmäßig stark verfeinertes Gitter, mit $n \approx 4 \cdot 10^4$, $n_F \approx 2 \cdot 10^4$ sowie $\Delta x \approx 0,3 \text{ mm}$, ist in Abbildung 5.12 das Anlaufverhalten (links: Lorentz-Kraft, rechts: Geschwindigkeit) der Siliziumschmelze als Resultat einer URANS-Simulation mit k - ω -SST-Turbulenzmodell [Menter 1994] gezeigt [vgl. Beckstein u. a. 2015b]. Beide Spalten beinhalten Konturplots mit dem Betrag der jeweils zugeordneten Größe, die um betragsmäßig skalierte Richtungsvektoren ergänzt sind.

Zum Startzeitpunkt der Simulation bei $t = 0 \text{ s}$ wird eine ruhende, horizontal verlaufende Oberfläche angenommen. In diesem initialen Zustand offenbart ein direkter Vergleich mit Abbildung 4.30b deutlich, dass sowohl die Verteilung als auch die maximale Amplitude der zeitlich gemittelten Lorentz-Kraftdichte $|\langle \mathbf{f}_L \rangle_t| / \rho$ tatsächlich sehr gut mit Daten aus der Symmetrieebene des dreidimensionalen Modells übereinstimmen. Durch die hohe Kraftwirkung wird die Fluidregion unmittelbar nach Aktivierung des äußeren Magnetfeldes im Bereich der Seitenwände erheblich deformiert. Im weiteren Verlauf entstehen durch die induzierte Strömungsgeschwindigkeit mit Betrag $|\mathbf{u}|$ dann zunächst zwei größere und zwei kleinere Wirbel, die kurzzeitig in lediglich zwei dominante Strukturen übergehen. Obwohl die Strömung, wie in Abbildung 5.12 auf der rechten Seite erkennbar ist, anfangs noch nahezu

symmetrisch erscheint, führt der Einfluss von Substratbewegung und Geometrie zu einer asymmetrischen Evolution. Dadurch wächst mit fortschreitender Simulationszeit einer der großen Wirbel langsam ins Zentrum. Die Übergänge zwischen den Wirbelpaaren auf beiden Seiten fallen außerdem näherungsweise mit einem Vorzeichenwechsel der Rotation der Lorentz-Kraft zusammen.

Für das feine Gitter treten beim letzten dargestellten Zeitpunkt mit $t = 5$ s nur noch leichte Oberflächenschwankungen auf, die bis ca. ≈ 10 s vollständig abklingen und letztlich ein stationärer Zustand eintritt. Auf dem gröberen Gitter beeinflusst das Substrat die Strömung durch den größeren Wandabstand in der ersten Gitterzelle weniger, sodass sich die Asymmetrie dort tendenziell verringert. Erstaunlicherweise kann dabei sogar eine Instabilität einsetzen, die durch abwechselnde Intensivierung der beiden mittleren Wirbel in Verbindung mit einem synchronen Schwanken der Oberfläche entsteht. Dabei folgt beiden Wirbeln eine stetig wachsende Geschwindigkeitsüberhöhung auf einem Pfad in Form einer liegenden Acht. Das so hervorgerufene schwappende Verhalten lässt sich aber auch forcieren, indem die Substratbewegung schlicht vernachlässigt wird. Bei einer zweidimensionalen Simulation mit *COMSOL Multiphysics* [COMSOL 2016] ließ sich dieses Phänomen mit ähnlich grober Gitterauflösung identisch nachstellen [siehe Beckstein u. a. 2015a, Abbildung 6]. Abgesehen davon stimmen auch die Struktur der Strömung und die Verteilung der Lorentz-Kraft jeweils sehr gut mit den Ergebnissen aus der *COMSOL Multiphysics*-Rechnung überein.

Grundsätzlich werden im Gesamtverlauf zwischenzeitlich Strömungsgeschwindigkeiten oberhalb von $|\mathbf{u}| \approx 0,5 \text{ m s}^{-1}$ erreicht, was deutlich oberhalb der Substratgeschwindigkeit von $u_S = 0,1 \text{ m s}^{-1}$ liegt und wobei stellenweise vor allem sehr hohe Tangentialgeschwindigkeiten entlang der freien Oberfläche auftreten. Diese können ihrerseits wiederum den lokalen Krümmungsradius stark verringern, wenn sich die Strömung beginnt von der Oberfläche abzulösen. Dadurch kommt es gerade in der Anfangsphase zu sehr schnell ablaufenden Kontraktionen. Insgesamt geht aus Abbildung 5.12 auch nochmals hervor, dass bei den typischen Parametern des RGS-Verfahrens die elektromagnetisch getriebene Strömung gegenüber der Substratbewegung deutlich dominiert.

Aus numerischer Sicht ist für solche Strömungen eine adaptive Anpassung der Zeitschrittweite, die sich bei gegebener Gitterweite Δx und maximaler Strömungsgeschwindigkeit nach Gleichung (5.39) und (5.40) aus Gleichung (5.41) bestimmen lässt, unverzichtbar. Während der Simulationen ergab sich, dass stabile Rechnungen bis zu einer CFL-Zahl [siehe auch Gleichung (3.52)] von $C \approx 0,3$ bis $0,4$ möglich sind, wobei die zweite Begrenzung, welche sich aus der Auflösung von Kapillarwellen ergibt, dagegen voll ausgereizt werden kann: $C_\zeta \approx 1,0$. Pro Stunde Rechenzeit wird damit, bei einer Aktualisierung der Lorentz-Kraft in jedem einzelnen Zeitschritt, eine Simulationszeit von $\approx 0,4$ s mit nur einer CPU (*Intel i5-3570*) erreicht. Für die gegebene Konfiguration können zur Neuberechnung der elektromagnetischen Felder aber auch Intervalle von bis zu $\approx 0,01$ s Simulationszeit ausgelassen werden, ohne das dynamische Verhalten merklich zu beeinflussen.

Zur Simulation auf Basis des zweidimensionalen Modells können weiterhin – genau wie im dreidimensionalen Fall – sowohl Biot-Savart Induktoren als auch eine FVM-Diskretisierung der Quellstromdichte im Induktor gewählt werden. Beides liefert je nach Auflösung nahezu identische Ergebnisse. Die gezeigte Rechnung basiert zudem fast ausschließlich auf Diskretisierungsschemata zweiter Ordnung, d. h. zum Einsatz kommt vorwiegend die lineare Interpolation gemäß Gleichung (3.32) und das

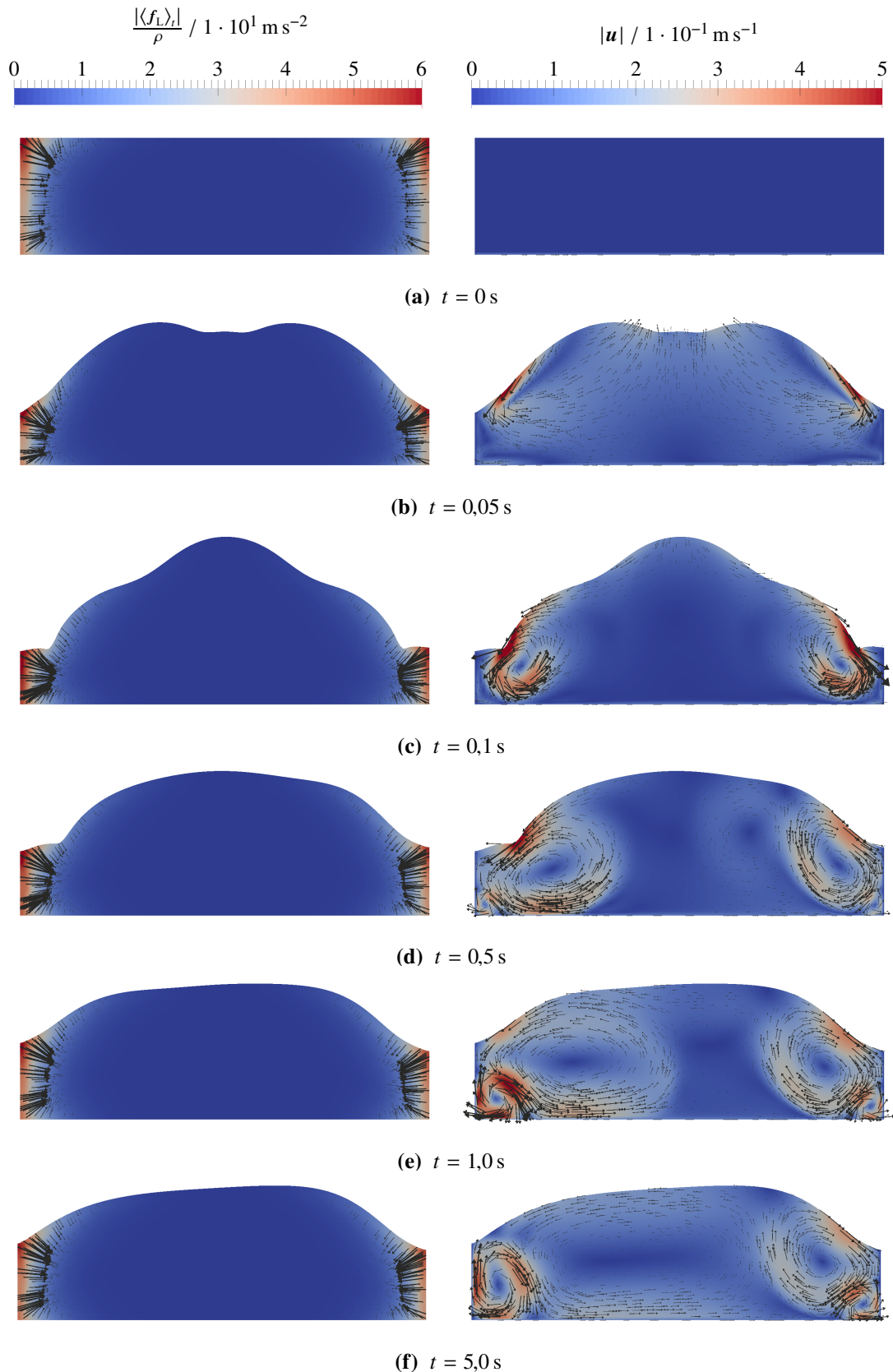


Abbildung 5.12: Anlaufverhalten der Siliziumschmelze beim RGS-Verfahren auf Grundlage einer URANS-Simulation des zweidimensionalen Schnittmodells nach Abbildung 2.5a: Gezeigt ist die Dynamik der freien Oberfläche und die Entwicklung der Strömung im Inneren der Fluidregion Ω_F nach Aktivierung des externen Magnetfeldes bei $t = 0 \text{ s}$ [Beckstein u. a. 2015b].

Rückwärts-Differenzen (Backward Differencing Formulas, BDF)-Verfahren zweiter Ordnung nach Gleichung (3.57) zur Zeitintegration. Eine Ausnahme bildet lediglich das Interpolationsverfahren zur Berechnung des Massenstromes im Fluss F_f gemäß Gleichung (3.36) bei der Diskretisierung des Konvektionsterms der Impulserhaltungsgleichung (5.7). Dort ist aus Stabilitätsgründen z. B. das Gamma-Verfahren [Jasak u. a. 1999] oder ein anderes nicht-dispersives Verfahren besser geeignet.

5.3.2 Dreidimensionales Modell

Ein Gitter, welches sich zur Untersuchung des Anlaufverhaltens anhand des dreidimensionalen RGS-Modells eignet, wurde in Abschnitt 4.6 schon für eine elektromagnetische Rechnung eingesetzt und ist in Abbildung 4.29a illustriert. Mit insgesamt $n \approx 1,5 \cdot 10^6$ Kontrollvolumina und $n_F \approx 1,2 \cdot 10^5$ Zellen in Ω_F ergibt sich für dieses relativ grobe Gitter eine mittlere Gitterweite von $\Delta x \approx 1,0$ mm. Für die selben Zeitpunkte wie aus Abbildung 5.12 und mit identischen geometrischen Anfangsbedingungen bei $t = 0$ s zeigt Abbildung 5.13 die Entwicklung von Strömung und Oberflächendynamik als Ergebnis einer dreidimensionalen URANS-Simulation mit k - ω -SST-Turbulenzmodell [Menter 1994]. Die Darstellung beinhaltet von links nach rechts drei Spalten [vgl. Beckstein u. a. 2017a]: eine dreidimensionale Ansicht mit Einblick in den geschnittenen Gießrahmen, eine vertikale Schnittansicht in der Symmetrieebene, die mit dem zweidimensionalen Modell koinzidiert und schließlich eine horizontale Schnittansicht, die bei $t = 0$ s auf halber Höhe durch die Fluidregion verläuft. Die linke Spalte enthält geteilte Konturplots der Fluidregion mit den Beträgen der Strömungsgeschwindigkeit $|\mathbf{u}|$ (vorne) und der zeitlich gemittelten Lorentz-Kraftdichte $|\langle \mathbf{f}_L \rangle_t| / \rho$ (hinten). Die anderen beiden Spalten zeigen, analog zu Abbildung 5.12, Konturplots für $|\mathbf{u}|$, die zusätzlich betragsmäßig skalierte Richtungsvektoren enthalten.

Unmittelbar nach Aktivierung des Induktorstromes, tritt zu Beginn der Simulation nahe den Wänden des Gießrahmens, mit dem Einsetzen der Wirkung der Lorentz-Kraft [siehe Abbildung 4.30b], eine ähnliche Verdrängung der Fluidregion auf, wie schon zuvor beim zweidimensionalen Modell. Eine Gegenüberstellung mit Abbildung 5.12 offenbart dabei bis $t \approx 0,1$ s noch eine relativ gute Übereinstimmung der Strömung in der Symmetrieebene. Die Stärke lokaler Verformungen scheint hier jedoch, wie beispielsweise zum Zeitpunkt $t = 0,1$ s in Abbildung 5.12 und (5.13) ersichtlich, etwas weniger ausgeprägt zu sein. Die Ursache dafür liegt zum einen in der geringeren Gitterauflösung, was infolge einer verstärkten Turbulenzmodellierung lokal geringere Strömungsgeschwindigkeiten und damit global kleinere Geschwindigkeitsgradienten $\nabla \mathbf{u}$ bedingt, aber vor allem auch an der zusätzlichen Dimension hinsichtlich der (doppelten) mittleren Krümmung $\kappa = -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n}_F$. Dadurch verringert sich in der Druckbilanz nach Gleichung (5.13b) tendenziell der Einfluss von hydrodynamischem und krümmungsbedingtem Druck, sodass im Gegenzug hydrostatischer und magnetischer Druck an Bedeutung gewinnen.

Auf der anderen Seite lässt sich mit dem dreidimensionalen Modell ein dynamischer Effekt reproduzieren, der bei zweidimensionaler Modellierung so nicht auftreten kann. Dieser Mechanismus zeigt sich in Form schneller Höhenfluktuationen der freien Oberfläche und tritt vornehmlich im Bereich der Kontaktlinie mit der Gießrahmenwand auf, wo Stromdichte und Lorentz-Kraft besonders groß sind. Diese zitternden Schwankungen lassen sich dadurch erklären, dass in dieser Region die einzelnen

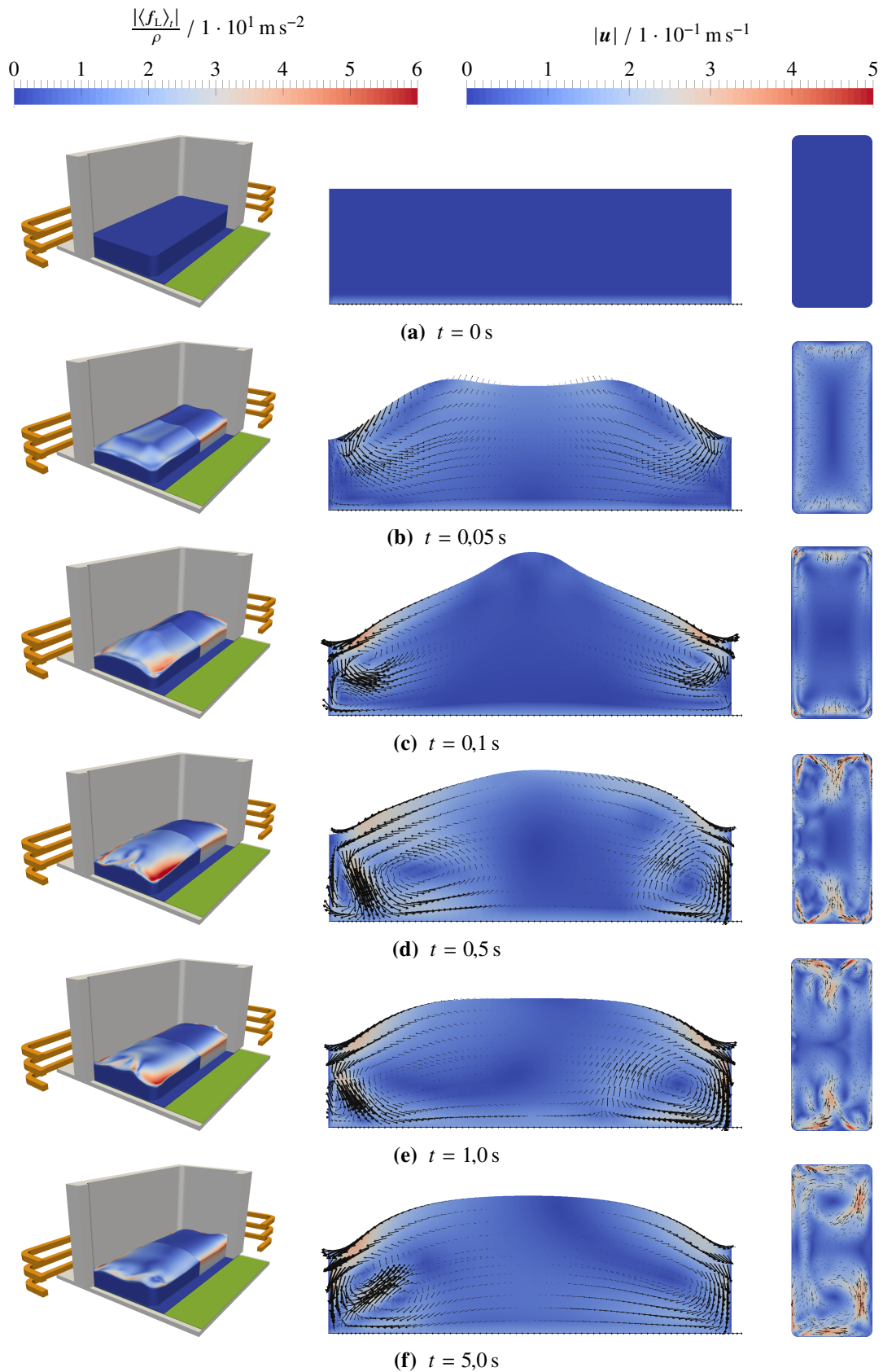


Abbildung 5.13: Anlaufverhalten der Siliziumschmelze beim RGS-Verfahren auf Grundlage einer URANS-Simulation des zweidimensionalen Schnittmodells nach Abbildung 2.5a: Gezeigt ist die Dynamik der freien Oberfläche und die Entwicklung der Strömung im Inneren der Fluidregion Ω_F nach Aktivierung des externen Magnetfeldes bei $t = 0$ s [Beckstein u. a. 2017a].

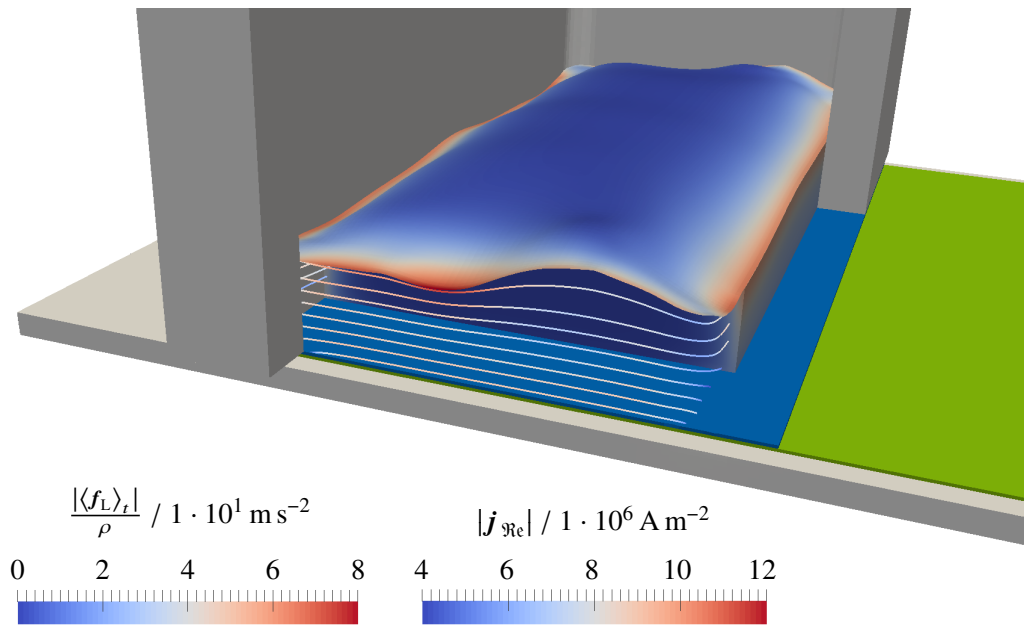


Abbildung 5.14: Überhöhung der elektromagnetischen Kraftwirkung durch eine in Wandnähe auftretende tangentielle Geschwindigkeit entlang der freien Oberfläche: Dargestellt sind neben der Lorentz-Kraftdichte $|\langle f_L \rangle_t| / \rho$ (Konturplot) auch ausgewählte Stromlinien des Realteils der komplexen Amplitude der elektrischen Leitfähigkeit $|j_{re}|$.

Druckanteile in Gleichung (5.13b) sehr sensitiv auf Höhenänderungen des Fluides reagieren. Falls es dort zu einer höheren Tangentialgeschwindigkeit kommt, sinkt – analog zum zweidimensionalen Fall – die freie Oberfläche zunächst lokal ab. Durch das Absinken wird allerdings der effektive Querschnitt der elektrischen Stromdichte reduziert, deren Stromlinien parallel zu Wand und tangentialer Strömung verlaufen. Mit der reduzierten Höhe steigt also die elektrische Stromdichte und damit auch die Lorentz-Kraft bzw. der magnetische Druck an. Dieses Prinzip ist in Abbildung 5.14 für den Momentanzustand der Simulation zum Zeitpunkt $t = 1,8$ s in einer Schnittansicht veranschaulicht. Im dortigen Beispiel ist zu erkennen, dass es schon durch eine kleine Einwölbung zu einer beachtlichen Änderung der elektrischen Stromdichte kommen kann. Der Oberflächenkontur nach korreliert dies am Beispiel mit einer Überhöhung der Lorentz-Kraftdichte $|\langle f_L \rangle_t| / \rho$ von ca. 60 m s^{-2} auf $\approx 80 \text{ m s}^{-2}$, obwohl sich die Oberfläche an der nach unten gewölbten Stelle tendenziell vom Zentrum der Induktionsspule (nicht abgebildet) wegbewegt. Andererseits führt die höhere Krümmung und eine stärkere Absenkung auch zu einem entsprechend wachsenden Gegendruck. Auf Grund der Verstärkungswirkung des elektromagnetischen Feldes verlaufen mögliche Wechsel im Druckgleichgewicht durch Fluktuationen in der Geschwindigkeit jedoch überproportional schnell.

Aus einer Analyse der horizontalen Strömung ist in Abbildung 5.13 (rechte Spalte) erkennbar, dass sich aus zunächst parallel zur Wand verlaufenden, röhrenförmigen Wirbeln bei $t \approx 0,05$ s vier größere Eckwirbel herausbilden, die bis $t \approx 1,5$ s beständig sind. Im Anschluss findet eine Transition statt, wobei sich die beiden gegenüberliegenden Wirbelpaare jeweils zu einer großen Drallströmung vereinigen, wie in der Darstellung bei $t \approx 5,0$ s deutlich zu sehen ist. Hinterher verläuft die mittlere Strömung, welche im Wandbereich an der freien Oberfläche tangential in Prozessrichtung gerich-

tet ist, beidseitig spiralförmig abwärts und führt im Zentrum um die Symmetrieebene zu einer der Substratbewegung entgegengerichteten Strömung. Diese charakteristische Struktur scheint sich quasistationär zu verhalten und besteht auch bei längeren Simulationszeiten fort. Insgesamt werden auch beim dreidimensionalen Modell Strömungsgeschwindigkeiten von bis zu $|\mathbf{u}| \approx 0,5 \text{ m s}^{-1}$ erreicht, was für den Hauptbereich der Strömung [siehe Abbildung 2.3, II] größenordnungsmäßig mit Testrechnungen ohne bewegliche Oberfläche korreliert. Die Struktur der Strömung unterscheidet sich aber unter Berücksichtigung der Oberflächenbewegung vollständig [vgl. Beckstein u. a. 2015a, Abbildung 3]. Beispielsweise entstehen bei Vernachlässigung der Bewegung der freien Oberfläche selbst mit reibungsfreier Modellierung nicht die beiden horizontalen Wirbelstrukturen, welche in Abbildung 5.13f (rechte Spalte) besonders deutlich zu erkennen sind. Da beim RGS-Verfahren aber festgestellt wurde, dass sich die Dicke des extrahierten Bandes im Zentrum gegenüber den Randbereichen unterscheidet, werden die hier erzielten Simulationsergebnisse bestätigt.

Für die dreidimensionale Simulation auf dem Gitter nach Abbildung 4.29a wird durch die effiziente Herangehensweise in einer Stunde Rechenzeit eine Simulationszeit von $\approx 0,05 \text{ s}$ mit nur einer CPU (*Intel i5-3570*) erreicht, was einer Simulationszeit von $\approx 10,0 \text{ s}$ pro Woche entspricht. Dabei lassen sich zur Neuberechnung der elektromagnetischen Felder, genau wie beim zweidimensionalen RGS-Modell, wieder Intervalle von bis zu $\approx 0,01 \text{ s}$ Simulationszeit auslassen, ohne das dynamische Verhalten merklich zu beeinflussen. Eine quantitative Bewertung der erreichbaren Performanz mit ähnlichen Modellen anderer Autoren gestaltet sich sehr schwierig, da diesbezüglich kaum Angaben zu finden sind. Zur qualitativen Einschätzung ist aber z. B. in Spitans u. a. [2014, Abschnitt 4.3] für ein ähnliche Problemstellung die Rede von Rechenzeiten in der Größenordnung von drei Monaten für $10,0 \text{ s}$ Simulationszeit unter Nutzung von vier CPUs. Dies entspräche einem Faktor von ≈ 24 in der Rechengeschwindigkeit, sofern man davon ausgeht, dass die Größen der Gitter vergleichbar sind. Obwohl beide Fälle zwar ähnliche Größenordnungen aufweisen, besteht auf Grund der fehlenden Informationen eine gewisse Restunsicherheit bei der Beurteilung.

Im Hinblick auf die Möglichkeit zur Durchführung einer LES ist in *foam-extend* mit der in dieser Arbeit neu entwickelten Schnittstelle zur Gitterpartitionierung mit *METIS* eine Nutzung feinerer Gitter durch eine parallele Ausführung der Lösungsalgorithmen möglich. Tatsächlich wird in *foam-extend* dabei durch die in Abschnitt 5.2.3 beschriebene Partitionierung der überlagerten Gitter keinerlei Änderung an der technischen Umsetzung der Parallelisierung im Zusammenhang mit *MPI* [Argonne National Laboratory 2015] bzw. *Open MPI* [Software in the Public Interest 2017] vorgenommen. Die einzige Ausnahme stellt in dieser Hinsicht die neu implementierte Matrix-Regularisierung aus Abschnitt 4.3.3 dar, welche aber lediglich den Austausch einer reellwertigen Zahl pro Partition und Iteration erfordert. Durch die spezielle Aufteilung der überlagerten Gitter wird jedoch gerade ausgeschlossen, dass es infolge der Überlagerung zu weiterer Kommunikation kommt. Weiterhin arbeiten die zuvor gezeigten Lösungsalgorithmen bezüglich der überlagerten Gitter vollständig iterativ, d. h. es werden niemals auf mehreren Teilgebieten gleichzeitig DGLn gelöst, womit das maximale Kommunikationsvolumen einzig durch die Größe des Hauptgitters bestimmt wird. Daher verursacht in *foam-extend* die Nutzung der überlagerten Gitter im Parallelbetrieb keinerlei Änderung des Verhaltens gegenüber dem klassischen Fall eines einzelnen Gitters. Aus diesem Grund wurde auch die parallele Beschleunigung bzw. die parallele Effizienz in dieser Arbeit nur qualitativ untersucht – hauptsächlich um die Implementierung

auf Fehler zu überprüfen. Im Falle des zweidimensionalen **RGS**-Modells wurde dazu die Rechengeschwindigkeit mit bis zu 4 **CPUs** und beim dreidimensionalen Modell mit bis zu 16 **CPUs** ausgewertet (Intel Xeon E5-2698, Intel Xeon E5-2667). In beiden Fällen konnte ein nahezu lineares Verhalten der parallelen Beschleunigung bezüglich der genutzten **CPUs** beobachtet werden.

Erste Testrechnungen einer **LES** wurden für das dreidimensionale **RGS**-Modell bereits durchgeführt. Eine rigorose Ausführung mit anschließender Auswertung würde den Rahmen dieser Arbeit jedoch bei Weitem übersteigen. Für weiterführende Untersuchungen sind aber aus praktischer Sicht mit den neuen Diskretisierungsschemata für diskontinuierliche Materialeigenschaften, welche in Abschnitt 4.4 vorgestellt wurden, sehr einfache Konfigurationsänderungen an Geometrie und Gitter möglich, da sich die Konduktorregion numerisch als ein einzelnes Gebiet beschreiben lässt. Insofern stellt das in dieser Arbeit neu entwickelte Modellierungskonzept ein effizientes Werkzeug für diesen Zweck dar. Die Tatsache, dass sich die unter Berücksichtigung der Oberflächenbewegung ermittelte Strömung einer **URANS**-Rechnung signifikant von Resultaten unterscheidet, die man unter Vernachlässigung dieser Bewegung erzielt, hebt den wertvollen Beitrag, der durch diese Entwicklung bereits geleistet wurde, nochmals besonders hervor.

6 Zusammenfassung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war es, einen umfassenden Methodenapparat zur Berechnung von beliebigen dreidimensionalen Strömungen mit freier Oberfläche unter dem Einfluss harmonisch oszillierender Magnetfelder mit einer einheitlichen numerischen Methode zu entwickeln. Bisher existieren zur Modellierung solcher Problemstellungen nur kombinierte Ansätze auf Grundlage der **FVM** und **FEM**. In den meisten Fällen kommen dabei kommerzielle Programme zum Einsatz, die für Magnetfeld und Strömung jeweils unterschiedliche numerische Techniken nutzen. Durch eine einheitliche Modellierung in *OpenFOAM* bzw. *foam-extend* lässt sich demgegenüber jedoch unnötiger Rechenaufwand durch Suchalgorithmen bei der Interpolation numerischer Daten und durch regelmäßig wiederholte Gittererzeugung vermeiden. Eine Implementierung in einer frei verfügbaren Bibliothek hat zudem den Vorteil, dass sich die bereits bestehende Funktionalität, wie z. B. die Turbulenzmodellierung in *OpenFOAM*, leicht nutzen und ggf. adaptieren lässt. Darüber hinaus sind neue Lösungsmethoden künftig Anderen zugänglich. In dieser Hinsicht wurde stets ein enger Kontakt zu den Hauptentwicklern von *foam-extend* gepflegt. Im Zusammenhang mit dieser Arbeit sind daraus sowohl Beiträge zum Quellcode von *foam-extend* als auch eine gemeinsame Veröffentlichung [Beckstein u. a. 2017d] entstanden.

6.1 Errungenschaften

Als Referenz und typisches Beispiel eines Induktionsprozesses der metallurgischen **MHD** wurde in der vorliegenden Arbeit ein vereinfachtes Modell des **RGS**-Prozesses abgeleitet [Kapitel 2]. Dabei hat sich gezeigt, dass die großskalige Wechselwirkung von leitfähiger Schmelze und Magnetfeld hauptsächlich von der freien Oberfläche beeinflusst wird. Anhand des **RGS**-Modells wurden dann die drei Teilprobleme der **MD**, **HD** und **MHD** für die Modellentwicklung in dieser Arbeit formuliert. Die Lösung dieser Teilprobleme wird im Folgenden detailliert zusammengefasst.

6.1.1 Magnetodynamik (MD)

Da bisher noch keinerlei Arbeiten oder Ansätze zur Simulation zeitharmonischer Induktionsvorgänge in *OpenFOAM* bzw. *foam-extend* existierten, ist im ersten Teil dieser Arbeit in Kapitel 4 – durch die Lösung des Teilproblems der **MD** – zunächst die Grundlage für die spätere Kombination mit der **HD** geschaffen worden. Im Zuge einer erweiterten Untersuchung der zugrundeliegenden Physik wurde im Einklang mit den Möglichkeiten und Limitierungen der **FVM** auf unstrukturierten Gittern eine passende mathematische Beschreibung der elektromagnetischen Effekte gesucht. Dabei hat sich herausgestellt, dass eine Formulierung der Maxwellschen Gleichungen in Potentialform besonders gut

geeignet ist [Abschnitt 4.1]. Die Grundgleichungen auf Basis des divergenzfreien magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A} und des elektrischen Skalarpotentials ϕ weisen große Ähnlichkeit mit den Erhaltungsgleichungen der Strömungs- und linearelastischen Festkörpermechanik auf. Ähnlich wie beim Druck und der Massenbilanz inkompressibler Strömungen wirkt der Gradient des elektrischen Potentials als eine Art Nebenbedingung zur Erfüllung der Ladungserhaltung. Im Gegensatz zur Strömungsmechanik lässt sich die Quellfreiheit des magnetischen Vektorpotentials jedoch direkt in die Grundgleichungen einarbeiten und durch die konservative Eigenschaft der **FVM** erhalten.

Die größte Herausforderung bei der Entwicklung eines geeigneten Lösungsverfahrens ergab sich aus der Unbeschränktheit des Gültigkeitsgebietes der Maxwell-Gleichungen. Zusätzlich wurde die Umsetzung dadurch erschwert, dass zur Lösung im Frequenzraum eine geeignete Handhabung komplexwertiger Algebra gefunden werden musste [Abschnitt 4.2]. Nach einer genaueren Analyse der Kopplungsmechanismen zwischen den Potentialen wurde schließlich ein effizienter semi-gekoppelter Lösungsalgorithmus für *foam-extend* abgeleitet, der auf überlagerten Gittern basiert und selbst für höhere Anregungsfrequenzen numerisch stabil ist [Abschnitt 4.3]. Dabei werden die unterschiedlichen Gültigkeitsgebiete der Potentiale \mathbf{A} und ϕ , welche sich aus der Unterscheidung leitfähiger und nicht-fähiger Regionen ergeben, jeweils monolithisch über ein Haupt- und Teilgitter diskretisiert, während die gegenseitige Abhängigkeit der zugehörigen **DGLn** iterativ adressiert wird. Durch eine identische Topologie überlappender Gitterbereiche ist gleichzeitig ein direkter Austausch von Daten ohne Interpolation sichergestellt. Die starke Kopplung des Real- und Imaginärteils der komplexen Amplitude von \mathbf{A} ließ sich in *foam-extend* mit Hilfe von Blockmatrizen über tensorwertige Matrixkoeffizienten berücksichtigen, sodass dort die direkte Lösung komplexwertiger Gleichungssysteme vermieden werden konnte. Die Verfügbarkeit der Blockmatrizen war auch der Hauptgrund dafür, dass in dieser Arbeit *foam-extend* gegenüber *OpenFOAM* bevorzugt wurde. Um die Konvergenz der iterativen Herangehensweise im Zusammenhang mit der Extrapolation numerischer Daten auf einzelnen Teilgittern insgesamt zu verbessern wurde zusätzlich eine alternative Technik zur Regularisierung von Neumann-Problemen entwickelt und in *foam-extend* implementiert, welche auf der Umkehrung der Hotelling-Deflation beruht. Auf Grundlage des Lösungskonzeptes für zeitharmonische Probleme der **MD** ist zur Vereinfachung von größeren Simulationen und komplizierten Geometrien außerdem die Idee aufgegriffen worden, das totale magnetische Vektorpotential in einen von der Induktionsspule aufgeprägten und den verbleibenden (reduzierten) Anteil zu trennen. Diese Erweiterung ermöglicht neben dem direkten Weg über die **FVM** auch den Einsatz des Gesetzes von Biot-Savart zur Modellierung von Induktoren durch Liniensegmente, die vom **FVM**-Gitter vollständig unabhängig sind. Indem der aufgeprägte Potentialanteil ausschließlich im Inneren des Konduktors, und mittelbar über Dirichlet-Randwerte bestimmt wird, lässt sich damit, im Vergleich zur direkten Anwendung des totalen magnetischen Vektorpotentials, der Rechenaufwand einer Simulation stark reduzieren. Eine entsprechende Implementierung von Biot-Savart-Induktoren in *foam-extend* ist im Rahmen der vorliegenden Arbeit entstanden. Darüber hinaus ist die Gittergenerierung im Allgemeinen wesentlich einfacher, da Biot-Savart-Induktoren im **FVM**-Gitter nicht geometrisch erfasst werden müssen. Für die Erstellung und Handhabung der Liniengitter zur geometrischen Repräsentation der Induktionsspulen konnte bereits bestehende Funktionalität von *foam-extend* genutzt und erweitert werden.

Eine weitere Schwierigkeit bei der numerischen Berechnung der elektromagnetischen Felder bestand im Umgang mit sprunghaften Änderungen der elektrischen Leitfähigkeit σ oder der magnetischen Permeabilität μ innerhalb des Konduktors. Streng genommen sind die Potentiale A und ϕ an solchen Grenzflächen nicht stetig differenzierbar. Diese Unstetigkeit ließe sich im diskreten Sinne zwar prinzipiell ignorieren, doch damit gingen im Übergangsbereich große numerische Fehler einher. Eine Möglichkeit bestünde darin, Regionen kontinuierlicher Stoffeigenschaften über eigene Teilgitter darzustellen, doch damit würde im Allgemeinen nicht nur das Aufsetzen einer Simulation massiv erschwert, sondern das Vorgehen wäre auch äußerst unflexibel. Gerade im Hinblick auf technische Anwendungen, wo das Konduktorgebiet üblicherweise aus einer Vielzahl verschiedener Materialien bestehen kann, sind stattdessen spezielle Schemata zur Diskretisierung entwickelt worden, die in der Lage sind, diskontinuierliche Materialübergänge in diskreter Form korrekt abzubilden [Abschnitt 4.4]. Dazu wurden, analog zur **GFM** für Strömungen mit freier Oberfläche, die physikalischen Sprungbedingungen direkt in die Diskretisierung eingebettet. Für die elektromagnetischen Potentiale ergeben sich aus der Änderung von μ und σ an einer Grenzfläche jeweils unterschiedliche Sprünge der Normallengradienten. Interessanterweise zeigte sich bei näherer Betrachtung, dass beide Sprungbedingungen in eine generalisierte Darstellung überführt werden können. Die verallgemeinerte Form eignet sich darüber hinaus sogar für Vorgänge mit ähnlichen Übergangsbedingungen, wie z. B. der Wärmeleitung. Zur Herleitung und Integration dieser speziellen Schemata war durch notwendige Änderungen der Diskretisierung auf Matrixebene ein sehr tiefgreifendes Verständnis der **FVM** in *foam-extend* erforderlich [siehe Kapitel 3]. Für Probleme der **MD**, bei welchen die Magnetisierung innerhalb der leitfähigen Region eine Rolle spielt, war zur Modellierung mit aufgeteiltem magnetischen Vektorpotential ein weiterer Schritt erforderlich, da die Anwendung des Biot-Savart-Gesetzes eine homogene Verteilung der Permeabilität voraussetzt. Legt man dem aufgeprägten Feldanteil wieder die Vakuumpermeabilität zugrunde, lässt sich die inhomogene Verteilung aber durch die Einführung eines effektiven Magnetisierungsstromes berücksichtigen. Für die Berechnung der entsprechenden Stromdichte ist die neu entwickelte Diskretisierungsmethode unmittelbar anwendbar. Es hat sich bei der praktischen Umsetzung jedoch gezeigt, dass mit der aktuellen Konzeption der eingebetteten Diskretisierung, auf Grund der expliziten Kopplung der Komponenten des Phasors von A , nicht beliebig große Sprünge in der magnetischen Permeabilität umgesetzt werden können. Große Diskontinuitäten in der elektrischen Leitfähigkeit sind hingegen unproblematisch.

Die gesamte Implementierung der Methoden zur Simulation von Induktionsprozessen mit der **FVM** wurde in *foam-extend* anhand zahlreicher Testfälle validiert und analysiert [Abschnitt 4.5]. Der Validierungsprozess umfasst sowohl Vergleiche von Simulationsergebnissen mit der kommerziellen **FEM**-Software *Cobham Opera 2D* [Cobham 2016b] und *Cobham Opera 3D* [Cobham 2016a] als auch Gegenüberstellungen mit analytisch ermittelten Daten. Die ausgewählten Testszenarios reichen dabei von prozesstechnisch relevanten Feldkonfigurationen, wie dem rotierenden Magnetfeld und dem wandernden Magnetfeld, bis hin zu eher akademischen Fällen zur selektiven Überprüfung der eingebetteten Diskretisierung an Grenzflächen verschiedener Materialien. Der geprüfte Frequenzbereich erstreckt sich von 50 Hz bis 10 000 Hz. Über die numerischen Tests konnte unter Berücksichtigung der Gitterqualität das für die **FVM** charakteristische Fehlerverhalten zweiter Ordnung reproduziert werden. Zudem wurde der Fehlereinfluss der Größe der nicht-leitfähigen Region auf die numerische Lösung untersucht, welche einen Teil des numerischen Modells repräsentiert. Auf diese Weise ließ

sich für die Auslegung des scheinbar willkürlich trunkierten Gebietes um den Konduktor sogar eine praktisch nutzbare Faustregel ableiten. Bei direktem Vergleich mit der **FEM** aus *Cobham Opera 3D* und *Cobham Opera 2D* ergaben sich für die gerechneten Testfälle, abgesehen von der Limitierung auf begrenzte Sprünge der magnetischen Permeabilität, keinerlei Nachteile. In Bezug auf die Performance zeigten sich dagegen tendenziell Vorteile, da qualitativ gleichwertige Ergebnisse in kürzerer Rechenzeit erreicht wurden.

Als Abschluss des ersten Teils dieser Arbeit wurde die validierte Simulationsplattform für zeitharmonische Induktionsvorgänge in *foam-extend* dann zur Berechnung von Magnetfeld und Lorentz-Kraft beim **RGS**-Verfahren genutzt, wobei die erzielten Resultate mit *Cobham Opera 3D* bestätigt werden konnten. Insgesamt hat sich dabei gezeigt, dass die realisierte Herangehensweise zur Modellierung der **MD** mit der **FVM** hervorragend geeignet ist.

6.1.2 Hydrodynamik (HD)

Der zweite Teil der vorliegenden Arbeit in Kapitel 5 ist der **HD** und dem Mehrfeldproblem der **MHD** gewidmet. Im Zuge der Annahmen und Vereinfachungen zur Modellbildung wurde dort dargelegt, dass das zeitliche Verhalten dieses Mehrfeldproblems maßgeblich durch die **HD** bestimmt wird, während sich die **MD** quasistatisch bezüglich einer gegebenen räumlichen Konfiguration des Konduktors verhält.

Im ersten Schritt wurde dann zunächst das Teilproblem der **HD** in Abschnitt 5.1 gelöst. Dort ist nach Einführung der Grundlagen [Abschnitt 5.1.1] mit der **ITT** die präferierte Technik zur Erfassung der Dynamik der freien Oberfläche in *foam-extend* beschrieben [Tuković u. Jasak 2012] und später im Hinblick auf die Zusammenführung mit der **MD** technisch weiterentwickelt worden. Der Grund für die Bevorzugung der **ITT** gegenüber anderen Verfahren ergibt sich in erster Linie aus dem Vorteil der Bewegung des zur Diskretisierung eingesetzten Gitters im Sinne der **ALE**-Methode, durch welche diskrete Datenpunkte stets in einem anfänglich zugeordneten Gebiet verbleiben. Zudem wird mit der **ITT** der Übergang zwischen Fluid und externer Atmosphäre numerisch scharf abgebildet und nicht regularisiert, sodass in diesem kritischen Bereich der Verlauf diskontinuierlicher Felder mit hoher Qualität erfasst wird [5.1.2].

Die dynamische Adaption des Gitters lässt sich in *foam-extend* standardmäßig entweder über eine Laplace-Glättung oder eine linearelastische Verformung bewerkstelligen. Durch eigene Parameterstudien hat sich jedoch gezeigt, dass gerade für die Modellierung des **RGS**-Prozesses eine Kombination beider Ansätze, bei gleichzeitiger lokaler Anpassung der Gittersteifigkeit, besonders günstig für die Erhaltung der Gitterqualität ist [Abschnitt 5.1.3]. Deshalb wurde *foam-extend* um entsprechende Glättungsalgorithmen erweitert.

Schließlich wurde der zur Technik der Oberflächenbeschreibung gehörende Lösungsalgorithmus aus *foam-extend* skizziert und dabei auch in Vorbereitung auf die Kopplung mit der **MD** technisch erweitert und verbessert [Abschnitt 5.1.4]. Dabei wurde im Rahmen von Testrechnungen aufgedeckt, dass der in *foam-extend* genutzte Algorithmus zur Bewegung der freien Oberfläche bei Auftreten größerer

Tangentialgeschwindigkeiten numerisch instabil ist. Durch die lineare Rekonstruktion der Gitterpunkte aus sogenannten Kontrollpunkten wird infolge eines Defizits bei der Krümmungsberechnung eine Entkopplung von Druck und Geschwindigkeit begünstigt. Zur Vermeidung ist im Rahmen dieser Arbeit eine methodische Verbesserung erarbeitet worden, die auf einem triangulierten Oberflächengitter beruht, das direkt an die Kontrollpunkte gekoppelt wird. Die ursprünglich in *foam-extend* verfügbaren Lösungsalgorithmen zur Berechnung von Strömungen mit freier Oberfläche wurden außerdem dahingehend erweitert, dass nun eine automatische adaptive Zeitschrittweite sowie Turbulenz- und Feinstrukturmodelle auf Basis des Boussinesq-Ansatzes nutzbar sind. Auf diese Weise lassen sich bei numerischen Berechnungen mit der *ITT* in *foam-extend* jetzt sowohl **RAS** als auch **LES** durchführen.

6.1.3 Magnetohydrodynamik (MHD)

Als zweiter Schritt wurde in Abschnitt 5.2 die Lösung des Teilproblems der **MHD** präsentiert. Dabei ist als Konzept zur Lösung des Mehrfeldproblems aus **MD** und **HD** wieder die Idee herangezogen worden, mehrere überlagerte Gitter in Verbindung mit einer iterativen Vorgehensweise einzusetzen. Die bereits zuvor geschaffene Funktionalität zum direkten Datenaustausch zwischen verschiedenen Teilgittern wurde dazu in *foam-extend* verallgemeinert und nochmals erweitert, um die Gitterbewegungen untereinander zu synchronisieren [Abschnitt 5.2.1]. Durch die *ITT* lässt sich damit die Neuberechnung der elektromagnetischen Felder in jedem einzelnen Zeitschritt vermeiden. Stattdessen kann über eine quantitative Fehlerabschätzung ein konkretes Kriterium für die Notwendigkeit einer Aktualisierung definiert und so der Rechenaufwand reduziert werden [Abschnitt 5.2.2]. Auf der anderen Seite hat sich das Problem bestätigt, dass die *ITT* gegenüber einer *ICT* weit weniger flexibel und nicht für extreme Verformungen der freien Oberfläche anwendbar ist.

Hinsichtlich der Durchführbarkeit größerer Simulationen bestand in dieser Arbeit weiterhin der Wunsch, von der gleichzeitigen Nutzung mehrerer **CPUs** zu profitieren. Deshalb wurde für das Konzept der überlagerten Gitter auch eine effiziente Möglichkeit zur Parallelisierung bzw. Parallelisierbarkeit gesucht. Eine Lösung in Form einer gleichmäßigen Partitionierung der Gitter, bei der die Lokalität der numerischen Daten sichergestellt ist, fand sich mit der Software *METIS*, welche Funktionen zur Graphpartitionierung mit vektoriellen Knotengewichten bereitstellt [Abschnitt 5.2.3]. Zur Realisierung musste die zugehörige Schnittstelle in *foam-extend* jedoch nahezu vollständig neu implementiert werden.

Zuletzt wurde mit einer Untersuchung des Anlaufverhaltens beim **RGS**-Prozess ein Nachweis zur Funktionalität und Lösung aller Teilprobleme erbracht und so ein erster Einblick in die dort ablaufenden Effekte der metallurgischen **MHD** vermittelt. Dabei hat sich sowohl für ein zweidimensionales als auch für ein dreidimensionales **RGS**-Modell sehr deutlich abgezeichnet, dass die Nutzung einer einheitlichen numerischen Technik in Gestalt der **FVM** für Problemstellungen der metallurgischen **MHD** mit freier Oberfläche absolut geeignet ist [Abschnitt 5.3]. Durch die überlagerten Gitter als Grundlage entsteht in *foam-extend* weder größerer Rechenaufwand zum Datenaustausch zwischen den Teilproblemen der **MD** und **HD** noch werden zukünftige Weiterentwicklungen durch nicht öffentlich zugänglichen Quellcode erschwert. Darüber hinaus ist die so entstandene Simulationsplattform für den parallelen Einsatz vorbereitet und auf Grund des allgemeinen Designs der überlagerten Gitter leicht

erweiterbar. Mit der entsprechenden Implementierung aller Modelle und Algorithmen in *foam-extend* steht somit ein mächtiges Werkzeug zur weiteren Untersuchung des RGS-Prozesses und ähnlicher Anwendungsfälle zur Verfügung.

6.2 Limitierungen und Weiterentwicklung

Durch die physikalischen Vereinfachungen im Kontext der metallurgischen MHD in Kapitel 2 sowie durch numerische Modellierung im Zuge der methodischen Entwicklungen in den Kapiteln 4 und 5 ergeben sich jeweils Limitierungen für die im Rahmen dieser Arbeit entstandene Simulationsplattform. Die wichtigsten Einschränkungen werden im Folgenden kurz zusammengefasst, wobei hier strikt zwischen Modellannahmen und methodischen Restriktionen unterschieden wird.

Einschränkungen durch Modellannahmen ergeben sich vor allem durch die Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit von Materialeigenschaften und auf der Seite der MD durch die Annahme kleiner magnetischer Reynolds-Zahlen, d. h. strömungsinduzierte elektromagnetische Felder werden vollständig vernachlässigt. Zudem bezieht sich die gesamte elektromagnetische Beschreibung auf eine einzelne Anregungsfrequenz der Induktionsspule. Diese Annahmen sind für das RGS-Verfahren und ähnliche Induktionsprozesse in sehr guter Näherung gerechtfertigt [siehe Abschnitt 2.2], müssen aber für andere Anwendungsfälle überprüft werden. Nötigenfalls wäre eine Erweiterung zur Berücksichtigung der Thermodynamik (TD) in zukünftigen Arbeiten problemlos möglich. Große magnetische Reynolds-Zahlen oder eine nicht-harmonische Anregung würde aber eine Lösung der Maxwell'schen Gleichungen im Zeitbereich erfordern, was mit dem hier vorgestellten Methodenapparat zwar prinzipiell realisierbar ist, jedoch generell erheblich mehr Rechenaufwand verursacht. Schließlich wurde auch die vereinfachte Induktormodellierung in Form einer vorgegebenen homogenen Stromverteilung bisher nur am Rande erwähnt. Falls die Stromverteilung innerhalb einer Induktionsspule von Interesse sein sollte, könnte hierzu die Konduktorregion erweitert werden [siehe Abbildung 4.1], allerdings müsste dazu die Spule entweder mit der FVM diskretisiert oder ggf. das Modellierungskonzept der Biot-Savart-Induktoren überarbeitet werden. Eine methodische Restriktion, welche bereits erwähnt wurde, ist die numerische Begrenzung von Diskontinuitäten in der magnetischen Permeabilität μ . Zur vollständigen Vermeidung dieser Limitierung wäre allerdings eine gänzlich implizite Diskretisierung der komplexen Amplituden beider Potentiale A und ϕ nötig, was sich in Bezug auf die Speichereffizienz äußerst negativ auswirken würde. Durch eine Unterrelaxation bei der iterativen Lösung der zugehörigen DGLn lässt sich diese Einschränkung aber bereits abschwächen. Ohne die implizite Diskretisierung könnte sich eine weitere Verbesserung möglicherweise auch aus einer speziell angepassten Quellterm-Linearisierung ergeben.

Was die HD angeht, so ergeben sich Limitierungen lediglich aus bekannten Problemen der numerischen Strömungsmechanik, wie z. B. der enorme Rechenaufwand einer DNS [vgl. Abschnitt 5.1.6] oder die Aufrechterhaltung der Gitterqualität im Zusammenhang mit der dynamischen Gitterbewegung bei der ITT. Für sehr große Verformungen des Gitters wird die Gitterqualität in der Regel signifikant verschlechtert. Hinzu kommt, dass sich durch die Beschreibung der freien Oberfläche als Teil einer Gitterberandung auch topologische Änderungen während der Simulation nur mit viel manuellem Aufwand erzielen lassen. Ohne eine automatische Neuvernetzung, die wiederum mit mehreren

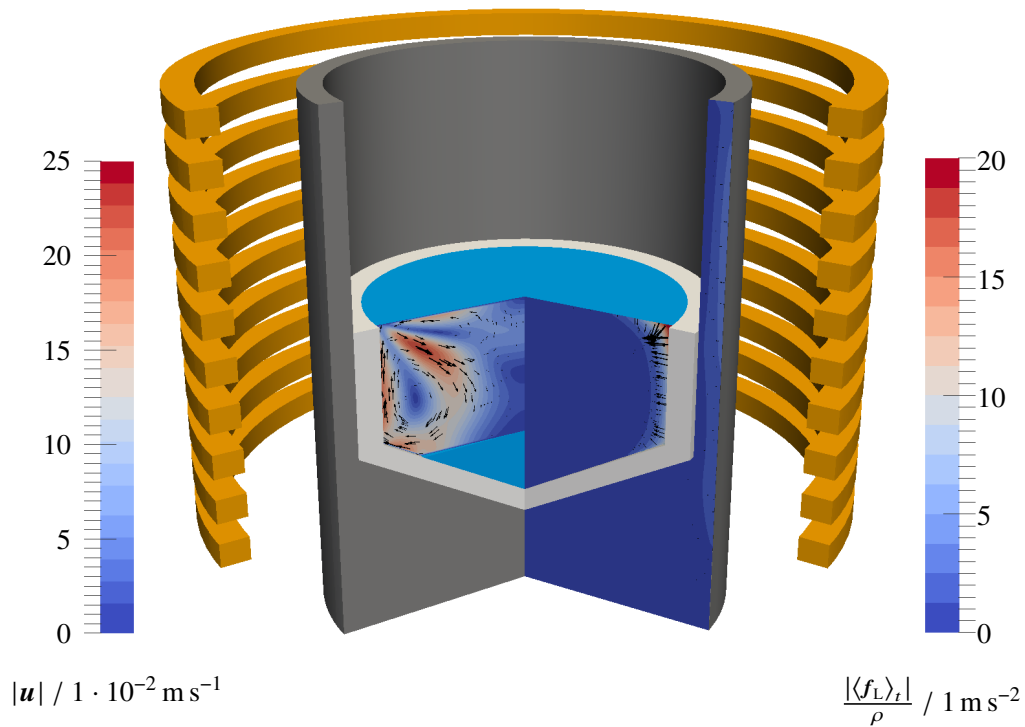
untereinander zugeordneten Gittern eine Herausforderung darstellt, ist der Grad der Verformung des Gitters demnach qualitativ limitiert. Um in Verbindung mit der *ITT* bei größeren Deformationen der freien Oberfläche die Gitterqualität zu erhalten, könnte ein in *foam-extend* verfügbares **generalisiertes Gitter-Interface (General grid interface, GGI)** eingesetzt werden, welches die Anwendung nicht konformer Grenzflächen im Inneren des Gitters ermöglicht. Ansonsten böte es sich allgemein zur Verringerung numerischer Fehler an, die in dieser Arbeit neu entwickelten Diskretisierungsschemata auf die *KQM* zu übertragen. Darüber hinaus sei angemerkt, dass bei der *ITT* die Bedingungen an der freien Oberfläche explizit über die *FAM* berechnet werden, woraus sich aus Stabilitätsgründen, gerade bei hoher Oberflächenspannung, eine entsprechende Zeitschrittbegrenzung ergibt. Zur Vermeidung restriktiver Zeitschrittweiten wäre es durchaus lohnenswert, über eine Kombination der *FAM* und *FVM* auf Matrixebene längerfristig eine vollständig implizite Diskretisierung der Grenzflächenbedingungen anzustreben.

Allgemeine bzw. technische Schwierigkeiten gab es bezüglich der Funktionalität und Auswahl freier Software zur Gittergenerierung. Nur wenige in *OpenFOAM* oder *foam-extend* mitgelieferte Programme und Hilfsmittel waren zum Zeitpunkt der Entstehung dieser Arbeit für mehrere Regionen geeignet. Dadurch mussten nicht nur einige der zuvor genutzten Gitter teilweise in mühevoller Handarbeit erstellt werden, sondern es kamen auch vorwiegend hexaedrische Zellen zum Einsatz obwohl polyedrische Kontrollvolumina tendenziell eine bessere Gitterqualität ermöglichen [siehe z. B. [Juretić 2004](#)]. In sehr wenigen Einzelfällen traten auch Probleme mit unausgeglichene Partitionen bei der Gitterpartitionierung mit *METIS* auf, die jedoch stets durch leichte Parameteränderungen umgangen werden konnten. Inwieweit dieser Umstand durch zukünftige Programmaktualisierungen von *METIS* noch verbessert wird ist nicht absehbar.

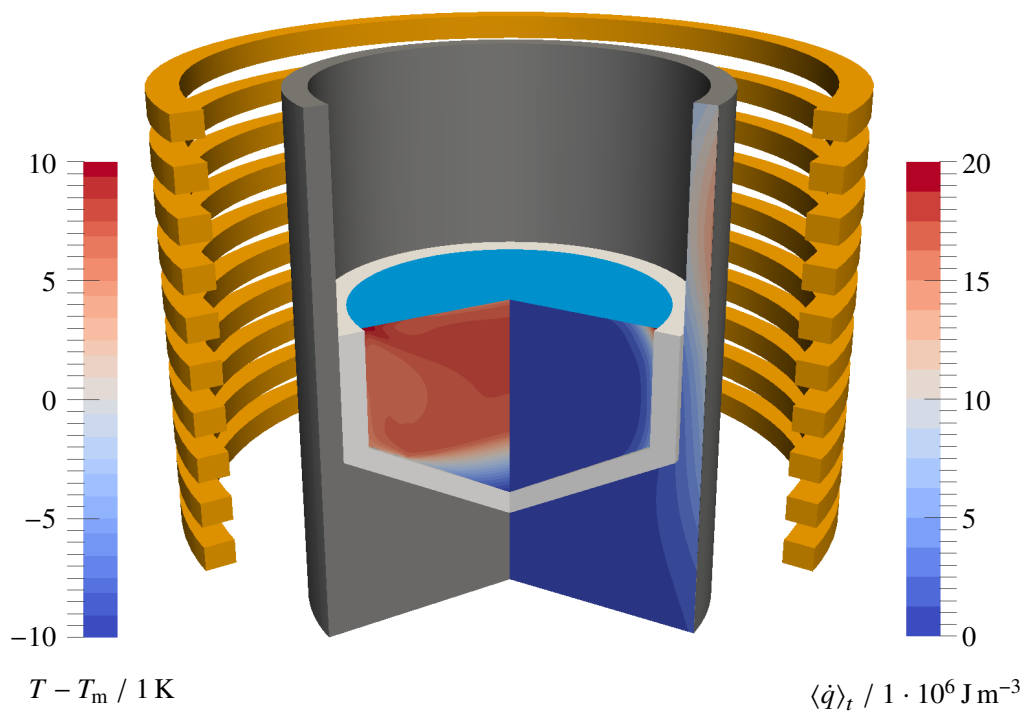
6.3 Ausblick

Mit dieser Arbeit wurde die methodische und technische Grundlage für eine effiziente Simulation von Induktionsprozessen mit freier Oberfläche geschaffen. Am Beispiel des *RGS*-Prozesses wurde bereits ein erster Einblick in die dort ablaufenden Effekte der metallurgischen *MHD* vermittelt. Für das weitere Verständnis dieser Phänomene wäre es besonders erstrebenswert, in zukünftigen Arbeiten die Strömung der Schmelze beim *RGS*-Verfahren mit Hilfe einer *LES* zu untersuchen. Zuvor sollte jedoch für alle physikalischen Modellannahmen aus Abschnitt 2.2 eine umfassende Validierung anhand experimenteller Daten aus verschiedenen Modellversuchen erfolgen. Gerade hinsichtlich der Annahme kleiner magnetischer Reynolds-Zahlen könnte man so feststellen, ob es ggf. sinnvoll ist strömungsinduzierte Felder doch zu berücksichtigen. Auf längere Sicht ließe sich auch der Einfluss thermodynamischer Effekte und die Erstarrung bei weiteren Simulationen zum *RGS*-Prozess mit einbeziehen.

Um qualitativ zu demonstrieren, dass sich das bereits beim *RGS*-Prozess eingesetzte Konzept der überlagerten Gitter tatsächlich auch für Mehrfeldprobleme aus *MD*, *HD* und *TD* auf jeweils unterschiedlichen Gültigkeitsgebieten eignet, wird in Abbildung 6.1 ein Machbarkeitsnachweis präsentiert. Die Darstellung zeigt die Ergebnisse einer axialsymmetrischen Testrechnung für eine quasistationäre Strömung bei der gerichteten Erstarrung von polykristallinem Silizium. Die Siliziumschmelze, welche



(a) Betrag der mittleren Geschwindigkeit (links) und Lorentz-Kraft (rechts)



(b) Temperatur (links) und Joule-Wärme (rechts)

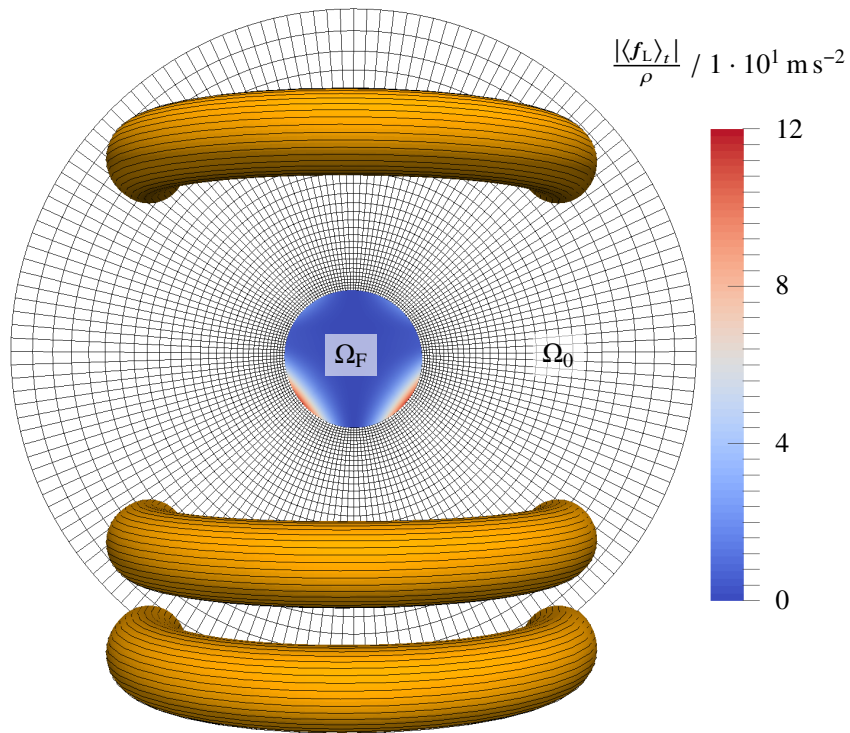
Abbildung 6.1: Numerische Lösung eines Mehrfeldproblems aus MD, HD und TD: Gezeigt sind Ergebnisse einer vereinfachten axialsymmetrischen Testrechnung für eine quasistationäre Strömung bei der gerichteten Erstarrung von polykristallinem Silizium [Schmid u. a. 2015; Poklad u. a. 2017].

über die Induktionsspule elektromagnetisch beeinflusst wird, befindet sich dabei in einem zylindrischen Induktionsschmelztiegel mit konischem Boden. Dieser Schmelztiegel ist wiederum von einem Grafituszeptor umschlossen. Eine genauere Beschreibung dieses Induktionsprozesses findet man in Schmid u. a. [2015]; Poklad u. a. [2017]. Zusätzlich wurde hier vereinfacht angenommen, dass bereits ein Teil der Schmelze auf dem Grund des Schmelztiegels erstarrt ist, sich die freie Oberfläche nicht bewegt und eine feste Temperaturverteilung auf dem inneren Rand des Schmelztiegels vorliegt. Die Demonstrationsrechnung veranschaulicht dabei, dass mit der neu entstandenen Simulationsplattform in *foam-extend* sowohl die Strömung in der Schmelze als auch die Temperaturverteilung im flüssigen und festen Silizium als Folge von Lorentz-Kraft und Joule-Wärme numerisch berechnet werden können. Auf diese Weise können in zukünftigen Arbeiten beispielsweise temperaturabhängige Stoffdaten berücksichtigt werden.

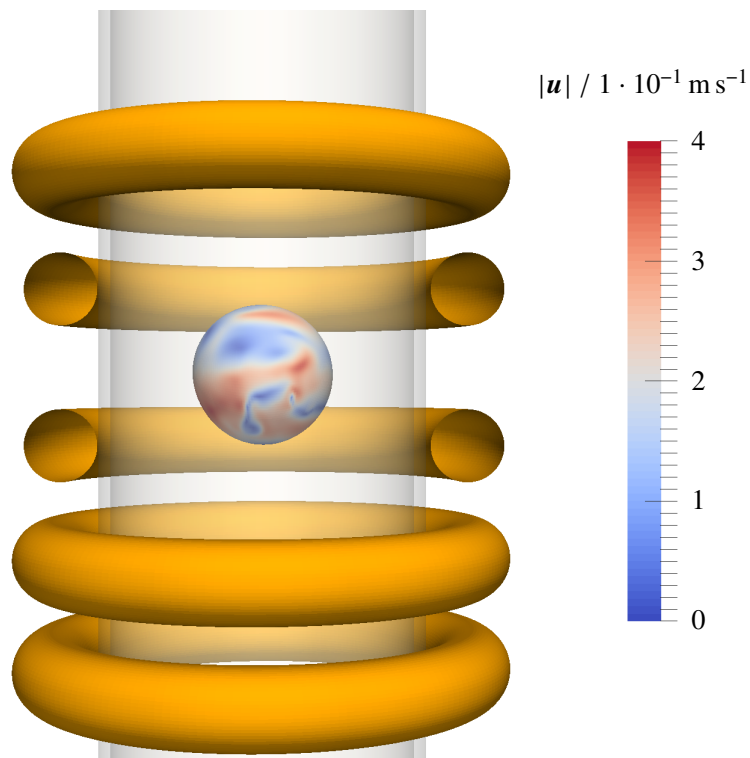
Weiterhin sind in Bezug auf die Turbulenzmodellierung in *foam-extend* noch viele Fragen offen. Hier sollte überprüft werden, ob die Nutzung des Boussinesq-Ansatzes gerechtfertigt ist, welchen Einfluss die Lorentz-Kraft und ggf. die Joule-Wärme auf die lokale Struktur der Turbulenz haben und inwiefern das turbulente Verhalten entlang der freien Oberfläche korrekt abgebildet wird. Diesbezüglich könnten weiterführende Studien auch im Zusammenhang mit der Levitation von Flüssigmetallen an die Arbeit von Spitans [2015] anknüpfen.

Ein prinzipieller Nachweis darüber, dass sich die selbe Herangehensweise wie beim RGS-Prozess auch für dreidimensionale Simulationen der elektromagnetischen Levitation eignet, wird über das in Abbildung 6.2 gezeigt Resultat einer testweise durchgeführten LES erbracht. In der Darstellung ist anhand einer Momentaufnahme zu erkennen, wie ein Siliziumtropfen infolge der hohen Lorentz-Kraft im Zentrum einer Induktionsspule in der Schwebe gehalten wird. Der dafür genutzte Induktor besteht aus insgesamt fünf Windungen, wobei der Stromfluss in den beiden oberen Windungen gegenläufig zu den unteren drei Windungen ist. Der Durchmesser des Tropfens beträgt nur etwa 5 mm und die Spule wird mit einer Amplitude von $\hat{I}_0 = 400$ A und einer Frequenz von bis zu $f_0 = 500$ kHz betrieben. Nähere Angaben zur gesamten Konfiguration finden sich in Gao u. a. [2016]. Als Grundlage für die numerische Berechnung kamen sphärische Gitter zum Einsatz, doch im Gegensatz zum RGS-Prozess sind Konduktor und Strömungsgebiet hier identisch. Für ein Gitter mit $\approx 1 \cdot 10^6$ Zellen für die Fluidregion ist dabei pro Stunde Rechenzeit ein Fortschritt in der Simulationszeit von bis zu 0,01 s pro CPU erreicht worden. Das Hauptgitter wurde für diese Rechnungen am äußeren Rand festgehalten, allerdings ließe sich speziell für die Levitation auch ein mitbewegtes Gitter realisieren, welches dem Schwerpunkt des Siliziumtropfens folgt. In weiteren Arbeiten zur elektromagnetischen Levitation könnten einerseits verschiedene Turbulenzmodelle untersucht werden, andererseits wären aber auch Vergleichsrechnungen für Anwendungen im Bereich der Verfahrenstechnik oder für die Bestimmung von Materialeigenschaften denkbar.

Durch den Einsatz der ITT besteht in *foam-extend* mit der Beschreibung der freien Oberfläche über die FAM zudem eine einfache Möglichkeit zur Modellierung von Grenzflächenprozessen, wie z. B. Phasenumwandlungen oder einem Stofftransport. Für Letzteres und den Fall einer temperaturabhängigen Oberflächenspannung (Marangoni-Effekt) bestehen prinzipiell sogar schon validierte Implementierungen in *foam-extend* [Tuković u. Jasak 2008; Qin u. a. 2015], welche man in Folgearbeiten direkt aufgreifen könnte.



(a) Betrag der Lorentz-Kraft innerhalb des Siliziumtropfens



(b) Momentaufnahme des Betrages der Geschwindigkeit

Abbildung 6.2: Numerische Simulation zur Levitation eines Siliziumtropfens nach Gao u. a. [2016]: Gezeigt sind hier das Ergebnis einer LES mit Smagorinsky-Feinstrukturmodell. Durch Biot-Savart-Induktoren kann die Größe der nicht-leitfähigen Region auf ein Minimum beschränkt werden (a).

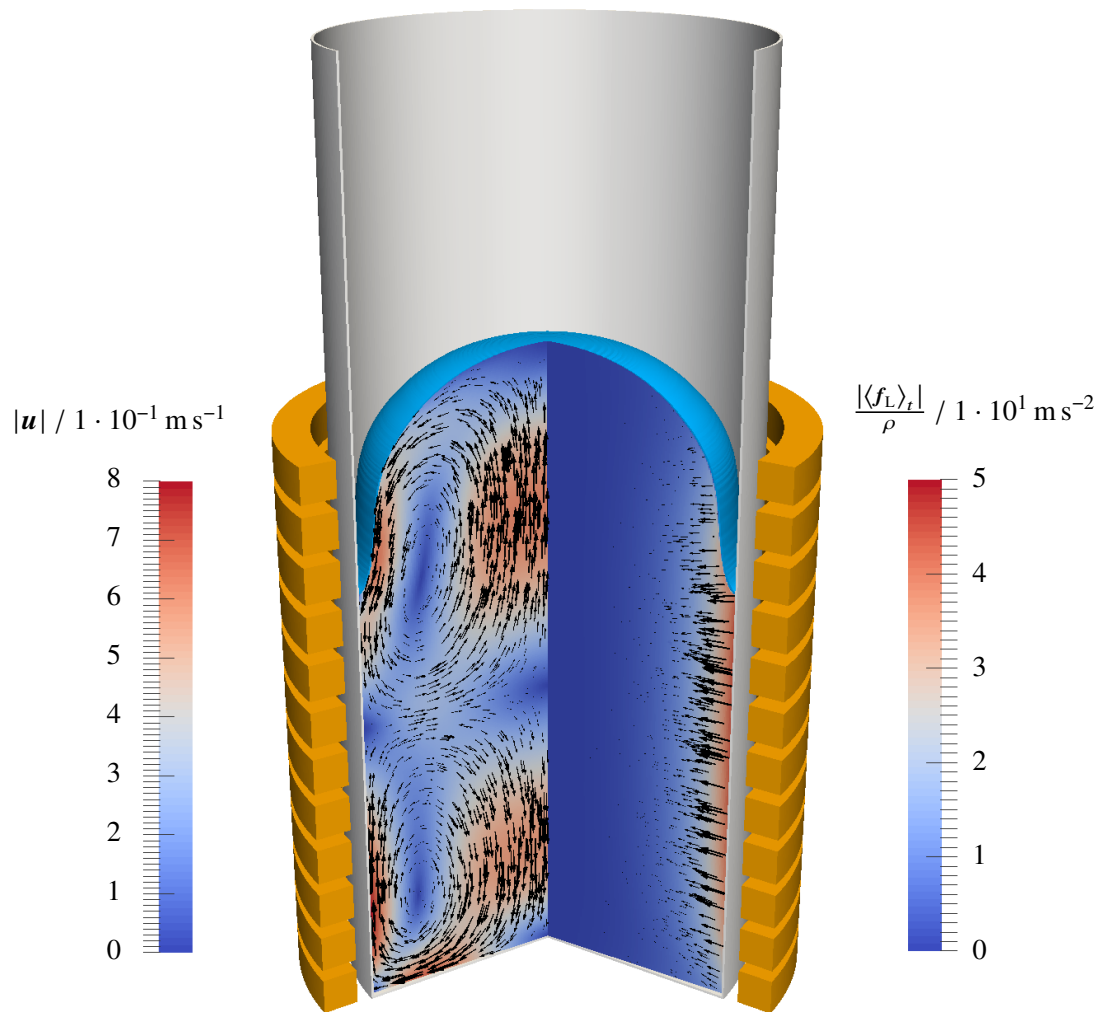


Abbildung 6.3: Numerische Simulation zur Strömung mit starker Oberflächenverformung von Wood-schem Metall in einem zylindrischen Induktionsschmelztiegel mit der VOF als ICT [Spitans u. a. 2013; Vencels u. a. 2017]: Betrag der mittleren Geschwindigkeit (links) und Lorentz-Kraft (rechts).

Für Problemstellungen, wo hingegen sehr starke Verformungen der freien Oberfläche oder komplexe topologische Änderungen auftreten und die ITT somit nachteilig wäre, ist z. B. über die VOF eine Modifikation des in dieser Arbeit genutzten Methodenapparates im Sinne der ICT möglich. Eine Situation, für die eine solche Modifikation sinnvoll ist, geht aus dem Beispiel in Abbildung 6.3 hervor. Die Darstellung zeigt das Resultat einer numerisch berechneten Oberflächenverformung von Woodschem Metall unter dem Einfluss eines magnetischen Wechselfeldes in einem zylindrischen Induktionsschmelztiegel aus Stahl. Dabei ist deutlich zu erkennen, dass die Oberfläche der Schmelze eine domartige Form annimmt und sich nahe der Tiegelwand – ausgehend von einem ebenen Verlauf – ein sehr schmaler Spaltbereich ausbildet. Durch diesen schmalen Bereich gestaltet sich die Anwendung einer ITT hier äußerst schwierig. Weitere Informationen wie Stoffparameter und geometrische Abmessungen findet man zu diesem Testfall in Spitans u. a. [2013]; Vencels u. a. [2017]. Die entsprechende Rechnung wurde in *foam-extend* im Rahmen einer axialsymmetrischen RAS mit k - ε -Turbulenzmodell durchgeführt. Für die Induktionsspule wurde dazu eine Amplitude von $\hat{I}_0 = 2460\sqrt{2}\text{ A} \approx 3480\text{ A}$ und eine Frequenz von $f_0 = 330\text{ Hz}$ genutzt. Zur Erfassung der Oberfläche ist eine VOF in Kombination mit dem nach Vencels u. a. [2017, Gleichung (4)] vorgeschlagenen Kriterium zur Neuberechnung

der elektromagnetischen Felder auf Basis des Volumenanteils eingesetzt worden. Für ein Gitter mit insgesamt $\approx 17 \cdot 10^4$ Kontrollvolumina und $\approx 8 \cdot 10^4$ Zellen in der Fluidregion dauerte eine serielle Rechnung bis zur Konvergenz bei einer Simulationszeit von 3 s ungefähr acht Stunden. Für die Form der freien Oberfläche hat sich dabei im stationären Zustand eine sehr gute Übereinstimmung mit Spitas u. a. [2013]; Vencels u. a. [2017] ergeben. Die erreichte Rechengeschwindigkeit in CPU-Stunden ist aber fünf mal höher als in Vencels u. a. [2017], was die Effizienz einer einheitlichen numerischen Technik für Strömung und Magnetfeld abermals hervorhebt. In zukünftigen Arbeiten wäre es problemlos möglich die ICT auch für dreidimensionale Problemstellungen einzusetzen.

Mit der in dieser Arbeit entwickelten Simulationsplattform ist demnach nicht nur ein mächtiges Werkzeug zur weiteren Untersuchung des RGS-Prozesses entstanden, sondern die Flexibilität und Erweiterbarkeit des gesamten Methodenapparates ermöglicht auch effiziente Untersuchungen allgemein im Bereich der metallurgischen MHD. Nicht zuletzt hat dazu die Offenheit und Funktionalität von *OpenFOAM* bzw. *foam-extend* beigetragen. Darüber hinaus wird die gesamte Methodenentwicklung zur metallurgischen MHD auch zukünftig von vielen Weiterentwicklungen dieser beliebten und vielfach genutzten Programmpakete profitieren.

A Tensorrechnung im Kontext von *OpenFOAM*

Zur Unterstützung des Haupttextes werden in diesem Anhang wichtige Vereinbarungen zur Tensorrechnung im Kontext von *OpenFOAM* [OpenFOAM Foundation 2017; Jasak 1996; Weller u. a. 1998] anhand des offiziellen Handbuchs [OpenFOAM Foundation 2015] aufgegriffen und ergänzt. In diesem Sinne ist der Abschnitt eher als ein Nachschlagewerk zu betrachten. Stellenweise wird im Verlauf der Kapitel 2 bis 5 aber auch für weitergehende Informationen hierher verwiesen.

Zunächst sei mit Bezug auf die Einleitung in OpenFOAM Foundation [2015, Abschnitt 1.1] darauf hingewiesen, dass *OpenFOAM* hauptsächlich dazu entwickelt wurde, um kontinuumsmechanische Problemstellungen numerisch zu lösen. Dabei wird stets der dreidimensionale Raum betrachtet und physikalische Größen werden mathematisch durch Tensoren beziehungsweise (bzw.) Tensorfelder dargestellt. Als globale Basis der Tensoren wird in *OpenFOAM* grundsätzlich ein kartesisches Koordinatensystem zugrunde gelegt, dessen Basisvektoren e_x , e_y und e_z rechtshändig orientiert sowie geradlinig-orthogonal zueinander sind. Für lokale Koordinatensysteme mit den Basisvektoren e_n , e_s , e_t , bzw. mit den Normalen- n und den Tangentialrichtungen s und t einer Ebene, gelten die selben Annahmen, gleichwohl diese bezüglich des globalen Koordinatensystems räumlich gedreht und verschoben sein können.

Genau wie in OpenFOAM Foundation [2015, Abschnitt 1.2] beschrieben wird, lässt sich einem Tensor hinsichtlich seiner Bedeutung eine Stufe zuordnen. Interpretiert man ihn als Funktion zur multilinearen Abbildung, so entspricht die Stufe der Anzahl Vektoren, welche diese Funktion auf einen skalaren Wert projiziert [Jeevanjee 2011, Kapitel 1]. Für jede Kombination aus Basisvektor und einem an der Abbildung beteiligten Vektor sind dem Tensor dabei Werte zugeordnet. Diese Komponenten lassen sich als mehrdimensionales Raster von Werten darstellen: Ein Tensor der Stufe 0 ergibt einen Skalar, ein Tensor der Stufe 1 entspricht einem Vektor und ein Tensor der Stufe 2 (Dyade) führt zu einer quadratischen Matrix mit 9 Komponenten. Tensoren höherer Stufe (Polyaden) werden, mit Ausnahme des nur indirekt angewandten Permutationstensors [Anhang A.1.2], welchen man sich als dreidimensionale Matrix mit 27 Komponenten (Triade) gerade noch vorstellen kann, nicht genutzt.

Gemäß OpenFOAM Foundation [2015, Abschnitt 1.2.1] werden Tensoren erster Stufe und darüber hinaus durch fett gedruckte Symbole dargestellt. In dieser Arbeit bildet diesbezüglich allerdings die Funktion ψ eine Ausnahme, da sie in den Abschnitten 3.16, 3.3, 4.3.3 und 4.4.2 als allgemeiner Platzhalter gebraucht wird. Dadurch, dass innerhalb dieses Anhanges im Gegensatz zum Hauptteil der physikalische Kontext fehlt und somit die Stufe eines Tensors nicht sofort ersichtlich ist, wird hier von der Nutzung kleiner und großer Symbole zur Unterscheidung von Tensoren erster bzw. zweiter Stufe Gebrauch gemacht. Weiterhin stehen die hier nur exemplarisch genutzten Symbole in keinerlei Zusammenhang zu physikalischen Größen im Haupttext.

Im Gegensatz zum Tensor selbst, sind dessen Komponenten abhängig von der zugehörigen Basis. Bezüglich eines definierten Koordinatensystems können diese in Indexschreibweise notiert werden, wobei dann auf fett gedruckte Letter verzichtet wird. So lautet zum Beispiel (z. B.) ein Tensor erster Stufe f in Indexschreibweise $f_i \forall i = 1, 2, 3$. Dabei werden die möglichen Werte des freien Index i , welche den kartesischen Koordinaten x, y, z entsprechen, nicht mit angegeben, da diese ja durch die Basis bekannt sind. Für einen Tensor zweiter Stufe F benötigt man schon zwei Indizes: $F_{ij} \forall i, j = 1, 2, 3$. Die Anzahl der freien Indizes ergibt sich also aus der Stufe des Tensors.

Da man Tensoren für lineare Abbildungen nutzt, kommen bei deren Anwendung häufig Summen der Art

$$r = \sum_{i=1}^3 f_i g_i = f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 \quad (\text{A.1})$$

vor. Durch das doppelte Auftreten des Index i im Summanden ist das Summenzeichen \sum überflüssig. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird im Rahmen der Einsteinschen Summenkonvention darauf verzichtet. Gleichung (A.1) ist demnach gleichbedeutend mit der Darstellung

$$r = f_i g_i = f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 . \quad (\text{A.2})$$

Im Anschluss werden nun spezielle Tensoren eingeführt und, in Anlehnung an [OpenFOAM Foundation \[2015, Abschnitt 1.3\]](#), wichtige algebraische sowie differentielle Operationen für Tensoren zusammengestellt. Die Zusammenstellung wurde jedoch weniger mit dem Anspruch einer vollständigen Sammlung erstellt, sondern vielmehr als selektive Ergänzung zur Abhandlung dieser Arbeit.

A.1 Spezielle Tensoren

A.1.1 Einheitstensor

Einheitstensor (Kronecker-Delta) zweiter Stufe:

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3a})$$

$$I_{ij} = \delta_{ij} \quad (\text{A.3b})$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.3c})$$

$$\delta_{ij} = \delta_{ji} \quad (\text{A.3d})$$

A.1.2 Permutationstensor

Permutationstensor (Epsilon-Tensor bzw. Levi-Civita-Symbol) dritter Stufe:

$$\varepsilon = \left(\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}}_{i=1} \parallel \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{i=2} \parallel \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{i=3} \right) \quad (\text{A.4a})$$

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{wenn mindestens zwei Indizes gleich sind} \\ 1 & \text{wenn } i, j, k \text{ eine gerade Permutation von } 1, 2, 3 \text{ ist} \\ -1 & \text{wenn } i, j, k \text{ eine ungerade Permutation von } 1, 2, 3 \text{ ist} \end{cases} \quad (\text{A.4b})$$

$$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{kij} = \varepsilon_{jki} \quad (\text{A.4c})$$

A.2 Algebraische Operationen

A.2.1 Inneres Produkt

Inneres Produkt zwischen zwei Vektoren (Skalarprodukt):

$$r = \mathbf{f} \cdot \mathbf{g} = \mathbf{g} \cdot \mathbf{f} \quad (\text{A.5a})$$

$$r = f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 \quad (\text{A.5b})$$

$$r = f_i g_i \quad (\text{A.5c})$$

Quadrat des Betrages eines Vektors:

$$r = |\mathbf{f}|^2 = \mathbf{f} \cdot \mathbf{f} \quad (\text{A.6a})$$

$$= f_1^2 + f_2^2 + f_3^2 \quad (\text{A.6b})$$

$$= f_i f_i \quad (\text{A.6c})$$

Betrag eines Vektors:

$$r = |\mathbf{f}| = \sqrt{\mathbf{f} \cdot \mathbf{f}} \quad (\text{A.7a})$$

$$r^2 = f_1^2 + f_2^2 + f_3^2 \quad (\text{A.7b})$$

$$= f_i f_i \quad (\text{A.7c})$$

Inneres Produkt zwischen Vektor und Tensor zweiter Stufe (Vektor links):

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \cdot \mathbf{G} = \mathbf{G}^T \cdot \mathbf{f} \quad (\text{A.8a})$$

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} f_1 G_{11} + f_2 G_{21} + f_3 G_{31} \\ f_1 G_{12} + f_2 G_{22} + f_3 G_{32} \\ f_1 G_{13} + f_2 G_{23} + f_3 G_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8b})$$

$$r_i = f_j G_{ji} \quad (\text{A.8c})$$

Inneres Produkt zwischen Vektor und Tensor zweiter Stufe (Vektor rechts):

$$\mathbf{r} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{f} = \mathbf{f} \cdot \mathbf{G}^T \quad (\text{A.9a})$$

$$= \begin{pmatrix} G_{11} f_1 + G_{12} f_2 + G_{13} f_3 \\ G_{21} f_1 + G_{22} f_2 + G_{23} f_3 \\ G_{31} f_1 + G_{32} f_2 + G_{33} f_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9b})$$

$$r_i = G_{ij} f_j \quad (\text{A.9c})$$

Inneres Produkt zwischen Vektor und Einheitstensor zweiter Stufe:

$$r_i = \mathbf{f} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{I}^T \cdot \mathbf{f} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{f} = \mathbf{f} \quad (\text{A.10a})$$

$$r_i = f_j \delta_{ji} = \delta_{ij} f_j = f_i \quad (\text{A.10b})$$

A.2.2 Doppeltes inneres Produkt

Doppeltes inneres Produkt zwischen zwei Tensoren zweiter Stufe (Frobenius-Skalarprodukt):

$$r = \mathbf{F} : \mathbf{G} = \mathbf{G} : \mathbf{F} \quad (\text{A.11a})$$

$$= F_{11} G_{11} + F_{12} G_{12} + F_{13} G_{13} \\ + F_{21} G_{21} + F_{22} G_{22} + F_{23} G_{23} \\ + F_{31} G_{31} + F_{32} G_{32} + F_{33} G_{33} \quad (\text{A.11b})$$

$$= F_{ij} G_{ij} \quad (\text{A.11c})$$

Spur eines Tensors zweiter Stufe:

$$r = \text{Sp}(\mathbf{F}) = \mathbf{F} : \mathbf{I} = \mathbf{I} : \mathbf{F} \quad (\text{A.12a})$$

$$= F_{11} + F_{22} + F_{33} \quad (\text{A.12b})$$

$$= F_{ij} \delta_{ij} \quad (\text{A.12c})$$

A.2.3 Äußeres Produkt

Äußeres Produkt zwischen zwei Vektoren (Tensorprodukt bzw. dyadisches Produkt):

$$\mathbf{R} = \mathbf{f} \mathbf{g} = \mathbf{f} \otimes \mathbf{g} = \mathbf{f} \mathbf{g}^T \quad (\text{A.13a})$$

$$= \begin{pmatrix} f_1 g_1 & f_1 g_2 & f_1 g_3 \\ f_2 g_1 & f_2 g_2 & f_2 g_3 \\ f_3 g_1 & f_3 g_2 & f_3 g_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13b})$$

$$R_{ij} = f_i g_j \quad (\text{A.13c})$$

Quadrat eines Vektors:

$$\mathbf{R} = \mathbf{f}^2 = \mathbf{f} \mathbf{f} = \mathbf{f} \otimes \mathbf{f} = \mathbf{f} \mathbf{f}^T \quad (\text{A.14a})$$

$$= \begin{pmatrix} f_1^2 & f_1 f_2 & f_1 f_3 \\ f_2 f_1 & f_2^2 & f_2 f_3 \\ f_3 f_1 & f_3 f_2 & f_3^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.14b})$$

$$R_{ij} = f_i f_j \quad (\text{A.14c})$$

Quadrat des Betrages eines Vektors:

$$r = |\mathbf{f}|^2 = \text{Sp}(\mathbf{f}^2) = \text{Sp}(\mathbf{f} \mathbf{f}) = \mathbf{I} : \mathbf{f} \mathbf{f} = \mathbf{f} \cdot \mathbf{f} \quad (\text{A.15a})$$

$$= f_1^2 + f_2^2 + f_3^2 \quad (\text{A.15b})$$

$$= f_i f_i \quad (\text{A.15c})$$

Inneres Produkt eines Vektors mit äußerem Produkt zweier Vektoren:

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \mathbf{h} = \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g} \otimes \mathbf{h}) \quad (\text{A.16a})$$

$$= \begin{pmatrix} f_1 g_1 h_1 + f_2 g_2 h_1 + f_3 g_3 h_1 \\ f_1 g_1 h_2 + f_2 g_2 h_2 + f_3 g_3 h_2 \\ f_1 g_1 h_3 + f_2 g_2 h_3 + f_3 g_3 h_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.16b})$$

$$r_i = f_j g_j h_i \quad (\text{A.16c})$$

Inneres Produkt eines Vektors mit transponiertem äußerem Produkt zweier Vektoren:

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g} \mathbf{h})^T = \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g} \otimes \mathbf{h})^T \quad (\text{A.17a})$$

$$= \begin{pmatrix} f_1 g_1 h_1 + f_2 g_1 h_2 + f_3 g_1 h_3 \\ f_1 g_2 h_1 + f_2 g_2 h_2 + f_3 g_2 h_3 \\ f_1 g_3 h_1 + f_2 g_3 h_2 + f_3 g_3 h_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.17b})$$

$$r_i = f_j g_i h_j \quad (\text{A.17c})$$

Normaler Anteil eines Vektors:

$$\mathbf{r} = \mathbf{nn} \cdot \mathbf{f} = \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{f}) = (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{f} \quad (\text{A.18a})$$

$$= \begin{pmatrix} n_1 n_1 f_1 + n_1 n_2 f_2 + n_1 n_3 f_3 \\ n_2 n_1 f_1 + n_2 n_2 f_2 + n_2 n_3 f_3 \\ n_3 n_1 f_1 + n_3 n_2 f_2 + n_3 n_3 f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_1(n_1 f_1 + n_2 f_2 + n_3 f_3) \\ n_2(n_1 f_1 + n_2 f_2 + n_3 f_3) \\ n_3(n_1 f_1 + n_2 f_2 + n_3 f_3) \end{pmatrix} \quad (\text{A.18b})$$

$$r_i = n_i n_j f_j \quad (\text{A.18c})$$

Tangentialer Anteil eines Vektors:

$$\mathbf{r} = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{f} = \mathbf{f} - \mathbf{nn} \cdot \mathbf{f} = \mathbf{f} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{f}) = \mathbf{f} - (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{f} \quad (\text{A.19a})$$

$$= \begin{pmatrix} f_1 - n_1 n_1 f_1 - n_1 n_2 f_2 - n_1 n_3 f_3 \\ f_2 - n_2 n_1 f_1 - n_2 n_2 f_2 - n_2 n_3 f_3 \\ f_3 - n_3 n_1 f_1 - n_3 n_2 f_2 - n_3 n_3 f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 - n_1(n_1 f_1 + n_2 f_2 + n_3 f_3) \\ f_2 - n_2(n_1 f_1 + n_2 f_2 + n_3 f_3) \\ f_3 - n_3(n_1 f_1 + n_2 f_2 + n_3 f_3) \end{pmatrix} \quad (\text{A.19b})$$

$$r_i = f_i - n_i n_j f_j \quad (\text{A.19c})$$

A.2.4 Kreuzprodukt

Kreuzprodukt zwischen zwei Vektoren (Vektorprodukt):

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \times \mathbf{g} = -\mathbf{g} \times \mathbf{f} \quad (\text{A.20a})$$

$$= \begin{pmatrix} f_2 g_3 - f_3 g_2 \\ f_3 g_1 - f_1 g_3 \\ f_1 g_2 - f_2 g_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.20b})$$

$$r_i = \varepsilon_{ijk} f_j g_k \quad (\text{A.20c})$$

Wiederholtes Kreuzprodukt zwischen drei Vektoren (Graßmann-Identität):

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \times (\mathbf{g} \times \mathbf{h}) \quad (\text{A.21a})$$

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} g_2 h_3 - g_3 h_2 \\ g_3 h_1 - g_1 h_3 \\ g_1 h_2 - g_2 h_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_2(g_1 h_2 - g_2 h_1) - f_3(g_3 h_1 - g_1 h_3) \\ f_3(g_2 h_3 - g_3 h_2) - f_1(g_1 h_2 - g_2 h_1) \\ f_1(g_3 h_1 - g_1 h_3) - f_2(g_2 h_3 - g_3 h_2) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} f_2 g_1 h_2 + f_3 g_1 h_3 - f_2 g_2 h_1 - f_3 g_3 h_1 \\ f_3 g_2 h_3 + f_1 g_2 h_1 - f_3 g_3 h_2 - f_1 g_1 h_2 \\ f_1 g_3 h_1 + f_2 g_3 h_2 - f_1 g_1 h_3 - f_2 g_2 h_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} f_2 g_1 h_2 + f_3 g_1 h_3 + f_1 g_1 h_1 - f_1 g_1 h_1 - f_2 g_2 h_1 - f_3 g_3 h_1 \\ f_3 g_2 h_3 + f_1 g_2 h_1 + f_2 g_2 h_2 - f_2 g_2 h_2 - f_3 g_3 h_2 - f_1 g_1 h_2 \\ f_1 g_3 h_1 + f_2 g_3 h_2 + f_3 g_3 h_3 - f_3 g_3 h_3 - f_1 g_1 h_3 - f_2 g_2 h_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} f_2 g_1 h_2 + f_3 g_1 h_3 + f_1 g_1 h_1 \\ f_3 g_2 h_3 + f_1 g_2 h_1 + f_2 g_2 h_2 \\ f_1 g_3 h_1 + f_2 g_3 h_2 + f_3 g_3 h_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f_1 g_1 h_1 + f_2 g_2 h_1 + f_3 g_3 h_1 \\ f_2 g_2 h_2 + f_3 g_3 h_2 + f_1 g_1 h_2 \\ f_3 g_3 h_3 + f_1 g_1 h_3 + f_2 g_2 h_3 \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g}\mathbf{h})^T - \mathbf{f} \cdot \mathbf{g}\mathbf{h} = \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g} \otimes \mathbf{h})^T - \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g} \otimes \mathbf{h}) \\
&= \mathbf{f} \cdot \left((\mathbf{g}\mathbf{h})^T - \mathbf{g}\mathbf{h} \right) = \mathbf{f} \cdot \left((\mathbf{g} \otimes \mathbf{h})^T - \mathbf{g} \otimes \mathbf{h} \right) \tag{A.21b}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} g_1(f_2 h_2 + f_3 h_3 + f_1 h_1) \\ g_2(f_3 h_3 + f_1 h_1 + f_2 h_2) \\ g_3(f_1 h_1 + f_2 h_2 + f_3 h_3) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} (f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3) h_1 \\ (f_2 g_2 + f_3 g_3 + f_1 g_1) h_2 \\ (f_3 g_3 + f_1 g_1 + f_2 g_2) h_3 \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{g}(\mathbf{f} \cdot \mathbf{h}) - (\mathbf{f} \cdot \mathbf{g})\mathbf{h} \tag{A.21c}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r_i &= \varepsilon_{ijk} f_j (\varepsilon_{klm} g_l h_m) \\
&= (\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm}) f_j g_l h_m \\
&= \delta_{il} g_l (f_j \delta_{jm} h_m) - (f_j \delta_{jl} g_l) \delta_{im} h_m \\
&= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im}) f_j g_l h_m \tag{A.21d}
\end{aligned}$$

Kombination von Kreuzprodukt zweier Vektoren mit innerem Produkt (Spatprodukt):

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \cdot (\mathbf{g} \times \mathbf{h}) \tag{A.22a}$$

$$\begin{aligned}
&= f_1 (g_2 h_3 - g_3 h_2) + f_2 (g_3 h_1 - g_1 h_3) + f_3 (g_1 h_2 - g_2 h_1) \\
&= (f_2 g_3 - f_3 g_2) h_1 + (f_3 g_1 - f_1 g_3) h_2 + (f_1 g_2 - f_2 g_1) h_3 \\
&= (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) \cdot \mathbf{h} \tag{A.22b}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r &= f_i (\varepsilon_{ijk} g_j h_k) \\
&= \varepsilon_{ijk} f_i g_j h_k \\
&= \varepsilon_{kij} f_i g_j h_k \\
&= (\varepsilon_{kij} f_i g_j) h_k \tag{A.22c}
\end{aligned}$$

A.3 Differentielle Operationen

A.3.1 Operatoren

Nabla-Operator:

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix} \tag{A.23a}$$

$$(\nabla)_i = \partial_i \tag{A.23b}$$

Oberflächen-Nabla-Operator [vergleiche (vgl.) Gleichung (A.19)]:

$$\begin{aligned}\bar{\nabla} &= (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla = \nabla - \mathbf{nn} \cdot \nabla = \nabla - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} - n_1 n_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - n_1 n_2 \frac{\partial}{\partial x_2} - n_1 n_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} - n_2 n_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - n_2 n_2 \frac{\partial}{\partial x_2} - n_2 n_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} - n_3 n_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - n_3 n_2 \frac{\partial}{\partial x_2} - n_3 n_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_1 - n_1(n_1 \partial_1 + n_2 \partial_2 + n_3 \partial_3) \\ \partial_2 - n_2(n_1 \partial_1 + n_2 \partial_2 + n_3 \partial_3) \\ \partial_3 - n_3(n_1 \partial_1 + n_2 \partial_2 + n_3 \partial_3) \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A.24a})$$

$$(\nabla)_i = \partial_i - n_i n_j \partial_j \quad (\text{A.24b})$$

Laplace-Operator:

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \nabla \cdot \nabla \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \\ &= \partial_1 \partial_1 + \partial_2 \partial_2 + \partial_3 \partial_3\end{aligned}\quad (\text{A.25a})$$

$$= \partial_i \partial_i \quad (\text{A.25b})$$

A.3.2 Gradient

Gradient eines Skalars:

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \partial_1 f \\ \partial_2 f \\ \partial_3 f \end{pmatrix} \quad (\text{A.26a})$$

$$(\nabla f)_i = \partial_i f \quad (\text{A.26b})$$

Richtungsableitung eines Skalars:

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{n}} f &= \mathbf{n} \cdot \nabla f = \nabla f \cdot \mathbf{n} \\ &= n_1 \partial_1 f + n_2 \partial_2 f + n_3 \partial_3 f\end{aligned}\quad (\text{A.27a})$$

$$= n_i \partial_i f \quad (\text{A.27b})$$

Gradient eines Vektors (Transponierte Jacobi-Matrix):

$$\begin{aligned}\nabla \mathbf{f} &= \nabla \otimes \mathbf{f} \\ &= \begin{pmatrix} \partial_1 f_1 & \partial_1 f_2 & \partial_1 f_3 \\ \partial_2 f_1 & \partial_2 f_2 & \partial_2 f_3 \\ \partial_3 f_1 & \partial_3 f_2 & \partial_3 f_3 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A.28a})$$

$$(\nabla \mathbf{f})_{ij} = \partial_i f_j \quad (\text{A.28b})$$

Richtungsableitung eines Vektors:

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{f} &= \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{f} = (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{f} = (\nabla \mathbf{f})^T \cdot \mathbf{n} \\ &= \begin{pmatrix} n_1 \partial_1 f_1 + n_2 \partial_2 f_1 + n_3 \partial_3 f_1 \\ n_1 \partial_1 f_2 + n_2 \partial_2 f_2 + n_3 \partial_3 f_2 \\ n_1 \partial_1 f_3 + n_2 \partial_2 f_3 + n_3 \partial_3 f_3 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A.29a})$$

$$(\nabla_{\mathbf{n}} \mathbf{f})_i = n_j \partial_j f_i \quad (\text{A.29b})$$

Gradient einer gerichteten Vektorkomponente:

$$\begin{aligned}\nabla f_{\mathbf{n}} &= \nabla \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{f})^T \\ &= \begin{pmatrix} n_1 \partial_1 f_1 + n_2 \partial_1 f_2 + n_3 \partial_1 f_3 \\ n_1 \partial_2 f_1 + n_2 \partial_2 f_2 + n_3 \partial_2 f_3 \\ n_1 \partial_3 f_1 + n_2 \partial_3 f_2 + n_3 \partial_3 f_3 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A.30a})$$

$$(\nabla f_{\mathbf{n}})_i = n_j \partial_i f_j \quad (\text{A.30b})$$

A.3.3 Divergenz

Divergenz eines Vektors:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{f} &= \text{Sp}(\nabla \mathbf{f}) = \nabla \mathbf{f} : \mathbf{I} = \mathbf{I} : \nabla \mathbf{f} \\ &= \partial_1 f_1 + \partial_2 f_2 + \partial_3 f_3\end{aligned}\quad (\text{A.31a})$$

$$= \partial_i f_i \quad (\text{A.31b})$$

Divergenz eines Tensors zweiter Stufe:

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \partial_1 F_{11} + \partial_2 F_{21} + \partial_3 F_{31} \\ \partial_1 F_{12} + \partial_2 F_{22} + \partial_3 F_{32} \\ \partial_1 F_{13} + \partial_2 F_{23} + \partial_3 F_{33} \end{pmatrix}\quad (\text{A.32a})$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{F})_i = \partial_j F_{ji} \quad (\text{A.32b})$$

A.3.4 Rotation

Rotation eines Vektors:

$$\nabla \times \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \partial_2 f_3 - \partial_3 f_2 \\ \partial_3 f_1 - \partial_1 f_3 \\ \partial_1 f_2 - \partial_2 f_1 \end{pmatrix}\quad (\text{A.33a})$$

$$(\nabla \times \mathbf{f})_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j f_k \quad (\text{A.33b})$$

Wiederholte Anwendung des Rotations-Operators (Graßmann-Identität):

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{f}) &= \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \partial_2 f_3 - \partial_3 f_2 \\ \partial_3 f_1 - \partial_1 f_3 \\ \partial_1 f_2 - \partial_2 f_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_2(\partial_1 f_2 - \partial_2 f_1) - \partial_3(\partial_3 f_1 - \partial_1 f_3) \\ \partial_3(\partial_2 f_3 - \partial_3 f_2) - \partial_1(\partial_1 f_2 - \partial_2 f_1) \\ \partial_1(\partial_3 f_1 - \partial_1 f_3) - \partial_2(\partial_2 f_3 - \partial_3 f_2) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \partial_2 \partial_1 f_2 + \partial_3 \partial_1 f_3 - \partial_2 \partial_2 f_1 - \partial_3 \partial_3 f_1 \\ \partial_3 \partial_2 f_3 + \partial_1 \partial_2 f_1 - \partial_3 \partial_3 f_2 - \partial_1 \partial_1 f_2 \\ \partial_1 \partial_3 f_1 + \partial_2 \partial_3 f_2 - \partial_1 \partial_1 f_3 - \partial_2 \partial_2 f_3 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \partial_2 \partial_1 f_2 + \partial_3 \partial_1 f_3 + \partial_1 \partial_1 f_1 - \partial_1 \partial_1 f_1 - \partial_2 \partial_2 f_1 - \partial_3 \partial_3 f_1 \\ \partial_3 \partial_2 f_3 + \partial_1 \partial_2 f_1 + \partial_2 \partial_2 f_2 - \partial_2 \partial_2 f_2 - \partial_3 \partial_3 f_2 - \partial_1 \partial_1 f_2 \\ \partial_1 \partial_3 f_1 + \partial_2 \partial_3 f_2 + \partial_3 \partial_3 f_3 - \partial_3 \partial_3 f_3 - \partial_1 \partial_1 f_3 - \partial_2 \partial_2 f_3 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \partial_2 \partial_1 f_2 + \partial_3 \partial_1 f_3 + \partial_1 \partial_1 f_1 \\ \partial_3 \partial_2 f_3 + \partial_1 \partial_2 f_1 + \partial_2 \partial_2 f_2 \\ \partial_1 \partial_3 f_1 + \partial_2 \partial_3 f_2 + \partial_3 \partial_3 f_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \partial_1 \partial_1 f_1 + \partial_2 \partial_2 f_1 + \partial_3 \partial_3 f_1 \\ \partial_2 \partial_2 f_2 + \partial_3 \partial_3 f_2 + \partial_1 \partial_1 f_2 \\ \partial_3 \partial_3 f_3 + \partial_1 \partial_1 f_3 + \partial_2 \partial_2 f_3 \end{pmatrix} \\
 &= \nabla \cdot (\nabla \mathbf{f})^T - \nabla \cdot \nabla \mathbf{f} \\
 &= \nabla \cdot \left((\nabla \mathbf{f})^T - \nabla \mathbf{f} \right) \tag{A.34a}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \begin{pmatrix} \partial_1(\partial_2 f_2 + \partial_3 f_3 + \partial_1 f_1) \\ \partial_2(\partial_3 f_3 + \partial_1 f_1 + \partial_2 f_2) \\ \partial_3(\partial_1 f_1 + \partial_2 f_2 + \partial_3 f_3) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} (\partial_1 \partial_1 + \partial_2 \partial_2 + \partial_3 \partial_3) f_1 \\ (\partial_1 \partial_1 + \partial_2 \partial_2 + \partial_3 \partial_3) f_2 \\ (\partial_1 \partial_1 + \partial_2 \partial_2 + \partial_3 \partial_3) f_3 \end{pmatrix} \\
 &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{f}) - (\nabla \cdot \nabla) \mathbf{f} \\
 &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{f}) - \nabla^2 \mathbf{f} \tag{A.34b}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\nabla \times (\nabla \times \mathbf{f}))_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (\varepsilon_{klm} \partial_l f_m) \\
 &= (\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm}) \partial_j \partial_l f_m \\
 &= \delta_{il} f_l (\partial_j \delta_{jm} f_m) - (\partial_j \delta_{jl} \partial_l) \delta_{im} f_m \\
 &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \partial_j \partial_l f_m \tag{A.34c}
 \end{aligned}$$

Wiederholte Anwendung des Rotations-Operators mit innerem Skalar [vgl. Gleichung (A.34)]:

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (f \nabla \times \mathbf{g}) &= \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f \partial_2 g_3 - f \partial_3 g_2 \\ f \partial_3 g_1 - f \partial_1 g_3 \\ f \partial_1 g_2 - f \partial_2 g_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_2(f \partial_1 g_2 - f \partial_2 g_1) - \partial_3(f \partial_3 g_1 - f \partial_1 g_3) \\ \partial_3(f \partial_2 g_3 - f \partial_3 g_2) - \partial_1(f \partial_1 g_2 - f \partial_2 g_1) \\ \partial_1(f \partial_3 g_1 - f \partial_1 g_3) - \partial_2(f \partial_2 g_3 - f \partial_3 g_2) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \partial_2(f \partial_1 g_2) + \partial_3(f \partial_1 g_3) - \partial_2(f \partial_2 g_1) - \partial_3(f \partial_3 g_1) \\ \partial_3(f \partial_2 g_3) + \partial_1(f \partial_2 g_1) - \partial_3(f \partial_3 g_2) - \partial_1(f \partial_1 g_2) \\ \partial_1(f \partial_3 g_1) + \partial_2(f \partial_3 g_2) - \partial_1(f \partial_1 g_3) - \partial_2(f \partial_2 g_3) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \partial_2(f \partial_1 g_2) + \partial_3(f \partial_1 g_3) + \partial_1(f \partial_1 g_1) - \partial_1(f \partial_1 g_1) - \partial_2(f \partial_2 g_1) - \partial_3(f \partial_3 g_1) \\ \partial_3(f \partial_2 g_3) + \partial_1(f \partial_2 g_1) + \partial_2(f \partial_2 g_2) - \partial_2(f \partial_2 g_2) - \partial_3(f \partial_3 g_2) - \partial_1(f \partial_1 g_2) \\ \partial_1(f \partial_3 g_1) + \partial_2(f \partial_3 g_2) + \partial_3(f \partial_3 g_3) - \partial_3(f \partial_3 g_3) - \partial_1(f \partial_1 g_3) - \partial_2(f \partial_2 g_3) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \partial_2(f\partial_1g_2) + \partial_3(f\partial_1g_3) + \partial_1(f\partial_1g_1) \\ \partial_3(f\partial_2g_3) + \partial_1(f\partial_2g_1) + \partial_2(f\partial_2g_2) \\ \partial_1(f\partial_3g_1) + \partial_2(f\partial_3g_2) + \partial_3(f\partial_3g_3) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \partial_1(f\partial_1g_1) + \partial_2(f\partial_2g_1) + \partial_3(f\partial_3g_1) \\ \partial_2(f\partial_2g_2) + \partial_3(f\partial_3g_2) + \partial_1(f\partial_1g_2) \\ \partial_3(f\partial_3g_3) + \partial_1(f\partial_1g_3) + \partial_2(f\partial_2g_3) \end{pmatrix} \\
&= \nabla \cdot f (\nabla \mathbf{g})^T - \nabla \cdot f \nabla \mathbf{g} \\
&= \nabla \cdot f \left((\nabla \mathbf{g})^T - \nabla \mathbf{g} \right) \tag{A.35a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\nabla \times (f \nabla \times \mathbf{g}))_i &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (f \varepsilon_{klm} \partial_l g_m) \\
&= (\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm}) \partial_j f \partial_l g_m \tag{A.35b}
\end{aligned}$$

Kombination des Rotations-Operators mit innerem Produkt:

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} \cdot (\nabla \times \mathbf{g}) \tag{A.36a}$$

$$\begin{aligned}
&= f_1 (\partial_2 g_3 - \partial_3 g_2) + f_2 (\partial_3 g_1 - \partial_1 g_3) + f_3 (\partial_1 g_2 - \partial_2 g_1) \\
&= (f_2 \partial_3 - f_3 \partial_2) g_1 + (f_3 \partial_1 - f_1 \partial_3) g_2 + (f_1 \partial_2 - f_2 \partial_1) g_3 \\
&= (\mathbf{f} \times \nabla) \cdot \mathbf{g} \tag{A.36b}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r &= f_i (\varepsilon_{ijk} \partial_j g_k) \\
&= \varepsilon_{ijk} f_i \partial_j g_k \\
&= \varepsilon_{kij} f_i \partial_j g_k \\
&= (\varepsilon_{kij} f_i \partial_j) g_k \tag{A.36c}
\end{aligned}$$

A.3.5 Weitere ausgewählte Zusammenhänge

Verschiedene Identitäten zwischen Differentialoperationen:

$$\nabla \cdot \mathbf{f} = \mathbf{I} : \nabla \mathbf{f} = \text{Sp}(\nabla \mathbf{f}) \tag{A.37a}$$

$$2 \nabla \cdot \mathbf{f} = \text{Sp} \left(\nabla \mathbf{f} + (\nabla \mathbf{f})^T \right) \tag{A.37b}$$

$$0 = \text{Sp} \left(\nabla \mathbf{f} - (\nabla \mathbf{f})^T \right) \tag{A.37c}$$

$$\mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{f} = \nabla \mathbf{f} - \bar{\nabla} \mathbf{f} \tag{A.37d}$$

$$\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{f} - \bar{\nabla} \cdot \mathbf{f} \tag{A.37e}$$

$$\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{f} = \mathbf{I} : (\mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{f}) = \text{Sp}(\mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{f}) \tag{A.37f}$$

$$2 \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{f} = \mathbf{nn} : \left(\nabla \mathbf{f} + (\nabla \mathbf{f})^T \right) \tag{A.37g}$$

$$0 = \mathbf{nn} : \left(\nabla \mathbf{f} - (\nabla \mathbf{f})^T \right) \tag{A.37h}$$

$$\nabla \cdot (f \mathbf{I}) = \nabla f \tag{A.37i}$$

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{f}) = 0 \tag{A.37j}$$

$$\nabla \times \nabla f = \mathbf{0} \tag{A.37k}$$

$$\nabla \cdot (\nabla \mathbf{f})^T = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{f}) \tag{A.37l}$$

$$\nabla \cdot \nabla f = \nabla^2 f \quad (\text{A.37m})$$

Produktregeln für den Gradienten:

$$\begin{aligned} \nabla(fg) &= (\nabla f)g + f(\nabla g) \\ &= g\nabla f + f\nabla g \end{aligned} \quad (\text{A.38a})$$

$$\begin{aligned} \nabla(f\mathbf{g}) &= (\nabla f)\mathbf{g} + f(\nabla\mathbf{g}) \\ &= \mathbf{g}\nabla f + f\nabla\mathbf{g} \end{aligned} \quad (\text{A.38b})$$

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{f} \cdot \mathbf{g}) &= (\nabla f) \cdot \mathbf{g} + \mathbf{f} \cdot (\nabla\mathbf{g})^T \\ &= \nabla f \cdot \mathbf{g} + \mathbf{f} \cdot (\nabla\mathbf{g})^T \\ &= \mathbf{f} \cdot (\nabla\mathbf{g})^T + \mathbf{g} \cdot (\nabla f)^T \\ &= \mathbf{f} \cdot \left((\nabla\mathbf{g})^T - \nabla\mathbf{g} \right) + \mathbf{f} \cdot \nabla\mathbf{g} + \mathbf{g} \cdot \left((\nabla f)^T - \nabla f \right) + \mathbf{g} \cdot \nabla f \\ &= \mathbf{f} \times (\nabla \times \mathbf{g}) + \mathbf{f} \cdot \nabla\mathbf{g} + \mathbf{g} \times (\nabla \times \mathbf{f}) + \mathbf{g} \cdot \nabla f \\ &= \mathbf{f} \times (\nabla \times \mathbf{g}) + (\mathbf{f} \cdot \nabla)\mathbf{g} + \mathbf{g} \times (\nabla \times \mathbf{f}) + (\mathbf{g} \cdot \nabla)\mathbf{f} \end{aligned} \quad (\text{A.38c})$$

Produktregeln für die Divergenz:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (fg) &= (\nabla f) \cdot \mathbf{g} + f(\nabla \cdot \mathbf{g}) \\ &= \nabla f \cdot \mathbf{g} + f\nabla \cdot \mathbf{g} \end{aligned} \quad (\text{A.39a})$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (f\mathbf{G}) &= (\nabla f) \cdot \mathbf{G} + f(\nabla \cdot \mathbf{G}) \\ &= \nabla f \cdot \mathbf{G} + f\nabla \cdot \mathbf{G} \end{aligned} \quad (\text{A.39b})$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) = (\nabla \times \mathbf{f}) \cdot \mathbf{g} - \mathbf{f} \cdot (\nabla \times \mathbf{g}) \quad (\text{A.39c})$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (f\mathbf{g}) &= (\nabla \cdot f)\mathbf{g} + \mathbf{f} \cdot (\nabla\mathbf{g}) \\ &= (\nabla \cdot f)\mathbf{g} + \mathbf{f} \cdot \nabla\mathbf{g} \\ &= (\nabla \cdot f)\mathbf{g} + (\mathbf{f} \cdot \nabla)\mathbf{g} \end{aligned} \quad (\text{A.39d})$$

Produktregeln für die Rotation:

$$\nabla \times (fg) = \nabla f \times \mathbf{g} + f\nabla \times \mathbf{g} \quad (\text{A.40a})$$

$$\nabla \times (f\mathbf{G}) = \nabla f \times \mathbf{G} + f\nabla \times \mathbf{G} \quad (\text{A.40b})$$

$$\begin{aligned} \nabla \times (\mathbf{f} \times \mathbf{g}) &= \nabla \cdot \left((f\mathbf{g})^T - f\mathbf{g} \right) \\ &= \nabla \cdot (\mathbf{g}f - f\mathbf{g}) \\ &= \nabla \cdot (\mathbf{g}f) - \nabla \cdot (f\mathbf{g}) \\ &= (\nabla \cdot \mathbf{g})f + \mathbf{g} \cdot (\nabla f) - (\nabla \cdot f)\mathbf{g} - \mathbf{f} \cdot (\nabla\mathbf{g}) \\ &= (\nabla \cdot \mathbf{g})f + \mathbf{g} \cdot \nabla f - (\nabla \cdot f)\mathbf{g} - \mathbf{f} \cdot \nabla\mathbf{g} \\ &= (\nabla \cdot \mathbf{g})f + (\mathbf{g} \cdot \nabla)f - (\nabla \cdot f)\mathbf{g} - (\mathbf{f} \cdot \nabla)\mathbf{g} \end{aligned} \quad (\text{A.40c})$$

A.3.6 Integralsätze

Verallgemeinerter Satz von Gauß für eine allgemeine Funktion ψ mit „ \circ “ als Skalar-, Vektor- oder Tensorprodukt [vgl. Spiegel u. a. 2009, Kapitel 6, Seite 107]:

$$\int_{\Omega} \nabla \circ \psi \, dV = \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \circ \psi \, dS \quad (\text{A.41})$$

Satz von Gauß [nach Gleichung (A.41) mit Skalarprodukt und vektorwertiger Funktion \mathbf{f}]:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{f} \, dV = \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \mathbf{f} \, dS \quad (\text{A.42})$$

Verallgemeinerter Satz von Gauß in Oberflächen-Form für eine allgemeine Funktion ψ mit „ \circ “ als Skalar-, Vektor- oder Tensorprodukt [vgl. Edwards u. a. 1991, Abschnitt 3.3, Seite 51–52, Gleichung (3.3-9) und Abbildung 3.3-2; Jakobsen 2014, Abschnitt 3.4.1, Seite 415–416, Gleichung (3.79) und Abbildung 3.4; Tuković 2005, Anhang B, Gleichung (B.1); Tuković u. Jasak 2012, Abschnitt 3.4, Gleichung (45) und beachte $\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{n}\mathbf{n}) = (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \bar{\nabla} \mathbf{n} = (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$]:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \circ \psi \, dS &= \int_{\partial\Gamma} \mathbf{m} \circ \psi \, dL && \text{mit} \quad \mathbf{m} = \mathbf{t} \times \mathbf{n} \\ \int_{\Gamma} \bar{\nabla} \circ \psi \, dS &= \int_{\partial\Gamma} \mathbf{m} \circ \psi \, dL - \int_{\Gamma} \kappa \mathbf{n} \circ \psi \, dS && \text{mit} \quad \kappa = -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Verallgemeinerter Satz von Stokes für eine allgemeine Funktion ψ mit „ \circ “ als Skalar-, Vektor- oder Tensorprodukt [vgl. Spiegel u. a. 2009, Kapitel 6, Seite 107]:

$$\int_{\Gamma} (\mathbf{n} \times \nabla) \circ \psi \, dS = \int_{\partial\Gamma} \mathbf{t} \circ \psi \, dL \quad (\text{A.44})$$

Satz von Stokes [nach Gleichung (A.44) mit Skalarprodukt und vektorwertiger Funktion \mathbf{f} ; siehe Gleichung (A.36)]:

$$\int_{\Gamma} (\mathbf{n} \times \nabla) \cdot \mathbf{f} \, dS = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{f}) \, dS = \int_{\partial\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{f} \, dL \quad (\text{A.45})$$

Wegunabhängigkeit eines Gradientenfeldes mit einer allgemeinen Funktion ψ als Potential [Spiegel u. a. 2009, Kapitel 5, Seite 83 und 89]:

$$\int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \nabla \psi \, dL = [\psi]_{\partial\Lambda} \quad (\text{A.46})$$

A.3.7 Transportsätze

Substantielle Ableitungen [vgl. [Altenbach 2015](#), Abschnitt 3.4, Seite 89]:

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\psi \quad (\text{A.47a})$$

$$\frac{d(dV)}{dt} = (\nabla \cdot \mathbf{v}) dV \quad (\text{A.47b})$$

$$\frac{d(\mathbf{n}dS)}{dt} = \mathbf{n} \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} - (\nabla\mathbf{v})^T) dS \quad (\text{A.47c})$$

$$\frac{d(\mathbf{t}dL)}{dt} = \mathbf{t} \cdot \nabla\mathbf{v} dL \quad (\text{A.47d})$$

Volumen-Transportsatz bzw. Reynolds-Transport-Theorem für eine skalar-, vektor- oder tensorwertige Funktion ψ mit der Referenzgeschwindigkeit \mathbf{v} [vgl. [Cohen u. a. 2012](#), Abschnitt 3.6, Gleichung (3.35); [Geronimus u. Zeitlin 2000](#), Abschnitt 10.81, Seite 1048, Gleichung MV 88]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \psi dV &= \int_{\Omega} \frac{d\psi}{dt} dV + \int_{\Omega} \frac{d(dV)}{dt} \psi \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial\psi}{\partial t} dV + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \nabla\psi dV + \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v})\psi dV \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial\psi}{\partial t} dV + \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{v})\psi + \mathbf{v} \cdot \nabla\psi dV \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial\psi}{\partial t} dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{v}\psi) dV \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial\psi}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}\psi) dS \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Oberflächen-Transportsatz für eine skalar-, vektor- oder tensorwertige Funktion ψ mit der Referenzgeschwindigkeit \mathbf{v} :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \circ \psi dS &= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ \frac{d\psi}{dt} dS + \int_{\Gamma} \frac{d(\mathbf{n}dS)}{dt} \circ \psi \\ &= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ \frac{\partial\psi}{\partial t} dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ (\mathbf{v} \cdot \nabla\psi) dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} - (\nabla\mathbf{v})^T) \circ \psi dS \\ &= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ \frac{\partial\psi}{\partial t} dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ ((\nabla \cdot \mathbf{v})\psi + \mathbf{v} \cdot \nabla\psi) - (\mathbf{n} \cdot (\nabla\mathbf{v})^T) \circ \psi dS \\ &= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ \frac{\partial\psi}{\partial t} dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \circ (\nabla \cdot (\mathbf{v}\psi)) dS - \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot (\nabla\mathbf{v})^T) \circ \psi dS \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Oberflächen-Transportsatz [nach Gleichung (A.49) mit Skalarprodukt und vektorwertiger Funktion f ; vgl. Abraham u. Becker 1950, Seite 39-40; Geronimus u. Zeitlin 2000, Abschnitt 10.81, Seite 1048, Gleichung MV 90; Davidson 2001, Abschnitt 2.7.2, Gleichung (2.25)]:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{f} \, dS &= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{f})) \, dS - \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T) \cdot \mathbf{f} \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{f})) \, dS - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{v}) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{f})) \, dS - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{v}) \, dS \\
&\quad - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS \\
&\quad + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{f})) \, dS - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{f}) \mathbf{v} + \mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{v}) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS + \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{f}) - \nabla \cdot (\mathbf{f} \mathbf{v})) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS - \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{f} \mathbf{v} - \mathbf{v} \mathbf{f})) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS - \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot ((\mathbf{v} \mathbf{f})^T - \mathbf{v} \mathbf{f})) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{f})) \, dS \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS - \int_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{f}) \, dL \tag{A.50a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \oint_{\Gamma(t)=\partial \Omega(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{f} \, dS &= \oint_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \oint_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS - \oint_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot (\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{f})) \, dS \\
&= \oint_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dS + \oint_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \, dS - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{f})) \, dV \\
&= \oint_{\partial \Omega} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \right) \, dS \\
&= \int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \mathbf{v}(\nabla \cdot \mathbf{f}) \right) \, dV \tag{A.50b}
\end{aligned}$$

Kurven-Transportsatz für eine skalar-, vektor- oder tensorwertige Funktion ψ mit der Referenzgeschwindigkeit \mathbf{v} :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Lambda(t)} \mathbf{t} \circ \psi \, dL &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \circ \frac{d\psi}{dt} \, dL + \int_{\Lambda} \frac{d(\mathbf{t}dL)}{dt} \circ \psi \\ &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \circ \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dL + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \circ (\mathbf{v} \cdot \nabla \psi) \, dL + \int_{\Lambda} (\mathbf{t} \cdot \nabla \mathbf{v}) \circ \psi \, dL \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Kurven-Transportsatz [nach Gleichung (A.49) mit Skalarprodukt und vektorwertiger Funktion \mathbf{f} ; vgl. Geronimus u. Zeitlin 2000, Abschnitt 10.81, Seite 1048, Gleichung MV 94]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Lambda(t)} \mathbf{t} \cdot \mathbf{f} \, dL &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{f}) \, dL + \int_{\Lambda} (\mathbf{t} \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{f} \, dL \\ &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{f}) \, dL + \int_{\Lambda} (\mathbf{t} \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{f} \, dL \\ &\quad - \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \cdot (\nabla \mathbf{f})^T) \, dL + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \cdot (\nabla \mathbf{f})^T) \, dL \\ &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \cdot (\nabla \mathbf{f} - (\nabla \mathbf{f})^T)) \, dL \\ &\quad + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} + \mathbf{v} \cdot (\nabla \mathbf{f})^T) \, dL \\ &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL - \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{f})) \, dL + \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}) \, dL \\ &= \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL - \int_{\Lambda} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{f})) \, dL + [\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}]_{\partial \Lambda} \end{aligned} \quad (\text{A.52a})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \oint_{\Lambda(t)=\partial \Gamma(t)} \mathbf{t} \cdot \mathbf{f} \, dL &= \oint_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL - \oint_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{f})) \, dL + \oint_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot \nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{f}) \, dL \\ &= \oint_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \, dL - \oint_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{f})) \, dL + \int_{\Gamma} \nabla \times (\nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{f})) \, dS \\ &= \oint_{\partial \Gamma} \mathbf{t} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{f}) \right) \, dL \\ &= \int_{\Gamma} \nabla \times \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} - \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{f}) \right) \, dS \end{aligned} \quad (\text{A.52b})$$

B Bedingungen an der freien Oberfläche inkompressibler Strömungen

Im Rahmen dieses Anhangs werden die Grenzbedingungen an der freien Oberfläche inkompressibler Strömungen abgeleitet. Der Ablauf orientiert sich dabei größtenteils an den Arbeiten von [Chen u. a. \[2000\]](#) und [Tuković \[2005\]](#). Im Gegensatz zu allgemeiner Literatur wie beispielsweise [Ferziger u. Perić \[2002, Abschnitt 12.5\]](#), worin das Thema nicht sonderlich detailliert beleuchtet wird, steht hier das Ziel im Vordergrund nutzbare Rand- beziehungsweise (bzw.) Übergangsbedingungen für Druck und Geschwindigkeit in tensorieller Form zu formulieren.

Die Ableitung erfolgt anhand der Momentenbilanz für inkompressible Fluide in Gestalt der modifizierten Impulserhaltungsgleichung [Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.7)]. Die darin enthaltenen Größen sind die Dichte ρ , die Geschwindigkeit \mathbf{u} , die modifizierte Volumenkraft $\tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{f} + \nabla p_f$ [Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.5)], der modifizierte Druck $\tilde{p} = p + p_f$ und Spannungstensor $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ [Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.6)] sowie der Deformationstensor \mathbf{D}_u [Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.3)]. Als wesentliches Hilfsmittel zur Beschreibung der sprunghaften Änderung einer Größe ψ , über die freie Oberfläche Γ_{\pm} hinweg, kommt des Weiteren der Sprung-Operator

$$[[\psi]] = \psi^+ - \psi^- \quad \text{mit} \quad \mathbf{n} = \mathbf{n}^- = -\mathbf{n}^+ \quad (\text{B.1})$$

zum Einsatz [vergleiche (vgl.) Abschnitt 4.4, Gleichung (4.87)]. Die Markierungen „+“ und „-“ kennzeichnen dabei jeweils ein Medium auf einer der beiden Seiten der Grenzfläche. Der Normalenvektor \mathbf{n} ist jedoch stets von „-“ nach „+“ gerichtet, also dem Gebiet des Mediums „-“ zugeordnet.

Die Bedingungen an einer freien Oberfläche nicht mischbarer Fluide teilt man, wie beispielsweise in [Ferziger u. Perić \[2002, Abschnitt 12.5, Gleichung \(12.25\) und \(12.26\)\]](#), [Cohen u. a. \[2012, Abschnitt 8.2\]](#) erklärt wird, in eine kinematische und eine dynamische Bedingung auf. Die kinematische Bedingung stellt dabei Forderungen an die reine Bewegung der Oberfläche und in der dynamischen Bedingung werden die Kräfte an der Oberfläche bilanziert. Beide Bedingungen werden im Zuge der nächsten beiden Abschnitte näher analysiert.

B.1 Kinematische Bedingung

Unter der kinematischen Bedingung versteht man üblicherweise nur die Grundlage dafür, dass eine freie Oberfläche zusammenhält, also nicht infolge einer Bewegung „zerreißen“ würde. Wird hinsichtlich zweier nicht mischbarer Fluide ein Massestrom über die Phasengrenze ausgeschlossen, so ist diese

Voraussetzung dann erfüllt, wenn die Normalkomponente der Geschwindigkeit über die Grenzfläche hinweg stetig verläuft:

$$\llbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \rrbracket = 0 . \quad (\text{B.2})$$

Damit eine tangentialer Impulstransport über die Grenzfläche möglich ist, müssen jedoch auch die tangentialen Komponenten der Geschwindigkeit stetig verlaufen [siehe zum Beispiel (z. B.) [Tuković \[2005, Abschnitt 2.3, Gleichung \(2.16\)\]](#) und [Tuković u. Jasak \[2012, Abschnitt 2, Gleichung \(4\)\]](#)]:

$$\llbracket (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{u} \rrbracket = 0 . \quad (\text{B.3})$$

Zusammengefasst stellen die Gleichungen (B.2) und (B.3) also den Anspruch eines insgesamt stetigen Geschwindigkeitsfeldes:

$$\llbracket \mathbf{u} \rrbracket = 0 . \quad (\text{B.4})$$

B.2 Dynamische Bedingung

Die Ableitung der dynamischen Bedingung geschieht, indem man eine vollständige Kräftebilanz aufstellt und anschließend in tensorieller Form auswertet. Dazu wird die Navier-Stokes-Gleichung zunächst über einen zur freien Oberfläche Γ_{\pm} mittig und normal ausgerichteten Zylinder mit dem Gebiet Ω integriert. Zusätzlich zu den Volumenintegralen wird dabei auch die Oberflächenspannung ς bilanziert, welche tangential an der Schnittkurve des Zylinders mit der Grenzfläche in nach außen gerichteter Binormalenrichtung $\mathbf{s} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$ angreift [vgl. Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.7)]:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \, dV &= \int_{\Omega} \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \, dV + \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{f}} \, dV + \int_{\partial\Gamma_{\pm}} \mathbf{s} \varsigma \, dl \\ &= \int_{\Omega} \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \, dV + \int_{\Omega} \mathbf{f} \, dV + \int_{\Omega} \nabla p_f \, dV + \int_{\partial\Gamma_{\pm}} \mathbf{s} \varsigma \, dl . \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Im Grenzfall einer infinitesimal kleinen Höhe und eines infinitesimal kleinen Radius, also folglich auch eines verschwindenden Volumens, verbleiben nach vorheriger Anwendung des Satzes von Gauß [Anhang A.3.6, Gleichung (A.41)] nur die Integralbeiträge der Stirnflächen sowie der Randkurve [siehe dazu ergänzend Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.8)]:

$$0 = \int_{\Gamma_{\pm}} \llbracket \mathbf{n} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket \, dS + \int_{\Gamma_{\pm}} \llbracket p_f \rrbracket \mathbf{n} \, dS + \int_{\partial\Gamma_{\pm}} \mathbf{s} \varsigma \, dl . \quad (\text{B.6})$$

Dabei liegen die Stirnflächen in infinitesimalem Abstand auf jeweils einer Seite der Grenzfläche Γ_{\pm} und fallen im Grenzfall mit dieser zusammen. Deren entgegengesetzt gerichtete Normalenvektoren werden durch das negative Vorzeichen innerhalb des Sprung-Operators $\llbracket \cdot \rrbracket$ aus Gleichung (B.1) berücksichtigt. Mit Hilfe des verallgemeinerten Satzes von Gauß in Oberflächen-Form [Anhang A.3.6,

Gleichung (A.43)] lässt sich das Linienintegral, welches die Oberflächenspannung beinhaltet, auch in ein Oberflächenintegral transformieren:

$$\int_{\Gamma_{\pm}} \llbracket \mathbf{n} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket \, dS = - \int_{\Gamma_{\pm}} \llbracket p_f \rrbracket \mathbf{n} \, dS - \int_{\Gamma_{\pm}} \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \zeta \, dS . \quad (\text{B.7})$$

Nun können die einzelnen Integrale zusammengefasst und folglich der Integrand separat betrachtet werden. Nach Erweiterung des letzten Terms erhält man über eine kleine Umformung bereits die vollständige dynamische Bedingung in Tensorform:

$$\llbracket \mathbf{n} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket = - \llbracket p_f \rrbracket \mathbf{n} - \zeta \kappa \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta \quad \text{mit} \quad \kappa = -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n} , \quad (\text{B.8})$$

worin κ die doppelte mittlere Krümmung darstellt. Aus der kompakten, aber noch recht unhandlichen dynamischen Bedingung [Gleichung (B.8)] sollen im Folgenden explizite Übergangs- bzw. Randbedingungen für p und \mathbf{u} abgeleitet werden.

B.2.1 Aufteilung in Normalen- und Tangentialrichtung

Über einen ersten Zwischenschritt wird die Kräftebilanz zunächst getrennt sowohl in Normalenrichtung als auch in Tangentialrichtung weiter untersucht. Zur Bedingung in Normalenrichtung gelangt man unmittelbar über skalare Multiplikation der Gleichung (B.8) mit dem Normalenvektor \mathbf{n} :

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{nn} : \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket &= - \llbracket p_f \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} - \zeta \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta \cdot \mathbf{n} \\ &= - \llbracket p_f \rrbracket \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} - \zeta \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \bar{\nabla} \zeta \\ &= - \llbracket p_f \rrbracket \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}}_{=1} - \zeta \kappa \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}}_{=1} - \underbrace{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \bar{\nabla} \zeta}_{=0} \\ \llbracket \mathbf{nn} : \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket &= - \llbracket p_f \rrbracket - \zeta \kappa . \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Die tangentielle Bedingung ergibt sich hingegen, indem die skalare Gleichung (B.9) tensoriell mit \mathbf{n} multipliziert, also wieder in eine vektorielle Darstellung gebracht und schließlich von der vollständigen Form aus Gleichung (B.8) subtrahiert wird:

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{n} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket - \llbracket \mathbf{nn} : \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket \mathbf{n} &= - \llbracket p_f \rrbracket \underbrace{(\mathbf{n} - \mathbf{n})}_{=0} + \zeta \kappa \underbrace{(\mathbf{n} - \mathbf{n})}_{=0} - \bar{\nabla} \zeta \\ \llbracket \mathbf{n} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket - \llbracket \mathbf{nn} : \tilde{\boldsymbol{\tau}} \rrbracket \mathbf{n} &= -\bar{\nabla} \zeta . \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

B.2.2 Ersetzen des Spannungstensors

In einem weiteren Zwischenschritt wird der Spannungstensor in Gleichungen (B.9) und (B.10) unter Zuhilfenahme seiner Definition [Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.6)] ersetzt. Für die Kräftebilanz in

Normalenrichtung erhält man somit:

$$\begin{aligned}
 \llbracket \mathbf{n} : (\tilde{p}\mathbf{I} - 2\eta\mathbf{D}_u) \rrbracket &= \llbracket p_f \rrbracket + \varsigma\kappa \\
 \underbrace{\llbracket \mathbf{n} : \mathbf{I} \rrbracket}_{=1} \llbracket \tilde{p} \rrbracket &= \llbracket p_f \rrbracket + 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D}_u \rrbracket + \varsigma\kappa \\
 \llbracket \tilde{p} \rrbracket &= \llbracket p_f \rrbracket + 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D}_u \rrbracket + \varsigma\kappa .
 \end{aligned} \tag{B.11}$$

Analog ergibt sich für die Tangentialrichtung:

$$\begin{aligned}
 \llbracket \mathbf{n} \cdot (2\eta\mathbf{D}_u - \tilde{p}\mathbf{I}) \rrbracket - \llbracket \mathbf{n} \mathbf{n} : (2\eta\mathbf{D}_u - \tilde{p}\mathbf{I}) \rrbracket \mathbf{n} &= -\bar{\nabla}_\varsigma \\
 \llbracket \tilde{p} \rrbracket \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{I}}_{=\mathbf{n}} - \underbrace{\mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{I}}_{=1} \llbracket \tilde{p} \rrbracket \mathbf{n} + 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u \rrbracket &= 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \bar{\nabla}_\varsigma \\
 \underbrace{\llbracket \tilde{p} \rrbracket \mathbf{n} - \llbracket \tilde{p} \rrbracket \mathbf{n}}_{=0} + 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u \rrbracket &= 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \bar{\nabla}_\varsigma \\
 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u \rrbracket &= 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \bar{\nabla}_\varsigma .
 \end{aligned} \tag{B.12}$$

B.2.3 Normalkomponente des Deformationstensors

Bevor Gleichungen (B.11) und (B.12) Gegenstand weiterer Umformungen werden, soll zunächst die Normalkomponente des Deformationstensors, welche in Gleichung (B.12) auf der linken Seite innerhalb des Sprung-Operators steht, einzeln näher beleuchtet werden. Mit der Definition des Deformationstensors [Abschnitt 5.1.1, Gleichung (5.3)] findet man dazu erst einmal [vgl. Anhang A.3.2]:

$$\begin{aligned}
 2\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u &= \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \\
 &= \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u})^T \\
 &= \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} .
 \end{aligned} \tag{B.13}$$

Über die Definition des Oberflächen-Nabla-Operators [vgl. Anhang A.3, Gleichung (A.24)] mit

$$\nabla \mathbf{u} = \bar{\nabla} \mathbf{u} + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \tag{B.14}$$

lassen sich die Gradienten der Geschwindigkeit aufteilen und daraufhin weiter vereinfachen [Tuković 2005, Abschnitt 2.3, Seite 57-58, Gleichung (2.27) bis (2.31)]:

$$\begin{aligned}
 2\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u &= \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \\
 &= \mathbf{n} \cdot \bar{\nabla} \mathbf{u} + \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \\
 &= \underbrace{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}) \cdot \nabla \mathbf{u}}_{=0} + \underbrace{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}}_{=1} + \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \underbrace{\mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n})}_{\mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}} \\
 &= \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}) \mathbf{n} .
 \end{aligned} \tag{B.15}$$

Ferner lässt sich durch komponentenweises Einsetzen sehr leicht zeigen, dass folgender Zusammenhang zwischen Geschwindigkeitsgradient und Deformationstensor gültig ist [vgl. Anhang A.3,

Gleichung (A.37g):

$$\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u} = \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u . \quad (\text{B.16})$$

Somit ergibt sich nach Austausch des letzten Terms in Gleichung (B.15) mit Gleichung (B.16) die doppelte Normalkomponente des Deformationstensors zu:

$$2\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{nn} : \mathbf{D}_u) \mathbf{n} . \quad (\text{B.17})$$

Mit Kenntnis von Gleichung (B.17) lässt sich nun auch Gleichung (B.12) weiter umschreiben:

$$\begin{aligned} 2 \llbracket \eta \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_u \rrbracket &= 2 \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta \\ \llbracket \eta \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \eta \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \eta (\mathbf{nn} : \mathbf{D}_u) \mathbf{n} \rrbracket &= 2 \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta \\ \llbracket \mathbf{n} \cdot \eta \nabla \mathbf{u} \rrbracket + \underbrace{\llbracket \eta \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \rrbracket}_{\llbracket \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \rrbracket = 0} + \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} &= 2 \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta \\ \llbracket \mathbf{n} \cdot \eta \nabla \mathbf{u} \rrbracket &= \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket \mathbf{n} - \llbracket \eta \rrbracket \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta . \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

B.2.4 Normalspannungsanteil des Deformationstensors

Sowohl in der normalen Bilanz aus Gleichung (B.11) als auch in der tangentialen Bilanz aus Gleichung (B.18) tritt der Normalspannungsanteil des Deformationstensors $2\eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u$ auf. Letzterer soll in diesem Abschnitt konkretisiert und weiter vereinfacht werden. Das Vorgehen dazu findet sich in Chen u. a. [2000, Gleichung (1) bis (6)]. Der Vollständigkeit halber wird hier eine Kurzform gezeigt.

Sortiert man die Terme aus der Zerlegung des Geschwindigkeitsgradienten in Gleichung (B.14) um und bildet anschließend die Spur, so folgt für inkompressible Strömungen mit $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ [siehe Anhang A.3, Gleichung (A.37a) und Gleichung (A.37f)]:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= \text{Sp}(\nabla \mathbf{u}) - \text{Sp}(\bar{\nabla} \mathbf{u}) \\ \mathbf{I} : (\mathbf{nn} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= \mathbf{I} : \nabla \mathbf{u} - \mathbf{I} : \bar{\nabla} \mathbf{u} \\ \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u} &= \underbrace{\nabla \cdot \mathbf{u}}_{=0} - \bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} \\ \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u} &= -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} , \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

und somit als Übergangsbedingung für die Hälfte des Normalspannungsanteils des Deformationstensors unter Anwendung von Gleichung (B.16):

$$\begin{aligned} \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket &= -\llbracket \eta \underbrace{\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}}_{\llbracket \bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} \rrbracket = 0} \rrbracket \\ \llbracket \eta \mathbf{nn} : \mathbf{D}_u \rrbracket &= -\llbracket \eta \rrbracket \bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} . \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

B.2.5 Übergangsbedingungen für Druck und Geschwindigkeit

Wird der Zusammenhang aus Gleichung (B.20) in die normale- und tangentiale Bilanz aus Gleichung (B.11) und Gleichung (B.18) eingesetzt erhält man schließlich zweckdienliche Übergangsbedingungen für den Druck und den Normalengradienten der Geschwindigkeit:

$$\llbracket \tilde{p} \rrbracket = \llbracket p_f \rrbracket - 2 \llbracket \eta \rrbracket (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) + \zeta \kappa \quad \text{mit} \quad \kappa = -\bar{\nabla} \cdot \mathbf{n} \quad (\text{B.21a})$$

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{n} \cdot \eta \nabla \mathbf{u} \rrbracket &= - \llbracket \eta \rrbracket (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} - \llbracket \eta \rrbracket \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \bar{\nabla} \zeta \\ &= - \llbracket \eta \rrbracket \mathbf{n} \cdot \left((\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + (\bar{\nabla} \mathbf{u})^T \right) - \bar{\nabla} \zeta . \end{aligned} \quad (\text{B.21b})$$

Eine sprunghafte Änderung des modifizierten Druckes \tilde{p} ergibt sich aus der Oberflächen-Divergenz der Geschwindigkeit und mit der Oberflächenspannung ζ aus der lokalen (doppelten mittleren) Krümmung κ . Ein Sprung im Normalengradient der Geschwindigkeit \mathbf{u} wird durch den Oberflächen-Gradienten ihrer Normalkomponente bestimmt und hängt zusätzlich von ihrer Oberflächen-Divergenz sowie der Änderung der Krümmung entlang der Oberflächenspannung ab. In beiden Bedingungen spielt natürlich auch eine diskontinuierliche Viskosität η überall dort eine Rolle, wo räumliche Ableitungen der Geschwindigkeit auftreten. Hinsichtlich der Kopplung zwischen Normalenableitung und Normalkomponente der Geschwindigkeit stellt sich eine erstaunliche Ähnlichkeit zum magnetischen Vektorpotential mit Coulomb-Eichung [vgl. Abschnitt 4.4, Gleichung (4.91a)].

B.2.6 Randbedingungen für eine externe Oberfläche eines Fluides

Soll das Fluid auf der Seite „+“ nicht modelliert werden, dann können die Übergangsbedingungen (B.21a) und (B.21b) mit $\tilde{p} = \tilde{p}^-$, $\mathbf{n} \cdot \eta \nabla \mathbf{u} = (\mathbf{n} \cdot \eta \nabla \mathbf{u})^-$, $p_f = p_f^-$ und $\eta = \eta^-$ durch Einführung eines externen Umgebungsdruckes $p_0 = \tilde{p}^+$ in Verbindung mit einem externen Schubspannungsvektor $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}_0$ ($\mathbf{n} \mathbf{n} : \boldsymbol{\tau}_0 = 0$) auch als Randbedingungen für das Fluid auf der Seite „-“ dienen:

$$\tilde{p} = p_0 + p_f - 2\eta (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) - \zeta \kappa \quad (\text{B.22a})$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{\eta} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}_0 - (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} - \bar{\nabla} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{\eta} \bar{\nabla} \zeta . \quad (\text{B.22b})$$

Für eine reibungsfreie Modellierung ($\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}_0 = \mathbf{0}$) einer stationären freien Oberfläche ($\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0$) ergibt sich unter Vernachlässigung der Oberflächenspannung ($\zeta \equiv 0$) die Vereinfachung:

$$\tilde{p} = p_0 + p_f - 2\eta (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{B.23a})$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = - (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} . \quad (\text{B.23b})$$

Dies stellt eine Gleitbedingung für die Geschwindigkeit dar, wobei Gleichung (B.23b) ein Verschwinden der Normalengradienten tangentialer Geschwindigkeitskomponenten fordert.

Literaturverzeichnis

Abraham u. Becker 1950

ABRAHAM, M. ; BECKER, R.: *The classical Theory of Electricity and Magnetism*. 2. Blackie, 1950 [Seite 197]

Aland u. a. 2013

ALAND, S. ; BODEN, S. ; HAHN, A. ; KLINGBEIL, F. ; WEISMANN, M. ; WELLER, S.: Quantitative comparison of Taylor flow simulations based on sharp-interface and diffuse-interface models. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 73 (2013), Nr. 4, S. 344–361. <http://dx.doi.org/10.1002/flid.3802>. – DOI 10.1002/flid.3802 [Seite 24]

Aland u. a. 2010

ALAND, S. ; LOWENGRUB, J. ; VOIGT, A.: Two-phase flow in complex geometries: a diffuse domain approach. In: *Computational Methods in Engineering Science* 77–108 (2010), 1. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21918638> [Seite 24]

Aland u. Voigt 2011

ALAND, S. ; VOIGT, A.: Benchmark computations of diffuse interface models for two-dimensional bubble dynamics. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 69 (2011), S. 747–761. <http://dx.doi.org/10.1002/flid.2611>. – DOI 10.1002/flid.2611 [Seite 24]

Altenbach 2015

ALTENBACH, Holm: *Kontinuumsmechanik*. 3. Springer, 2015 [Seite 31 und 196]

Anderson u. McFadden 1997

ANDERSON, D. M. ; MCFADDEN, G. B.: A diffuse-interface description of internal waves in a near-critical fluid. In: *Physics of Fluids* 9 (1997), Nr. 7, S. 1870–1879. <http://dx.doi.org/10.1063/1.869309>. – DOI 10.1063/1.869309 [Seite 24]

Anderson u. a. 1998

ANDERSON, D. M. ; MCFADDEN, G. B. ; WHEELER, A. A.: Diffuse-interface methods in fluid mechanics. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 30 (1998), S. 139–165. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.139>. – DOI 10.1146/annurev.fluid.30.1.139 [Seite 24]

Anderson u. a. 2000

ANDERSON, D.M. ; MCFADDEN, G.B. ; WHEELER, A.A.: A phase-field model of solidification with convection. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 135 (2000), Nr. 1, S. 175–194. [http://dx.doi.org/10.1016/S0167-2789\(99\)00109-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0167-2789(99)00109-8). – DOI 10.1016/S0167-2789(99)00109-8 [Seite 24]

Anderson 1995

ANDERSON, John D.: *Computational Fluid Dynamics*. McGraw Hill, 1995 [Seite 18]

ANSYS 2008

ANSYS: *ANSYS Classic*. <http://ansys.com>. Version: 2008 [Seite 26]

ANSYS 2017a

ANSYS: *ANSYS*. <http://ansys.com>. Version: 18.1, 2017 [Seite 19]

ANSYS 2017b

ANSYS: *ANSYS CFX*. <http://ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-CFX>. Version: 18.1, 2017 [Seite 20 und 156]

ANSYS 2017c

ANSYS: *ANSYS Fluent*. <http://ansys.com/products/electronics/ansys-maxwell>. Version: 18.1, 2017 [Seite 20 und 156]

ANSYS 2017d

ANSYS: *ANSYS Maxwell*. <http://ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>. Version: 18.1, 2017 [Seite 19]

Apel u. a. 2002

APEL, M. ; FRANKE, D. ; STEINBACH, I.: Simulation of the crystallisation of silicon ribbons on substrate. In: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 72 (2002), Nr. 1-4, S. 201–208. [http://dx.doi.org/10.1016/S0927-0248\(01\)00165-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0927-0248(01)00165-9). – DOI 10.1016/S0927-0248(01)00165-9 [Seite 9 und 12]

Argonne National Laboratory 2015

Argonne National Laboratory: *Message Passing Interface (MPI)*. <http://mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>. Version: 3.1, 2015 [Seite 26 und 169]

Argonne National Laboratory 2017

Argonne National Laboratory: *NEK5000 - A fast and scalable open-source spectral element solver for CFD*. <http://nek5000.mcs.anl.gov>. Version: 17.0.0, 2017 [Seite 20]

Aruliah u. a. 2001

ARULIAH, D. A. ; ASCHER, U. M. ; HABER, E. ; OLDENBURG, D.: A Method for the forward modeling of 3-D electromagnetic quasi-static problems. In: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 11 (2001), Nr. 1, S. 1–21. <http://dx.doi.org/10.1142/S0218202501000702>. – DOI 10.1142/S0218202501000702 [Seite 19, 28, 70 und 71]

Asai 2012

ASAI, Shigeo: *Electromagnetic Processing of Materials*. Springer, 2012 [Seite 1, 2, 25, 56, 65 und 101]

Aulisa u. a. 2007

AULISA, E. ; MANSERVISI, S. ; SCARDOVELLI, R. ; ZALESKI, S.: Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry. In: *Journal of Computational Physics* 225 (2007), Nr. 2, S. 2301–2319. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2007.03.015>. – DOI 10.1016/j.jcp.2007.03.015 [Seite 23]

Baake 1992

BAAKE, Egbert: *Industrielle Elektrowärmetechnik*. Vulkan, 1992 [Seite 1]

Baake u. Nacke 2013

BAAKE, Egbert ; NACKE, Bernard: *Induktives Erwärmen: Wärmen, Härten, Glühen, Löten, Schweißen*. Vulkan, 2013 [Seite 1]

Babuska u. Suri 1994

BABUSKA, I. ; SURI, M.: The p and h-p Versions of the Finite Element Method, Basic Principles and Properties. In: *SIAM Review* 36 (1994), Nr. 4, S. 578–632. <http://dx.doi.org/10.1137/1036141>. – DOI 10.1137/1036141 [Seite 20]

Babuška u. a. 1981

BABUŠKA, I. ; SZABO, B. A. ; KATZ, I N.: The p-version of the finite element method. In: *SIAM journal on numerical analysis* 18 (1981), Nr. 3, 515–545. <http://www.jstor.org/stable/2156869> [Seite 20]

Badea u. a. 2001

BADEA, Eugene A. ; EVERETT, Mark E. ; NEWMAN, Gregory A. ; BÍRÓ, Oszkar: Finite-element analysis of controlled-source electromagnetic induction using Coulomb-gauged potentials. In: *Geophysics* 66 (2001), Nr. 3, S. 786–799. <http://dx.doi.org/10.1190/1.1444968>. – DOI 10.1190/1.1444968 [Seite 19]

Barnard u. a. 1967a

BARNARD, A.C. L. ; DUCK, I.M. ; LYNN, M.S. ; TIMLAKE, W.P.: The Application of Electromagnetic Theory to Electrocardiology: I. Derivation of the Integral Equations. In: *Biophysical Journal* 7 (1967), Nr. 5, S. 443–462. [http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495\(67\)86598-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495(67)86598-6). – DOI 10.1016/S0006-3495(67)86598-6 [Seite 78]

Barnard u. a. 1967b

BARNARD, A.C. L. ; DUCK, I.M. ; LYNN, M.S. ; TIMLAKE, W.P.: The Application of Electromagnetic Theory to Electrocardiology: II. Numerical Solution of the Integral Equations. In: *Biophysical Journal* 7 (1967), Nr. 5, S. 463–491. [http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495\(67\)86599-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495(67)86599-8). – DOI 10.1016/S0006-3495(67)86599-8 [Seite 78]

Batchelor 1967

BATCHELOR, G. K.: *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1967 [Seite 10, 31, 133 und 134]

Bathe 1996

BATHE, K. J.: *Finite Element Procedures*. Prentice-Hall, 1996 [Seite 18, 77 und 141]

Bathe 2002

BATHE, Klaus-Jürgen: *Finite-Elemente-Methoden*. 2. Springer, 2002 [Seite 18]

Beale u. a. 2015

BEALE, Steven B. ; CHOI, Hae-Won ; PHAROAH, Jon G. ; ROTH, Helmut K. ; JASAK, Hrvoje ; JEON, Dong H.: Open-Source Computational Model of a Solid Oxide Fuel Cell. In: *Computer Physics Communications* 200 (2015), S. 15–26. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2015.10.007>. – DOI 10.1016/j.cpc.2015.10.007 [Seite 19, 71 und 156]

Beckstein u. a. 2014

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Electromagnetic flow control in the Ribbon Growth on Substrate (RGS) process. In: *Proceedings of the 9th International PAMIR Conference on Fundamental and Applied MHD* Bd. 2, 2014, S. 196–201 [Seite 5, 15, 16, 27 und 153]

Beckstein u. a. 2015a

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Electromagnetic flow control in the Ribbon Growth on Substrate (RGS) process. In: *Magnetohydrodynamics* 51 (2015), Nr. 2, 385–396. <http://mhd.sal.lv/contents/2015/2/MG.51.2.24.R.html> [Seite 5, 15, 16, 27, 128, 153, 164 und 169]

Beckstein u. a. 2015b

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Free-surface dynamics in the Ribbon Growth on Substrate (RGS) process. In: *Proceedings of the 8th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials*, 2015, S. 167–170 [Seite 27, 163 und 165]

Beckstein u. a. 2016a

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Free-surface dynamics in the Ribbon Growth on Substrate (RGS) process. In: *Proceedings of the International Conference on Heating by Electromagnetic Sources*, 2016, S. 127–134 [Seite 131]

Beckstein u. a. 2016b

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Modelling free-surface dynamics in the Ribbon Growth on Substrate process (RGS). In: *Proceedings of the 10th International PAMIR Conference on Fundamental and Applied MHD*, 2016, S. 257–261 [Seite 131]

Beckstein u. a. 2017a

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Free-surface dynamics in the Ribbon Growth on Substrate (RGS) process. In: *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics* 53 (2017), Nr. S1, S. 43–51. <http://dx.doi.org/10.3233/JAE-162237>. – DOI 10.3233/JAE-162237 [Seite 131, 166 und 167]

Beckstein u. a. 2017b

BECKSTEIN, P. ; GALINDO, V. ; SCHÖNECKER, A. ; GERBETH, G.: Modeling electromagnetically driven free-surface flows motivated by the Ribbon Growth on Substrate (RGS) process. In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 228 (2017), Nr. 1, S.

012018. <http://dx.doi.org/10.1088/1757-899X/228/1/012018>. – DOI 10.1088/1757-899X/228/1/012018 [Seite 55 und 131]

Beckstein u. a. 2017c

BECKSTEIN, Pascal ; GALINDO, Vladimir ; GERBETH, Gunter: Free-surface dynamics in Induction Processing Applications. Version: 2017. <http://www.springer.com/us/book/9783319608457>. In: NÓBREGA, J. M. (Hrsg.) ; JASAK, H. (Hrsg.): *OpenFOAM – Selected papers of the 11th Workshop*. Springer, 2017, In press [Seite 131 und 134]

Beckstein u. a. 2017d

BECKSTEIN, Pascal ; GALINDO, Vladimir ; VUKČEVIĆ, Vuko: Efficient solution of 3D electromagnetic eddy-current problems within the finite volume framework of OpenFOAM. In: *Journal of Computational Physics* 344 (2017), S. 623–646. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2017.05.005>. – DOI 10.1016/j.jcp.2017.05.005 [Seite 55 und 171]

Betten 1986

BETTEN, Josef: *Elastizitäts- und Plastizitätslehre*. Vieweg, 1986 [Seite 140 und 141]

Bichot u. Siarry 2013

BICHOT, Charles-Edmond ; SIARRY, Patrick: *Graph Partitioning*. John Wiley & Sons, 2013 [Seite 160]

Binns u. Lawrenson 1973

BINNS, K. J. ; LAWRENSON, P. J.: *Analysis and Computation of Electric and Magnetic Field Problems*. 2. Pergamon, 1973 [Seite 18, 62 und 81]

Binns u. a. 1992

BINNS, K. J. ; LAWRENSON, P. J. ; TROWBRIDGE, C. W.: *The Analytical and Numerical Solution of Electric and Magnetic Fields*. John Wiley & Sons, 1992 [Seite 18, 62 und 81]

Bíró 1999

BÍRÓ, O.: Edge element formulations of eddy current problems. In: *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering* 169 (1999), S. 391–405. [http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7825\(98\)00165-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00165-0). – DOI 10.1016/S0045-7825(98)00165-0 [Seite 19 und 65]

Bíró u. Preis 1989

BÍRÓ, O. ; PREIS, K.: On the use of the magnetic vector potential in the finite element analysis of three-dimensional eddy currents. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 25 (1989), Nr. 4, S. 3145–3159. <http://dx.doi.org/10.1109/20.106343>. – DOI 10.1109/20.106343 [Seite 19, 60, 62, 63, 65 und 91]

Bíró u. Preis 2000

BÍRÓ, O. ; PREIS, K.: An edge finite element eddy current formulation using a reduced magnetic and a current vector potential. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 36 (2000), Nr. 5, S. 3128–3130. <http://dx.doi.org/10.1109/20.908708>. – DOI 10.1109/20.908708 [Seite 19]

Bíró u. Valli 2007

BÍRÓ, O. ; VALLI, A.: The Coulomb gauged vector potential formulation for the eddy-current problem in general geometry: Well-posedness and numerical approximation. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196 (2007), S. 1890–1904. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2006.10.008>. – DOI 10.1016/j.cma.2006.10.008 [Seite 19 und 65]

Bojarevics u. Pericleous 2003

BOJAREVICS, V ; PERICLEOUS, K: Modelling electromagnetically levitated liquid droplet oscillations. In: *ISIJ International* 43 (2003), Nr. 6, S. 890–898. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.43.890>. – DOI 10.2355/isijinternational.43.890 [Seite 25]

Bojarevics u. a. 2000

BOJAREVICS, V. ; PERICLEOUS, K. ; CROSS, M.: Modeling the dynamics of magnetic semilevitation melting. In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 31 (2000), Nr. 1, S. 179–189. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-000-0143-7>. – DOI 10.1007/s11663-000-0143-7 [Seite 25]

Bojarevics u. a. 2004

BOJAREVICS, V. ; PERICLEOUS, K. ; HARDING, R. A. ; WICKINS, M.: The development and experimental validation of a numerical model of an induction skull melting furnace. In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 35 (2004), Nr. 4, S. 785–803. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-004-0019-3>. – DOI 10.1007/s11663-004-0019-3 [Seite 25]

Bojarevics u. a. 2010

BOJAREVICS, V. ; ROY, A. ; PERICLEOUS, K.: Magnetic levitation of large liquid volume. In: *Magnetohydrodynamics* 46 (2010), Nr. 4, 339–352. <http://mhd.sal.lv/contents/2010/4/MG.46.4.3.R.html> [Seite 25]

Bouffanais u. a. 2007

BOUFFANAIS, Roland ; DEVILLE, Michel O. ; LERICHE, Emmanuel: Large-eddy simulation of the flow in a lid-driven cubical cavity. In: *Physics of Fluids* 19 (2007), Nr. 5, S. 055108. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2723153>. – DOI 10.1063/1.2723153 [Seite 153]

Boussinesq 1897

BOUSSINESQ, M. J.: *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides*. Gauthier-Villars, 1897 [Seite 154]

Brackbill u. a. 1992

BRACKBILL, J.U ; KOTHE, D.B ; ZEMACH, C: A continuum method for modeling surface tension. In: *Journal of Computational Physics* 100 (1992), Nr. 2, S. 335–354. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90240-Y](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y). – DOI 10.1016/0021-9991(92)90240-Y [Seite 23 und 152]

Cai u. a. 2015

CAI, Xuan ; MARSCHALL, Holger ; WÖRNER, Martin ; DEUTSCHMANN, Olaf: Numerical Simulation

of Wetting Phenomena with a Phase-Field Method Using OpenFOAM. In: *Chemical Engineering & Technology* 38 (2015), Nr. 11, S. 1985–1992. <http://dx.doi.org/10.1002/ceat.201500089>. – DOI 10.1002/ceat.201500089 [Seite 25]

Cantwell u. a. 2015

CANTWELL, Chris D. ; MOXEY, David ; COMERFORD, A. ; BOLIS, A. ; ROCCO, G. ; MENGALDO, Gianmarco ; DE GRAZIA, Daniele ; YAKOVLEV, Sergey ; LOMBARD, J.-E. ; EKELSCHOT, D. ; JORDI, B. ; XU, H. ; MOHAMIED, Y. ; ESKILSSON, C. ; NELSON, B. ; VOS, P. ; BIOTTO, C. ; KIRBY, R. M. ; SHERWIN, S. J.: Nektar++: An open-source spectral/hp element framework. In: *Computer Physics Communications* 192 (2015), S. 205–219. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2015.02.008>. – DOI 10.1016/j.cpc.2015.02.008 [Seite 20]

Capoglu 2017

CAPOGLU, Ilker R.: *Angora - A free finite-difference time-domain (FDTD) electromagnetic simulation package*. <http://angorafdtd.org/>. Version: 0.2, 2017 [Seite 18]

Cardiff u. a. 2016

CARDIFF, Philip ; TUKOVIĆ, Željko ; JASAK, Hrvoje ; IVANKOVIĆ, Aliž: A block-coupled Finite Volume methodology for linear elasticity and unstructured meshes. In: *Computers & Structures* 175 (2016), S. 100–122. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruc.2016.07.004>. – DOI 10.1016/j.compstruc.2016.07.004 [Seite 19 und 71]

Carpenter 1977

CARPENTER, C. J.: Comparison of alternative formulations of 3-dimensional magnetic-field and eddy-current problems at power frequencies. In: *Proceedings of the Institution of Electrical Engineers* 124 (1977), Nr. 11, S. 1026–1034. <http://dx.doi.org/10.1049/piee.1977.0211>. – DOI 10.1049/piee.1977.0211 [Seite 19]

Chen u. a. 2014

CHEN, Goong ; XIONG, Qingang ; MORRIS, Philip J. ; PATERSON, Eric G. ; SERGEEV, Alexey ; WANG, Y.: OpenFOAM for Computational Fluid Dynamics. In: *Notices of the AMS* 61 (2014), Nr. 4, 354–363. <http://www.ams.org/journals/notices/201404/rnoti-p354.pdf> [Seite 32]

Chen u. a. 2000

CHEN, Kang P. ; SARIC, William ; STONE, Howard A.: On the deviatoric normal stress on a slip surface. In: *Physics of Fluids* 12 (2000), Nr. 12, S. 3280–3281. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1321259>. – DOI 10.1063/1.1321259 [Seite 199 und 203]

Cheng u. Cheng 2005

CHENG, A. ; CHENG, D. T.: Heritage and early history of the boundary element method. In: *Engineering Analysis with Boundary Elements* 29 (2005), S. 268–302. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enganabound.2004.12.001>. – DOI 10.1016/j.enganabound.2004.12.001 [Seite 43]

Cobham 2016a

Cobham: *Opera-2D Design Software*. <http://cobham.com>. Version: 16.0, 2016 [Seite 15, 100 und 173]

Cobham 2016b

Cobham: *Opera-3D Design Software*. <http://cobham.com>. Version: 16.0, 2016 [Seite 19, 100 und 173]

Cohen u. a. 2012

COHEN, I. M. ; KUNDU, P. K. ; DOWLING, David R.: *Fluid Mechanics*. 3. Elsevier Academic Press, 2012 [Seite 19, 31, 134, 136, 196 und 199]

COMSOL 2016

COMSOL: *COMSOL Multiphysics*. <http://comsol.com>. Version: 5.2, 2016 [Seite 19, 128 und 164]

Constant u. a. 2016

CONSTANT, Eddy ; LI, C. ; FAVIER, Julien ; MELDI, M. ; MELIGA, P. ; SERRE, E.: Implementation of a discrete Immersed Boundary Method in OpenFOAM. In: *arXiv preprint arXiv:1609.04364* (2016), 1–37. <https://arxiv.org/abs/1304.5514> [Seite 25]

Courant u. a. 1928

COURANT, R. ; FRIEDRICHS, K. ; LEWY, H.: Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. In: *Mathematische Annalen* 100 (1928), 32–74. <http://eudml.org/doc/159283> [Seite 47]

Crank u. Nicolson 1947

CRANK, John ; NICOLSON, Phyllis: A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 43 (1947), Nr. 1, S. 207–226. <http://dx.doi.org/10.1017/S03050004100023197>. – DOI 10.1017/S03050004100023197 [Seite 48]

Crockett u. a. 2010

CROCKETT, R. K. ; COLELLA, P. ; GRAVES, D. T.: A Cartesian grid embedded boundary method for solving the Poisson and heat equations with discontinuous coefficients in three dimensions. In: *Journal of Computational Physics* 230 (2010), S. 613–628. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2010.12.017>. – DOI 10.1016/j.jcp.2010.12.017 [Seite 88]

Cross u. a. 1996

CROSS, M. ; CHOW, P. ; BAILEY, C. ; CROFT, N. ; EWER, J. ; LEGGETT, P. ; MCMANUS, K. ; PERICLEOUS, K. A. ; PATEL, M. K.: PHYSICA – A software environment for the modeling of multi-physics phenomena. In: *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik* 76 (1996), S. 105–108. <http://dx.doi.org/10.1002/zamm.19960760211>. – DOI 10.1002/zamm.19960760211 [Seite 19 und 27]

CSC - IT Center for Science 2017

CSC - IT Center for Science: *Elmer - An open source multiphysical simulation software*. <http://csc.fi/elmer>. Version: 8.3, 2017 [Seite 18]

Dai u. Schmidt 2005

DAI, Meizhong ; SCHMIDT, David P.: Adaptive tetrahedral meshing in free-surface flow. In: *Journal of Computational Physics* 208 (2005), Nr. 1, S. 228–252. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.02.012>. – DOI 10.1016/j.jcp.2005.02.012 [Seite 22]

Darwish u. a. 2009

DARWISH, M. ; SRAJ, I. ; MOUKALLED, F.: A coupled finite volume solver for the solution of incompressible flows on unstructured grids. In: *Journal of Computational Physics* 228 (2009), Nr. 1, S. 180–201. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.08.027>. – DOI 10.1016/j.jcp.2008.08.027 [Seite 32 und 71]

Davidson 2001

DAVIDSON, P. A.: *An Introduction to Magnetohydrodynamics*. Cambridge University Press, 2001 [Seite 1, 10, 11, 12, 15, 16, 57, 58, 59, 63, 64, 67, 101, 153, 154 und 197]

Davidson u. Hunt 1987

DAVIDSON, P. A. ; HUNT, J. C. R.: Swirling recirculating flow an a liquid-metal column generated by a rotating magnetic field. In: *Journal of Fluid Mechanics* 185 (1987), S. 67–106. <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112087003082>. – DOI 10.1017/S0022112087003082 [Seite 68]

Demirdžić u. a. 1997

DEMIRDŽIĆ, I. ; MUZAFERIJA, S. ; PERIĆ, M.: Benchmark solutions of some structural analysis problems using finite-volume method and multigrid acceleration. In: *International journal for numerical methods in engineering* 40 (1997), Nr. 10, S. 1893–1908. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19970530\)40:10<1893::AID-NME146>3.0.CO;2-L](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19970530)40:10<1893::AID-NME146>3.0.CO;2-L). – DOI 10.1002/(SICI)1097-0207(19970530)40:10<1893::AID-NME146>3.0.CO;2-L [Seite 19]

Demirdžić u. Perić 1988

DEMIRDŽIĆ, I. ; PERIĆ, M.: Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 8 (1988), Nr. 9, S. 1037–1050. <http://dx.doi.org/10.1002/flid.1650080906>. – DOI 10.1002/flid.1650080906 [Seite 22 und 39]

Denner u. van Wachem 2015

DENNER, Fabian ; WACHEM, Berend G.: Numerical time-step restrictions as a result of capillary waves. In: *Journal of Computational Physics* 285 (2015), S. 24–40. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.01.021>. – DOI 10.1016/j.jcp.2015.01.021 [Seite 152]

Deshpande u. a. 2012

DESHPANDE, Suraj S. ; ANUMOLU, Lakshman ; TRUJILLO, Mario F.: Evaluating the performance of the two-phase flow solver interFoam. In: *Computational Science & Discovery* 5 (2012), Nr. 1, S. 014016. <http://dx.doi.org/10.1088/1749-4699/5/1/014016>. – DOI 10.1088/1749-4699/5/1/014016 [Seite 23 und 25]

Desjardins u. a. 2008

DESJARDINS, O. ; MOUREAU, V. ; PITSCH, H.: An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. In: *Journal of Computational Physics* 227

(2008), Nr. 18, S. 8395–8416. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.05.027>. – DOI 10.1016/j.jcp.2008.05.027 [Seite 88 und 89]

Deville u. a. 2002

DEVILLE, M. O. ; FISCHER, P. F. ; MUND, E. H.: *High-Order Methods for Incompressible Fluid Flow*. Cambridge University Press, 2002 [Seite 20]

Dhondt 2004

DHONDT, Guido: *The Finite Element Method for Three-dimensional Thermomechanical Applications*. John Wiley & Sons, 2004 [Seite 18]

Dhondt 2017

DHONDT, Guido: *CalculiX - A Free Software Three-Dimensional Structural Finite Element Program*. <http://calculix.de>. Version: 2.12, 2017 [Seite 18]

Djambazov u. a. 2015

DJAMBAZOV, G. ; BOJAREVICS, V. ; PERICLEOUS, K. ; CROFT, N.: Finite volume solutions for electromagnetic induction processing. In: *Applied Mathematical Modelling* 39 (2015), Nr. 16, S. 4733–4745. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2015.03.059>. – DOI 10.1016/j.apm.2015.03.059 [Seite 19, 28, 71 und 82]

Donea 1983

DONEA, J.: Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite element methods. In: BELYTSCHKO, T. (Hrsg.) ; HUGHES, T. R. J. (Hrsg.): *Computational methods for transient analysis*. Elsevier, 1983, S. 473–516 [Seite 22 und 39]

Donea u. Huerta 2003

DONEA, Jean ; HUERTA, Antonio: *Finite Element Methods for Flow Problems*. John Wiley & Sons, 2003 [Seite 18]

Dongarra u. a. 2003

DONGARRA, Jack ; FOSTER, Ian ; FOX, Geoffrey ; GROPP, William ; KENNEDY, Ken ; TORCZON, Linda ; WHITE, Andy: *Sourcebook of Parallel Computing*. Morgan Kaufmann Publishers San Francisco, 2003 [Seite 155, 159, 160 und 161]

Du u. a. 2006

DU, Jian ; FIX, Brian ; GLIMM, James ; JIA, Xicheng ; LI, Xiaolin ; LI, Yuanhua ; WU, Lingling: A simple package for front tracking. In: *Journal of Computational Physics* 213 (2006), Nr. 2, S. 613–628. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.08.034>. – DOI 10.1016/j.jcp.2005.08.034 [Seite 21]

Easter u. a. 2011

EASTER, S ; BOJAREVICS, V ; PERICLEOUS, K: Numerical modelling of liquid droplet dynamics in microgravity. In: *Journal of Physics: Conference Series* 327 (2011), S. 012027. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/327/1/012027>. – DOI 10.1088/1742-6596/327/1/012027 [Seite 25]

Edwards u. a. 1991

EDWARDS, D.A. ; BRENNER, H. ; WASAN, D.T.: *Interfacial transport processes and rheology*. Butterworth-Heinemann, 1991 [Seite 195]

Électricité de France 2017

Électricité de France: *Code_Saturne - A free, general-purpose computational fluid dynamics computer software package*. <http://code-saturne.org>. Version: 5.0.0, 2017 [Seite 19]

Ehrhard 2015

EHRHARD, Sebastian: *Numerische Simulation von MHD-Strömungen in inhomogenen, instationären Magnetfeldern*, Karlsruher Institut für Technologie, Diss., 2015 [Seite 19, 27 und 65]

Elmore u. Heald 1969

ELMORE, William C. ; HEALD, Mark A.: *Physics of Waves*. McGraw Hill, 1969 [Seite 151]

Emmerich 2003

EMMERICH, H.: *The Diffuse Interface Approach in Materials Science: Thermodynamic Concepts and Applications of Phase-Field Models*. Springer, 2003 [Seite 24]

Enright u. a. 2002

ENRIGHT, Douglas ; FEDKIW, Ronald ; FERZIGER, Joel ; MITCHELL, Ian: A Hybrid Particle Level Set Method for Improved Interface Capturing. In: *Journal of Computational Physics* 183 (2002), Nr. 1, S. 83–116. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7166>. – DOI 10.1006/jcph.2002.7166 [Seite 24]

Fautrelle u. a. 2003

FAUTRELLE, Yves ; PERRIER, Damien ; ETAY, Jacqueline: Free surface controlled by magnetic fields. In: *ISIJ international* 43 (2003), Nr. 6, S. 801–806. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.43.801>. – DOI 10.2355/isijinternational.43.801 [Seite 2 und 25]

Fazio u. a. 2015

FAZIO, C. ; SOBOLEV, V.P. ; AERTS, A. ; GAVRILOV, S. ; LAMBRINOU, K. ; SCHUURMANS, P. ; GESSI, A. ; AGOSTINI, P. ; CIAMPICHETTI, A. ; MARTINELLI, L. ; GOSSE, S. ; BALBAUD-CELERIER, F. ; COUROUAU, J.L. ; TERLAIN, A. ; LI, N. ; GLASBRENNER, H. ; NEUHAUSEN, J. ; HEINITZ, S. ; ZANINI, L. ; DAI, Y. ; JOLKKONEN, M. ; KURATA, Y. ; OBARA, T. ; THIOILLIERE, N. ; MARTIN-MUNOZ, F.J. ; HEINZEL, A. ; WEISENBURGER, A. ; MUELLER, G. ; SCHUMACHER, G. ; JIANU, A. ; PACIO, J. ; MAROCCO, L. ; STIEGLITZ, R. ; WETZEL, T. ; DAUBNER, M. ; LITFIN, K. ; VOGT, J.B. ; PRORIOL-SERRE, I. ; GORSE, D. ; ECKERT, S. ; STEFANI, F. ; BUCHENAU, D. ; WONDRAK, T. ; HWANG, I.S.: *Handbook on Lead-bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermal-hydraulics and Technologies - 2015 Edition / Organisation for Economic Co-Operation and Development*. Version: 2015. http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/46/133/46133907.pdf. 2015 (2). – Forschungsbericht. – Nuclear Energy Agency - OECD/NEA [Seite 1]

Fedkiw u. a. 1999

FEDKIW, R. P. ; ASLAM, T. ; XU, S.: The Ghost Fluid Method for Deflagration and Detonation

Discontinuities. In: *Journal of Computational Physics* 154 (1999), Nr. 2, S. 393–427. <http://dx.doi.org/doi.org/10.1006/jcph.1999.6320>. – DOI doi.org/10.1006/jcph.1999.6320 [Seite 88]

Feel++ Consortium 2017

Feel++ Consortium: *Feel++ - Finite Element Embedded Library in C++*. <http://feelpp.org>. Version: 0.103.2, 2017 [Seite 20]

Felippa 2001

FELIPPA, C. A.: A historical outline of matrix structural analysis: a play in three acts. In: *Computers & Structures* 79 (2001), Nr. 14, S. 1313–1324. [http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7949\(01\)00025-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7949(01)00025-6). – DOI 10.1016/S0045-7949(01)00025-6 [Seite 18]

Ferziger u. Perić 2002

FERZIGER, J. H. ; PERIĆ, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. Springer, 2002 [Seite 18, 19, 20, 31, 33, 37, 38, 42, 46, 47, 65, 134, 136, 156, 157, 158, 159 und 199]

Francois u. a. 2006

FRANCOIS, Marianne M. ; CUMMINS, Sharen J. ; DENDY, Edward D. ; KOTHE, Douglas B. ; SICILIAN, James M. ; WILLIAMS, Matthew W.: A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. In: *Journal of Computational Physics* 213 (2006), Nr. 1, S. 141–173. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.08.004>. – DOI 10.1016/j.jcp.2005.08.004 [Seite 23]

Fröhlich 2006

FRÖHLICH, Jochen: *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner, 2006 [Seite 20, 136, 145, 153 und 154]

Fujisaki u. a. 2000

FUJISAKI, K. ; WAJIMA, K. ; OHKI, M.: 3D magnetohydrodynamics analysis method for free surface molten metal. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 36 (2000), Nr. 4, S. 1325–1328. <http://dx.doi.org/10.1109/20.877683>. – DOI 10.1109/20.877683 [Seite 26]

Fujisaki u. Ueyama 1998

FUJISAKI, Keisuke ; UYAMA, Takatsugu: Magnetohydrodynamic calculation for free surfaces. In: *Journal of Applied Physics* 83 (1998), Nr. 11, S. 6356–6358. <http://dx.doi.org/10.1063/1.367687>. – DOI 10.1063/1.367687 [Seite 26]

Gagliardini u. Zwinger 2008

GAGLIARDINI, O. ; ZWINGER, T.: The ISMIP-HOM benchmark experiments performed using the Finite-Element code Elmer. In: *The Cryosphere* (2008). <http://dx.doi.org/10.5194/tc-2-67-2008>. – DOI 10.5194/tc-2-67-2008 [Seite 18]

Gagnoud u. a. 2015

GAGNOUD, A. ; SCAPOLAN, R. ; COUVAT, Y. Du T.: Electromagnetic modeling with 3D integral method. In: *8th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials*, 2015 [Seite 82]

Ganesan 2006

GANESAN, S.: *Finite element methods on moving meshes for free surface and interface flows*, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Diss., 2006 [Seite 22]

Gao u. a. 2016

GAO, Lei ; SHI, Zhe ; LI, Donghui ; YANG, Yindong ; ZHANG, Guifang ; McLEAN, Alexander ; CHATTOPADHYAY, Kinnor: Dimensionless Analysis and Mathematical Modeling of Electromagnetic Levitation (EML) of Metals. In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 47 (2016), Nr. 1, S. 67–75. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-015-0457-0>. – DOI 10.1007/s11663-015-0457-0 [Seite 179 und 180]

Geronimus u. Zeitlin 2000

GERONIMUS, J. ; ZEITLIN, M. ; JEFFREY, Alan (Hrsg.) ; ZWILLINGER, Daniel (Hrsg.): *Table of Integrals, Series and Products*. 6. Academic Press, 2000 [Seite 196, 197 und 198]

Geršgorin 1931

GERŠGORIN, S.: Über die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix. In: *Bulletin de l'Académie des Sciences de l'URSS. Classe des sciences mathématiques et na* 6 (1931), 749–754. <http://mi.mathnet.ru/eng/izv5235> [Seite 79]

Geuzaine 2008

GEUZAINÉ, C.: GetDP: a general finite-element solver for the de Rham complex. In: *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics* 7 (2008), Nr. 1, S. 1010603–1010604. <http://dx.doi.org/10.1002/pamm.200700750>. – DOI 10.1002/pamm.200700750 [Seite 18]

Glimm u. a. 1988

GLIMM, James ; GROVE, John ; LINDQUIST, Brent ; MCBRYAN, Oliver A. ; TRYGGVASON, Gretar: The Bifurcation of Tracked Scalar Waves. In: *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 9 (1988), Nr. 1, S. 61–79. <http://dx.doi.org/10.1137/0909006>. – DOI 10.1137/0909006 [Seite 21]

Gorbachev u. a. 1974

GORBACHEV, L.P. ; NIKITIN, N.V. ; USTINOV, A.L.: Magnetohydrodynamic rotation of an electrically conductive liquid in a cylindrical vessel of finite dimensions. In: *Magnetohydrodynamics* 10 (1974), Nr. 4, 406–414. <http://mhd.sal.lv/contents/1974/4/MG.10.4.4.R.html> [Seite 101 und 104]

Grants u. a. 2013

GRANTS, I. ; GALINDO, V. ; GERBETH, G.: Linear and non-linear stability of melt flows in magnetic fields. In: *The European Physical Journal Special Topics* 220 (2013), Nr. 1, S. 215–225. <http://dx.doi.org/10.1140/epjst/e2013-01809-0>. – DOI 10.1140/epjst/e2013-01809-0 [Seite 101]

Grants u. Gerbeth 2004

GRANTS, I. ; GERBETH, G.: Stability of melt flow due to a traveling magnetic field in a closed ampoule. In: *Journal of Crystal Growth* 269 (2004), Nr. 2–4, S. 630–638. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.05.011>

[org/10.1016/j.jcrysgro.2004.05.090](https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.05.090). – DOI 10.1016/j.jcrysgro.2004.05.090 [Seite 101 und 110]

Griebel u. a. 1995

GRIEBEL, Michael ; DORNSEIFER, Thomas ; NEUNHOEFFER, Tilman: *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Vieweg, 1995 [Seite 21]

Griffiths 1999

GRIFFITHS, D.J.: *Introduction to Electrodynamics*. 3. Prentice Hall, 1999 [Seite 7, 8, 10, 56, 57, 65, 81 und 99]

Grote u. Feldhusen 2011

GROTE, K.-H. ; FELDHUSEN, J.: *Dubbel - Taschenbuch für den Maschinenbau*. 23. Springer, 2011 [Seite 65]

Gueyffier u. a. 1999

GUEYFFIER, Denis ; LI, Jie ; NADIM, Ali ; SCARDOVELLI, Ruben ; ZALESKI, Stéphane: Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. In: *Journal of Computational Physics* 152 (1999), Nr. 2, S. 423–456. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.6168>. – DOI 10.1006/jcph.1998.6168 [Seite 23]

Gustafson u. Abe 1998a

GUSTAFSON, Karl ; ABE, Takehisa: The third boundary condition – was it Robin's? In: *The Mathematical Intelligencer* 20 (1998), Nr. 2, S. 63–71. <http://dx.doi.org/10.1007/BF03024402>. – DOI 10.1007/BF03024402 [Seite 44]

Gustafson u. Abe 1998b

GUSTAFSON, Karl ; ABE, Takehisa: (Victor) Gustave Robin: 1855–1897. In: *The Mathematical Intelligencer* 20 (1998), Nr. 2, S. 47–53. <http://dx.doi.org/10.1007/BF03025298>. – DOI 10.1007/BF03025298 [Seite 44]

Haber u. a. 2000

HABER, E. ; ASCHER, U.M. ; ARULIAH, D.A. ; OLDENBURG, D.W.: Fast Simulation of 3D Electromagnetic Problems Using Potentials. In: *Journal of Computational Physics* 163 (2000), Nr. 1, S. 150–171. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2000.6545>. – DOI 10.1006/jcph.2000.6545 [Seite 19, 28, 70 und 71]

Haber u. Heldmann 2007

HABER, Eldad ; HELDMANN, Stefan: An OcTree Multigrid Method for Quasi-Static Maxwell's Equations with Highly Discontinuous Coefficients. In: *Journal of Computational Physics* 223 (2007), Nr. 2, S. 783–796. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.10.012>. – DOI 10.1016/j.jcp.2006.10.012 [Seite 28]

Hahn u. Schönecker 2004

HAHN, G. ; SCHÖNECKER, A.: New crystalline silicon ribbon materials for photovoltaics. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 16 (2004), Nr. 50, S. R1615–R1648. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/16/50/R1615>. – DOI 10.1088/0953-8984/16/50/R1615

[org/10.1088/0953-8984/16/50/R03](https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/50/R03). – DOI 10.1088/0953-8984/16/50/R03 [Seite 5, 7, 8, 9 und 12]

Hairer u. a. 2008

HAIRER, E. ; NORSETT, S. P. ; WANNER, G.: *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*. 3. Springer, 2008 [Seite 48]

Hairer u. Wanner 2002

HAIRER, E. ; WANNER, G.: *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems*. 2. Springer, 2002 [Seite 48]

Hecht 2012

HECHT, F.: New development in FreeFem++. In: *Journal of Numerical Mathematics* 20 (2012), Nr. 3-4, S. 251–265. <http://dx.doi.org/10.1515/jnum-2012-0013>. – DOI 10.1515/jnum-2012-0013 [Seite 18]

Hecht 2017

HECHT, F.: *FreeFEM++ - A partial differential equation solver*. <http://www.freefem.org>. Version: 3.56, 2017 [Seite 18]

Helmholtz 1868

HELMHOLTZ, H. L. F.: Über discontinuierlich Flüssigkeitsbewegungen. In: *Monatsberichte Königlich Preussische Akademie der Wissenschaften Berlin*, 1868, S. 215–228 [Seite 150]

Herrmann 2007

HERRMANN, Norbert: *Höhere Mathematik für Ingenieure, Physiker und Mathematiker*. Oldenbourg, 2007 [Seite 47 und 48]

Hess u. a. 2011

HESS, U. ; JOOS, S. ; SEREN, S. ; HAHN, G. ; WEBER, T. ; PICHON, P.-Y. ; SCHÖNECKER, A.: First Ribbon Growth on Substrate (RGS) Solar Cells with Selective Emitter. In: *26th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*, 2011 [Seite 5]

Hirt u. Nichols 1981

HIRT, C. W. ; NICHOLS, B. D.: Volume of fluid (VOF) methods for the dynamics of free boundaries. In: *Journal of Computational Physics* 39 (1981), S. 201–225. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5). – DOI 10.1016/0021-9991(81)90145-5 [Seite 23]

Horesh u. Haber 2011

HORESH, Lior ; HABER, Eldad: A Second Order Discretization of Maxwell's Equations in the Quasi-Static Regime on OcTree Grids. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 33 (2011), Nr. 5, S. 2805–2822. <http://dx.doi.org/10.1137/100798508>. – DOI 10.1137/100798508 [Seite 28]

Huang u. a. 2007

HUANG, J. ; CARRICA, P. M. ; STERN, F.: Coupled ghost fluid/two-phase level set method for curvilinear body-fitted grids. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 44 (2007),

S. 867–897. <http://dx.doi.org/10.1002/flid.1499>. – DOI 10.1002/flid.1499 [Seite 88 und 89]

Huang 2010

HUANG, Zhe: *OpenFOAM Simulation for Electromagnetic Problems*, Chalmers University of Technology, Diplomarbeit, 2010 [Seite 19 und 27]

Hughes u. a. 1981

HUGHES, T. J. ; LIU, W. K. ; ZIMMERMANN, T. K.: Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 29 (1981), S. 329–349. [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(81\)90049-9](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(81)90049-9). – DOI 10.1016/0045-7825(81)90049-9 [Seite 22 und 39]

Hyman 1984

HYMAN, James M.: Numerical methods for tracking interfaces. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 12 (1984), Nr. 1-3, S. 396–407. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789\(84\)90544-X](http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789(84)90544-X). – DOI 10.1016/0167-2789(84)90544-X [Seite 20 und 21]

Ikebe u. a. 1969

IKEBE, Yasuhiko ; LYNN, M. S. ; TIMLAKE, William P.: The Numerical Solution of the Integral Equation Formulation of the Single Interface Neumann Problem. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 6 (1969), Nr. 3, S. 334–346. <http://dx.doi.org/10.1137/0706031>. – DOI 10.1137/0706031 [Seite 78]

Imperial College London and University of Utah 2017

Imperial College London and University of Utah: *Nektar++ - Spectral/hp Element Framework*. <http://www.nektar.info>. Version: 4.4.0, 2017 [Seite 20]

Issa 1986

ISSA, R.I.: Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. In: *Journal of Computational Physics* 62 (1986), Nr. 1, S. 40–65. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90099-9](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(86)90099-9). – DOI 10.1016/0021-9991(86)90099-9. – ISSN 0021-9991 [Seite 142 und 145]

Jackson 1975

JACKSON, John D.: *Classical Electrodynamics*. 2. John Wiley & Sons, 1975 [Seite 12, 56, 57, 60, 62, 81, 89, 99 und 108]

Jacqmin 1996

JACQMIN, D.: An energy approach to the continuum surface tension method. In: *AIAA Meeting Paper* 96 (1996), S. 1–11. <http://dx.doi.org/10.2514/6.1996-858>. – DOI 10.2514/6.1996-858 [Seite 23 und 24]

Jacqmin 2000

JACQMIN, D.: Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. In: *Journal of Fluid Mechanics* 402 (2000), S. 57–88. <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112099006874>. – DOI 10.1017/S0022112099006874 [Seite 24]

Jahandari u. Farquharson 2015

JAHANDARI, H. ; FARQUHARSON, C.G.: Finite-volume modelling of geophysical electromagnetic data on unstructured grids using potentials. In: *Geophysical Journal International* 202 (2015), Nr. 3, S. 1859–1876. <http://dx.doi.org/10.1190/segam2015-5867560.1>. – DOI 10.1190/segam2015-5867560.1 [Seite 28 und 71]

Jakobsen 2014

JAKOBSEN, Hugo A.: *Chemical Reactor Modeling: Multiphase Reactive Flows*. 2. Springer, 2014 [Seite 195]

Jareteg u. a. 2014

JARETEG, K. ; VUKČEVIĆ, V. ; JASAK, H.: pUCoupledFoam - An open source coupled incompressible pressure-velocity solver based on foam-extend. In: *9th OpenFOAM Workshop*, 2014 [Seite 32 und 72]

Jasak 2009

JASAK, H.: Dynamic Mesh Handling in OpenFOAM. In: *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, 2009 [Seite 32]

Jasak u. Tuković 2007

JASAK, H. ; TUKOVIĆ, Ž.: Automatic mesh motion for the unstructured finite volume method. In: *Transactions of FAMENA* 30 (2007), Nr. 2, 1–18. <http://powerlab.fsb.hr/ped/kturbo/openfoam/docs/meshmotionjcp.pdf> [Seite 22, 25, 32, 39, 42, 139, 140 und 141]

Jasak u. a. 1999

JASAK, H. ; WELLER, H.G. ; GOSMAN, A.D.: High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 31 (1999), Nr. 2, S. 431–449. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0363\(19990930\)31:2<431::AID-FLD884>3.0.CO;2-T](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(19990930)31:2<431::AID-FLD884>3.0.CO;2-T). – DOI 10.1002/(SICI)1097-0363(19990930)31:2<431::AID-FLD884>3.0.CO;2-T [Seite 42 und 166]

Jasak 1996

JASAK, Hrvoje: *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*, Imperial College London, Diss., 1996 [Seite 19, 31, 32, 34, 35, 36, 37, 38, 41, 42, 45, 49, 51, 52, 53, 55, 65, 107, 131, 136, 145 und 183]

Jasak 2006

JASAK, Hrvoje: Multi-physics simulations in continuum mechanics. In: *Proceedings of 5th International Conference of Croatian Society of Mechanics*, 2006 [Seite 19]

Jasak 2007

JASAK, Hrvoje: Updated Lagrangian finite volume solver for large deformation dynamic response of elastic body. In: *Transactions of FAMENA* 31 (2007), Nr. 1, 55. http://powerlab.fsb.hr/ped/kturbo/openfoam/papers/TukovicJasak_NonLinElastodynamics_FAMENA_18-06-2007.pdf [Seite 19]

Jasak u. a. 2014

JASAK, Hrvoje ; RIGLER, Damir ; TUKOVIĆ, Željko: Finite volume immersed boundary method for turbulent flow simulations. In: *9th OpenFOAM Workshop*, 2014 [Seite 25]

Jasak u. Weller 2000

JASAK, Hrvoje ; WELLER, H.G.: Application of the finite volume method and unstructured meshes to linear elasticity. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 48 (2000), Nr. 2, S. 267–287. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(20000520\)48:2<267::AID-NME884>3.0.CO;2-Q](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(20000520)48:2<267::AID-NME884>3.0.CO;2-Q). – DOI 10.1002/(SICI)1097-0207(20000520)48:2<267::AID-NME884>3.0.CO;2-Q [Seite 19, 139 und 141]

Jeevanjee 2011

JEEVANJEE, Nadir: *An Introduction to Tensors and Group Theory for Physicists*. Birkhäuser, 2011 [Seite 183]

Jeong u. a. 2010

JEONG, H.-M. ; CHUNG, H.-S. ; LEE, T.-W.: Computational simulations of Ribbon-Growth on substrate for photovoltaic silicon wafer. In: *Journal of Crystal Growth* 312 (2010), Nr. 4, S. 555–562. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2009.11.031>. – DOI 10.1016/j.jcrysgr.2009.11.031 [Seite 9 und 12]

Johansen u. Colella 1998

JOHANSEN, H. ; COLELLA, P.: A Cartesian Grid Embedded Boundary Method for Poisson's Equation on Irregular Domains. In: *Journal of Computational Physics* 147 (1998), S. 60–85. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.5965>. – DOI 10.1006/jcph.1998.5965 [Seite 88]

Johnson u. Tezduyar 1994

JOHNSON, A. A. ; TEZDUYAR, T. E.: Mesh update strategies in parallel finite element computations of flow problems with moving boundaries and interfaces. In: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 119 (1994), S. 73–94. [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(94\)00077-8](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(94)00077-8). – DOI 10.1016/0045-7825(94)00077-8 [Seite 22 und 140]

Jones u. Launder 1972

JONES, W. P. ; LAUNDER, B. E.: The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972), Nr. 2, S. 301 – 314. [http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90076-2](http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310(72)90076-2). – DOI 10.1016/0017-9310(72)90076-2 [Seite 154]

Jordan 1950

JORDAN, C.: *Calculus of Finite Differences*. Chelsea Publishing Company, 1950 [Seite 18]

Juretić 2004

JURETIĆ, Franjo: *Error Analysis in Finite Volume CFD*, Imperial College London, Diss., 2004 [Seite 38, 46 und 177]

Karniadakis u. Sherwin 1999

KARNIADAKIS, George ; SHERWIN, Spencer: *Spectral/hp Element Methods for CFD*. Oxford University Press, 1999 [Seite 20]

Karypis 2003

KARYPIS, G.: Multi-Constraint Mesh Partitioning for Contact/Impact Computations. In: *Proceedings of the 2003 ACM/IEEE Conference on Supercomputing*, 2003, S. 56–66 [Seite 161]

Karypis 2013a

KARYPIS, G.: *METIS - Serial Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering*. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/overview>. Version: 5.1.0, 2013 [Seite 161]

Karypis u. Kumar 1998

KARYPIS, G. ; KUMAR, V.: Multilevel Algorithms for Multi-constraint Graph Partitioning. In: *Proceedings of the 1998 ACM/IEEE Conference on Supercomputing*, 1998, S. 1–13 [Seite 161]

Karypis 2013b

KARYPIS, George: *METIS Manual*. Version 5.1.0. Minneapolis, USA: University of Minnesota, 2013. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/fetch/sw/metis/manual.pdf> [Seite 162]

Kirpo 2008

KIRPO, Maksims: *Modeling of Turbulence Properties and Particle Transport in Recirculated Flows*. Riga, University of Latvia, Diss., 2008 [Seite 26, 27 und 154]

Koal 2011

KOAL, K.: *Strömungsbeeinflussung in Flüssigmetallen durch rotierende und wandernde Magnetfelder*, Technische Universität Dresden, Diss., 2011 [Seite 68 und 101]

Lalanne u. a. 2015

LALANNE, B. ; VILLEGAS, L. R. ; TANGUY, S. ; RISSO, F.: On the computation of viscous terms for incompressible two-phase flows with Level Set/Ghost Fluid Method. In: *Journal of Computational Physics* 301 (2015), S. 289–307. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.08.036>. – DOI 10.1016/j.jcp.2015.08.036 [Seite 88]

Lange u. Schwirtlich 1990

LANGE, H. ; SCHWIRTLICH, I.A.: Ribbon Growth on Substrate (RGS) – A new approach to high speed growth of silicon ribbons for photovoltaics. In: *Journal of Crystal Growth* 104 (1990), Nr. 1, S. 108–112. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(90\)90317-E](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(90)90317-E). – DOI 10.1016/0022-0248(90)90317-E [Seite 2, 5, 6, 7 und 12]

Lee u. a. 2012

LEE, Jin-Seok ; JANG, Bo-Yun ; AHN, Young-Soo: Effect of Processing Parameters on Thickness of Columnar Structured Silicon Wafers Directly Grown from Silicon Melts. In: *International Journal of Photoenergy* 2012 (2012), Nr. 147250, S. 1–6. <http://dx.doi.org/10.1155/2012/147250>. – DOI 10.1155/2012/147250 [Seite 7]

Lielpeteris u. Moreau 2012

LIELPETERIS, J. J. ; MOREAU, René J.: *Liquid Metal Magnetohydrodynamics*. Bd. 10. Springer, 2012 [Seite 1, 2 und 25]

Loöhner u. Yang 1996

LOÖHNER, R. ; YANG, C.: Improved ALE mesh velocities for moving bodies. In: *Communications in numerical methods in engineering* 12 (1996), S. 599–608. [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-0887\(199610\)12:10<599::AID-CNM1>3.0.CO;2-Q](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1099-0887(199610)12:10<599::AID-CNM1>3.0.CO;2-Q). – DOI 10.1002/(SICI)1099-0887(199610)12:10<599::AID-CNM1>3.0.CO;2-Q [Seite 22 und 139]

López u. Hernández 2008

LÓPEZ, J. ; HERNÁNDEZ, J.: Analytical and geometrical tools for 3D volume of fluid methods in general grids. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), Nr. 12, S. 5939–5948. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.03.010>. – DOI 10.1016/j.jcp.2008.03.010 [Seite 23]

Maccormack u. Paullay 1972

MACCORMACK, R. W. ; PAULLAY, A. J.: Computational efficiency achieved by time splitting of finite difference operators. In: *10th Aerospace Sciences Meeting*, 1972 [Seite 19 und 31]

Maday u. Patera 1989

MADAY, YVON ; PATERA, Anthony T.: Spectral element methods for the incompressible Navier-Stokes equations. In: *State-of-the-art surveys on computational mechanics (A90-47176 21-64)*, 1989, S. 71–143 [Seite 20]

Maitre 2006

MAITRE, Emmanuel: Review of numerical methods for free interfaces. In: *In Ecole Thématique "Modèles de champ de phase pour l'évolution de structures complexes"*., 2006 [Seite 20, 21 und 23]

Marcus 2017

MARCUS, Yizhak: On the compressibility of liquid metals. In: *The Journal of Chemical Thermodynamics* 109 (2017), S. 11–15. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jct.2016.07.027>. – DOI 10.1016/j.jct.2016.07.027. – ISSN 0021–9614 [Seite 10 und 134]

Marić u. a. 2014

MARIĆ, Tomislav ; HÖPKEN, Jens ; MOONEY, Kyle: *The OpenFOAM Technology Primer*. sourceflux, 2014 [Seite 32 und 38]

Marić u. a. 2015

MARIĆ, Tomislav ; MARSCHALL, Holger ; BOTHE, Dieter: lentFoam – A hybrid Level Set/Front Tracking method on unstructured meshes. In: *Computers & Fluids* 113 (2015), S. 20–31. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.12.019>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2014.12.019 [Seite 25]

Marschall u. a. 2014

MARSCHALL, Holger ; BODEN, Stephan ; LEHRENFELD, Christoph ; D., Carlos J. F. ; HAMPEL, Uwe ; REUSKEN, Arnold ; WÖRNER, Martin ; BOTHE, Dieter: Validation of Interface Capturing and

Tracking techniques with different surface tension treatments against a Taylor bubble benchmark problem. In: *Computers & Fluids* 102 (2014), Nr. 0, S. 336–352. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.06.030>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2014.06.030 [Seite 24 und 136]

Massachusetts Institute of Technology 2017

Massachusetts Institute of Technology: *Meep - A free finite-difference time-domain (FDTD) simulation software package*. <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>. Version: 1.3, 2017 [Seite 18]

Maury 1996

MAURY, B.: Characteristics ALE Method for the Unsteady 3D Navier-Stokes Equations with a Free Surface. In: *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 6 (1996), Nr. 3, S. 175–188. <http://dx.doi.org/10.1080/10618569608940780>. – DOI 10.1080/10618569608940780 [Seite 22]

McDonald 1971

MCDONALD, P. W.: The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascades. In: *ASME 1971 International Gas Turbine Conference and Products Show, 1971* [Seite 19, 31 und 33]

Menon u. a. 2016

MENON, Sankar ; NAGAWKAR, Jethro ; NILSSON, Håkan: Coupled Level-Set with VOF interFoam / Chalmers University of Technology. 2016 (CFD with OpenSource Software). – Forschungsbericht. – Chalmers University of Technology [Seite 25]

Menter 1994

MENTER, F. R.: Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. In: *AIAA Journal* 32 (1994), Nr. 8, S. 1598–1605. <http://dx.doi.org/10.2514/3.12149>. – DOI 10.2514/3.12149 [Seite 154, 163 und 166]

Mittal u. Iaccarino 2005

MITTAL, Rajat ; IACCARINO, Gianluca: Immersed boundary methods. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 37 (2005), S. 239–261. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743>. – DOI 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743 [Seite 21]

Molokov u. a. 2007

MOLOKOV, S. S. ; MOREAU, R. ; MOFFATT, H. K.: *Magnetohydrodynamics: Historical Evolution and Trends*. Springer, 2007 [Seite 1 und 2]

Monk 2003

MONK, Peter: *Finite Element Methods for Maxwell's equations*. Oxford University Press, 2003 [Seite 18]

Moreau 1990

MOREAU, R.: *Magnetohydrodynamics*. Kluwer, 1990 [Seite 1, 57, 59 und 154]

Morisue 1982

MORISUE, T.: Magnetic vector potential and electric scalar potential in three-dimensional eddy current problem. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 18 (1982), Nr. 2, S. 531–535. <http://dx.doi.org/10.1109/TMAG.1982.1061856>. – DOI 10.1109/TMAG.1982.1061856 [Seite 19]

Morisue 1993

MORISUE, T.: A comparison of the Coulomb gauge and Lorentz gauge magnetic vector potential formulations for 3D eddy current calculations. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 29 (1993), S. 1372–1375. <http://dx.doi.org/10.1109/CEFC.1992.720818>. – DOI 10.1109/CEFC.1992.720818 [Seite 19 und 61]

Moukalled u. a. 2016

MOUKALLED, F. ; MANGANI, L. ; DARWISH, M.: *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. Springer, 2016 [Seite 31, 32, 37, 38, 42, 46, 47, 51, 150 und 154]

Muzaferija u. Perić 1997

MUZAFERIJA, S. ; PERIĆ, M.: Computation of free-surface flows using the finite-volume method and moving grids. In: *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 32 (1997), Nr. 4, S. 369–384. <http://dx.doi.org/10.1080/10407799708915014>. – DOI 10.1080/10407799708915014 [Seite 22, 136, 148, 149 und 150]

Naumann u. Schenk 2012

NAUMANN, Uwe (Hrsg.) ; SCHENK, Olaf (Hrsg.): *Combinatorial Scientific Computing*. CRC Press, 2012 <https://www.crcpress.com/Combinatorial-Scientific-Computing/Naumann-Schenk/p/book/9781439827352> [Seite 160]

Noh u. Woodward 1976

NOH, W. F. ; WOODWARD, Paul: SLIC (Simple Line Interface Calculation). In: VOOREN, Adrian I. d. (Hrsg.) ; ZANDBERGEN, Pieter J. (Hrsg.): *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, 1976, S. 330–340 [Seite 23]

Novo u. a. 2007

NOVO, M.S. ; SILVA, L.C. da ; TEIXEIRA, F.L.: Finite Volume Modeling of Borehole Electromagnetic Logging in 3-D Anisotropic Formations Using Coupled Scalar-Vector Potentials. In: *IEEE Antennas Wireless Propagation Letters* 6 (2007), S. 549–552. <http://dx.doi.org/10.1109/LAWP.2007.906301>. – DOI 10.1109/LAWP.2007.906301 [Seite 28]

Okada u. Ohno 2003

OKADA, Tatsuya ; OHNO, Satoru: Electrical Properties of Liquid Si and Liquid Au–Si Alloys. In: *Journal of the Physical Society of Japan* 72 (2003), Nr. 2, S. 352–356. <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.72.352>. – DOI 10.1143/JPSJ.72.352 [Seite 15]

Oñate u. a. 1994

OÑATE, E. ; CERVERA, M. ; ZIENKIEWICZ, O. C.: A finite volume format for structural mechanics.

In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 37 (1994), Nr. 2, S. 181–201. <http://dx.doi.org/10.1002/nme.1620370202>. – DOI 10.1002/nme.1620370202 [Seite 19]

OpenFOAM Foundation 2015

OPENFOAM FOUNDATION (Hrsg.): *OpenFOAM Programmer's Guide*. Version 3.0.1. London, UK: OpenFOAM Foundation, 2015. <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf> [Seite 32, 183 und 184]

OpenFOAM Foundation 2016

OPENFOAM FOUNDATION (Hrsg.): *OpenFOAM User Guide*. Version 4.0. London, UK: OpenFOAM Foundation, 2016. <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf> [Seite 32]

OpenFOAM Foundation 2017

OpenFOAM Foundation: *OpenFOAM - Free, open source software for CFD*. <http://openfoam.org>. Version: 4.1, 2017 [Seite 19, 31, 65, 136 und 183]

Osher u. Fedkiw 2002

OSHER, S. ; FEDKIW, R.: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2002 [Seite 23]

Osher u. Sethian 1988

OSHER, S. ; SETHIAN, J. A.: Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton–Jacobi formulations. In: *Journal of Computational Physics* 79 (1988), S. 12–49. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2). – DOI 10.1016/0021-9991(88)90002-2 [Seite 23]

Oskooi u. a. 2010

OSKOOI, Ardavan F. ; ROUNDY, David ; IBANESCU, Mihai ; BERMEL, Peter ; JOANNOPOULOS, J. D. ; JOHNSON, Steven G.: MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. In: *Computer Physics Communications* 181 (2010), S. 687–702. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>. – DOI 10.1016/j.cpc.2009.11.008 [Seite 18]

Özkan u. a. 2007

ÖZKAN, Furkan ; WÖRNER, Martin ; WENKA, Achim ; SOYHAN, Hakan S.: Critical evaluation of CFD codes for interfacial simulation of bubble-train flow in a narrow channel. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 55 (2007), Nr. 6, S. 537–564. <http://dx.doi.org/10.1002/flid.1468>. – DOI 10.1002/flid.1468 [Seite 23]

Pal u. a. 2009

PAL, J. ; CRAMER, A. ; GUNDRUM, Th. ; GERBETH, G.: MULTIMAG - A MULTIpurpose MAGnetic system for physical modelling in magnetohydrodynamics. In: *Flow Measurement and Instrumentation* 20 (2009), Nr. 6, S. 241–251. <http://dx.doi.org/10.1016/j.flowmeasinst.2009.08.003>. – DOI 10.1016/j.flowmeasinst.2009.08.003 [Seite 102, 103, 104 und 110]

Palacios u. a. 2013

PALACIOS, FRANCISCO ; COLONNO, Michael R. ; ARANAKE, Aniket C. ; CAMPOS, Alejandro ; COPELAND, Sean R. ; ECONOMON, Thomas D. ; LONKAR, Amrita K. ; LUKACZYK, Trent W. ; TAYLOR, Thomas W. R. ; ALONSO, Juan J.: Stanford University Unstructured (SU²): An open-source integrated computational environment for multi-physics simulation and design. In: *AIAA Paper 287* (2013), S. 2013. <http://dx.doi.org/10.2514/6.2013-287>. – DOI 10.2514/6.2013-287 [Seite 19]

Parlett 1998

PARLETT, Beresford N.: *The Symmetric Eigenvalue Problem*. SIAM, 1998 [Seite 78]

Patankar 1981

PATANKAR, S.V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, 1981 [Seite 32]

Pellegrini 2012a

PELLEGRINI, F.: Scotch and PT-Scotch Graph Partitioning Software: An Overview. In: NAUMANN, Uwe (Hrsg.) ; SCHENK, Olaf (Hrsg.): *Combinatorial Scientific Computing*. CRC Press, 2012, S. 373–406 [Seite 161]

Pellegrini u. Roman 1996

PELLEGRINI, F. ; ROMAN, J.: SCOTCH: A Software Package for Static Mapping by Dual Recursive Bipartitioning of Process and Architecture Graphs. In: *Proceedings of the 4th International Conference on High-Performance Computing and Networking*, 1996, S. 493–498 [Seite 161]

Pellegrini 2012b

PELLEGRINI, François: *SCOTCH - A Software Package for Static Mapping by Dual Recursive Bipartitioning of Process and Architecture Graphs*. <https://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch>. Version: 6.0, 2012 [Seite 161]

Pericleous u. a. 2006

PERICLEOUS, K. ; BOJAREVICS, V. ; DJAMBAZOV, G. ; HARDING, R. A. ; WICKINS, M.: Experimental and numerical study of the cold crucible melting process. In: *Applied Mathematical Modelling* 30 (2006), Nr. 11, S. 1262–1280. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2006.03.003>. – DOI 10.1016/j.apm.2006.03.003 [Seite 25]

Pesci u. a. 2016

PESCI, Chiara ; DIETER-KISSLING, Kathrin ; MARSCHALL, Holger ; BOTHE, Dieter: Finite Volume/Finite Area Interface-Tracking Method for Two-Phase Flows with Fluid Interfaces Influenced by Surfactant. In: RAHNI, M. T. (Hrsg.) ; KARBASCHI, M. (Hrsg.) ; MILLER, R. (Hrsg.): *Computational Methods for Complex Liquid-Fluid Interfaces*. CRC Press, 2016, S. 373–409 [Seite 137]

Peskin 1977

PESKIN, Charles S.: Numerical analysis of blood flow in the heart. In: *Journal of Computational Physics* 25 (1977), Nr. 3, S. 220–252. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(77\)90100-0](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(77)90100-0). – DOI 10.1016/0021-9991(77)90100-0 [Seite 21]

Peskin 2002

PESKIN, Charles S.: The immersed boundary method. In: *Acta Numerica* 11 (2002), S. 479–517. <http://dx.doi.org/10.1017/S0962492902000077>. – DOI 10.1017/S0962492902000077 [Seite 21]

Peşteanu u. Baake 2011a

PEŞTEANU, Ovidiu ; BAAKE, Egbert: The Multicell Volume of Fluid (MC-VOF) Method for the Free Surface Simulation of MFD Flows. Part I: Mathematical Model. In: *ISIJ international* 51 (2011), Nr. 5, S. 707–713. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.707>. – DOI 10.2355/isijinternational.51.707 [Seite 24]

Peşteanu u. Baake 2011b

PEŞTEANU, Ovidiu ; BAAKE, Egbert: The Multicell Volume of Fluid (MC-VOF) Method for the Free Surface Simulation of MFD Flows. Part II: Experimental Verifications and Results. In: *ISIJ international* 51 (2011), Nr. 5, S. 714–721. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.714>. – DOI 10.2355/isijinternational.51.714 [Seite 24]

Pilliod u. Puckett 2004

PILLIOD, James E. ; PUCKETT, Elbridge G.: Second-order accurate Volume-Of-Fluid algorithms for tracking material interfaces. In: *Journal of Computational Physics* 199 (2004), Nr. 2, S. 465–502. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2003.12.023>. – DOI 10.1016/j.jcp.2003.12.023 [Seite 23]

Plevachuk u. a. 2014

PLEVACHUK, Y. ; SKLYARCHUK, V. ; ECKERT, S. ; GERBETH, G. ; NOVAKOVIC, R.: Thermophysical Properties of the Liquid Ga-In-Sn Eutectic Alloy. In: *Journal of Chemical & Engineering Data* 59 (2014), Nr. 3, S. 757–763. <http://dx.doi.org/10.1021/je400882q>. – DOI 10.1021/je400882q [Seite 104]

Poklad u. a. 2017

POKLAD, A. ; PAL, J. ; GALINDO, V. ; GRANTS, I. ; HEINZE, V. ; MEIER, D. ; PÄTZOLD, O. ; STELTER, M. ; GERBETH, G.: Magnetic flow control in growth and casting of photovoltaic silicon: Numerical and experimental results. In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 228 (2017), Nr. 1, S. 012017. <http://dx.doi.org/10.1088/1757-899X/228/1/012017>. – DOI 10.1088/1757-899X/228/1/012017 [Seite 178 und 179]

Pope 2000

POPE, Stephen B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000 [Seite 20 und 154]

Prosperetti u. Tryggvason 2007

PROSPERETTI, A. ; TRYGGVASON, G.: *Computational Methods For Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2007 [Seite 20, 21, 23 und 24]

Prud’Homme u. a. 2012

PRUD’HOMME, Christophe ; CHABANNES, Vincent ; DOYEUX, Vincent ; ISMAIL, Mourad ; SAMAKE,

Abdoulaye ; PENA, Gonçalo: Feel++: A computational framework for galerkin methods and advanced numerical methods. In: *ESAIM: Proceedings* Bd. 38, 2012, S. 429–455 [Seite 20]

Qin u. a. 2015

QIN, T. ; TUKOVIĆ, Ž. ; GRIGORIEV, R. O.: Buoyancy-thermocapillary convection of volatile fluids under their vapors. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 80 (2015), S. 38–49. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.08.068>. – DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.08.068 [Seite 32, 137 und 179]

Quan u. a. 2009

QUAN, Shaoping ; LOU, Jing ; SCHMIDT, David P.: Modeling merging and breakup in the moving mesh interface tracking method for multiphase flow simulations. In: *Journal of Computational Physics* 228 (2009), Nr. 7, S. 2660–2675. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.12.029>. – DOI 10.1016/j.jcp.2008.12.029 [Seite 22]

Quan u. Schmidt 2007

QUAN, Shaoping ; SCHMIDT, David P.: A moving mesh interface tracking method for 3D incompressible two-phase flows. In: *Journal of Computational Physics* 221 (2007), Nr. 2, S. 761–780. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.06.044>. – DOI 10.1016/j.jcp.2006.06.044 [Seite 22]

RGS Development BV 2017

RGS Development BV: *Thermagy*. <http://rgsdevelopment.nl>. Version: 2017 [Seite 6]

Rhie u. Chow 1983

RHIE, C. M. ; CHOW, W. L.: A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. In: *AIAA Journal* 21 (1983), S. 1525–1532. <http://dx.doi.org/10.2514/3.8284>. – DOI 10.2514/3.8284 [Seite 147 und 150]

Rhim u. Ohsaka 2000

RHIM, Won-Kyu ; OHSAKA, Kenichi: Thermophysical properties measurement of molten silicon by high-temperature electrostatic levitator: density, volume expansion, specific heat capacity, emissivity, surface tension and viscosity. In: *Journal of Crystal Growth* 208 (2000), Nr. 1, S. 313–321. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(99\)00437-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(99)00437-6). – DOI 10.1016/S0022-0248(99)00437-6 [Seite 13]

Roenby u. a. 2016

ROENBY, Johan ; BREDMOSE, Henrik ; JASAK, Hrvoje: A computational method for sharp interface advection. In: *Royal Society Open Science* 3 (2016), Nr. 11, S. 1–25. <http://dx.doi.org/10.1098/rsos.160405>. – DOI 10.1098/rsos.160405 [Seite 23]

Rusche 2002

RUSCHE, Henrik: *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*, Imperial College London, Diss., 2002 [Seite 23, 25, 34, 38 und 45]

Saad 2003

SAAD, Yousef: *Iterative Methods for sparse Linear Systems*. 2. SIAM, 2003 [Seite 46, 71, 75, 76, 78, 79, 82 und 146]

Saad 2011

SAAD, Yousef: *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*. 2. SIAM, 2011 [Seite 78]

Sanders u. Schulz 2013

SANDERS, Peter ; SCHULZ, Christian: Think Locally, Act Globally: Highly Balanced Graph Partitioning. In: *Proceedings of the 12th International Symposium on Experimental Algorithms* Bd. 7933, 2013, S. 164–175 [Seite 161]

Sanders u. Schulz 2017

SANDERS, Peter ; SCHULZ, Christian: *KaHIP - Karlsruhe High Quality Partitioning*. <http://algo2.iti.kit.edu/kahip/>. Version: 6.0, 2017 [Seite 161]

Sasaki u. a. 1995

SASAKI, Hitoshi ; IKARI, Atsushi ; TERASHIMA, Kazutaka ; KIMURA, Shigeyuki: Temperature Dependence of the Electrical Resistivity of Molten Silicon. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 34 (1995), Nr. 7R, S. 3426–3431. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.34.3426>. – DOI 10.1143/JJAP.34.3426 [Seite 15]

Scardovell u. Zaleski 1999

SCARDOVELL, R. ; ZALESKI, S.: Direct Numerical Simulation of Free Surface and Interfacial Flow. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 31 (1999), S. 567–603. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.31.1.567>. – DOI 10.1146/annurev.fluid.31.1.567 [Seite 20, 21 und 137]

Schmid u. a. 2015

SCHMID, E. ; POKLAD, A. ; HEINZE, V. ; MEIER, D. ; PÄTZOLD, O. ; STELTER, M.: Growth of multicrystalline silicon in a cone-shaped crucible. In: *Journal of Crystal Growth* 416 (2015), S. 1–7. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2015.01.007>. – DOI 10.1016/j.jcrysgro.2015.01.007 [Seite 178 und 179]

Schnyders u. Zytveld 1996

SCHNYDERS, H. S. ; ZYTVELD, J. B. V.: Electrical resistivity and thermopower of liquid Ge and Si. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 8 (1996), Nr. 50, S. 10875–10883. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/8/50/013>. – DOI 10.1088/0953-8984/8/50/013 [Seite 15]

Schönecker u. a. 2004

SCHÖNECKER, A. ; GEERLIGS, L. J. ; MÜLLER, A.: Casting Technologies for Solar Silicon Wafers: Block Casting and Ribbon-Growth-on Substrate. In: *Solid State Phenomena* 95-96 (2004), S. 149–158. <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.95-96.149>. – DOI 10.4028/www.scientific.net/SSP.95-96.149 [Seite 5 und 6]

Schwarz u. Köckler 2009

SCHWARZ, H. R. ; KÖCKLER, N.: *Numerische Mathematik*. 7. Teubner, 2009 [Seite 76]

Sethian 1999

SETHIAN, J. A.: *Level Set Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge University Press, 1999 [Seite 23]

Sethian u. Smereka 2003

SETHIAN, J. A. ; SMEREKA, Peter: Level Set Methods for Fluid Interfaces. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 35 (2003), Nr. 1, S. 341–372. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.35.101101.161105>. – DOI 10.1146/annurev.fluid.35.101101.161105 [Seite 24]

Shatrov u. a. 2003

SHATROV, V. ; MUTSCHKE, G. ; GERBETH, G.: Three-dimensional linear stability analysis of lid-driven magnetohydrodynamic cavity flow. In: *Physics of Fluids* 15 (2003), Nr. 8, S. 2141–2151. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1582184>. – DOI 10.1063/1.1582184 [Seite 153]

Siemens 2017

Siemens: *STAR-CCM+*. <https://mdx.plm.automation.siemens.com/star-ccm-plus>. Version: 5.0.0, 2017 [Seite 20]

Smagorinsky 1963

SMAGORINSKY, J.: General circulation experiments with the primitive equations, I. The basic experiment. In: *Monthly Weather Review* 91 (1963), S. 99–164. [http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(1963\)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2). – DOI 10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2 [Seite 154]

Snyder u. Toberer 2008

SNYDER, G J. ; TOBERER, Eric S.: Complex thermoelectric materials. In: *Nature materials* 7 (2008), Nr. 2, S. 105–114. <http://dx.doi.org/10.1038/nmat2090>. – DOI 10.1038/nmat2090 [Seite 6]

Software in the Public Interest 2017

Software in the Public Interest: *Open MPI - A High Performance Message Passing Library*. <http://open-mpi.org>. Version: 2.1.1, 2017 [Seite 169]

Spiegel u. a. 2009

SPIEGEL, M. R. ; LIPSCHUTZ, S. ; SPELLMAN, D.: *Vector Analysis. Schaum's Outlines*. McGraw Hill, 2009 [Seite 195]

Spitans 2015

SPITANS, S.: *Investigation of turbulent free surface flow of liquid metal in electromagnetic field*, University of Latvia, Diss., 2015 [Seite 26, 27, 154, 156 und 179]

Spitans u. a. 2014

SPITANS, S. ; BAAKE, E. ; NACKE, B. ; JAKOVIČS, A.: A numerical model for coupled free surface and liquid metal flow calculation in electromagnetic field. In: *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics* 44 (2014), S. 171–182. <http://dx.doi.org/10.3233/JAE-141757>. – DOI 10.3233/JAE-141757 [Seite 26, 157 und 169]

Spitans u. a. 2015a

SPITANS, S. ; BAAKE, E. ; NACKE, B. ; JAKOVIČS, A.: New technology for large scale electromagnetic levitation melting of metals. In: *Magnetohydrodynamics* 51 (2015), Nr. 1, 121–131. <http://mhd.sal.lv/contents/2015/1/MG.51.1.12.R.html> [Seite 26]

Spitans u. a. 2015b

SPITANS, S. ; BAAKE, E. ; NACKE, B. ; JAKOVIČS, A.: Numerical Modeling of Free Surface Dynamics of Melt in an Alternate Electromagnetic Field: Part II. Conventional Electromagnetic Levitation. In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 47 (2015), Nr. 1, S. 522–536. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-015-0515-7>. – DOI 10.1007/s11663-015-0515-7 [Seite 26]

Spitans u. a. 2010

SPITANS, S. ; JAKOVIČS, A. ; BAAKE, E. ; NACKE, B.: Numerical modelling of free surface dynamics of conductive melt in induction crucible furnace. In: *Magnetohydrodynamics* 46 (2010), Nr. 4, 425–436. <http://mhd.sal.lv/contents/2010/4/MG.46.4.13.R.html> [Seite 27]

Spitans u. a. 2013

SPITANS, S. ; JAKOVIČS, A. ; BAAKE, E. ; NACKE, B.: Numerical Modeling of Free Surface Dynamics of Melt in an Alternate Electromagnetic Field: Part I. Implementation and Verification of Model. In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 44 (2013), Nr. 3, S. 593–605. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-013-9809-9>. – DOI 10.1007/s11663-013-9809-9. – ISSN 1073–5615 [Seite 26, 157, 181 und 182]

Stanford University 2017

Stanford University: *SU² - The Open-Source CFD Code*. <http://su2.stanford.edu>. Version: 5.0.0, 2017 [Seite 19]

Steinbach u. Apel 2007

STEINBACH, I. ; APEL, M.: Phase-field simulation of rapid crystallization of silicon on substrate. In: *Materials Science and Engineering: A* 449 (2007), S. 95–98. <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2005.12.100>. – DOI 10.1016/j.msea.2005.12.100. – ISSN 0921–5093. – Proceedings of the 12th International Conference on Rapidly Quenched & Metastable Materials [Seite 9]

Stiller u. a. 2013

STILLER, J. ; KOAL, K. ; NAGEL, W.E. ; PAL, J. ; CRAMER, A.: Liquid metal flows driven by rotating and traveling magnetic fields. In: *The European Physical Journal Special Topics* 220 (2013), Nr. 1, S. 111–122. <http://dx.doi.org/10.1140/epjst/e2013-01801-8>. – DOI 10.1140/epjst/e2013-01801-8 [Seite 101]

Stiller 2008

STILLER, Jörg: *Beiträge zur numerischen Strömungsmechanik: Methoden höherer Ordnung, Magneto-fluiddynamik und Kavitation*, Technische Universität Dresden, Habilitation, 2008 [Seite 68]

Stuart Lynn u. Timlake 1968

STUART LYNN, M. ; TIMLAKE, William P.: *The Numerical Solution of Singular Integral Equations*

of Potential Theory. In: *Numerische Mathematik* 11 (1968), Nr. 1, S. 77–98. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02165473>. – DOI 10.1007/BF02165473 [Seite 78]

Sugai 1965

SUGAI, I.: Maxwell stress tensors in isotropic linear media. In: *Proceedings of the IEEE*, 1965 [Seite 64]

Sun u. Beckermann 2007

SUN, Y. ; BECKERMANN, C.: Sharp interface tracking using the phase-field equation. In: *Journal of Computational Physics* 220 (2007), Nr. 2, S. 626–653. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.05.025>. – DOI 10.1016/j.jcp.2006.05.025 [Seite 24]

Sun u. Beckermann 2008

SUN, Y. ; BECKERMANN, C.: A two-phase diffuse-interface model for Hele–Shaw flows with large property contrasts. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 237 (2008), Nr. 23, S. 3089–3098. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physd.2008.06.010>. – DOI 10.1016/j.physd.2008.06.010 [Seite 24]

Sussman u. Puckett 2000

SUSSMAN, Mark ; PUCKETT, Elbridge G.: A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows. In: *Journal of Computational Physics* 162 (2000), Nr. 2, S. 301–337. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2000.6537>. – DOI 10.1006/jcph.2000.6537 [Seite 24]

Sussman u. a. 1994

SUSSMAN, Mark ; SMEREKA, Peter ; OSHER, Stanley: A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. In: *Journal of Computational Physics* 114 (1994), Nr. 1, S. 146–159. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1994.1155>. – DOI 10.1006/jcph.1994.1155 [Seite 24]

Szabó u. Babuška 1991

SZABÓ, B. A. ; BABUŠKA, I.: *Finite Element Analysis*. John Wiley & Sons, 1991 [Seite 18]

Szabó u. Mehta 1978

SZABÓ, B. A. ; MEHTA, A. K.: p-convergent finite element approximations in fracture mechanics. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 12 (1978), Nr. 3, S. 551–560. <http://dx.doi.org/10.1002/nme.1620120313>. – DOI 10.1002/nme.1620120313 [Seite 20]

Taflove u. Hagness 2005

TAFLOVE, Allen ; HAGNESS, Susan C.: *Computational electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House, 2005 [Seite 18]

Tai 1991

TAI, Y.: *Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory*. 2. Elsevier, 1991 [Seite 89]

Taylor 1996

TAYLOR, Gareth A.: *A vertex based discretisation scheme applied to material non-linearity within a multi-physics finite volume framework*, University of Greenwich, Diss., 1996 [Seite 19]

Tryggvason u. a. 2001

TRYGGVASON, G. ; BUNNER, B. ; ESMAEELI, A. ; JURIC, D. ; AL-RAWAHI, N. ; TAUBER, W. ; HAN, J. ; NAS, S. ; JAN, Y.-J.: A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow. In: *Journal of Computational Physics* 169 (2001), Nr. 2, S. 708–759. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2001.6726>. – DOI 10.1006/jcph.2001.6726 [Seite 21]

Tryggvason u. a. 2011

TRYGGVASON, Grétar ; SCARDOVELLI, Ruben ; ZALESKI, Stéphane: *Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011 [Seite 20]

Tuković 2005

TUKOVIĆ, Ž.: *Metoda kontrolnih volumena na domenama promjenjivog oblika*, Sveučilište u Zagrebu, Diss., 2005 [Seite 22, 25, 32, 39, 142, 195, 199, 200 und 202]

Tuković u. Jasak 2008

TUKOVIĆ, Ž. ; JASAK, H.: Simulation of free-rising bubble with soluble surfactant using moving mesh finite volume/area method. In: *Proceedings of 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries, no. CFD08-072*, 2008 [Seite 22, 25 und 179]

Tuković u. Jasak 2012

TUKOVIĆ, Ž. ; JASAK, H.: A moving mesh finite volume interface tracking method for surface tension dominated interfacial fluid flow. In: *Computers & Fluids* 55 (2012), S. 70–84. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.11.003>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2011.11.003 [Seite 22, 25, 32, 33, 136, 137, 142, 143, 144, 145, 147, 148, 149, 150, 151, 174, 195 und 200]

Turner u. a. 1956

TURNER, M. J. ; CLOUGH, R. W. ; MARTIN, H. C. ; TOPP, L. J.: Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures. In: *Journal of the Aeronautical Sciences* 23 (1956), Nr. 9, S. 805–823. <http://dx.doi.org/10.2514/8.3664>. – DOI 10.2514/8.3664 [Seite 18]

Ubbink u. Issa 1999

UBBINK, O. ; ISSA, R.I.: A Method for Capturing Sharp Fluid Interfaces on Arbitrary Meshes. In: *Journal of Computational Physics* 153 (1999), Nr. 1, S. 26–50. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6276>. – DOI 10.1006/jcph.1999.6276 [Seite 23]

Ubbink 1997

UBBINK, Onno: *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*, Imperial College London, Diss., 1997 [Seite 23]

University of Liège 2017

University of Liège: *GetDP - A General Environment for the Treatment of Discrete Problems*. <http://getdp.info>. Version: 2.11.1, 2017 [Seite 18]

Unverdi u. Tryggvason 1992

UNVERDI, Salih O. ; TRYGGVASON, Grétar: A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. In: *Journal of Computational Physics* 100 (1992), Nr. 1, S. 25–37. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90307-K](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90307-K). – DOI 10.1016/0021-9991(92)90307-K [Seite 21]

Van Bladel 1958

VAN BLADEL, J.: On Helmholtz's theorem in finite regions / Midwestern Universities Research Association (MURA). Version: 1958. <http://cds.cern.ch/record/1043670>. 1958 (MURA-440). – Forschungsbericht. – Cern Libraries, Geneva [Seite 63 und 135]

Vanderlinde 2004

VANDERLINDE, J.: *Classical Electromagnetic Theory*. 2. Kluwer, 2004 [Seite 89]

Vencels u. a. 2017

VENCELS, J. ; JAKOVICS, A. ; GEZA, V. ; SCEPANSKIS, M.: EOF Library: Open-Source Elmer and OpenFOAM Coupler for Simulation of MHD with Free Surface. In: *Proceedings of the 18th International UIE-Congress on Electrotechnologies for Material Processing*, 2017, S. 312–317 [Seite 26, 27, 156, 157, 181 und 182]

Versteeg u. Malalasekera 2007

VERSTEEG, H. K. ; MALALASEKERA, W.: *An introduction to Computational Fluid Dynamics: The finite volume method*. 2. Prentice Hall, 2007 [Seite 19, 31, 52 und 134]

Vukčević 2016

VUKČEVIĆ, V.: *Numerical Modelling of Coupled Potential and Viscous Flow for Marine Applications*, University of Zagreb, Diss., 2016 [Seite 23, 24, 25 und 88]

Vukčević u. a. 2017

VUKČEVIĆ, Vuko ; JASAK, Hrvoje ; GATIN, Inno: Implementation of the Ghost Fluid Method for Free Surface Flows in Polyhedral Finite Volume Framework. In: *Computers & Fluids* 153 (2017), S. 1–19. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2017.05.003>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2017.05.003 [Seite 88, 89, 92 und 98]

Wang u. a. 2011

WANG, H. ; DJAMBAZOV, G. ; PERICLEOUS, K. A. ; HARDING, R. A. ; WICKINS, M.: Modelling the dynamics of the tilt-casting process and the effect of the mould design on the casting quality. In: *Computers & Fluids* 42 (2011), Nr. 1, S. 92–101. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.11.010>. – DOI 10.1016/j.compfluid.2010.11.010 [Seite 27]

Wang u. a. 2013

WANG, S. ; GLIMM, J. ; SAMULYAK, R. ; JIAO, X. ; DIAO, C.: An Embedded Boundary Method for Two Phase Incompressible Flow. In: *arXiv preprint arXiv:1304.5514* (2013), 1–27. <https://arxiv.org/abs/1304.5514> [Seite 88]

Weber u. a. 2013

WEBER, N. ; GALINDO, V. ; STEFANI, F. ; WEIER, T. ; WONDRAK, T.: Numerical simulation of the Tayler instability in liquid metals. In: *New Journal of Physics* 15 (2013), S. 043034. <http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/15/4/043034>. – DOI 10.1088/1367-2630/15/4/043034 [Seite 82]

Weber 2016

WEBER, Norbert: *Modellierung von Tayler-Instabilität und Elektrowirbelströmungen in Flüssigmetallbatterien*, Technische Universität Dresden, Diss., 2016 [Seite 82]

Weber u. a. 2017a

WEBER, Norbert ; BECKSTEIN, Pascal ; HERREMAN, Wietze ; HORSTMANN, Gerrit M. ; NORE, Caroline ; STEFANI, Frank ; WEIER, Tom: Sloshing instability and electrolyte layer rupture in liquid metal batteries. In: *Physics of Fluids* 29 (2017), Nr. 5, S. 054101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4982900>. – DOI 10.1063/1.4982900 [Seite 82]

Weber u. a. 2017b

WEBER, Norbert ; BECKSTEIN, Pascal ; HERREMAN, Wietze ; NORE, Caroline ; STEFANI, Frank ; WEIER, Tom: Metal pad roll instability in liquid metal batteries. In: *Magnetohydrodynamics* 53 (2017), Nr. 1, 3–13. <http://mhd.sal.lv/contents/2017/1/MG.53.1.14.R.html> [Seite 82]

Weber u. a. 2017c

WEBER, Paul S. ; MARSCHALL, Holger ; BOTHE, Dieter: Highly accurate two-phase species transfer based on ALE Interface Tracking. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 104 (2017), S. 759–773. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.08.072>. – DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.08.072 [Seite 137]

Weiss 2013

WEISS, Chester J.: Project APhiD: A Lorenz-gauged A-phi decomposition for parallelized computation of ultra-broadband electromagnetic induction in a fully heterogeneous Earth. In: *Computers & Geosciences* 58 (2013), S. 40–52. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2013.05.002>. – DOI 10.1016/j.cageo.2013.05.002 [Seite 28 und 71]

Weiss u. Donaldson 2017

WEISS, Sebastian ; DONALDSON, Adam: *phaseFieldFoam - Phase field solver for OpenFOAM v2.2.0*. <https://github.com/11101011/phaseFieldFoam>. Version: 2.2.0, 2017 [Seite 25]

Welch u. a. 1966

WELCH, J. E. ; HARLOW, F. W. ; SHANNON, J. P. ; DALY, B.J.: The MAC Method: A Computing Technique for Solving Viscous, Incompressible, Transient Fluid Flow Problems Involving Free Surfaces / Los Alamos Scientific Laboratory. 1966 (LA-3425). – Forschungsbericht. – University of California [Seite 21]

Weller 2008

WELLER, Henry G.: A New Approach to VOF-based Interface Capturing Methods for Incompressible and Compressible Flow / OpenCFD. 2008 (TR/HGW/04). – Forschungsbericht. – OpenCFD [Seite 23 und 25]

Weller u. a. 1998

WELLER, H.G. ; TABOR, G. ; JASAK, H. ; FUREBY, C.: A tensorial approach to computational continuum mechanics using object oriented techniques. In: *Computers in Physics* 12 (1998), Nr. 6, S. 620–631. <http://dx.doi.org/10.1063/1.168744>. – DOI 10.1063/1.168744 [Seite 19, 31, 32, 55, 65, 131, 136, 154 und 183]

Werner 2011

WERNER, Dirk: *Funktionalanalysis*. Springer, 2011 [Seite 78]

Wikki 2017

Wikki: *The foam-extend Project*. <http://foam-extend.org>. Version: 4.0, 2017 [Seite 19, 31, 55 und 131]

Wilcox 1988

WILCOX, D. C.: Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. In: *AIAA Journal* 26 (1988), Nr. 11, S. 1299–1310. <http://dx.doi.org/10.2514/3.10041>. – DOI 10.2514/3.10041 [Seite 154]

Wilcox 1998

WILCOX, David C.: *Turbulence modeling for CFD*. DCW Industries, 1998 [Seite 154]

Wilkinson 1965

WILKINSON, James H.: *The algebraic eigenvalue problem*. Oxford University Press, 1965 [Seite 78 und 79]

Wondrak 2012

WONDRAK, Thomas: *Beiträge zur Methodik und Anwendung der kontaktlosen induktiven Strömungstomographie*, Technische Universität Dresden, Diss., 2012 [Seite 78]

Xu u. Simkin 2004

XU, E. X. ; SIMKIN, J.: Total and reduced magnetic vector potentials and electrical scalar potential for eddy current calculation. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 40 (2004), Nr. 2, S. 938–940. <http://dx.doi.org/10.1109/TMAG.2004.824887>. – DOI 10.1109/TMAG.2004.824887 [Seite 19 und 81]

Zalesak 1979

ZALESAK, Steven T.: Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. In: *Journal of Computational Physics* 31 (1979), Nr. 3, S. 335–362. [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(79\)90051-2](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(79)90051-2). – DOI 10.1016/0021-9991(79)90051-2 [Seite 23]

Zhou u. a. 2003

ZHOU, Zhenhua ; MUKHERJEE, Sundeep ; RHIM, Won-Kyu: Measurement of thermophysical properties of molten silicon using an upgraded electrostatic levitator. In: *Journal of Crystal Growth* 257 (2003), Nr. 3, S. 350–358. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(03\)01430-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(03)01430-1). – DOI 10.1016/S0022-0248(03)01430-1 [Seite 13]

Zienkiewicz u. a. 2005

ZIENKIEWICZ, O.C. ; TAYLOR, R.L. ; NITHIARASU, P.: *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. 6. Elsevier, 2005 [Seite 18]

Zimmerman 2006

ZIMMERMAN, William B. J.: *Multiphysics modeling with Finite Element Methods*. World Scientific, 2006 [Seite 18]

Abkürzungsverzeichnis

Kurzform	Beschreibung	Seite(n)
AC	Wechselstrom (Alternating Current)	1, 7, 56, 66, 101
ALE	Arbitrary-Lagrangian-Eulerian	22, 39, 138, 142, 145, 174
BDF	Rückwärts-Differenzen-Formeln (Backward Differencing Formulas)	48, 166
BiCGSTAB	stabilisiertes Verfahren der bikonjugierten Gradienten (Biconjugate Gradient Stabilized)	75
CFD	numerische Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics)	19, 20, 25, 28, 29, 31, 65, 71, 72, 82
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy	47, 151, 152, 164
CG	Verfahren der konjugierten Gradienten (Conjugate Gradient)	76, 80
CLSVOF	gekoppelte Level-Set-VOF-Methode (Coupled Level-Set-VOF)	24, 25
CPU	(Haupt-)Prozessor eines Computers (Central Processing Unit)	106, 107, 109, 111, 115, 159, 162, 164, 169, 170, 175, 179, 182
DGL	Differentialgleichung	10, 11, 16–20, 31–33, 36, 38, 43, 54, 69, 82–84, 107, 128, 131, 133, 154–156, 159, 160, 169, 172, 176
DNS	direkte numerische Simulation (Direct Numerical Simulation)	153, 176
FAM	Finite-Flächen-Methode (Finite Area Method)	32, 142–145, 177, 179
FDM	Finite-Differenzen-Methode	18, 20, 26, 31, 33
FEM	Finite-Elemente-Methode	18–20, 22–27, 31–33, 71, 77, 105, 129, 141, 142, 160, 171, 173, 174

Kurzform	Beschreibung	Seite(n)
FVM	Finite-Volumen-Methode	iii, 19, 20, 22, 23, 25–29, 31–33, 37, 38, 46, 53, 55, 60, 65, 70, 74, 80, 81, 84, 89, 92, 100, 102–104, 110, 114, 115, 118, 125, 126, 128, 131, 138, 141, 143–145, 152, 154, 160, 161, 164, 171–177
GAMG	geometrisch-algebraisches Mehrgitter-Verfahren (Geometric Algebraic Multigrid)	76
GFM	Pseudo-Fluid-Methode (Ghost Fluid Method)	88, 93, 173
GGI	generalisiertes Gitter-Interface (General grid interface)	177
GMRES	verallgemeinertes Verfahren des minimalen Residuums (Generalized Minimal Residual)	75
HD	Hydrodynamik	vi, 1, 10–13, 16, 17, 19, 20, 25, 26, 28, 29, 54, 129, 131–133, 142, 154, 157, 158, 163, 171, 174–178
HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	2, 102, 104
IBM	Immersed-Boundary-Methode (Immersed boundary method)	21, 22, 24, 25
ICT	Interface-Capturing Technik (Interface-capturing technique)	22–25, 137, 157, 175, 181, 182
ITT	Interface-Tracking Technik (Interface-tracking technique)	iii, 22, 24–26, 136–139, 142, 148, 151, 157, 158, 174–177, 179, 181
KQM	Kleinste-Quadrate-Methode	150, 158, 177
LES	Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation)	20, 153, 154, 159, 169, 170, 175, 177, 179, 180
LF	Niedrigfrequenz (Low Frequency)	101, 104–106, 110–113

Kurzform	Beschreibung	Seite(n)
LIMTECH	Helmholtz-Allianz / Forschungsinitiative zur Untersuchung von Technologien im Bereich der metallurgischen Magnetohydrodynamik (Liquid Metal Technologies)	2
LSM	Level-Set-Methode (Level-set method)	23–25
MD	Magnetodynamik	vi, 1, 10–13, 15–18, 20, 25, 26, 28, 29, 54, 55, 100, 101, 128, 129, 131–133, 137, 142, 154, 157, 158, 163, 171–178
MHD	Magnetohydrodynamik	vi, 1–3, 5, 15–17, 20, 27–29, 55, 131, 154, 156, 171, 174–177, 182
MQS	Magneto-Quasistatik	10, 11, 19, 55, 59
MULTIMAG	Mehrzweckversuchsanlage zur Untersuchung elektromagnetisch getriebener Strömungen (Multipurpose Magnetic Fields)	102–104
PFM	Phasenfeld-Methode (Phase-field method)	23–25
PISO	Pressure-Implicit with Splitting of Operators	142, 143, 145, 158
PLS	Partikel-Level-Set-Methode (Particel-Level-Set)	24, 25
PV	Photovoltaik	5, 6
RAM	Arbeitsspeicher (Random-Access Memory)	27, 71, 72, 79
RANS	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes (Gleichungen) (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)	153
RAS	Reynolds-gemittelte Simulation (Reynolds-Averaged simulation)	20, 25, 26, 153, 154, 159, 175, 181
RGS	Substrat-basiertes Gießverfahren für vorrangig Silizium-basierte Werkstoffe (Ribbon Growth on Substrate)	iii, 2, 3, 5–10, 12–14, 16–22, 24–28, 53, 55, 56, 59, 68, 113, 114, 116, 118, 125, 126, 128, 129, 131–134, 139, 142, 152–155, 162–167, 169–171, 174–177, 179, 182
RMF	rotierendes Magnetfeld (Rotating Magnetic Field)	101–113, 115

Kurzform	Beschreibung	Seite(n)
SCL	Volumenerhaltungsgesetz (Space conservation law)	39, 42, 138, 142, 148
SEM	Spektral-Elemente-Methode	20, 31
TD	Thermodynamik	3, 10–13, 28, 29, 176–178
TEG	thermoelektrischer Generator	6
TMF	wanderndes Magnetfeld (Travelling Magnetic Field)	101–103, 110–115
URANS	instationäre Reynolds-gemittelte Navier-Stokes (Gleichungen) (Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes)	153, 163, 165–167, 170
VOF	Volume-of-Fluid-Methode (Volume of fluid)	23–26, 137, 181

Symbolverzeichnis

Dimensionslose Kennzahlen

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
C	1	CFL-Zahl	Gleichung (3.52)
F	1	Kraftparameter	Gleichung (4.132)
Pr_M	1	magnetische Prandtl-Zahl	Abschnitt 5.1.6
Re	1	Reynolds-Zahl	Abschnitt 5.1.6
Re_M	1	magnetische Reynolds-Zahl	Gleichung (4.13)
S	1	Abschirmparameter	Gleichung (4.48)
Ta_M	1	magnetische Taylor-Zahl	Gleichung (4.126)

Griechische Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
α	1	Phasenverschiebung	
α_0	1	Phasenverschiebung des Induktorstromes	Gleichung (4.40)
α_ψ	1	Phasenverschiebung des Feldes ψ	Gleichung (4.42)
β	1	Mischfaktor	
β_e	1	Mischfaktor zur Kombination von implizitem Euler- und Crank-Nicolson-Verfahren (Exzentrizität)	Abschnitt 3.3.4
β_f	1	Mischfaktor zur Kombination von Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen auf einer äußeren Fläche f	Abschnitt 3.3.2
β_v	1	Mischfaktor zur Kombination von Laplace-Glättung und linearelastischer Verformung	Gleichung (5.19)
χ	1	magnetische Suszeptibilität	Gleichung (4.118)
δ	m	Skintiefe	Gleichung (4.47)
δ_0	m	Skintiefe des Induktors	Abschnitt 4.3.5
δ_f	$\frac{1}{m}$	Delta-Koeffizient (inverser Betrag des Zellabstandsvektors \mathbf{d}_f)	Gleichung (3.5)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
δ_f^\perp	$\frac{1}{\text{m}}$	Delta-Koeffizient am Rand (inverser Betrag des Zellrandvektors \mathbf{d}_f^\perp)	Gleichung (3.14)
ϵ	1	Dehnungstensor	Gleichung (5.18)
$\dot{\epsilon}$	$\frac{1}{\text{s}}$	zeitliche Änderung des Dehnungstensors	Gleichung (5.18)
ϵ	$\frac{\text{s}^4 \text{A}^2}{\text{kg m}^3}$	elektrische Permittivität	Gleichung (4.3b)
ϵ_0	$\frac{\text{s}^4 \text{A}^2}{\text{kg m}^3}$	elektrische Vakuumpermittivität, elektrische Feldkonstante	Gleichung (4.3b), Gleichung (4.5)
ϵ_r	1	relative elektrische Permittivität	Gleichung (4.3b)
η	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}}$	dynamische Viskosität	Gleichung (5.2)
Γ		Gebietsrand eines Volumens, Gebiet einer Oberfläche	
$\partial\Gamma$		Gebietsrand von Γ	
Γ_∞		äußerer Rand der nicht-leitfähigen Region, numerisch trunkierter Rand	Abbildung 4.1, Abschnitt 4.1.3
Γ_\pm		Grenzfläche eines Materialübergangs mit sprunghafter Änderung von Stoffeigenschaften	Abschnitt 4.4.1
Γ_B		Übergang zum statischen Gitter, Teil des Randes von Ω_B	Abbildung 5.3
Γ_C		Rand der leitfähigen Region, Konduktoroberfläche	Abbildung 4.1
Γ_F		freie Oberfläche der Fluidregion, Teil des Randes von Ω_F	Abbildung 5.1, Abbildung 5.2
Γ_f		Gebiet der Fläche f	Abbildung 3.2, Abbildung 3.3
$\partial\Gamma_f$		Gebietsrand von Γ_f	Abschnitt 3.2
Γ_S		Substratwand der Fluidregion, Teil des Randes von Ω_F , Übergang zum statischen Gitter, Teil des Randes von Ω_B	Abbildung 5.2, Abbildung 5.3
Γ_W		feste Wand der Fluidregion, Teil des Randes von Ω_F	Abbildung 5.2
γ		Diffusivität, Gitterflexibilität, zweite Lamé-Konstante (dimensionslos)	Abschnitt 3.3, Abschnitt 4.3.3, Abschnitt 4.4.2, Gleichung (5.17), Gleichung (5.18)
γ_f		Diffusivität im Schwerpunkt der Fläche f	Gleichung (4.95)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
$\tilde{\gamma}_f$		harmonisch interpolierte Diffusivität im Schwerpunkt der Fläche f	Gleichung (4.112)
γ_N		Diffusivität im Schwerpunkt der Nachbarzelle N	Gleichung (4.98)
γ_P		Diffusivität im Schwerpunkt der Zelle P	Gleichung (4.98)
κ	$\frac{1}{\text{m}}$	doppelte mittlere Krümmung	Gleichung (5.13)
κ_f	$\frac{1}{\text{m}}$	doppelte mittlere Krümmung im Schwerpunkt der Fläche f	Gleichung (5.25)
Λ		Gebietsrand einer Oberfläche, Gebiet einer Linie	
$\partial\Lambda$		Gebietsrand von Λ , Anfangs- und Endpunkte von Λ	
Λ_e		Gebiet der Kante e	Abschnitt 5.1.4
$\partial\Lambda_e$		Gebietsrand von Λ_e , Anfangs- und Endpunkte von Λ_e	Abschnitt 5.1.4
λ	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	magnetische Diffusivität	Gleichung (4.14)
λ_1		Null-Eigenwert der Matrix \mathbf{A} zum Eigenvektor $\mathbf{v}_1 = \mathbf{1}$	Abschnitt 4.3.3
$\tilde{\lambda}_1$		modifizierter Null-Eigenwert der Matrix \mathbf{A}	Gleichung (4.71)
λ_k		Eigenwert der Matrix \mathbf{A} zum Eigenvektor \mathbf{v}_k , Nullstellen der ersten Ableitung J'_1 der Bessel-Funktion erster Art und Ordnung J_1	Abschnitt 4.3.3, Abschnitt 4.5.1
λ_ζ	m	Wellenlänge einer Kapillarwelle	Abschnitt 5.1.5
λ_{TMF}	m	Wellenlänge des TMF	Abschnitt 4.5.1
μ	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^2 \text{A}^2}$	magnetische Permeabilität	Gleichung (4.3a)
μ_0	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^2 \text{A}^2}$	magnetische Vakuumpermeabilität, magnetische Feldkonstante	Gleichung (4.3a), Gleichung (4.4)
μ_r	1	relative magnetische Permeabilität	Gleichung (4.3a)
μ_r^+	1	relative magnetische Permeabilität in Ω_C^+	Abschnitt 4.5.2
μ_r^-	1	relative magnetische Permeabilität in Ω_C^-	Abschnitt 4.5.2
ν	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	kinematische Viskosität	Abschnitt 4.2.3, Abschnitt 4.5.1, Abschnitt 5.1
Ω		Gebiet eines Volumens, Gesamtgebiet aus nicht- und leitfähiger Region	Abbildung 4.1
$\partial\Omega$		Gebietsrand von Ω	
Ω_∞		unbeschränktes Gebiet	Abschnitt 4.1
Ω_0		Gebiet der nicht-leitfähigen Region	Abbildung 4.1
Ω_B		Gebiet der Pufferregion, Region mit dynamischem Gitter	Abbildung 5.3

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
Ω_C		Gebiet der leitfähigen Region	Abbildung 4.1
Ω_C^+		Teilgebiet der leitfähigen Region (Material „+“)	Abbildung 4.7
Ω_C^-		Teilgebiet der leitfähigen Region (Material „-“)	Abbildung 4.7
Ω_F		Gebiet der Fluidregion, Region mit dynamischem Gitter	Abbildung 5.1, Abbildung 5.3
Ω_N		Gebiet der Nachbarzelle N	Abbildung 3.2
$\partial\Omega_N$		Gebietsrand von Ω_N	Abschnitt 3.3
Ω_P		Gebiet der Zelle P	Abbildung 3.2, Abbildung 3.3
$\partial\Omega_P$		Gebietsrand von Ω_P	Abschnitt 3.3
ω_0	$\frac{1}{s}$	Kreisfrequenz des Induktorstromes und der elektromagnetischen Felder	Abschnitt 4.2
ϕ	$\frac{kg}{s^3 A}$	elektrisches Potential (Skalarpotential)	Gleichung (4.18b)
φ	1	zylindrisches Koordinatensystem: φ -Koordinate (azimutal)	
π	1	Kreiszahl	
ψ		skalar-, vektor-, oder tensorwertiges Feld	Gleichung (3.16), Abschnitt 3.3, Abschnitt 4.3.3, Abschnitt 4.4.2
$\hat{\psi}$		Amplitude des Feldes ψ	Gleichung (4.42)
$\hat{\psi}_C$		komplexe Amplitude des Feldes ψ	Gleichung (4.42)
$\psi_{\Im m}$		Imaginärteil der komplexen Amplitude $\hat{\psi}_C$	Gleichung (4.45b)
$\psi_{\Re e}$		Realteil der komplexen Amplitude $\hat{\psi}_C$	Gleichung (4.45a)
$\tilde{\psi}$		Modifikation des Feldes ψ	Abschnitt 4.3.3
ψ_0		konstanter Wert als Anteil des Feldes ψ	Abschnitt 4.3.3
ψ_C		komplexe Ansatzfunktion des Feldes ψ	Gleichung (4.41)
ψ_e		Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Kante e , interpolierter Wert auf der Kante e	Gleichung (5.22), Gleichung (5.24)
ψ_f		Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Fläche f , interpolierter Wert auf der Fläche f	Gleichung (3.18), Gleichung (3.29)
$\hat{\psi}_f$		einseitig-linear interpolierter Wert des Feldes ψ auf der Fläche f	Gleichung (4.103)
$\bar{\psi}_f$		linear interpolierter Wert des Feldes ψ auf der Fläche f	Gleichung (3.31)
$\hat{\psi}_f$		Aufwind-interpolierter Wert des Feldes ψ auf der Fläche f	Gleichung (3.34)
ψ_N		Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Nachbarzelle N	Gleichung (3.17)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
ψ'_N		Extrapolierter Pseudo-Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Nachbarzelle N	Abbildung 4.9
ψ_{N_f}		Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der an f angrenzenden Nachbarzelle N	Abschnitt 3.3.3
ψ_P		Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Zelle P	Gleichung (3.17)
ψ'_P		Extrapolierter Pseudo-Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Zelle P	Abbildung 4.9
ψ_{P_k}		Wert des Feldes ψ im Schwerpunkt der Zelle P mit dem Index k	Abschnitt 3.3.3
ψ_R		Referenzwert der Funktion ψ	Gleichung (4.66)
ψ_U		konstanter Anteil bei der Interpolation des Feldes ψ auf die Fläche f	Gleichung (3.30)
$\widehat{\psi}_U$		konstanter Anteil bei der einseitig-linearen Interpolation des Feldes ψ auf die Fläche f	Gleichung (4.100)
$\bar{\psi}_U$		konstanter Anteil bei der linearen Interpolation des Feldes ψ auf die Fläche f	Gleichung (3.32)
$\acute{\psi}_U$		konstanter Anteil bei der Aufwind-Interpolation des Feldes ψ auf die Fläche f	Gleichung (3.35)
Ψ		diskreter Lösungsvektor eines linearen Gleichungssystems des Feldes ψ	Gleichung (3.44)
$\tilde{\Psi}$		Modifikation des diskreten Lösungsvektors von ψ	Abschnitt 4.3.3
ρ	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	Dichte, Dichte des Fluides in Ω_F	Abschnitt 3.3, Gleichung (5.1)
ϱ	$\frac{\text{s A}}{\text{m}^3}$	elektrische Ladungsdichte (Raumladungsdichte)	Gleichung (4.1d), Gleichung (4.10)
ϱ_S	$\frac{\text{s A}}{\text{m}^2}$	idealisierte elektrische Flächenladungsdichte	Gleichung (4.88d)
σ	$\frac{\text{s}^3 \text{ A}^2}{\text{kg m}^3}$	elektrische Leitfähigkeit	Abbildung 4.1, Gleichung (4.7), Gleichung (4.8)
σ_0	$\frac{\text{s}^3 \text{ A}^2}{\text{kg m}^3}$	elektrische Leitfähigkeit des Induktors	Abschnitt 4.3.5
σ^+	$\frac{\text{s}^3 \text{ A}^2}{\text{kg m}^3}$	elektrische Leitfähigkeit in Ω_C^+	Abschnitt 4.5.2
σ^-	$\frac{\text{s}^3 \text{ A}^2}{\text{kg m}^3}$	elektrische Leitfähigkeit in Ω_C^-	Abschnitt 4.5.2
$\boldsymbol{\sigma}$	$\frac{\text{s}^3 \text{ A}^2}{\text{kg m}^3}$	tensorielle elektrische Leitfähigkeit	Abschnitt 4.1
$\boldsymbol{\sigma}$	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$	Cauchyscher Spannungstensor	Gleichung (5.18)
$\dot{\boldsymbol{\sigma}}$	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}^3}$	zeitliche Änderung des Cauchyschen Spannungstensors	Gleichung (5.18)
ς	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$	Oberflächenspannung	Gleichung (5.13)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
τ	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$	Spannungstensor, Spannungstensor für inkompressible Strömungen	Gleichung (5.1b), Gleichung (5.2)
$\tilde{\tau}$	$\frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}$	modifizierter Spannungstensor	Gleichung (5.6)
θ	1	Winkel	
θ_1	1	Öffnungswinkel bei der kantenbasierten Induktormodellierung	Abbildung 4.6
θ_2	1	Öffnungswinkel bei der kantenbasierten Induktormodellierung	Abbildung 4.6
θ_f	1	Winkel zur Nicht-Orthogonalität der Fläche f	Gleichung (3.10)
ν	1	erste Lamé-Konstante (dimensionslos)	Gleichung (5.18)

Lateinische Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
$\mathbf{0}$		Null-Vektor	
$\mathbf{1}$		Eins-Vektor	Abschnitt 4.3.3
A	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^2 \text{ A}}$	Komponente des magnetischen Vektorpotentials in Richtung von \mathbf{e}_\circ	Abschnitt 4.1.5
\mathbf{A}	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^2 \text{ A}}$	magnetisches Vektorpotential mit Coulomb-Eichung	Gleichung (4.18a)
A_0	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^2 \text{ A}}$	aufgeprägtes magnetisches Vektorpotential	Gleichung (4.77), Gleichung (4.78)
\mathbf{A}		quadratische Matrix eines linearen Gleichungssystems	Gleichung (3.44)
$\tilde{\mathbf{A}}$		modifizierte quadratische Matrix eines linearen Gleichungssystems	Gleichung (4.71)
\mathbf{a}	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^2 \text{ A}}$	reduziertes magnetisches Vektorpotential	Gleichung (4.77), Gleichung (4.79)
a		Koeffizient der Matrix \mathbf{A}	Gleichung (3.45)
a_N		Nebendiagonalkoeffizient der Matrix \mathbf{A}	Abschnitt 3.3.3
$a_{N_{k,f}}$		Nebendiagonalkoeffizient der Matrix \mathbf{A} der über f an die Zelle P mit Index k angrenzenden Nachbarzelle N	Gleichung (3.42)
$a_{N_{k,f}}^\times$		Nebendiagonalbeitrag zu $a_{N_{k,f}}$ durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer inneren Fläche f	Gleichung (3.47)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
$a_{N_{k,f}}^{\square}$		Nebendiagonalbeitrag zu $a_{N_{k,f}}$ durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer äußeren Fläche f ($\equiv 0$)	Gleichung (3.47)
$a_{N_{k,f}}^{\boxtimes}$		Nebendiagonalbeitrag zu $a_{N_{k,f}}$ durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer Fläche f	Gleichung (3.43)
a_P		Diagonalkoeffizient der Matrix A	Abschnitt 3.3.3
a_{P_k}		Diagonalkoeffizient der Matrix A zur Zelle P mit Index k	Gleichung (3.42)
$a_{P_k}^{\blacksquare}$		Diagonalbeitrag zu a_{P_k} durch die Diskretisierung eines Volumenintegrals über die Zelle P	Gleichung (3.47)
$a_{P_{k,f}}^{\times}$		Diagonalbeitrag zu a_{P_k} durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer inneren Fläche f	Gleichung (3.47)
$a_{P_{k,f}}^{\square}$		Diagonalbeitrag zu a_{P_k} durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer äußeren Fläche f	Gleichung (3.47)
$a_{P_{k,f}}^{\boxtimes}$		Diagonalbeitrag zu a_{P_k} durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer Fläche f	Gleichung (3.43)
B_{∞}	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{A}}$	charakteristische magnetische Flussdichte auf Γ_{∞} ohne Trunkierung von Ω_{∞}	Abschnitt 4.5.1
B_0	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{A}}$	charakteristische aufgeprägte magnetische Flussdichte, charakteristische magnetische Flussdichte des RMF bzw. TMF	Abschnitt 4.5.1
B_J	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{A}}$	charakteristische magnetische Flussdichte auf dem Radius einer idealisierten Stromverteilung	Abschnitt 4.5.1
B	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{A}}$	magnetische Flussdichte, magnetisches Feld	Gleichung (4.1b)
B_0	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{A}}$	aufgeprägte magnetische Flussdichte, aufgeprägtes magnetisches Feld	
b	$\frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \text{A}}$	reduzierte magnetische Flussdichte, reduziertes magnetisches Feld	
c_0	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	Gleichung (4.6)
c_k	1	Koeffizienten der RMF -Formfunktion	Gleichung (4.128)
c_{Ref}	1	Referenzfaktor	Gleichung (4.66), Gleichung (4.67)
c_S	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	Geschwindigkeit einer Kapillarwelle	Abschnitt 5.1.5
c_V	1	Koeffizient zur Relaxation des Korrekturvolumens	Gleichung (5.36)
\mathbf{c}_f	1	normierter Zellabstandsvektor der Fläche f	Gleichung (3.6)
\mathbf{c}_f^{\perp}	1	normierter Zellrandvektor der Fläche f	Gleichung (3.15)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
D	$\frac{\text{sA}}{\text{m}^2}$	elektrische Flussdichte	Gleichung (4.1d)
D_f	m^2	flächengewichteter Zellabstandsvektor der Fläche f	Gleichung (3.9)
D_f^\perp	m^2	flächengewichteter Zellrandvektor der Fläche f	Abschnitt 3.2
D_u	$\frac{1}{\text{s}}$	Deformationstensor	Gleichung (5.3)
d_f	m	Zellabstandsvektor der Fläche f	Abbildung 3.1, Abbildung 3.2
d_f^\perp	m	Zellrandvektor der Fläche f	Abbildung 3.3
E	$\frac{\text{kg m}}{\text{s}^3 \text{A}}$	elektrische Feldstärke, elektrisches Feld	Gleichung (4.1c)
\mathcal{E}		Fehlergröße	Gleichung (4.122)
e		Kante zwischen zwei Flächen, Schwerpunkt der Kante	Abschnitt 5.1.4
e	1	Basisvektor	
e_\odot	1	Basisvektor senkrecht zu der Ebene bei zweidimensionaler Modellierung	Abschnitt 4.1.5
e_φ	1	zylindrisches Koordinatensystem: φ -Basisvektor (azimutal)	
e_r	1	zylindrisches Koordinatensystem: r -Basisvektor (radial)	
e_S	1	normierter Richtungsvektor der Substratbewegung	Gleichung (5.12)
e_x	1	kartesisches Koordinatensystem: x -Basisvektor	
e_y	1	kartesisches Koordinatensystem: y -Basisvektor	
e_z	1	kartesisches Koordinatensystem: z -Basisvektor, zylindrisches Koordinatensystem: z -Basisvektor (axial)	
F_f	$\frac{\text{kg}}{\text{s}}$	interpolierter Massestrom durch die Fläche f bezüglich der Relativgeschwindigkeit ν	Gleichung (3.36), Abschnitt 3.3.5, Abschnitt 5.1.4
f		Grenzfläche zwischen Zelle P und Nachbarzelle N , Schwerpunkt der Grenzfläche	Abbildung 3.1
f_0	$\frac{1}{\text{s}}$	Frequenz des Induktorstromes und der elektromagnetischen Felder	Abschnitt 4.2
f_c		Schnittpunkt des Zellabstandsvektors d_f mit Γ_f	Abbildung 3.2, Abbildung 3.3
f_e		Schnittpunkt des Korrekturvektors o_f mit $\partial\Gamma_f$	Abbildung 3.2, Abbildung 3.3
f	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}^2}$	Volumenkraftdichte	Gleichung (5.1b), Gleichung (5.4)

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
\tilde{f}	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}^2}$	modifizierte Volumenkraftdichte	Gleichung (5.5)
f_L	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}^2}$	Lorentz-Kraft (volumetrische Kraftdichte)	Gleichung (4.33)
$\langle f_L \rangle_t$	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}^2}$	zeitlich gemittelte Lorentz-Kraft (volumetrische Kraftdichte)	Gleichung (4.53)
G		Gradienten-Sprungfunktion	Gleichung (4.92)
G_f		Gradienten-Sprungfunktion auf der Fläche f	Gleichung (4.95)
g_C		Neumann-Randbedingung (Gradient) auf der Konduktoroberfläche	Gleichung (4.61b)
g_f		Neumann-Randwert (Gradient) auf der Fläche f	Gleichung (3.38)
g	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$	Gravitationsbeschleunigung, Gravitationsvektor	Abschnitt 5.1
H	m	charakteristische Höhe, Zylinderhöhe	Abschnitt 4.5.1
H_∞	m	Höhe der nicht-leitfähigen Region	Abschnitt 4.5.1
H	$\frac{\text{A}}{\text{m}}$	magnetische Feldstärke	Gleichung (4.1a)
\mathbf{H}		diskreter Operator beim PISO-Verfahren	Gleichung (5.27)
h		Sprungfunktion	Gleichung (4.92)
h_f		Sprungfunktion auf der Fläche f	Gleichung (4.95)
δh_f		Korrekturhöhe zum Korrekturvolumen δV_f	Gleichung (5.37)
I_0	A	Quellstrom des Induktors in Ω_0	Gleichung (4.85), Gleichung (4.86)
\hat{I}_0	A	Amplitude des Quellstromes im Induktor	Gleichung (4.85), Gleichung (4.86)
\mathbf{I}		Einheitsmatrix	Abschnitt 4.3.3
i		Index, Iterator für Koordinaten	
i		Imaginäre Einheit	
J		Fluss der Gradienten-Sprungfunktion	Abschnitt 4.4.2
J_1	1	Bessel-Funktion erster Art und Ordnung	Abschnitt 4.5.1
J'_1	1	Ableitung der Bessel-Funktion erster Art	Abschnitt 4.5.1
j		Index, Iterator für Koordinaten	
j_0	$\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$	Komponente der Quellstromdichte des Induktors in Richtung von e_\odot	Abschnitt 4.1.5
\mathbf{j}	$\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$	Stromdichte, Wirbelstromdichte im Konduktor Ω_C , Stromdichte in Ω	Abbildung 4.1, Gleichung (4.7), Gleichung (4.25)
\hat{j}_0	$\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$	Amplitude der Quellstromdichte im Induktor	Gleichung (4.40)
\mathbf{j}_0	$\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$	Quellstromdichte des Induktors in Ω_0	Abbildung 4.1

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
j_M	$\frac{A}{m^2}$	effektive Magnetisierungsstromdichte	Gleichung (4.116)
j_S	$\frac{A}{m}$	idealisierte Flächenstromdichte	Gleichung (4.88a)
K_f	m^2	flächengewichteter Korrekturvektor zur Nicht-Orthogonalität der Fläche f	Gleichung (3.8)
k		Index, Iterator für Zellen	
k_ζ	$\frac{1}{m}$	Wellenzahl einer Kapillarwelle	Abschnitt 5.1.5
k_{TMF}	$\frac{1}{m}$	Wellenzahl des TMF	Abschnitt 4.5.1
k_f	1	Korrekturvektor zur Nicht-Orthogonalität der Fläche f	Gleichung (3.7)
\tilde{k}_f	1	alternativer Korrekturvektor zur Nicht-Orthogonalität der Fläche f (parallel zu Γ_f)	Gleichung (3.7)
k_f^\parallel	1	tangentialer Anteil des Korrekturvektors k_f (parallel zur Grenzfläche Γ_f)	Gleichung (4.109)
k_f^\perp	1	normaler Anteil des Korrekturvektors k_f (senkrecht zur Grenzfläche Γ_f)	Gleichung (4.109)
L	m	charakteristische Länge	
L_e	m	Länge der Kante e	Abschnitt 5.1.4
L_e	m	längengewichteter Binormalenvektor der Kante e	Abschnitt 5.1.4
l		Index, Iterator für Zellen	
l_f	1	Richtungsvektor zur Fläche f	Gleichung (5.37)
M_J	$\frac{kg}{s^2 A}$	magnetisches Moment einer idealisierten Stromverteilung	Abschnitt 4.5.1
M	$\frac{A}{m}$	Magnetisierung	Gleichung (4.3a)
M_0	$\frac{A}{m}$	Magnetisierung des aufgeprägten Magnetfeldes	Gleichung (4.117)
m		Index, Iterationsschritt	
\dot{m}	$\frac{kg}{s}$	Massenstrom	
\dot{m}_f	$\frac{kg}{s}$	interpolierter Massenstrom durch die Fläche f	Gleichung (3.36), Abschnitt 5.1.4
m_e	1	Binormalenvektor der Kante e (orthogonal zu t_e und n_e)	Abschnitt 5.1.4
N		Nachbarzelle (Kontrollvolumen), Schwerpunkt der Nachbarzelle	Abbildung 3.1, Abbildung 3.2
n		Anzahl von Zellen, Freiheitsgrad	
\mathbf{n}	1	Normalenvektor, normierter Normalenvektor (orthogonal zu s und t)	Gleichung (4.90)
n_∞	1	Orthonormalenvektor des äußeren Randes Γ_C	Abbildung 4.1
n_B	1	Orthonormalenvektor am Übergang zum statischen Gitter bei Γ_B	Abbildung 5.3

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
n_C	1	Orthonormalenvektor der Konduktoroberfläche Γ_∞	Abbildung 4.1
n_e	1	Orthonormalenvektor der Kante e (orthogonal zu m_e und t_e)	Abschnitt 5.1.4
n_F	1	Orthonormalenvektor der freien Oberfläche Γ_F	Abbildung 5.1
n_f	1	Orthonormalenvektor der Fläche f	Abschnitt 3.2
n_S	1	Orthonormalenvektor der Substratwand Γ_S , Orthonormalenvektor am Übergang zum statischen Gitter bei Γ_S	Abbildung 5.2, Abbildung 5.3
n_W	1	Orthonormalenvektor der festen Wand Γ_W	Abbildung 5.2
O		symbolische Zusammenfassung von Termen ohne Zeitableitung	Abschnitt 3.3.4
O_P		semidiskrete symbolische Zusammenfassung von Termen ohne Zeitableitung bezüglich zur Zelle P	Abschnitt 3.3.4
O_f	1	kantengewichteter Korrekturvektor zur Schiefe der Fläche f	Gleichung (3.12)
O		Fehlerordnung	Abschnitt 4.5
o_f	1	Korrekturvektor zur Schiefe der Fläche f	Gleichung (3.11)
P		Zelle (Kontrollvolumen), Schwerpunkt der Zelle	Abbildung 3.1, Abbildung 3.2, Abbildung 3.3
P	$\frac{sA}{m^2}$	Polarisation	Gleichung (4.3b)
p	$\frac{kg}{ms^2}$	Druck	
\tilde{p}	$\frac{kg}{ms^2}$	modifizierter Druck	Gleichung (5.6)
p_B	$\frac{kg}{ms^2}$	magnetischer Druck	Gleichung (4.35)
$\langle p_B \rangle_t$	$\frac{kg}{ms^2}$	zeitlich gemittelter magnetischer Druck	Gleichung (4.54)
pf	$\frac{kg}{ms^2}$	effektiver Druck durch f , skalares Potential des Gradientenanteils von f	Gleichung (5.5)
Q		Testgröße zu Fehleranalyse	Abschnitt 4.5
Q_{Ref}		Referenzgröße zur Fehleranalyse	Abschnitt 4.5
\dot{q}	$\frac{kg}{ms^3}$	Joule-Wärme (volumetrische thermische Leistungsdichte)	Gleichung (4.36)
$\langle \dot{q} \rangle_t$	$\frac{kg}{ms^3}$	zeitlich gemittelte Joule-Wärme (volumetrische thermische Leistungsdichte)	Gleichung (4.55)
R	m	charakteristischer Radius, Zylinderradius	Abschnitt 4.5.1
R_∞	m	Radius der nicht-leitfähigen Region	Abschnitt 4.5.1
r	m	zylindrisches Koordinatensystem: r -Koordinate (radial)	

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
\mathbf{r}	m	Ortsvektor, zylindrisches Koordinatensystem: Ortsvektor, Position der Kontrollpunkte	
\mathbf{r}_f	m	Position des Kontrollpunktes zur Fläche f	Gleichung (5.38)
\mathbf{r}		Eintrag der rechten Seite \mathbf{r}	Gleichung (3.45)
\mathbf{r}_P		Eintrag der rechten Seite \mathbf{r} zur Zelle P	Abschnitt 3.3.3
\mathbf{r}_{P_k}		Eintrag der rechten Seite \mathbf{r} zur Zelle P mit Index k	Gleichung (3.42)
$\mathbf{r}_{P_k}^\blacksquare$		Beitrag zur rechten Seite \mathbf{r}_{P_k} durch die Diskretisierung eines Volumenintegrals über die Zelle P	Gleichung (3.47)
$\mathbf{r}_{P_kf}^\times$		Beitrag zur rechten Seite \mathbf{r}_{P_k} durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer inneren Fläche f	Gleichung (3.47)
$\mathbf{r}_{P_kf}^\square$		Beitrag zur rechten Seite \mathbf{r}_{P_k} durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer äußeren Fläche f	Gleichung (3.47)
$\mathbf{r}_{P_kf}^\boxtimes$		Beitrag zur rechten Seite \mathbf{r}_{P_k} durch die Diskretisierung eines Oberflächenintegrals auf einer Fläche f	Gleichung (3.47)
\mathbf{r}		rechte Seite eines linearen Gleichungssystems	Gleichung (3.44)
S	m ²	Flächeninhalt	
S_f	m ²	Flächeninhalt der Fläche f	Abschnitt 3.2
\mathbf{S}	m ²	Flächennormalenvektor	
\mathbf{S}_f	m ²	Flächennormalenvektor der Fläche f	Abbildung 3.1, Abbildung 3.2
s		Quellterm, linearisierter Quellterm	Abschnitt 3.3, Gleichung (3.70)
s_{RMF}	1	RMF-Formfunktion	Gleichung (4.127)
s_{TMF}	1	TMF-Formfunktion	Gleichung (4.133)
s_U		konstanter Anteil des Quellterms s , konstanter Quellterm	Gleichung (3.70), Abschnitt 4.3.3, Abschnitt 4.4.2
\mathbf{s}	1	normierter Tangentialvektor (orthogonal zu \mathbf{n} und \mathbf{t})	Gleichung (4.90)
T_0	s	Periodendauer des Induktorstromes und der elektromagnetischen Felder	Gleichung (4.50)
T_{F}	K	konstante Temperatur des Fluides in Ω_{F}	Abschnitt 5.1.1
T_{Ref}	K	Referenztemperatur	Abschnitt 5.1.1
t	s	Zeit	
t_0	s	Startzeitpunkt	Abschnitt 3.2
t_{CPU}	s	typische Berechnungszeit für eine Simulation	Abschnitt 4.5
Δt	s	Zeitschrittweite	Abschnitt 3.2

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
t^*	s	aktueller Zeitpunkt	Abschnitt 3.2
t°	s	Zeitpunkt des letzten Zeitschrittes	Abschnitt 3.3.4
$t^{\circ\circ}$	s	Zeitpunkt des vorletzten Zeitschrittes	Abschnitt 3.3.4
\mathbf{t}	1	normierter Tangentialvektor (orthogonal zu \mathbf{n} und \mathbf{s})	Gleichung (4.90)
\mathbf{t}_e	1	Tangentialvektor der Kante e (orthogonal zu \mathbf{m}_e und \mathbf{n}_e)	Abschnitt 5.1.4
U	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	charakteristische Geschwindigkeit	
u	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	kartesische x -Komponente der Geschwindigkeit \mathbf{u}	
u_S	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	Substratgeschwindigkeit	Abbildung 5.2
\mathbf{u}	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	Geschwindigkeit, Geschwindigkeitsvektor, Strömungsgeschwindigkeit	Abschnitt 5.1
\mathbf{u}^*	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	Zwischengeschwindigkeit	Gleichung (5.28)
V	m^3	Volumeninhalt	
δV	m^3	Volumenänderung, Korrekturvolumen	Abschnitt 5.1.4
δV_f	m^3	Korrekturvolumen zur Fläche f	Gleichung (5.36)
\dot{V}	$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$	Volumenstrom	
$\delta \dot{V}$	$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$	Korrekturvolumenstrom	Abschnitt 5.1.4
\dot{V}_f	$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$	interpolierter Volumenstrom durch die Fläche f	Gleichung (3.36), Abschnitt 5.1.4
$\delta \dot{V}_f$	$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$	Korrekturvolumenstrom zur Fläche f	Gleichung (5.34)
V_N	m^3	Volumeninhalt der Nachbarzelle N	Abschnitt 3.2
V_P	m^3	Volumeninhalt der Zelle P	Abschnitt 3.2
v	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	kartesische y -Komponente der Geschwindigkeit \mathbf{u}	
v_e		Dirichlet-Randwert auf der Kante e	Gleichung (5.24)
v_f		Dirichlet-Randwert auf der Fläche f	Gleichung (3.37)
\mathbf{v}	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	Geschwindigkeit eines bewegten Bezugssystems, Gittergeschwindigkeit	Abschnitt 3.3, Abschnitt 5.1.3
\mathbf{v}		Eigenvektor	Abschnitt 4.3.3
\mathbf{v}_1		Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zum Null-Eigenwert $\lambda_1 = 0$	Abschnitt 4.3.3
\mathbf{v}_k		Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zum Eigenwert λ_k	Abschnitt 4.3.3
w	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	kartesische z -Komponente der Geschwindigkeit \mathbf{u}	
w_f	1	Interpolationsgewicht	Gleichung (3.30)
\widehat{w}_f	1	Interpolationsgewicht der einseitig-linearen Interpolation	Gleichung (4.100)
\overline{w}_f	1	Interpolationsgewicht der linearen Interpolation	Gleichung (3.32)
\acute{w}_f	1	Interpolationsgewicht der Aufwind-Interpolation	Gleichung (3.35)
x	m	kartesisches Koordinatensystem: x -Koordinate	

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
Δ	1	dimensionslose Gitterweite, dimensionslose charakteristische Abmessung einer Zelle	Abschnitt 4.5
Δx	m	Gitterweite, charakteristische Abmessung einer Zelle	Abschnitt 3.3.4
\mathbf{x}	m	Ortsvektor, kartesisches Koordinatensystem: Ortsvektor	
\mathbf{x}_C	m	Ortsvektor innerhalb des Konduktors	
\mathbf{x}_e	m	Ortsvektor des Schwerpunktes der Kante e	Abschnitt 5.1.4
\mathbf{x}_f	m	Ortsvektor des Schwerpunktes der Fläche f	Gleichung (3.4)
\mathbf{x}_{f_c}	m	Ortsvektor des Punktes f_c	Abschnitt 3.2
\mathbf{x}_N	m	Ortsvektor des Schwerpunktes der Nachbarzelle N	Gleichung (3.2)
\mathbf{x}_P	m	Ortsvektor des Schwerpunktes der Zelle P	Gleichung (3.2)
y	m	kartesisches Koordinatensystem: y -Koordinate	
z	m	kartesisches Koordinatensystem: z -Koordinate, zylindrisches Koordinatensystem: z -Koordinate (axial)	

Mathematische Operatoren

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
$()^*$		zum aktuellen Zeitpunkt t^* , zum aktuellen Iterationsschritt	Abschnitt 3.2
$()^\circ$		zum Zeitpunkt t° des letzten Zeitschrittes, zum letzten Iterationsschritt	Abschnitt 3.3.4
$()^{\circ\circ}$		zum Zeitpunkt $t^{\circ\circ}$ des vorletzten Zeitschrittes, zum vorletzten Iterationsschritt	Abschnitt 3.3.4
$()^{\{m\}}$		zum m -ten Iterationsschritt	Abschnitt 4.3.2
$\llbracket \rrbracket$		Sprung-Operator	Gleichung (4.87)
$()^+$		Wert auf der Seite „+“ eines sprunghaften Materialübergangs bei Γ_\pm	Gleichung (4.87)
$()^-$		Wert auf der Seite „-“ eines sprunghaften Materialübergangs bei Γ_\pm	Gleichung (4.87)
$[]$		Matrix-Kennzeichnung	
$\ \ $		Norm	
$\ \ _\infty$		Maximumsnorm	Abschnitt 4.5

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
$\ \cdot \ _1$		ℓ^1 -Norm	Abschnitt 4.5
$\ \cdot \ _2$		ℓ^2 -Norm	Abschnitt 4.5
$ $		Absolutbetrag eines Skalars, Betrag eines Vektors	Gleichung (A.7)
$ ^2$		Quadrat des Betrages eines Vektors	Gleichung (A.6)
$()^T$		transponierter Vektor/Matrix	
$\{\}$		(semi-)diskrete Kennzeichnung	
$\{\}_f$		(semi-)diskreter Wert im Schwerpunkt der Fläche f , interpolierter Wert im Schwerpunkt der Fläche f	Abschnitt 3.2
$\overline{\{\}}_f$		linear interpolierter Wert im Schwerpunkt der Fläche f	Abschnitt 3.2
$\widetilde{\{\}}_f$		harmonisch interpolierter Wert im Schwerpunkt der Fläche f	Abschnitt 4.4.2
$\widehat{\{\}}_f$		einseitig-linear interpolierter Wert im Schwerpunkt der Fläche f	Abschnitt 4.4.2
$\{\}_f$		Aufwind-interpolierter Wert im Schwerpunkt der Fläche f	Abschnitt 3.2
$\{\}_N$		(semi-)diskreter Wert im Schwerpunkt der Nachbarzelle N	Abschnitt 3.2
$\{\}_P$		(semi-)diskreter Wert im Schwerpunkt der Zelle P	Abschnitt 3.2
$()_{\Im m}$		Imaginärteil der komplexen Amplitude einer Größe	Gleichung (4.45b)
$()_{\Re e}$		Realteil der komplexen Amplitude einer Größe	Gleichung (4.45a)
$\Im m ()$		Imaginärteil einer komplexen Größe	Gleichung (4.45b)
$\Re e ()$		Realteil einer komplexen Größe	Gleichung (4.45a)
$\frac{\partial}{\partial t}$		Zeitableitung, zeitliche Änderung	
$\frac{d}{dt}$		Substantielle Ableitung	Gleichung (3.21)
∂_t		Zeitableitung (Kurzform)	
∂_φ		Ortsableitung in φ -Richtung (Kurzform)	
∂_r		Ortsableitung in r -Richtung (Kurzform)	
∂_x		Ortsableitung in x -Richtung (Kurzform)	
∂_y		Ortsableitung in y -Richtung (Kurzform)	
∂_z		Ortsableitung in z -Richtung (Kurzform)	
$\bar{\nabla}$		Oberflächen-Nabla-Operator	Anhang A.3.1
∇		Nabla-Operator, Gradienten-Operator	Anhang A.3.1, Anhang A.3.2
∇^2		Laplace-Operator	Anhang A.3.1
$\nabla \cdot$		Divergenz-Operator	Anhang A.3.3
$\nabla \times$		Rotations-Operator	Anhang A.3.4

Symbol	Einheit	Beschreibung	Bezug
δ		kleine Änderung	
\sim		größenordnungsmäßige Gleichheit (Abschätzung)	
\approx		approximative Gleichheit (numerische Näherung)	
$\hat{=}$		formelle Gleichheit (symbolische Ersetzung)	
\equiv		identische Gleichheit (räumlich-zeitliche Identität)	
$\stackrel{!}{=}$		erzwungene Gleichheit (Zwangsbedingung, Kompatibilität)	
\sum_f^{\boxtimes}		Summe über alle Flächen f einer Zelle	Gleichung (3.28)
\sum_f^{\square}		Summe über äußere Flächen f einer Zelle	Gleichung (3.28)
\sum_f^{\times}		Summe über innere Flächen f einer Zelle	Gleichung (3.28)
$\overline{(\)}$		Strecke	
\parallel		parallel	
\nparallel		nicht parallel	
\perp		senkrecht	
$\langle \rangle_t$		zeitlicher Mittelwert	Gleichung (4.50)
$(\)'$		zeitliche Fluktuation	Gleichung (4.51)
\circ		Skalar-, Vektor- oder Tensorprodukt	Anhang A.2.1, Anhang A.2.4, Anhang A.2.3
\cdot		Skalarprodukt (inneres Produkt)	Anhang A.2.1
$:$		Doppeltes inneres Produkt	Anhang A.2.2
\times		Vektorprodukt (Kreuzprodukt), innere Flächen einer Zelle	Anhang A.2.4, Gleichung (3.28)
\square		äußere Flächen einer Zelle	Gleichung (3.28)
\boxtimes		alle Flächen einer Zelle	Gleichung (3.28)
\cap		Schnittmenge	
\cup		Vereinigungsmenge	
\wedge		Konjunktion (und-Verknüpfung)	
\vee		Disjunktion (oder-Verknüpfung)	
\setminus		Komplementärmenge	
\subset		Teilmenge	

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Bei der Auswahl und Auswertung des Materials sowie bei der Herstellung des Manuskripts habe ich Unterstützungsleistungen von folgenden Personen erhalten:

– keine –

Weitere Personen waren an der geistigen Herstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich nicht die Hilfe eines kommerziellen Promotionsberaters in Anspruch genommen. Dritte haben von mir keine geldwerten Leistungen für Arbeiten erhalten, die in Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und ist auch noch nicht veröffentlicht worden.

Diese Promotionsordnung der Fakultät Maschinenwesen der Technischen Universität Dresden wird anerkannt.

Dresden, der 29. August 2017

Dipl.-Ing. Pascal Beckstein