

Simulation von Mehrkomponenten-Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

genehmigte Dissertation

von

Irenäus Wlokas

aus

Duisburg

Referent: Prof. Dr.-Ing. Dieter Hänel

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Ernst von Lavante

Tag der mündlichen Prüfung: 18. Dezember 2006

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Assistent am Institut für Verbrennung und Gasdynamik der Universität Duisburg-Essen.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr.-Ing. Dieter Hänel, für seine Unterstützung und die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Ernst von Lavante danke ich herzlichst für die Übernahme des Korreferates.

Für die Anregung in Form zahlreicher Diskussionen danke ich den Herren Dipl.-Ing. Markus Finck, Dipl.-Math. Rainer Kaiser, Dr.-Ing. Udo Lantermann und vor allem Dr.-Ing. Roland Vilsmeier.

Allen übrigen Professoren, Mitarbeitern und Studenten am Institut für Verbrennung und Gasdynamik danke ich für die freundschaftliche Zusammenarbeit.

Duisburg im Sommer 2006

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Modellierung	5
2.1	Navier-Stokes-Gleichungen im Grenzfall kleiner Mach-Zahlen	5
2.1.1	Erhaltungsgleichungen	5
2.1.2	Transportgleichungen	6
2.1.3	Dimensionsanalyse der Navier-Stokes-Gleichungen	7
2.1.4	Asymptotische Entwicklung für kleine Mach-Zahlen	8
2.1.5	Physikalische Interpretation des Druckes	10
2.2	Molekulare Transportvorgänge	11
2.2.1	Reibungsspannungen und Viskosität	12
2.2.2	Diffusiver Stofftransport	13
2.2.3	Diffusiver Wärmetransport	16
2.2.4	Transportgrößen in Gemischen	17
2.3	Modellierung chemischer Reaktionen	18
2.4	Erhaltungs- und Transportgleichungen von reaktiven Strömungen	20
2.4.1	Gleichungen in konservativer Form	21
2.4.2	Vollständige Transportgleichungen	21
2.4.3	Transportgleichungen des inkompressiblen Fluides	22
2.4.4	Gleichungen für rotationssymmetrische Probleme	23
3	Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen für kleine Mach-Zahlen	25
3.1	Helmholtz-Hodge-Zerlegung	26
3.2	Familie der Druckkorrektur-Verfahren	28
3.3	Fractional-Step-Methode – Projektionsverfahren	29
3.3.1	Explizite Diskretisierung und Integration in der Zeit	33
3.3.2	Diskrete Formulierung der Poisson-Gleichung für den Druck	36
3.3.3	Diskretisierung der Ortsableitungen	41

3.4	Lösungsverfahren für das elliptische Unterproblem	48
3.5	Formulierung der Anfangs- und Randbedingungen	51
3.5.1	Boundary-Fitting-Randbedingung	52
3.5.2	Randbedingungen an den Ein- und Ausströmrändern	55
3.5.3	Bestimmung der Körperkontur auf einem ebenen, kartesischen Gitter	56
4	Die Lattice-BGK-Methode	59
4.1	Diskretisierung der BGK-Gleichung	60
5	Gitterverfeinerung	63
5.1	Transferoperatoren für Druckkorrektur-Verfahren	64
5.2	Skalierung der Zeitschrittweite für ein Druckkorrektur-Verfahren	65
5.3	Grundalgorithmus der hierarchischen Gitterverfeinerung	67
6	Theoretischer Leistungsvergleich vorgestellter Algorithmen	69
6.1	Speicherbedarf der eingesetzten Verfahren	69
6.2	Theoretischer Rechenzeitbedarf der eingesetzten Verfahren	70
7	Validierung vorgestellter Verfahren	73
7.1	Inkompressible Nischenströmung	74
7.2	Zylinderumströmung im Kanal	79
7.3	Strömung um eine Reihe poröser Brenner	83
8	Beispiele technischer Anwendung	87
8.1	Synthesereaktor zur Herstellung von Diamantpartikeln	88
8.2	Modellierung und Simulation der Diamant-Reaktorströmung	89
8.3	Reaktor zur Synthese von Siliziumkarbid	95
8.3.1	Messtechnische Einbauten und Restriktionen	97
8.3.2	Thermische Grenzen der Materialien	98
8.3.3	Anforderungen an die Prozess-Inertgase	98
8.3.4	Ergebnisse der Strömungssimulation	99
9	Zusammenfassung und Ausblick	109
A	Kurze Einführung in die verwendete Vektornotation	111
B	Differentialoperatoren in zylindrischen Koordinaten	114
C	Grunddatentypen der hierarchischen Gitterverfeinerung	116

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	Frequenzfaktor
a	Schallgeschwindigkeit
C	Courant-Zahl
c, c_α	spezifische Stoffmenge (Konzentration)
c_p	Wärmekapazität
c_s	künstliche Schallgeschwindigkeit des LBGK-Modells
$c_{p,\alpha}$	Wärmekapazität der Komponente α
$D_{\alpha\beta}$	binärer Diffusionskoeffizient
$D_{\alpha,m}$	mittlerer Diffusionskoeffizient der Komponente α
Da	Damköhler-Zahl
e	innere Energie
E_a	Aktivierungsenergie
e_t	totale innere Energie
f	Geschwindigkeitsverteilungsfunktion
f^{eq}	Maxwell-Verteilung
h	Enthalpie
h_t	totale Enthalpie
k_B	Boltzmann-Konstante
K_c	Gleichgewichtskonstante der Rückreaktion
k_f, k_b	Reaktionskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion
L	Länge
M	Molmasse eines Gasgemisches
m	Masse
M_α	Molmasse der Komponente α
m_α	Masse der Komponente α
Ma	Mach-Zahl
N_L	Loschmidt-Zahl

p	Druck
$p^{(0)}$	thermodynamischer Druck
$p^{(1)}$	dynamischer Druck
Pr	Prandtl-Zahl
R	Gas-Konstante
R_m	universelle Gas-Konstante
R_α	Gas-Konstante der Komponente α
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
T	Temperatur
t	Zeit
t_l	Gewichtungsfaktoren der diskreten Maxwell-Verteilung
W_γ	Geschwindigkeit der Reaktion γ
Δt	Zeitschrittweite
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	diskrete Ortsschrittweite
ϵ/k	Lennard-Jones Parameter
\mathbf{I}	Einheitstensor
\mathbf{k}	Volumenkraftdichte
$\dot{\mathbf{m}}_\alpha$	Massenstromdichte der Komponente α
\mathbf{n}	Normalenvektor
$\dot{\mathbf{q}}$	Wärmestromdichte
\dot{Q}	Wärmequelle
$\dot{\mathbf{q}}_D$	Wärmestromdichte durch Diffusion
$\dot{\mathbf{q}}_\lambda$	Wärmestromdichte durch Wärmeleitung
\mathbf{R}	Drehmatrix
\dot{r}_α	massenbezogene Bildungsgeschwindigkeit der Komponente α
Res	Residuum der diskreten Ortsableitungen
\mathbf{S}	Reibungsspannungstensor
\mathbf{T}	Cauchyscher Spannungstensor
\mathbf{u}, \mathbf{v}	Geschwindigkeiten
\mathbf{V}_α	Diffusionsgeschwindigkeit der Komponente α
\mathcal{V}	geschlossenes Integrationsgebiet
$\partial\mathcal{V}$	Berandung des Integrationsgebietes
$\mathbf{x} = (x, y, z)$	Ortsvektor in kartesischen Koordinaten
$\mathbf{x} = (r, \Theta, z)$	Ortsvektor in zylindrischen Koordinaten

Griechische Buchstaben

α	Runge-Kutta-Verfahrensparameter
$\delta_{\alpha\beta}$	Kronecker-Delta
$\dot{\omega}_\alpha$	Bildungsgeschwindigkeit der Komponente α
η	dynamische Viskosität
η_α	dynamische Viskosität der Komponente α
κ	Isentropenexponent
λ	Wärmeleitfähigkeit
λ_α	Wärmeleitfähigkeit der Komponente α
μ_α^0	chemisches Standardpotential der Komponente α
ν	kinematische Viskosität
ν', ν''	stöchiometrische Koeffizienten
Ω	dimensionsloser Relaxationsparameter des LBGK-Modells
ω	Stoßfrequenz, Relaxationsparameter des BGK-Modells
$\Omega_\eta, \Omega_\lambda$	dimensionsloses Stoßintegral
ρ, ρ_α	Dichte
ρ_α	Partialdichte der Komponente α
σ_0	Stoßquerschnitt
Θ_α	Thermodiffusionsverhältnis
ε	kleine Größe
φ	skalare Feldgröße
ξ_α	Massenbruch der Komponente α
ζ_α	Molenbruch der Komponente α
ξ	Molekülgeschwindigkeit

Operatoren

div	Divergenz-Operator
grad	Gradient-Operator
div grad	Laplace-Operator
$\frac{D}{Dt}$	substantielle Ableitung

(hochgestellte) Indizes

n	Zeitschritt-Index
t	Iterations-Index

Indizes

∞	Größen der ungestörten Anströmung
ref	Referenzgrößen
α, β	Index der Stoffspezie
γ	Elementarreaktion

1 Einleitung

Ziel der Arbeit ist die Entwicklung und Anwendung von numerischen Verfahren zur Simulation von reaktiven und nichtreaktiven Mehrkomponenten-Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen. Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen sind dadurch gekennzeichnet, dass der Druck nur schwach oder gar nicht von der Dichte abhängt. Die Kompressibilität $p(\rho)$ ist somit gering, oder anders ausgedrückt, die Schallgeschwindigkeit $a = dp/d\rho|_{s=const.}$ ist sehr viel größer als die Strömungsgeschwindigkeit des Fluides. Nahezu alle im Verhältnis zu der Schallgeschwindigkeit langsamen Strömungen mit signifikanten Dichteunterschieden aufgrund unterschiedlicher Effekte, wie Temperatur, die Zusammensetzung oder durch Volumenkräfte, fallen in die Klasse der Strömung kleiner Mach-Zahlen. Bei homogener Stoffzusammensetzung und konstanter Temperatur und der daraus resultierenden Abwesenheit von Dichteunterschieden im Strömungsfeld tritt der Grenzfall des inkompressiblen Fluides ein. Die Strömung im Grenzfall kleiner Mach-Zahlen, einschließlich der Strömung inkompressibler Fluide, deckt ein weites Spektrum technischer und natürlicher Anwendungen ab. Das Anwendungsfeld reicht von der Berechnung atmosphärischer Strömungen in Wetter- und Klimaforschung bis zur Strömung in Brennkammern und chemischen Reaktoren. Der Anwendungsschwerpunkt wurde hier auf die Simulation der Strömung in chemischen Synthesereaktoren gelegt.

Die Mach-Zahl, das heißt das Verhältnis von Strömungsgeschwindigkeit zu Schallgeschwindigkeit, hat wesentlichen Einfluss auf die mathematischen Eigenschaften der zu Grunde liegenden Erhaltungsgleichungen eines Fluides und damit auf die Formulierung eines numerischen Lösungsverfahrens für diese Gleichungen. Traditionell haben die numerischen Methoden für kompressible Strömungen, also für endliche Machzahlen, ihren Ursprung in der Aerodynamik und basieren auf den zeitabhängigen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Die Dichte ist dabei eine primäre Erhaltungsgröße neben dem spezifischen Impuls und der Gesamtenergie. Die numerischen Lösungsverfahren basieren dabei auf der Existenz endlicher Charakteristiken des Systems hyperbolischer, partieller Differentialgleichungen im Orts- und Zeitraum (im Falle reibungsfreier Strömungen). Zu dieser Klasse von Verfahren gehören sowohl räumlich zentral als auch advektiv (upwind) diskretisierte Schemata, zum Beispiel [43, 33]. Diese dichte-basierten

Methoden ermöglichen Lösungen in einem weiten Mach-Zahlenbereich einschließlich eingebetteter Diskontinuitäten. Sie versagen aber bei kleinen Mach-Zahlen, da hierbei die Eigenwerte degenerieren und die Kopplung zwischen Druck und Dichte schwach wird.

Auf der anderen Seite existieren Verfahren zur Lösung von Strömungen inkompressibler Fluide bei konstanter Dichte, das heißt für Mach-Zahlen gegen Null. Die primäre Lösungsvariable ist dabei in den meisten Fällen der Druck neben den Geschwindigkeiten als weitere Variable. Der Druck ändert dabei seine physikalische Bedeutung von einer Zustandsgröße (thermodynamischer Druck) zu einem skalaren Wert, der die Massenerhaltung sichert (hydrodynamischer Druck). Im allgemeinen wird zur Lösung des resultierenden Systems der Erhaltungsgleichungen eine Prädiktor-Korrektor-Formulierung gewählt, die für die Erhaltung der Masse zu einer elliptischen Poisson-Gleichung für den Druck führt. Zu dieser Klasse von Verfahren gehören alle Druckkorrekturverfahren, wie sie zum Beispiel in den nachfolgenden Kapiteln diskutiert werden und die auf A. J. Chorin [7], V. Patankar [39, 38] und J. B. Bell [2, 1] zurückgehen. Diese druck-basierten Verfahren eignen sich deshalb besonders für verschwindende, beziehungsweise kleine Mach-Zahlen, versagen aber bei hohen Mach-Zahlen.

Für die in dieser Arbeit angesprochenen Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen bieten sich damit sofort die druck-basierten Methoden in Form von Druckkorrekturverfahren an. Da hierbei schwache Kompressibilität als auch variable Dichte infolge Temperatur- oder Konzentrationsänderungen zugelassen werden, werden zusätzlich zur Druck- und Impulsgleichung die Energie- und Spezieserhaltungsgleichungen mit erfasst. Beispielhaft seien hierzu die asymptotischen Entwicklungen für kleine Mach-Zahlen genannt, [29, 21] mit einer Anzahl weiterer Referenzen zu dieser Klasse von Strömungen. Das Lösungskonzept auf der Basis druck-basierter Methoden bildet die Grundlage der hier durchgeführten Verfahrensentwicklungen.

Neben diesem druck-basierten Konzept für kleine Mach-Zahlen sei zusätzlich der alternative Weg ausgehend von den dichte-basierten Methoden erwähnt. Um hierbei die Konsequenzen aus degenerierenden Eigenwerten bei kleinen Mach-Zahlen zu umgehen, wird eine künstliche Kompressibilität (Schallgeschwindigkeit) eingeführt und numerisch über Vorkonditionierung der Lösungsmatrix implementiert. Beispiele hierzu sind die Arbeiten von A. J. Chorin [7], E. Turkel [51] und C. Viozat [52]. Da durch die veränderten Charakteristiken der Gleichungen die Zeitgenauigkeit nicht gegeben ist, sind weitere Modifikationen dieser Verfahren notwendig [23].

Ziel dieser Arbeit ist, wie bereits eingangs aufgeführt, die Modellierung, die Entwicklung und die Anwendung numerischer Verfahren zur Simulation von Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen. Die Modellierung der Mehrkomponenten-Strömung im Grenz-

fall kleiner Mach-Zahlen ist Inhalt des Kapitels zwei. Dazu gehört die Herleitung der das System beschreibenden Transport- und Erhaltungsgleichungen mittels einer asymptotischen Entwicklung für den hier betrachteten Grenzfall und die Auswahl geeigneter Modelle zur Beschreibung des Stoff- und Wärmetransports.

Im darauf folgenden Kapitel drei werden die numerischen Grundlagen zur Lösung der resultierenden Gleichungen formuliert. Besonders wird auf die Klasse der Projektionsverfahren eingegangen, aus denen das hier eingesetzte Lösungsverfahren der Navier-Stokes-Gleichungen entwickelt wird. Diskutiert wird in diesem Kapitel weiterhin die Formulierung der Randbedingungen auf kartesischen Gittern.

Alternativ zu dem Kontinuumsansatz wird im Kapitel vier kurz auf die Formulierung der Lattice-Boltzmann-Methoden eingegangen. Diese bilden eine diskrete Methode zur Lösung der Boltzmann-Gleichung und repräsentieren für kleine Knudsen- und kleine Mach-Zahlen die Navier-Stokes-Gleichungen eines inkompressiblen Fluides. Ergebnisse dieser Methoden werden zum Vergleich mit Lösungen des hier vorgestellten Druckkorrektur-Verfahrens genutzt.

Im Kapitel fünf wird die Verwendung kartesischer Gitter zur Diskretisierung des Rechengebietes diskutiert. Zunächst erscheinen solche Gitter geometrisch unflexibel, ihre Vorteile sind jedoch die gut kontrollierbare Genauigkeit der Näherungslösung und sie zeichnen sich durch einen geringen algorithmischen Aufwand aus. Um dennoch komplexe Geometrien und Strömungsdetails hinreichend genau auflösen zu können, wurde eine hierarchische Gitterverfeinerung implementiert, wie sie vielfach für kartesische Gitter Verwendung findet, jedoch mit der weniger üblichen Möglichkeit auch Verfeinerungsgitter zu verwenden, die nicht punkt-konform auf dem gröberen Gitter liegen.

Die hier vorgestellten Verfahren wurden anhand klassischer Strömungsprobleme für die inkompressiblen als auch stark temperaturabhängigen Fälle validiert. Zum Vergleich wurden Lösungen von klassischen und speziell gestellten Strömungsproblemen herangezogen. Diese Probleme wurden mit bereits geprüften Verfahren ausführlich untersucht, so dass durch direkten Vergleich Schlüsse über die Güte der hier entwickelten Methoden gezogen werden konnten. Im Kapitel sechs wird daher ein theoretischer Leistungsvergleich zwischen der Lattice-BGK-Methode und dem hier entwickelten Druckkorrektur-Verfahren gezogen, bevor im Kapitel sieben die Validierungsfälle vorgestellt werden.

Das letzte Kapitel dieser Arbeit widmet sich der Anwendung auf reelle Reaktorgeometrien. Die erste Anwendung behandelt einen Reaktor zur Gasphasensynthese von Diamantpartikeln. Gegenstand der Untersuchung war die Reaktorströmung bei unterschiedlich gestalteten Gaszuführungen. Im zweiten Fall wurde das hier vorgestellte Verfahren für die Auslegung eines Reaktors zur Züchtung von Siliziumkarbid-Kristallen verwendet.

Die niedrige Strömungsgeschwindigkeit und die extremen thermischen Verhältnisse in dem Synthesereaktor stellen eine optimale Anwendung für die hier entwickelten Verfahren. Ziel der Untersuchung war die Auswahl geeigneter Inertgase für den Syntheseprozess und die Gestaltung der Reaktorgeometrie hinsichtlich der Prozessanforderungen.

2 Modellierung

Als Ausgangspunkt der analytischen Betrachtung sollen zunächst die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie im kontinuumsmechanischen Ansatz verwendet werden. Im Fall Newtonscher Fluide resultieren diese in den bekannten Navier-Stokes-Gleichungen. Folgende Abschnitte widmen sich der Untersuchung ihrer Eigenschaften bei kleinen Mach-Zahlen, sowie der Herleitung der zu diskretisierenden Gleichungen in nicht-konservativer Form.

Ein weiterer sehr wichtiger Aspekt der Modellierung von reagierenden Mehrkomponenten-Strömungen ist der molekulare Wärme- und Stofftransport sowie die Änderung der Zusammensetzung durch chemische Reaktionen. Die in dieser Arbeit verwendeten Modelle des diffusiven Transports werden ebenfalls in diesem Kapitel vorgestellt.

2.1 Navier-Stokes-Gleichungen im Grenzfall kleiner Mach-Zahlen

2.1.1 Erhaltungsgleichungen

Die Navier-Stokes-Gleichungen in der *Erhaltungform* sind Bilanzgleichungen in einem Gebiet \mathcal{V} für die Masse, Speziesmasse, Impuls und Energie, ausgedrückt durch die Dichte ρ , die Partialdichten ρ_α , den spezifischen Impuls $\rho\mathbf{u}$ und die spezifische totale Energie ρe_t . Für die asymptotische Entwicklung der Gleichungen bezüglich kleiner Geschwindigkeiten werden Quellterme, die aus den Volumenkäften und chemischen Reaktionen resultieren, nicht berücksichtigt. Weiterhin wird von nur einer Fluidspezies ausgegangen, so dass die Zeitskala des Stofftransportes bei der Betrachtung zunächst unberücksichtigt bleibt. Die resultierenden Gleichungen sind dann:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{grad} p = \operatorname{div} \mathbf{S} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \operatorname{div}(\rho h_t \mathbf{u}) = \operatorname{div} \mathbf{S} \mathbf{u} + \operatorname{div} \dot{\mathbf{q}} \quad (2.3)$$

mit dem Reibungsspannungstensor \mathbf{S} , der totalen inneren Energie e_t , der totalen Enthalpie h_t und der Wärmestromdichte $\dot{\mathbf{q}}$. Im einzelnen ist der Reibungsspannungstensor eines Newtonschen Fluides

$$\mathbf{S} = \eta \left(\operatorname{grad} \mathbf{u} + (\operatorname{grad} \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \quad (2.4)$$

mit der dynamischen Zähigkeit η und dem Einheitstensor \mathbf{I} . Die totale innere Energie bildet sich aus der Summe der thermischen und kinetischen Energie bzw. Enthalpie

$$e_t = e + \frac{1}{2} u^2 = c_v T + \frac{1}{2} u^2 \quad \text{und} \quad h_t = h + \frac{1}{2} u^2 = c_p T + \frac{1}{2} u^2 . \quad (2.5)$$

Für spätere Betrachtungen ist es sinnvoll, an dieser Stelle die innere Energie mit der Enthalpie wie folgt zu bilden

$$e_t = \left(h - \frac{p}{\rho} \right) + \frac{1}{2} u^2 = h_t - \frac{p}{\rho} . \quad (2.6)$$

Die Wärmestromdichte $\dot{\mathbf{q}}$ wird durch das Fouriersche Wärmeleitungsgesetz beschrieben

$$\dot{\mathbf{q}} = \lambda \operatorname{grad} T . \quad (2.7)$$

Finite-Volumen-Verfahren bauen gewöhnlich auf der konservativen Formulierung auf. Das Volumenintegral über die Divergenz-Operatoren kann dann mit dem Integralsatz von Gauß in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden. Die Integralform der Erhaltungsgleichungen wurde in dieser Arbeit nicht verwendet.

2.1.2 Transportgleichungen

Die Basis der angestrebten Finite-Differenzen-Diskretisierung bildet eine *nicht-konservative* Formulierung der Erhaltungsgleichungen. Hierzu wird ein Satz von Feldgrößen gewählt, der das Strömungsfeld hinreichend beschreibt, zum Beispiel $[\rho, \mathbf{u}, h_t]^T$. Diese werden in der Literatur oft unter dem Begriff *primitive Variablen* geführt. Anschließend werden aus den konservativen Erhaltungsgleichungen (Bilanzgleichungen der Erhaltungsgrößen), Gleichungen für diese Variablen abgeleitet. Das geschieht formal durch subtrahieren der Massenerhaltungsgleichung (2.1) multipliziert mit dem Geschwindigkeitsvektor von der Impulserhaltungsgleichung (2.2) und multipliziert mit der totalen Enthalpie von der Energieerhaltungsgleichung (2.3). Die resultierenden Transportgleichungen für den gewählten Satz intensiver Feldgrößen sind dann

$$\frac{D}{Dt} \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{D}{Dt} \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \text{grad } p = \frac{1}{\rho} \text{div } \mathbf{S} + \mathbf{k} \quad (2.9)$$

$$\frac{D}{Dt} h_t = \frac{1}{\rho} (\text{div}(\mathbf{S}\mathbf{u}) + \text{div } \dot{\mathbf{q}} + w) + \mathbf{u} \cdot \mathbf{k} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (2.10)$$

mit der substantiellen Ableitung für eine transportierte Größe φ

$$\frac{D}{Dt} \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{grad } \varphi \cdot \mathbf{u}. \quad (2.11)$$

2.1.3 Dimensionsanalyse der Navier-Stokes-Gleichungen

Einen ersten Schritt zur Analyse der vorliegenden Gleichungen bildet die Normierung bezüglich der zu untersuchenden Skalen. Im Falle des zu untersuchenden asymptotischen Verhaltens bei kleinen Mach-Zahlen, sind die Referenzgrößen so zu wählen, dass die dimensionslose Geschwindigkeit die Ordnung $O(1)$ bei kleinen Geschwindigkeiten behält. Die dimensionsbehafteten Größen, vorläufig mit einem Dach $\hat{}$ gekennzeichnet, sind dann:

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} L, \quad \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} u_\infty, \quad \hat{t} = t \frac{u_\infty}{L}, \quad \hat{\rho} = \rho \rho_\infty, \quad \hat{\eta} = \eta \eta_\infty, \quad \hat{\lambda} = \lambda \lambda_\infty$$

und mit $a_\infty^2 = \kappa R T_\infty$ (2.12)

$$\hat{p} = p \left(\rho_\infty \frac{a_\infty^2}{\kappa} \right), \quad \hat{e} = \frac{1}{\kappa - 1} T \left(\frac{a_\infty^2}{\kappa} \right), \quad \hat{h} = \frac{\kappa}{\kappa - 1} T \left(\frac{a_\infty^2}{\kappa} \right).$$

Ersetzen der dimensionsbehafteten Größen mit den Ausdrücken aus Gleichung (2.12) und sortieren bezüglich der dimensionslosen Koeffizienten führt zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\kappa Ma^2} \text{grad } p = \frac{1}{Re} \text{div } \mathbf{S} \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho e_t + \text{div}(\rho h_t \mathbf{u}) = \frac{\kappa Ma^2}{Re} \text{div } \mathbf{S}\mathbf{u} + \frac{1}{Re Pr} \text{div } \dot{\mathbf{q}} \quad (2.15)$$

mit den dimensionslosen Größen

$$h_t = h + \kappa Ma^2 \frac{u^2}{2} \quad \text{und} \quad e_t = h_t - \frac{p}{\rho}.$$

Der Übersicht halber wurde angenommen, dass alle Materialgrößen konstant sind, da dies keinen Einfluss auf die Entwicklung nach kleinen Mach-Zahlen hat. Die dimensionslosen Kennzahlen sind

$$\begin{aligned} \text{Mach-Zahl} \quad Ma &= \frac{u_\infty}{a_\infty}, \\ \text{Reynolds-Zahl} \quad Re &= \frac{\rho_\infty u_\infty L}{\eta_\infty} \quad \text{und} \\ \text{Prandtl-Zahl} \quad Pr &= \frac{\eta_\infty c_p}{\lambda}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Selbst ohne eine spezielle Untersuchung ist schon zu diesem Zeitpunkt offensichtlich, dass in der Energieerhaltungsgleichung Koeffizienten von Ma^2 bei kleinen Mach-Zahlen vernachlässigt werden dürfen. Weiterhin ist zu bemerken, dass aus diesem Grund Terme der kinetischen Energie in dieser Formulierung verschwinden, so dass die totale innere Energie nicht erhalten wird. Die Energieerhaltungsgleichung (2.15) reduziert sich dann zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h + \operatorname{div}(\rho h \mathbf{u}) = \frac{1}{Re Pr} \operatorname{div} \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial p}{\partial t} , \quad (2.17)$$

mit dem Wärmestrom als dimensionslosen Gradienten der Enthalpie

$$\dot{\mathbf{q}} = \operatorname{grad} h = \frac{\kappa}{\kappa - 1} \operatorname{grad} T \quad (2.18)$$

für konstante Materialkoeffizienten.

2.1.4 Asymptotische Entwicklung für kleine Mach-Zahlen

Ein genauer Blick auf die Impulserhaltungsgleichung (2.14) verrät potentielle Schwierigkeiten, die bei dem Übergang zu kleinen Mach-Zahlen auftreten können. Da die Machzahl vor dem Gradienten des Druckes im Nenner auftritt, werden für $Ma \rightarrow 0$ alle anderen Terme klein dagegen. Offensichtlich müssen unterschiedliche Skalen betrachtet werden. Die Methodik der asymptotischen Entwicklung der Euler-Gleichung bezüglich der Mach-Zahl geht in neuerer Zeit auf Klein [29] und Klein & Munz [21, 44] zurück und wird ausführlich in [35] erklärt. Dazu wird ein Störansatz gewählt und alle Feldgrößen werden als Potenzreihen von κMa^2 entwickelt, da die Gleichungen (2.13), (2.14) und (2.15) nur diese Kombination enthalten

$$f = \varepsilon^0 f^{(0)} + \varepsilon^1 f^{(1)} + \varepsilon^2 f^{(2)} + \dots \quad \text{mit} \quad \varepsilon = \kappa Ma^2 . \quad (2.19)$$

Diese Entwicklung wird auf die Erhaltungsgrößen angewendet unter Berücksichtigung der Tatsache, dass zum Beispiel der spezifische Impuls $\rho \mathbf{u}$ das Produkt aus *Dichte* mal *Geschwindigkeit* ist. Beispielhaft für den spezifischen Impuls führt das zu

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{u} &= (\rho \mathbf{u})^{(0)} + \varepsilon (\rho \mathbf{u})^{(1)} + O(\varepsilon^2) \\ &= (\rho^{(0)} + \varepsilon \rho^{(1)} + O(\varepsilon^2)) (\mathbf{u}^{(0)} + \varepsilon \mathbf{u}^{(1)} + O(\varepsilon^2)) \\ &= \rho^{(0)} \mathbf{u}^{(0)} + \varepsilon (\rho^{(0)} \mathbf{u}^{(1)} + \rho^{(1)} \mathbf{u}^{(0)}) + O(\varepsilon^2) . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Einsetzen der so entwickelten Größen in die Impulserhaltungsgleichung (2.14) und sortieren nach Potenzen von $\varepsilon = \kappa Ma^2$ liefert

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u})^{(0)} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u})^{(0)} - \frac{1}{Re} \operatorname{div} \mathbf{S}^{(0)} + \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{grad} p^{(0)} + \operatorname{grad} p^{(1)} + O(\varepsilon) = 0 . \quad (2.21)$$

Im Grenzfall kleiner Mach-Zahlen darf gefordert werden, dass Koeffizienten von ε und Terme der Ordnung $O(\varepsilon)$ verschwinden. Damit folgt aus der Gleichung (2.21) für die nullte Ordnung

$$\text{grad } p^{(0)} = 0 \quad , \quad (2.22)$$

was gleichbedeutend mit

$$p^{(0)} = p^{(0)}(t) \quad (2.23)$$

ist und für die erste Ordnung folgt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u})^{(0)} + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u})^{(0)} + \text{grad } p^{(1)} = \frac{1}{Re} \text{div } \mathbf{S}^{(0)} \quad . \quad (2.24)$$

Das Einsetzen der nach Gleichung (2.19) entwickelten Größen in die Zustandsgleichung idealer Gase führt zu einem Ausdruck für den thermodynamischen Druck

$$p^{(0)} + \varepsilon p^{(1)} = \rho^{(0)} T^{(0)} + O(\varepsilon) \quad (2.25)$$

und mit dem Ergebniss (2.23) der Gleichung (2.22) ergibt sich

$$p(\mathbf{x}, t) = p^{(0)}(t) + \varepsilon p^{(1)}(\mathbf{x}, t) \quad , \quad (2.26)$$

so dass schließlich folgt

$$p^{(0)}(t) = \rho(\mathbf{x}, t) \cdot T(\mathbf{x}, t) \quad . \quad (2.27)$$

Das ist ein wichtiger Schluss, besonders für offene, isobare Systeme, für die die Annahme gilt, dass der thermodynamische Druck $p^{(0)}$ konstant in der Zeit ist. Dort wird die Energiegleichung in der ρh -Formulierung (2.17) für kalorisch ideale Gase ($c_p = \text{const.}$) stationär und liefert eine Beziehung für die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes

$$\text{div } \mathbf{u} = \frac{1}{\rho h} \left(\frac{1}{Re Pr} \text{div } \dot{\mathbf{q}} + \frac{\partial p^{(0)}}{\partial t} \right) \quad . \quad (2.28)$$

Es ist sofort erkennbar, dass für isotherme Strömungen mit einer homogenen Zusammensetzung und konstanten thermodynamischen Druck die Gleichung (2.13) sich auf die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes reduziert, wie vom inkompressiblen, isothermen Fluid zu erwarten wäre. Um die Enthalpie zu berechnen, muss auf die nicht-konservative Form des Enthalpietransports zugegriffen werden

$$\frac{D}{Dt} h = \frac{1}{\rho Re Pr} \text{div } \dot{\mathbf{q}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{(0)}}{\partial t} \quad . \quad (2.29)$$

An dieser Stelle ist zu bemerken, dass für eine Lösung der konservativen Form der Impulsgleichung, eine Bedingung für die Divergenz des spezifischen Impulses benötigt

wird, um die rechte Seite der Druckgleichung zu bestimmen (siehe Kapitel 3, wo die Diskretisierung der Gleichungen behandelt wird). Es ist möglich, diese als Zeitableitung der Dichte $\rho^{(0)}$ aus der Massenerhaltungsgleichung (2.1) zu bestimmen, aber unabhängig welche Form gewählt wird – Finite-Differenzen oder Finite-Volumen – die Temperaturbeziehungsweise die Enthalpietransportgleichung muss in der nicht-konservativen Form gelöst werden.

2.1.5 Physikalische Interpretation des Druckes

Die vorangegangene Untersuchung der Erhaltungsgleichungen eines Fluides resultierte in einer Zerlegung des Druckes in eine Potenzreihe (2.19). Die einzelnen Elemente der Zerlegung erlauben unterschiedliche physikalische Interpretationen. Die resultierende Impulsgleichung (2.24) entspricht dabei in ihrer Form, bis auf die Komponenten des Reibungsspannungstensors (2.4), der eines inkompressiblen Fluides. Der aus der asymptotischen Betrachtung verbliebene Druckanteil $p^{(0)}$ bedarf nun einer Untersuchung.

Um genauer auf den Druckbegriff in Fluiden einzugehen, ist es zunächst notwendig, kurz den Cauchyschen Spannungstensor \mathbf{T} zu erwähnen. Der Spannungstensor leitet sich aus der Bilanz der auf die Oberfläche eines Kontrollvolumens wirkenden Kräfte her. Unter der Annahme eines „klassischen“ Kontinuums und der Betrachtung in einem raumfesten Koordinatensystem lässt sich zeigen, dass der Spannungstensor \mathbf{T} symmetrisch ist. Dabei entsprechen die Hauptdiagonalkomponenten des Tensors den Normalspannungen und die anderen den Schubspannungen. Das gilt für alle Materialien, auf die sich der Kontinuumsbegriff anwenden lässt. Die entsprechenden äußeren Kräfte auf ein Kontrollvolumen berechnen sich aus dem Oberflächenintegral der Spannungstensoranteile.

Dieser Spannungstensor ist zunächst unbekannt und um ihn zu bestimmen, müssen entsprechende Materialgleichungen, hier für Fluide, formuliert werden. Fluide werden dadurch definiert, dass im ruhenden Fluid der Spannungstensor kugelsymmetrisch ist. Dadurch lässt er sich additiv zerlegen in

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{S} , \quad (2.30)$$

wobei p der Druck ist und \mathbf{S} den Anteil der Reibungsspannungen enthält. Für die Reibungsspannungen findet sich ein Materialgesetz zum Beispiel aus der Annahme eines Newtonschen Fluides. Der Druckanteil des Spannungstensors kann jedoch unterschiedlich interpretiert werden. Bei *kompressiblen* Fluiden, also Gasen, entspricht er dem thermodynamischen Druck, der über eine Zustandsgleichung mit der Dichte und der Temperatur verknüpft ist. Bei *inkompressiblen* Fluiden existiert kein solches Materialgesetz, doch kann mit der Forderung einer Inkompressibilität eine Zwangsbedingung formuliert

werden. Der Drucktensor $p\mathbf{I}$ fungiert als eine Zwangsspannung, die aus der Bewegung des Fluides resultiert. Er folgt aus den Bewegungsgleichungen und den Randbedingungen, sowie der Massenerhaltung $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$.

Es bleibt festzuhalten, dass der Druck im inkompressiblen Fluid, beziehungsweise der Druck $p^{(1)}$ im Grenzfall kleiner Mach-Zahl, nicht aus einer Materialgleichung zu bestimmen ist, sondern eine Zwangsspannung ist. Diese muss so bestimmt werden, dass das Geschwindigkeitsfeld die Massenerhaltungsgleichung (2.1) erfüllt. Im Fall eines inkompressiblen Fluides ist die Bedingung, die erfüllt werden muss, die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes beziehungsweise, die Spur des Reibungsspannungstensors muss verschwinden. Für Gasströmungen kleiner Mach-Zahlen mit signifikanten Dichteänderungen hingegen, muss eine Beziehung für den Druck durch eine Verknüpfung der Massenbilanz (2.13) mit dem Enthalpietransport (2.29) gefunden werden. Da dies eng mit dem numerischen Verfahren zusammenhängt, wird es im Kapitel 3 ausführlich behandelt.

Die hier diskutierte asymptotische Entwicklung des Druckes wurde bezüglich Ma^2 durchgeführt. Dadurch wurde der Druck in einen thermodynamischen Anteil $p^{(0)}$ und einen dynamischen Teil $p^{(1)}$ aufgespalten. Die akustischen Effekte, die auf eine Druckänderung zurückgehen, wurden hier nicht berücksichtigt, da sie von der Ordnung Ma^1 sind. Eine asymptotische Entwicklung bezüglich Ma^1 führt auf zusätzliche Gleichungen für den akustischen Druck und wird ausführlich in den Arbeiten von Klein und Munz behandelt [29, 44, 21].

2.2 Molekulare Transportvorgänge

Die asymptotische Betrachtung hat sich auf die wesentlichen Effekte konzentriert, die durch die Annahme kleiner Mach-Zahlen beeinflusst werden. Dabei war es zweckmäßig, die Gleichungen zu reduzieren und in dimensionsloser Form zu formulieren. Zu einer detaillierten Simulation der Strömung müssen noch weitere Transportmechanismen betrachtet werden, die bis jetzt nicht erwähnt wurden beziehungsweise vereinfachenden Annahmen unterlagen. Diese beziehen sich vorwiegend auf den Transport von Wärme und Stoffspezies infolge molekularer Bewegung und sind von den bisher getroffenen Annahmen bezüglich der Strömungs-Mach-Zahlen nicht direkt betroffen. Der Vollständigkeit halber werden an dieser Stelle diese Effekte behandelt und in den resultierenden Erhaltungs- und Transportgleichungen zusammengefasst. Welche Transportmodelle letztlich in einer Simulationsrechnung in Erscheinung treten, hängt vom einzelnen Fall ab. Auf eine Formulierung dimensionsloser Kennzahlen wird ab jetzt verzichtet, da diese sich auf die materialabhängigen Transportkoeffizienten beziehen und bei Auftreten meh-

rerer Stoffspezies die Wahl von Referenzgrößen zu willkürlich wird. Trotzdem können im Vorfeld einer Simulationsrechnung solche Kennzahlen formuliert werden, um den Beitrag, beziehungsweise den Einfluss einzelner Transportmechanismen, abzuschätzen. Sie dienen dann als Entscheidungshilfe oder Kriterium bei der Modellierung des Problems. Generell ist bei der Wahl des Modells zur Bestimmung der Transportkoeffizienten zu beachten, dass die Fehler im Prozentbereich liegen können. Daher ist bei der Interpretation der Simulationsergebnisse immer das gewählte Modell anzugeben, und wo es sich anbietet, gegen Alternativmodelle zu vergleichen.

Das häufigste Anwendungsgebiet für Simulation von Strömungen kleiner Mach-Zahlen sind Prozesse der Verfahrenstechnik. Das bedeutet die Modellierung einer breiten Palette von Effekten und Mechanismen des Wärme- und Stofftransportes, die im Folgenden besprochen werden.

2.2.1 Reibungsspannungen und Viskosität

Der Reibungsspannungstensor \mathbf{S} eines Newtonschen Fluides, wird durch die Beziehung

$$\mathbf{S} = 2\eta \left(\mathbf{D} - \frac{1}{3}(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I} \right) \quad (2.31)$$

beschrieben, mit dem symmetrischen Tensor der Deformationsgeschwindigkeit

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \operatorname{grad} \mathbf{u} + \left(\frac{1}{2} \operatorname{grad} \mathbf{u} \right)^T . \quad (2.32)$$

Der Transportkoeffizient η , die dynamische Zähigkeit, hängt von der Zusammensetzung und der Temperatur des Gases ab. Diese Abhängigkeit ist für viele Stoffe aus Experimenten bekannt und wird in der Form

$$\ln \eta(T) = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (2.33)$$

angegeben [48]. Die Koeffizienten A , B , C und D sind Datenbanken, zum Beispiel der *NASA thermodynamic database* [34] oder den *GRI-Mech* Datenbanken [18], zu entnehmen.

Alternativ zu dem Polynomansatz zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit, kann ein Potenzgesetz näherungsweise verwendet werden in der Form

$$\eta(T) = \eta_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^n . \quad (2.34)$$

Hier werden nur drei Werte benötigt, nämlich die Referenzwerte der Viskosität und der Temperatur, sowie der entsprechende Exponent.

Bei der Simulation von komplexen chemischen Prozessen kommt es oft vor, dass die Transportkoeffizienten oder deren Temperaturabhängigkeit, nicht für alle beteiligten Stoffe bekannt sind. In diesem Fall können sie mittels kinetischer Gastheorie berechnet werden. Die Viskosität reiner Gaskomponenten kann mit der vielfach verwendeten Formel

$$\eta_\alpha = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_\alpha k_B T}}{\pi \sigma_0^2 \Omega_\eta} \quad (2.35)$$

berechnet werden [26], die auf die Chapman-Enskog-Theorie zurückgeht. Hier ist m_α die Molekülmasse, k_B ist die Boltzmann-Konstante, σ_0 ist der Stoßquerschnitt und Ω_η ist das Kollisionsintegral, berechnet aus den Lennard-Jones-Parametern der entsprechenden Gaskomponente. Diese Formel lässt sich vereinfachen zu

$$\eta_\alpha = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{R_m} \sqrt{M_\alpha T}}{\sqrt{\pi} N_L \sigma_0^2 \Omega_\eta} = 8,4411 \cdot 10^{-25} \frac{\sqrt{M_\alpha T}}{\sigma_0^2 \Omega_\eta}, \quad (2.36)$$

mit dem Molekulargewicht M_α , der universellen Gaskonstanten R_m und der Loschmidt-Zahl N_L [47]. Um die Viskosität auf diese Weise berechnen zu können, müssen die molekularen Wechselwirkungsparameter σ_0 und ϵ/k_B bekannt sein. Diese sind für viele Stoffe tabelliert [34, 18] oder sie können abgeschätzt werden [28].

2.2.2 Diffusiver Stofftransport

Der *konvektive* Transport ist makroskopischer Natur und von den Stoffeigenschaften unabhängig. Der *diffusive* Transport hingegen spielt sich auf der molekularen Ebene ab und wird in der Kontinuumsmechanik als Bewegung infolge von Temperatur- und Konzentrationsgradienten beschrieben. Der Betrag dieser Bewegung wird durch entsprechende, von der Gaszusammensetzung und Temperatur abhängige Koeffizienten, bestimmt. Diese Koeffizienten entstammen zum Teil Messungen im Experiment oder können aus gaskinetischen Modellen abgeleitet werden. Doch zunächst folgen einige Definitionen und Erklärungen, um die Lesbarkeit nachfolgender Ausführungen zu erleichtern.

Die Zusammensetzung des Gases wird je nach Gebrauch unterschiedlich ausgedrückt. Die spezifische Stoffmenge $c_\alpha = n_\alpha/V$ der Komponente α in $[\text{mol}/\text{m}^3]$ wird als Konzentration bezeichnet. Die daraus abgeleitete dimensionslose Größe ist der Molenbruch

$$\zeta_\alpha = \frac{c_\alpha}{c}, \quad \sum_\alpha \zeta_\alpha = 1. \quad (2.37)$$

Dabei ist $c = \sum_\alpha c_\alpha$, die totale Stoffmengenkonzentration des Gemisches. Wird die Gaszusammensetzung in Massenanteilen m_α ausgedrückt, ist die naheliegende dimensi-

onslose Größe, der Massenbruch

$$\xi_\alpha = \frac{m_\alpha}{m}, \quad \sum_{\alpha}^N \xi_\alpha = 1 . \quad (2.38)$$

Die Gesamtmasse m des Gemisches ist die Summe der partialen Massen aller Komponenten, $m = \sum_{\alpha} m_\alpha$. Die partielle Masse berechnet sich aus der Stoffmenge n_α und der molekularen Masse:

$$m_\alpha = n_\alpha M_\alpha \quad (2.39)$$

Der Zusammenhang zwischen dem Massen- und Molenbruch ist durch die Beziehung

$$\xi_\alpha = \zeta_\alpha \frac{M_\alpha}{M} \quad (2.40)$$

gegeben, mit der mittleren Molmasse M ,

$$M = \sum_{\alpha}^N \zeta_\alpha M_\alpha . \quad (2.41)$$

Mit dem so definierten dimensionslosen Molenbruch, lässt sich der Partialdruck der Komponente α berechnen zu:

$$p_\alpha = \zeta_\alpha p^{(0)} . \quad (2.42)$$

Der Druck $p^{(0)}$ ist der bereits erwähnte *thermodynamische* Druck. Die Partialdichte wird aus der Gemisch-Gesamtdichte über den Massenbruch berechnet:

$$\rho_\alpha = \xi_\alpha \rho . \quad (2.43)$$

Die Partialdichte ist in der konservativen Formulierung der Transportgleichungen eine Erhaltungsgröße.

Der primär durch Konzentrationsgradienten verursachte, gerichtete Transport von Gasmolekülen kann in der Kontinuumsmechanik am einfachsten durch das Ficksche Gesetz

$$\dot{\mathbf{m}}_\alpha = -\rho D \text{grad } \xi_\alpha , \quad (2.44)$$

beschrieben werden. Dieser Ansatz beschreibt einen gerichteten Massenfluss der Komponente α mit einer Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_α

$$\dot{\mathbf{m}}_\alpha = -\rho \xi_\alpha \mathbf{V}_\alpha . \quad (2.45)$$

Unter zusätzlicher Berücksichtigung der Thermodiffusion, also Molekültransport aufgrund von Temperaturgradienten, lässt sich die Diffusionsgeschwindigkeit in einem N -Komponenten-Gemisch ausdrücken als:

$$\mathbf{V}_\alpha = -\frac{1}{\zeta_\alpha M} \sum_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N M_\alpha D_{\alpha\beta} \text{grad } \zeta_\alpha - \frac{D_{\alpha,T}}{\rho \xi_\alpha} \frac{1}{T} \text{grad } T \quad (2.46)$$

mit dem binären Diffusionskoeffizienten $D_{\alpha\beta}$, dem Thermodiffusionskoeffizienten $D_{\alpha,T}$ und der mittleren Molmasse M des Gemisches.

Wird diese Berechnungsvorschrift für Diffusionsgeschwindigkeit in einem Computerprogramm verwendet, besteht die Gefahr der Division durch Null, im Fall verschwindender Konzentrationen einer Komponente oder wenn reine Spezies vorkommen. Alternativ kann die Gleichung (2.46), mit dem Massenbruch multipliziert werden, so dass unter Verwendung gemittelter Größen die wesentlich handlichere Formel entsteht:

$$\xi_\alpha \mathbf{V}_\alpha = -\frac{M_\alpha}{M} D_{\alpha,m} \left(\text{grad } \zeta_\alpha - \frac{\Theta_\alpha}{T} \text{grad } T \right) \quad (2.47)$$

mit Θ_α , dem Thermodiffusionsverhältnis und dem mittleren Diffusionskoeffizienten $D_{\alpha,m}$ der Komponente α , in das Gemisch.

Bei der Bestimmung der Transportkoeffizienten für Stoffdiffusion wird ausschließlich auf die kinetische Gastheorie zurückgegriffen. Wie bereits erwähnt, müssen zur Berechnung des Stoffdiffusionsstroms, der mittlere Diffusionskoeffizient und das Thermodiffusionsverhältnis bestimmt werden. Der mittlere Diffusionskoeffizient berechnet sich nach der Formel

$$D_{\alpha,m} = \frac{\sum_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N \zeta_\alpha M_\alpha}{M \sum_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N (\zeta_\alpha / D_{\beta\alpha})} \quad (2.48)$$

mit $D_{\beta\alpha}$, dem binären Diffusionskoeffizienten der Komponente β in die Komponente α . Dieser kann z.B. nach [26, 47] berechnet werden:

$$D_{\alpha\beta} = 5.9543 \cdot 10^{-24} \sqrt{\frac{T^3 [(1/M_\alpha) + (1/M_\beta)]}{p^{(0)} \sigma_{\alpha\beta}^2 \Omega_{\alpha\beta}}} . \quad (2.49)$$

Das dimensionslose Stoßintegral $\Omega_{\alpha\beta}$ ist eine Funktion der Temperatur und der mittleren Potentialtiefe $(\epsilon/k)_{\alpha\beta}$ (Lennard-Jones Parameter). Die Stoßdurchmesser $\sigma_{\alpha\beta}$ und die Potentialtiefen der Speziespaarung werden durch folgende Mittelungsregeln berechnet

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\sigma_\alpha + \sigma_\beta) \quad (2.50)$$

und

$$\left(\frac{\epsilon}{k} \right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{k} \sqrt{\epsilon_\alpha \epsilon_\beta} . \quad (2.51)$$

In den hier präsentierten Fällen wurde der Effekt der Thermodiffusion vernachlässigt, da die abgeschätzten Thermodiffusionsverhältnisse Θ_α mehrere Größenordnungen unter den mittleren Diffusionskoeffizienten $D_{\alpha,m}$ lagen. Die Berechnungsmethoden für das

Thermodiffusionsverhältniss finden sich ausführlich beschrieben und für Rechneranwendungen angepasst in [28]. In der Praxis kann auf externe Programmbibliotheken zurückgegriffen werden, die allerdings meistens Lizenzpflichtig sind. Die in dieser Arbeit verwendete Vorschrift (2.48) zur Berechnung des mittleren Diffusionskoeffizienten hat den Nachteil, dass sie für reine Gas-Spezies nicht definiert ist. Dieses Verhalten kann durch einführen von „Konzentrationssschranken“, also Mindestkonzentrationen, abgestellt werden.

2.2.3 Diffusiver Wärmetransport

Der gerichtete Wärmestrom $\dot{\mathbf{q}}$ setzt sich zusammen aus zwei diffusiven Transportmechanismen, der Wärmeleitung und dem Stofftransport

$$\dot{\mathbf{q}} = \dot{\mathbf{q}}_\lambda + \dot{\mathbf{q}}_D \quad . \quad (2.52)$$

Die Wärmeleitung beschreibt den Wärmestrom infolge eines Temperaturgradienten im Integrationsgebiet und wird durch das Gibbs'sche Gesetz beschrieben

$$\dot{\mathbf{q}}_\lambda = -\lambda \operatorname{grad} T \quad . \quad (2.53)$$

Dabei ist der Koeffizient λ , die globale Wärmeleitfähigkeit, eine Funktion der Temperatur und der Gaszusammensetzung.

Die Wärmeleitfähigkeit einer Gasspezies kann ähnlich, wie die bereits beschriebene Viskosität aus experimentell ermittelten Daten stammen. Ihre Temperaturabhängigkeit wird dann durch eine Näherungsfunktion der Art

$$\ln \lambda(T) = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D \quad (2.54)$$

beschrieben [48]. Die Koeffizienten A , B , C und D finden sich in der Regel, in den gleichen Datenbanken, wie die Koeffizienten zur Berechnung der Viskosität [34, 18].

Das Potenzgesetz zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit lässt sich ebenfalls anwenden, so dass gilt

$$\lambda(T) = \lambda_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^n \quad . \quad (2.55)$$

Die zwei Referenzwerte und der Exponent müssen hier ebenfalls Tabellen entnommen werden.

Ist die Wärmeleitfähigkeit eines Stoffes nicht hinreichend gut durch Experimente bekannt, kann sie ebenso wie die Viskosität, anhand der kinetischen Gastheorie berechnet

werden. Aus der Chapman-Enskog-Theorie folgt für die Wärmeleitfähigkeit monoatomarer Gase [26, 47]

$$\lambda_{\alpha,mono} = 2,6330 \cdot 10^{-23} \frac{\sqrt{T/M_\alpha}}{\sigma_0^2 \Omega_\lambda} . \quad (2.56)$$

Für die Wärmeleitfähigkeit mehratomiger, reiner Gase hat Eucken [26, 47] die halbempirische Korrektur-Formel entwickelt

$$\lambda_\alpha = \lambda_{\alpha,mono} \left[0,115 + 0,354 \frac{\kappa_\alpha}{\kappa_\alpha - 1} \right] , \quad (2.57)$$

mit dem Isentropenexponenten κ_α der Komponente α . Auch an dieser Stelle gilt: um die Transportkoeffizienten auf diese Weise berechnen zu können, müssen die molekularen Wechselwirkungsparameter σ_0 und ϵ/k_B bekannt sein. Diese sind für viele Stoffe bekannt oder sie können abgeschätzt werden [28].

Der Wärmestrom in Gasgemischen enthält zusätzlich zu dem Anteil aus der Wärmeleitung, noch den aus der Stoffdiffusion stammenden Enthalpiestrom $\dot{\mathbf{q}}_D$. Dieser wird mit der Diffusionsgeschwindigkeit \mathbf{V}_α transportiert und entspricht somit einem mit dem Massenbruch gewichteten Enthalpiestrom der Gaskomponenten

$$\dot{\mathbf{q}}_D = \rho \sum_{\alpha}^N h_\alpha \xi_\alpha \mathbf{V}_\alpha . \quad (2.58)$$

Formal muss der Wärmestrom aufgrund der unterschiedlichen Diffusionsgeschwindigkeiten der Gasspezies erwähnt werden. Dieser wird in der Literatur als Dufour-Effekt geführt [47]. Er ist in der Regel so klein, dass er vernachlässigt wird, selbst wenn die Thermodiffusion berücksichtigt werden muss.

2.2.4 Transportgrößen in Gemischen

Die Materialkoeffizienten zur Berechnung des Reibungsspannungstensors \mathbf{S} , der Enthalpie h und der Wärmestromdichte $\dot{\mathbf{q}}_\lambda$ infolge der Wärmeleitung beziehen sich immer auf das Gasgemisch, sind also zusätzlich zu der Temperaturabhängigkeit von der lokalen Gaszusammensetzung abhängig. Im einzelnen sind es die *dynamische Viskosität* η , die *Wärmekapazität* c_p und die *Wärmeleitfähigkeit* λ . Für die spezifische Wärmekapazität eines Gasgemisches aus N Gasspezies gilt:

$$c_{p,mix} = \sum_{\alpha=1}^N c_{p,\alpha} \xi_\alpha \quad (2.59)$$

mit ξ_α , der massenbezogenen Konzentration und $c_{p,\alpha}(T)$, der spezifischen Wärmekapazität des reinen Gases α . Für die Berechnung der dynamischen Zähigkeit η_{mix} und

der Wärmeleitfähigkeit λ_{mix} werden die halbempirischen Formeln nach Wilke verwendet [47]:

$$\eta_{mix} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\eta_{\alpha}}{1 + \frac{1}{\zeta_{\alpha}} \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^n \zeta_{\beta} \chi_{\alpha\beta, \eta}} \quad ; \quad \lambda_{mix} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\lambda_{\alpha}}{1 + \frac{1.065}{\zeta_{\alpha}} \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^n \zeta_{\beta} \chi_{\alpha\beta, \lambda}} \quad (2.60)$$

wobei ζ_{α} die molare Konzentration der Komponente α und $\chi_{\alpha\beta, \varphi}$ der Ausdruck

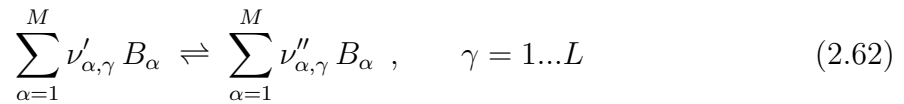
$$\chi_{\alpha\beta, \varphi} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_{\alpha}}{M_{\beta}} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\varphi_{\alpha}}{\varphi_{\beta}} \right)^{1/2} \left(\frac{M_{\beta}}{M_{\alpha}} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (2.61)$$

ist, mit φ als dynamische Zähigkeit η oder monoatomare Wärmeleitfähigkeit λ_0 .

2.3 Modellierung chemischer Reaktionen

Die Änderung der Stoffmengen einzelner Gaskomponenten infolge chemischer Reaktionen muss in den Erhaltungs- beziehungsweise Transportgleichungen als entsprechender Quellterm modelliert werden. Die Zusammensetzung des Gases hängt dabei von der elementaren Zusammensetzung, der Temperatur und allgemein vom zeitlichen Verlauf der Reaktionen ab.

Eine genaue Betrachtung des Problems beinhaltet folglich, die Bestimmung der zeitlichen Änderung der Stoffkonzentrationen und somit die Berechnung der Kinetik chemischer Reaktionen. Ein reagierendes System von L Elementarreaktionen und M Stoffen kann durch folgenden Formalismus beschrieben werden:



hier sind $\nu'_{\alpha, \gamma}$ und $\nu''_{\alpha, \gamma}$ die ganzzahligen, positiven stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte beziehungsweise der Produkte der Reaktion γ . Das chemische Symbol des beteiligten Stoffes α ist B_{α} . Die Geschwindigkeit W_{γ} der Reaktion γ ergibt sich mit den Stoffkonzentrationen c_{α} und den Reaktionskoeffizienten $k_{f\gamma}$, $k_{b\gamma}$ der Hin- und Rückreaktionen zu

$$W_{\gamma} = k_{f\gamma} \prod_{\alpha=1}^M c_{\alpha}^{\nu'_{\alpha, \gamma}} - k_{b\gamma} \prod_{\alpha=1}^M c_{\alpha}^{\nu''_{\alpha, \gamma}} \quad . \quad (2.63)$$

Somit lässt sich jetzt die Bildungsgeschwindigkeit eines Stoffes α durch L Elementarreaktionen bestimmen zu

$$\dot{\omega}_{\alpha} = \sum_{\gamma}^L (\nu'_{\alpha, \gamma} - \nu''_{\alpha, \gamma}) W_{\gamma} \quad . \quad (2.64)$$

Die Dimension der Bildungsgeschwindigkeit, beziehungsweise der Reaktionsgeschwindigkeit, ist die spezifische Stoffmenge pro Zeit. Um die massebezogene Stoffbildungsgeschwindigkeit zu bestimmen, muss mit der Molmasse M_α des Stoffes multipliziert werden:

$$\dot{r}_\alpha = M_\alpha \dot{\omega}_\alpha . \quad (2.65)$$

Zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit W_γ müssen die Reaktionskoeffizienten bekannt sein. In der Regel werden sie experimentell ermittelt, können jedoch unter Umständen abgeschätzt werden, wenn keine experimentellen Daten vorliegen. Die Reaktionskoeffizienten sind von der Stoffkonzentration unabhängig und hängen hauptsächlich von der Temperatur ab. Dieser Zusammenhang wird durch den modifizierten Arrhenius-Ansatz beschrieben

$$k = A \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^n \exp \left[-\frac{E_a}{RT} \right] , \quad (2.66)$$

mit der Aktivierungsenergie E_a und dem Frequenzfaktor A . Typischerweise werden diese Parameter nur für die Hinreaktionen angegeben und sind öffentlich zugänglichen Datenbanken zu entnehmen, zum Beispiel der Datenbank des *National Institute of Standards and Technology*, kurz *NIST* (<http://kinetics.nist.gov>). Die Reaktionskoeffizienten der Rückreaktion werden über den Zusammenhang

$$\frac{k_f}{k_b} = K_c \quad (2.67)$$

berechnet, der die Gleichgewichtskonstante einer Reaktion beschreibt. Diese wird für ideale Gase aus den chemischen Standardpotentialen μ_α^0 der an der Reaktion beteiligten Stoffe bestimmt, nach der Formel:

$$K_c = \exp \left[-\frac{\Delta\mu_\alpha^0}{R_m T} \right] \cdot \left(\frac{p}{R_m T} \right)^{\sum_{\alpha=1}^M (\nu'_\alpha - \nu''_\alpha)} \quad (2.68)$$

$$\Delta\mu_\alpha^0 = \sum_{\alpha=1}^M (\nu'_\alpha - \nu''_\alpha) \mu_\alpha^0 . \quad (2.69)$$

Für die Berechnung von Bildungsgeschwindigkeiten und zur Analyse der Reaktionskinetik existieren umfangreiche Programmbibliotheken. Eine frei verfügbare und die zudem einer Open-Source-Lizenz unterliegende Bibliothek, ist CANTERA. Einige der Funktionen, die CANTERA bietet, wurden für die Modellbildung und zur Untersuchung der Stoffumwandlungsprozesse im Siliziumkarbid-Reaktor verwendet, der im Kapitel 8 behandelt wird. Zudem enthält CANTERA Bibliotheksfunktionen zur Berechnung der Transportkoeffizienten. Diese Programmroutinen können ebenfalls in die Simulationsprogramme eingebunden oder zur Entwicklung von reduzierten Modellen verwendet werden.

Ob solche Bibliotheken tatsächlich in Strömungssimulationsprogrammen verwendet werden, sollte am Rechenaufwand einer Punktoperation festgemacht werden. Bei umfangreichen Problemen, ist es unter Umständen sehr lohnend die Berechnung von Stoffeigenschaften und Zusammensetzung zu simplifizieren oder in optimierten, angepassten Programmroutinen zu implementieren.

Gerade bei langsamen Strömungsprozessen ist es häufig der Fall, dass die charakteristische Stoffumwandlungsgeschwindigkeit sehr viel größer ist als die charakteristische Strömungsgeschwindigkeit. Dadurch wird der Aufwand, die Kinetik der Reaktionen im Ort und in der Zeit genau zu berechnen, unangemessen hoch. Die hohe Reaktionsgeschwindigkeit kann, zusammen mit entsprechenden Temperaturgradienten, Diskontinuitäten in den Stoffkonzentrationen erzeugen. Flammenfronten sind ein typisches Beispiel dafür. Sind solche Schwierigkeit nicht zu erwarten, lässt sich die Annahme eines chemischen Gleichgewichtes zu jeder Zeit an jedem Ort im Integrationsgebiet rechtfertigen. Diese Annahme vereinfacht die Modellierung sehr, da die Stoffkonzentrationen jetzt allein von der Temperatur und der elementaren Zusammensetzung abhängen.

Die Berechnung der Gleichgewichtszusammensetzung ist jedoch ein recht aufwendiger Prozess. Es empfiehlt sich daher, diese für eine bestimmte elementare Zusammensetzung und eine begrenzte Anzahl von Stoffen, in einem breiten Temperaturbereich zu berechnen. Das Ergebnis einer solchen Berechnung sind mehrdimensionale Tabellen der Stoffkonzentrationen als Funktion der Temperatur. Ist die Temperatur an einem Ort bestimmt, kann bei der Annahme sehr schneller Reaktionen, die Zusammensetzung durch Auswertung der Tabelle, bestimmt werden.

2.4 Erhaltungs- und Transportgleichungen von reaktiven Strömungen

Die Simulation technischer Probleme verlangt, Gleichungen zu verwenden, die das Problem hinreichend beschreiben. Aus Gründen der Effizienz ist es vorteilhaft möglichst viele Effekte zu vernachlässigen und Vereinfachungen zu treffen und sich ausschließlich auf die für das Problem wesentlichen Effekte zu beschränken. Die Annahmen, die dabei getroffen werden, können sich auf geometrische Besonderheiten der Strömung beziehen sowie auf der Beitrag einzelner Transportmechanismen. Typische Beispiele dafür sind die Navier-Stokes-Gleichungen des inkompressiblen Fluides und die Erhaltungsgleichungen für rotationssymmetrische Geometrien. Den Ausgangspunkt solcher Vereinfachungen bilden die vollständigen Gleichungen, formuliert für beliebige Koordinatensysteme.

2.4.1 Gleichungen in konservativer Form

Um die für das jeweilige Strömungsproblem notwendige Modellierung zu vereinfachen, empfiehlt es sich, zunächst von einer möglichst vollständigen Beschreibung der Strömung auszugehen. Die Gleichungen, die das zu beschreibende Problem dann wiedergeben, ergeben sich aus den Annahmen, welche Effekte vernachlässigbar sind. Die vollständigen, dimensionsbehafteten Erhaltungsgleichungen für Strömung mehrerer miteinander reagierender Gasspezies bei kleinen Mach-Zahlen sind:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}) = 0 \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_\alpha + \operatorname{div}(\rho_\alpha\mathbf{u}) = \operatorname{div}\dot{\mathbf{m}}_\alpha + \dot{r}_\alpha \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{grad}p^{(1)} = \operatorname{div}\mathbf{S} + \rho\mathbf{k} \quad (2.72)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \operatorname{div}(\rho h\mathbf{u}) = \operatorname{div}(\dot{\mathbf{q}}_\lambda + \dot{\mathbf{q}}_D) + \dot{Q} \quad (2.73)$$

Der Term $\rho\mathbf{k}$ in der Impulserhaltungsgleichung (2.72) beschreibt die Volumenkräfte aufgrund der Volumenkraftdichte \mathbf{k} , zum Beispiel in einem Schwerfeld. Die Wärmequelle \dot{Q} in der Energieerhaltungsgleichung (2.73) beschreibt die in chemischen Reaktionen freigesetzte beziehungsweise verbrauchte Wärme, sie kann aber auch punktförmige Wärmequellen enthalten. Ihre Formulierung hängt sehr stark von der Problemstellung ab. Diese Gleichungen dienen als Ausgangspunkt einer konservativen Diskretisierung, wobei die Energieerhaltungsgleichung (2.73) in dieser Form für eine explizite Zeitdiskretisierung lediglich eingeschränkt verwendbar ist. Wie später gezeigt wird, ist die Energieerhaltungsgleichung als Transportgleichung der Temperatur oder der Enthalpie, wesentlich einfacher zu handhaben. Der Vollständigkeit halber und weil sie bei der Herleitung der Divergenzbedingung für die Geschwindigkeit eine wichtige Rolle spielt, ist sie hier aufgeführt.

2.4.2 Vollständige Transportgleichungen

Die Erhaltungsgleichungen für Gasspezies, Impuls und Energie lassen sich durch Subtraktion der Massenerhaltung (2.70) in Transportgleichungen überführen. Dadurch entsteht ein System von Konvektions-Diffusions-Gleichungen für einen teilweise willkürlichen Satz von primitiven Feldvariablen, zum Beispiel $(\xi_\alpha, \mathbf{u}, h)$. Diese Gleichungen haben den Vorteil, einer algorithmisch einfacheren Diskretisierung zugänglich zu sein. Sie sind allerdings nicht ohne Einschränkungen, als „erhaltend“ anzusehen. Die Energiegleichung

muss aber ohnehin in ihrer Transportform gelöst werden. Für den Variablensatz $(\xi_\alpha, \mathbf{u}, h)$ entstehen folgende Gleichungen:

$$\frac{D}{Dt} \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (2.74)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \xi_\alpha = \operatorname{div} \dot{\mathbf{m}}_\alpha + \dot{r}_\alpha \quad (2.75)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \mathbf{u} + \operatorname{grad} p^{(1)} = \operatorname{div} \mathbf{S} + \rho \mathbf{k} \quad (2.76)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} h = \operatorname{div}(\dot{\mathbf{q}}_\lambda + \dot{\mathbf{q}}_D) + \dot{Q} + \frac{\partial}{\partial t} p^{(0)} \quad (2.77)$$

mit der substantiellen Ableitung für eine transportierte Größe φ

$$\frac{D}{Dt} \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{grad} \varphi \cdot \mathbf{u} . \quad (2.78)$$

Für Systeme von Konvektions-Diffusions-Gleichungen existiert eine Vielzahl gut funktionierender Finite-Differenzen-Verfahren, die mit kleineren Modifikationen zur Anwendung kamen. Die Gleichung (2.77) wird in dieser Form, selbst innerhalb einer sonst konservativen Diskretisierung, gelöst.

2.4.3 Transportgleichungen des inkompressiblen Fluides

Als Grundlage der Entwicklung numerischer Simulation von Strömung bei kleinen Mach-Zahlen, dienten Verfahren, die ursprünglich zur Berechnung von Strömung inkompressibler Fluide entwickelt wurden. Aus diesem Grund sollte kurz auf die entsprechenden Transportgleichungen eingegangen werden. Diese sind zum Teil einfacher als die vollständigen Gleichungen und erlauben bei konstanter Temperatur und Zusammensetzung des Fluides weitere vereinfachende Annahmen, wie zum Beispiel die konstante Dichte und Viskosität. Die daraus resultierenden Gleichungen sind ein Ausgangspunkt der Diskretisierung. Als Modellgleichungen zur analytischen Untersuchung des Problems dient die Konvektions-Diffusions-Gleichung.

Die Herleitung der Transportgleichung folgt im einfachsten Fall direkt aus der konstanten Dichte und Viskosität. Zunächst, angewendet auf die Massenerhaltung, zeigt sich, dass das Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei sein muss

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 . \quad (2.79)$$

Mit dieser Bedingung und der konstanten Viskosität vereinfacht sich die Divergenz des Reibungsspannungstensors zu

$$\operatorname{div} \mathbf{S} = \eta (\operatorname{div} \operatorname{grad} \mathbf{u}) . \quad (2.80)$$

Ohne den Wärmetransport reduzieren sich die Impulsgleichungen (2.76) in nicht-konservativer Form zu

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{u}) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \text{grad } p = \nu \text{div grad } \mathbf{u} . \quad (2.81)$$

Hierbei ist ν die konstante kinematische Zähigkeit. Der Druck p in den Navier-Stokes-Gleichungen des inkompressiblen Fluides entspricht dem dynamischen Druck $p^{(1)}$ aus der asymptotischen Entwicklung (2.26) und ist hier ein Lagrangescher Multiplikator, der so gewählt werden muss, dass die Zwangsbedingung $\text{div } \mathbf{u} = 0$ erfüllt ist.

2.4.4 Gleichungen für rotationssymmetrische Probleme

Die häufigsten Ausführungen von Brennkammern und Gasphasensynthese-Reaktoren enthalten zylindrische Geometrien. Dadurch bietet sich die Verwendung eines zylindrischen Koordinatensystems (r, Θ, z) an, mit den Geschwindigkeitskomponenten (u_r, u_Θ, u_z) . Ist in einem solchen Fall die Strömung laminar, darf auch Achssymmetrie angenommen werden, und dass die Umfangskomponente der Geschwindigkeit u_Θ verschwindet oder zumindest konstant ist. Die Erhaltungs- beziehungsweise Bewegungsgleichungen in zylindrischen Koordinaten folgen aus einer Bilanz am Ringelement oder einfacher, durch Anwendung der entsprechenden Differentialoperatoren (Anhang B) auf die allgemeingültig formulierten Gleichungen (2.74) bis (2.77). Für die Herleitung der Gleichungen in rotationssymmetrischen Systemen können alle Ableitungen in Umfangsrichtung zu Null gesetzt werden, sowie die Umfangskomponente der Geschwindigkeit. Folgende Gleichungen verbleiben in der Transport-Formulierung für die primitiven Variablen $(\xi_\alpha, \mathbf{u}, h)$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\rho u_r) + \frac{1}{r}(\rho u_r) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = 0 \quad (2.82)$$

$$\frac{\partial \xi_\alpha}{\partial t} + u_r \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial r} + u_z \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \text{div } \dot{\mathbf{m}}_\alpha \quad (2.83)$$

$$\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial r} = \frac{1}{\rho} (\text{div } \mathbf{S})_r + k_r \quad (2.84)$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial z} = \frac{1}{\rho} (\text{div } \mathbf{S})_z + k_z \quad (2.85)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u_r \frac{\partial h}{\partial r} + u_z \frac{\partial h}{\partial z} = \text{div}(\dot{\mathbf{q}}_\lambda + \dot{\mathbf{q}}_D) + \dot{Q} + \frac{\partial}{\partial t} p^{(0)} \quad (2.86)$$

Die Divergenz der Diffusionsmassenstromdichte $\dot{\mathbf{m}}_\alpha$ und der Wärmestromdichte $\dot{\mathbf{q}}$ erfordert die Bildung eines Laplace-Operators in Zylinderkoordinaten für eine skalare Funk-

tion $\varphi(r, z)$ mit variablen Koeffizienten $a(r, z)$. Die Komponenten der zu bildenden Divergenzen sind

$$\operatorname{div}(a \operatorname{grad} \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(a r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(a \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right). \quad (2.87)$$

Die r - und z -Komponenten der Divergenz $\operatorname{div} \mathbf{S}$ des Reibungsspannungstensors sind hier:

$$\begin{aligned} (\operatorname{div} \mathbf{S})_r &= \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left(2\eta \frac{\partial u_r}{\partial r} - \eta \frac{\partial u_z}{\partial z} - \eta \frac{u_r}{r} \right) + \\ &\quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial u_r}{\partial z} + \eta \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{2}{r} \eta \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r} \right) \end{aligned} \quad (2.88)$$

und

$$\begin{aligned} (\operatorname{div} \mathbf{S})_z &= \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(2\eta \frac{\partial u_z}{\partial z} - \eta \frac{\partial u_r}{\partial r} - \eta \frac{u_r}{r} \right) + \\ &\quad \frac{1}{r} \left(r \eta \frac{\partial u_r}{\partial z} + r \eta \frac{\partial u_z}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (2.89)$$

Letztlich entspricht die Betrachtung des rotationssymmetrischen Systems einer Reduktion des Problems um eine Dimension. Dadurch können zweidimensionale Gitter ohne weitere Modifikationen verwendet werden. Auch die Lösungsalgorithmen für kartesische Gitter sowie die diskreten Differential-Operatoren, können mit geringem Modifikationen verwendet werden. Es sind jedoch für alle Fälle die engen Grenzen der Anwendbarkeit zu beachten. Ein weiterer Aspekt bei der Diskretisierung der Gleichungen rotationssymmetrischer Strömung, ist der nichtsymmetrische Laplace-Operator, was vor allem die Lösung der Poisson-Gleichung für den Druck $p^{(1)}$ betrifft.

3 Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen für kleine Mach-Zahlen

Probleme der Simulation von Strömungen kleiner Mach-Zahlen betreffen vor allem die numerische Lösung der Gleichungen. Die Skalenanalyse hat gezeigt, dass der Gradient des thermodynamischen Druckes $p^{(0)}$ um Größenordnungen vom Gradient des dynamischen Druckes $p^{(1)}$ abweicht. In der allgemein gültigen Form der Navier-Stokes-Gleichungen kompressibler Gase ist die Kopplung zwischen der Impulserhaltung und Energieerhaltung durch den Druck in Abhängigkeit von der Dichte $p(\rho)$ gewährleistet. Diese Abhängigkeit ist bei kleinen Mach-Zahlen schwach oder fehlt ganz, wie in dem hergeleiteten Grenzfall oder bei Flüssigkeiten. Dies ist zum einen dadurch zu erklären, dass der Druck von Gasen eine thermodynamische Größe ist und sich direkt aus der molekularen Betrachtung erklären lässt. Bei Flüssigkeiten hingegen ist der Druck, wie er in den Erhaltungsgleichungen verwendet wird, eine Längsspannung, die aus der Deformation des Volumenelements herrührt. Der Druckanteil, hier $p^{(1)}$, wird deshalb auch als *hydrodynamischer* Druck bezeichnet.

Diese Eigenschaft des hydrodynamischen Druckes erfordert spezielle numerische Lösungsverfahren, da keine explizite Gleichung für diesen Druck existiert. Die gebräuchlichsten Ansätze zur numerischen Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen sind:

1. Vorkonditionierung der Navier-Stokes-Gleichungen [7, 51, 52], beziehungsweise das Verfahren künstlicher Kompressibilität.
2. Lösung der Gleichungen für kleine Mach-Zahlen mittels eines Druckkorrektur-Verfahrens.
3. Lattice-Boltzmann-Verfahren, hier speziell die Lattice-BGK-Methode.

Mit Modifikationen sind alle drei Verfahren auf Strömungen kleiner Mach-Zahlen über-

tragbar. Die Familie der Druckkorrektur-Verfahren wird hier besonders ausführlich behandelt, da sie im Rahmen dieser Arbeit bevorzugt verwendet wurden.

Die *Vorkonditionierung* wird in der Regel auf die vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen (2.1) bis (2.3) angewendet [51]. Ursprünglich ist sie abgeleitet aus der Idee *künstlicher Kompressibilität* [7], wo die Transportgleichungen (2.76) des inkompressiblen Fluids so manipuliert werden, dass deren Charakteristik sich zum hyperbolischen Typ hin verschiebt. Die Modifikation wird so angewendet, dass im stationären Fall die unveränderten Gleichungen verbleiben. Durch die veränderte Charakteristik zerstört die Vorkonditionierung die zeitliche Konsistenz der Gleichungen. Wird ein zeitgenaues Verfahren verlangt, werden weitere Modifikationen des numerischen Verfahrens notwendig [52].

Die zweite Möglichkeit, die *Druckkorrektur-Verfahren*, beziehen sich in der Regel auf die Gleichungen für kleine Mach-Zahlen, wie aus der Skalenanalyse abgeleitet. So ist es auch nicht verwunderlich, dass diese zuerst für Strömungen inkompressibler Fluide entwickelt wurden. Einige Varianten dieser Verfahren werden im Folgenden detaillierter beschrieben.

3.1 Helmholtz-Hodge-Zerlegung

Bevor detailliert auf die Druckkorrektur-Verfahren eingegangen werden kann, muss die so genannte Helmholtz-Hodge-Zerlegung kurz erklärt werden, da sie die mathematische Grundlage dieser Klasse von Algorithmen liefert [9]. Demnach existiert für ein beliebiges Vektorfeld \mathbf{u}^* in dem Gebiet \mathcal{V} , mit der Berandung $\partial\mathcal{V}$, eine eindeutige Zerlegung der Art:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u} + \text{grad } \varphi \tag{3.1}$$

mit

$$\text{div } \mathbf{u} = 0 \quad \text{in } \mathcal{V} \quad \text{und} \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{auf } \partial\mathcal{V} . \tag{3.2}$$

Für den Beweis [9] wird zunächst die Orthogonalität

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \text{grad } \varphi \, dV = 0 , \tag{3.3}$$

der Vektorfelder \mathbf{u} und $\text{grad } \varphi$ formuliert. Mit der Divergenzfreiheit von \mathbf{u} und der Identität

$$\text{div}(\varphi \mathbf{u}) = (\text{div } \mathbf{u})\varphi + \mathbf{u} \cdot \text{grad } \varphi , \tag{3.4}$$

sowie dem Integralsatz von Gauß folgt daraus

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \text{grad } \varphi \, dV = \int_{\mathcal{V}} \text{div}(\varphi \mathbf{u}) \, dV = \int_{\partial\mathcal{V}} \varphi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dA = 0 , \tag{3.5}$$

wegen der Randbedingung $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ auf $\partial\mathcal{V}$.

Der Beweis der Eindeutigkeit erfolgt mit der Annahme der Existenz einer weiteren Zerlegung

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}_1 + \text{grad } \varphi_1 = \mathbf{u}_2 + \text{grad } \varphi_2 \quad , \quad (3.6)$$

so dass gilt

$$0 = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2 + \text{grad}(\varphi_1 - \varphi_2) \quad . \quad (3.7)$$

Skalar multipliziert mit $(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)$ und eingesetzt in die Bedingung (3.3) für Orthogonalität führt es auf

$$0 = \int_{\mathcal{V}} [|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|^2 + (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \cdot \text{grad}(\varphi_1 - \varphi_2)] \, dV = \int_{\mathcal{V}} |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|^2 \, dV \quad , \quad (3.8)$$

woraus mit der Gleichung (3.5) folgt, dass $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2$ ist und überdies $\text{grad } \varphi_1 = \text{grad } \varphi_2$ gilt. Der letzte Ausdruck bedeutet ferner, dass die Skalarfelder φ_1 und φ_2 bis auf eine Konstante gleich sind. Wird nun \mathbf{u}^* als gegeben vorausgesetzt, kann φ als eine Lösung des Neumann-Problems formuliert werden

$$\text{div grad } \varphi = \text{div } \mathbf{u}^* \quad , \quad \text{mit} \quad \frac{\partial \varphi}{\partial n} = \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{V} \quad . \quad (3.9)$$

Es lässt sich weiterhin zeigen, dass dieses Problem eine, bis auf eine Konstante, eindeutige Lösung besitzt [10]. Diese kann in der Zerlegung $\mathbf{u} = \mathbf{u}^* - \text{grad } \varphi$ angewendet werden, so dass durch Konstruktion von φ , das Vektorfeld \mathbf{u} mit der angestrebten Eigenschaft $\text{div } \mathbf{u} = 0$ entsteht.

Diese Überlegungen bilden die Basis aller Druckkorrektur-Verfahren, die ursprünglich zur numerischen Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen entwickelt wurden [8]. Das Skalarfeld φ kann in den meisten Fällen mit dem Druck $p^{(1)}$, beziehungsweise mit einem Korrekturdruck p' , identifiziert werden. Es gilt zu beachten, dass der so berechnete Druck nicht der thermodynamische Druck $p^{(0)} = \rho RT$ ist, sondern ein Lagrange-Operator, der die Zwangsbedingung der Inkompressibilität zu erfüllen hat. Das hier verwendete Vektorfeld \mathbf{u} ist entsprechend mit dem Geschwindigkeitsfeld oder aber mit dem Vektorfeld des spezifischen Impulses $\rho\mathbf{u}$ identisch. Somit ist die hier besprochene Zerlegung auch für die Impulserhaltungsgleichung (2.72) anwendbar. Im Vorgriff auf die Bestimmung des Druckes $p^{(1)}$ aus den Gleichungen für Strömungen kleiner Mach-Zahlen und variabler Dichte ist zu bemerken, dass ein divergenzfreies Vektorfeld des spezifischen Impulses $\rho\mathbf{u}$ einzig im stationären Zustand vorliegt, entsprechend der Massenerhaltungsgleichung (2.1).

3.2 Familie der Druckkorrektur-Verfahren

Druckkorrektur-Verfahren bilden eine große Gruppe in den Methoden zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen. Wegen ihrer Eigenschaften sind sie ebenfalls in den meisten kommerziellen Verfahren zur Strömungssimulation implementiert. Das allen Verfahren dieser Art gemeinsame Vorgehensprinzip lässt sich allgemein wie folgt formulieren:

- 1) Beginne mit einer angenommenen Anfangsbedingung für das Geschwindigkeitsfeld.
- 2) Berechne entsprechend den Randbedingungen ein neues Geschwindigkeitsfeld zu einer neuen Zeit, ohne oder mit genähertem Gradienten des Druckes. *Dieses Geschwindigkeitsfeld erfüllt in der Regel nicht die Massenerhaltung.*
- 3) Finde mit Hilfe der Zwangsbedingung (Helmholtz-Hodge-Zerlegung) ein Druckfeld, passend zu dem Geschwindigkeitsfeld, das die Massenerhaltung erfüllt.
- 4) Korrigiere mit dem Gradienten des Druckes das in 2) berechnete Geschwindigkeitsfeld.
- 5) (Fahre bei 2) fort, bis das Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei ist.)

Der fünfte Schritt wurde bewusst in Klammern gesetzt, da er nicht für alle Verfahren formal notwendig ist. Die verschiedenen Implementierungen von Druckkorrektur-Verfahren unterscheiden sich in erster Linie in der Wahl der Zeitintegrationsmethode. Der Druck selber ist der Zeitebene des neuen Geschwindigkeitsfeldes zuzuordnen, er sollte so gewählt sein, dass die Massenerhaltung zu jeder Zeit erfüllt ist. Wie das Geschwindigkeitsfeld aus dem zweiten Schritt berechnet wird, bestimmt die jeweilige Implementierung. Desweiteren wird, je nach Verfahren, bei der Berechnung im zweiten Schritt ein Druckgradient verwendet und lediglich ein „Korrekturdruck“ im dritten Schritt berechnet. Der dritte Schritt beinhaltet in allen Varianten die Lösung einer elliptischen Gleichung für den Druck. Die populärsten Varianten von Druckkorrektur-Verfahren sind

- das SIMPLE-Verfahren (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations*) [39, 38] und
- die Fractional-Step-Methode, auch Projektionsverfahren genannt [8].

Prinzipiell sind beide Verfahren „Projektionsverfahren“, da beide das Vektorfeld \mathbf{u}^* auf seinen divergenzfreien Anteil \mathbf{u} „projizieren“. Die Unterschiede bestehen, wie bereits

erwähnt, in der Formulierung des Korrekturdruckes (der bis auf eine Konstante in beiden Verfahren gleich ist) und in der Zeitdiskretisierung.

Ein anderer Aspekt der Druckkorrektur-Verfahren ist das verwendete Gitter, beziehungsweise die Lage der diskreten Feldgrößen. Wie in den nachfolgenden Abschnitten erläutert wird, ist die eleganteste numerische Lösung der Gleichungen, nicht auf beliebigen Gittertypen zu implementieren.

3.3 Fractional-Step-Methode – Projektionsverfahren

Das älteste Druckkorrektur-Verfahren ist die von Chorin 1969 vorgestellte *Fractional Step Methode* für inkompressible Fluide [8]. Der ursprüngliche Lösungsablauf für die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen (2.79) und (2.81) lässt sich für eine einfache, explizite Zeitintegration wie folgt darstellen:

- 1) Beginne den Zeitschritt Δt mit der Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u}^*

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n - \Delta t \operatorname{Res}(\mathbf{u}^n) ,$$

das die Massenerhaltung (2.79) *nicht* erfüllt, da der Druckgradient fehlt. Das Residuum $\operatorname{Res}(\mathbf{u}^n)$ entspricht hier der diskreten Formulierung der Ortsableitungen der Geschwindigkeit \mathbf{u} des n -ten Zeitschritts in der Impulsgleichung (2.81).

- 2) Bestimme den Druck des divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u}^{n+1} als Lösung des Problems (3.9)

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} p = \frac{\rho}{\Delta t} \operatorname{div} \mathbf{u}^* .$$

- 3) Berechne das divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}^{n+1} des neuen Zeitschritts durch Korrektur mit dem Druckgradienten

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p .$$

Fahre fort im nächsten Zeitschritt.

Wie leicht zu sehen ist, ist die *Fractional-Step-Methode* eine direkte Anwendung der Helmholtz-Hodge-Zerlegung. Der zweite Schritt, die Formulierung des elliptischen Problems für den Druck, entspricht hierbei der Anwendung des Divergenz-Operators auf den Korrekturschritt. Damit durchgängig gleiche, diskrete Differenzen-Operatoren zur Anwendung kommen, ist es in der Regel notwendig, versetzte Gitter zu verwenden. Nur dann ist die Konsistenz des Verfahrens gewährleistet.

Dieses einfache Verfahren wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit als Ausgangspunkt für die Entwicklung von Lösungsverfahren für Strömungen kleiner Mach-Zahlen verwendet. Genauso wie bei einem inkompressiblen Fluid, ist in diesem Fall der Druck $p^{(1)}$ aus der Impulserhaltung eine Zwangsbedingung, die sich jedoch nicht in der Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes manifestiert. Die Projektion des geschätzten Geschwindigkeitsfeldes erfolgt aber ebenfalls durch eine Zerlegung, wobei das Vektorfeld, auf das projiziert wird, nun eine endliche Divergenz aufweist. Die Folge sind Einschränkungen in der Zeitgenauigkeit und in den Erhaltungseigenschaften des Verfahrens, da die Divergenzbedingung keine eindeutige Zerlegung des geschätzten Vektorfeldes darstellt. Im stationären Fall hingegen ist die Divergenzfreiheit des Vektorfeldes des spezifischen Impulses gegeben, da die Zeitableitung der Dichte aus der Massenbilanz (2.1) verschwindet. Trotzdem muss die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes zu jeder Zeit bestimmt werden können. Dazu bieten sich zwei Möglichkeiten an:

1. Auswertung der Energieerhaltungsgleichung (2.73), beziehungsweise der Enthalpietransportgleichung (2.77), was eine direkte Bestimmungsgleichung für die Divergenz der Geschwindigkeit liefert.
2. Formulierung der Massenbilanz (2.1) implizit in der Zeit und Auswertung der temperaturbedingten Dichteänderung in der Zeit.

Beide Möglichkeiten werden im Folgenden ausführlich besprochen.

Die Energieerhaltungsgleichung (2.73) wurde im Kapitel 2 formuliert. Abgekürzt mit $\dot{\mathbf{q}}$ als Summe aller Wärmeströme und \dot{Q} als Summe aller Wärmequellen lässt sich diese für kleine Mach-Zahlen schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \operatorname{div}(\rho h \mathbf{u}) = \operatorname{div} \dot{\mathbf{q}} + \dot{Q} . \quad (3.10)$$

Mit dem Gasgesetz $p^{(0)} = \rho R T$ und den Zustandsgleichungen für Enthalpie $h = c_p T$ und innere Energie $e = c_v T$ lassen sich die Energien als Funktionen des thermodynamischen Druckes darstellen als

$$\rho e = \frac{1}{\kappa - 1} p^{(0)} \quad \text{und} \quad \rho h = \frac{\kappa}{\kappa - 1} p^{(0)} . \quad (3.11)$$

Somit kann die Gleichung (3.10) umgeschrieben werden zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\kappa - 1} p^{(0)} \right) + \operatorname{div} \left(\frac{\kappa}{\kappa - 1} p^{(0)} \mathbf{u} \right) = \operatorname{div} \dot{\mathbf{q}} + \dot{Q} . \quad (3.12)$$

Unter der Annahme konstanter Stoffzusammensetzung und mit Gleichung (2.27) kann die Energieerhaltungsgleichung (3.10) weiter vereinfacht werden zu

$$\frac{1}{\kappa - 1} \frac{\partial p^{(0)}}{\partial t} + \frac{\kappa}{\kappa - 1} p^{(0)} \operatorname{div} \mathbf{u} = \operatorname{div} \dot{\mathbf{q}} + \dot{Q} \quad , \quad (3.13)$$

wobei die zeitliche Änderung des thermodynamischen Druckes nur noch einem Quellterm entspricht. Aus der Gleichung (3.13) lässt sich direkt eine Bedingung für die Divergenz der Geschwindigkeit ableiten in der Form

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{\kappa - 1}{\kappa} \frac{1}{p^{(0)}} \left(\operatorname{div} \dot{\mathbf{q}} + \dot{Q} - \frac{1}{\kappa - 1} \frac{\partial p^{(0)}}{\partial t} \right) \quad . \quad (3.14)$$

Entsprechend der getroffenen Annahme konstanter Stoffeigenschaften ist diese Beziehung nur eingeschränkt nutzbar. Probleme, die detaillierte Stoffmodelle verlangen, werden hierbei nur unzureichend wiedergegeben. Bezogen auf einen Lösungsalgorithmus, wird diese Gleichung immer dann ausgewertet, wenn die Temperatur zum entsprechenden Zeitschritt vorliegt. Somit ist zugleich eine explizite Auswertung der Temperaturtransportgleichung notwendig.

Die Massenerhaltungsgleichung (2.1) liefert den Zugang, um eine Beziehung für die Divergenz des Vektorfeldes des spezifischen Impulses zu bestimmen. Mit dem Gasgesetz lässt sich Gleichung (2.1) schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p^{(0)}}{RT} \right) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad , \quad (3.15)$$

die sich in ihrer semidiskreten, impliziten Form als

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\left(\frac{p^{(0)}}{RT} \right)^{n+1} - \left(\frac{p^{(0)}}{RT} \right)^n \right] = - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})^{n+1} \quad (3.16)$$

formulieren lässt und unmittelbar die Divergenzbedingung für das gesuchte Vektorfeld liefert. Ebenso wie die vorangegangene Divergenzbeziehung (3.14), verlangt diese die explizite Auswertung der Enthalpietransportgleichung (2.77). Der große Vorteil dieser Form ist hingegen, dass keine Annahmen bezüglich der stoff- und temperaturabhängigen Koeffizienten getroffen werden müssen. Weiterhin erlaubt diese Beziehung eine konservative Diskretisierung der Impulserhaltung, die mit einer Beziehung für die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes alleine nicht möglich ist.

Die *Fractional-Step*-Methode für die Navier-Stokes-Gleichungen bei kleinen Mach-Zahlen lässt sich jetzt, ohne detailliert auf die Ortsdiskretisierung einzugehen, in den

folgenden Algorithmen allgemein für ein explizites Verfahren formulieren. Zunächst beschrieben für das System von Transportgleichungen (2.74) bis (2.77), also für die primitiven Variablen $(\xi_\alpha, h, \mathbf{u})$. Dabei wird unter dem Residuum $\text{Res}(\cdot)$ eine diskrete Formulierung der Ortsableitungen in der entsprechenden Gleichung verstanden.

- 1) Beginne mit einer angenommenen Anfangsbedingung für alle primitiven Feldvariablen $(\xi_\alpha, h, \mathbf{u})$.
- 2.1) Berechne entsprechend der Randbedingungen die Enthalpie h und die Zusammensetzung ξ_α des neuen Zeitschritts $n + 1$ aus den Gleichungen (2.75) und (2.77)

$$\begin{aligned} h^{n+1} &= h^n - \Delta t \text{Res}_h(\xi_\alpha^n, h^n, \mathbf{u}^n) \\ \xi_\alpha^{n+1} &= \xi_\alpha^n - \Delta t \text{Res}_\xi(\xi_\alpha^n, h^n, \mathbf{u}^n) . \end{aligned} \tag{3.17}$$

Die Dichte ρ^{n+1} lässt sich aus der neuen Enthalpie und Zusammensetzung bestimmen.

- 2.2) Berechne das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}^* aus der Gleichung (2.76)

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n - \Delta t \text{Res}_u(\xi_\alpha^n, h^n, \mathbf{u}^n) , \tag{3.18}$$

das die Divergenzbedingung *nicht* erfüllt.

- 3) Bestimmung des Druckes als Lösung des Problems

$$\text{div}\left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \text{grad } p^{(1)}\right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\text{div } \mathbf{u}^* - \text{div } \mathbf{u}^{n+1} \right) , \tag{3.19}$$

wobei die Divergenzbedingung (3.14) oder (3.16) zu verwenden ist.

- 4) Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u}^{n+1} , das die Divergenzbedingung erfüllt, durch Korrektur mit dem Druckgradienten

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \frac{1}{\rho^{n+1}} \text{grad } p^{(1)} . \tag{3.20}$$

Fahre fort im nächsten Zeitschritt.

Für die Erhaltungsgleichungen (2.70) bis (2.72) mit den konservativen Variablen $(\rho_\alpha, \rho \mathbf{u})$ und der Enthalpie h ist prinzipiell derselbe Ablauf anzusetzen.

- 1) Beginne mit einer angenommenen Anfangsbedingung für alle konservativen Feldvariablen $(\rho_\alpha, \rho \mathbf{u})$ und für die Enthalpie h .

- 2.1) Berechne entsprechend der Randbedingungen die Enthalpie h und die Partialdichten ρ_α des neuen Zeitschritts $n + 1$ aus den Gleichungen (2.77) und (2.71)

$$\begin{aligned} h^{n+1} &= h^n - \Delta t \operatorname{Res}_h(\rho_\alpha^n, h^n, (\rho \mathbf{u})^n) \\ \rho_\alpha^{n+1} &= \rho_\alpha^n - \Delta t \operatorname{Res}_\rho(\rho_\alpha^n, h^n, (\rho \mathbf{u})^n) . \end{aligned} \quad (3.21)$$

Die Dichte ρ^{n+1} ist die Summe aller Partialdichten ρ_α^{n+1} .

- 2.2) Berechne das Vektorfeld $(\rho \mathbf{u})^*$ des spezifischen Impulses aus Gleichung (2.72)

$$(\rho \mathbf{u})^* = (\rho \mathbf{u})^n - \Delta t \operatorname{Res}_{\rho \mathbf{u}}(\rho_\alpha^n, h^n, (\rho \mathbf{u})^n) , \quad (3.22)$$

das die Divergenzbedingung (3.16) *nicht* erfüllt.

- 3) Bestimmung des Druckes als Lösung des Problems

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} p^{(1)} = \frac{1}{\Delta t} (\operatorname{div}(\rho \mathbf{u})^* - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})^{n+1}) , \quad (3.23)$$

wobei die Divergenzbedingung (3.16) zu verwenden ist.

- 4) Berechnung des Feldes spezifischen Impulses $(\rho \mathbf{u})^{n+1}$, das die Divergenzbedingung erfüllt, durch Korrektur mit dem Druckgradienten

$$(\rho \mathbf{u})^{n+1} = (\rho \mathbf{u})^* - \Delta t \operatorname{grad} p^{(1)} . \quad (3.24)$$

Fahre fort im nächsten Zeitschritt.

Für die Navier-Stokes-Gleichungen (2.70) bis (2.72) für Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen ist jetzt eine Finite-Volumen-Diskretisierung möglich. Die Energieerhaltungsgleichung muss jedoch nach wie vor in ihrer Transportform (2.77) gelöst werden, da die zeitliche Änderung der spezifischen inneren Energie in isobaren, also offenen Systemen, praktisch nur von der Änderung des Isentropenexponenten κ abhängt, wie in Gleichung (3.11) gezeigt. Somit ist die Energieerhaltungsgleichung (2.73) in der konservativen Formulierung für praktische Implementierungen ungünstig.

3.3.1 Explizite Diskretisierung und Integration in der Zeit

Die explizite Diskretisierung in der Zeit führt auf mehrere Probleme. Zum einem ist die Zeitschrittweite begrenzt, das heißt, dass die CFL-Bedingung eingehalten werden muss. Diese besagt, dass der numerische Fortschritt in der Zeit nicht größer sein darf als der physikalische, definiert durch die Charakteristik, d.h.

$$C = \max \left(\left| \frac{dx}{dt} \right|_c \right) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 . \quad (3.25)$$

Die Berechnung der Zeitschrittweite entsprechend der CFL-Bedingung, läuft auf eine Untersuchung der Charakteristiken des vorliegenden Gleichungssystems hinaus. Alternativ lässt sich ein Kriterium für die zulässige Zeitschrittweite über die Stabilitätsanalyse der diskreten Gleichung herleiten [25, 53].

Als Modell zur Untersuchung der zulässigen Zeitschrittweite soll die *Konvektions-Diffusions*-Gleichung dienen:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \text{grad } \varphi = \nu \text{div grad } \varphi . \quad (3.26)$$

Diese wird auch allgemein als Modellgleichung für den Wärme- und Stofftransport gesehen. Die Stabilitätsanalyse für eine explizite Integration in einem Schritt und zentrale Differenzen im Ort liefert die Bedingung

$$\Delta t \leq C \cdot \min \left(2\nu \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-1}, \frac{2\nu}{u^2} \right) , \quad (3.27)$$

mit $u^2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$ und der CFL-Zahl $C \leq 1$ [25]. Das Ergebnis der Stabilitätsanalyse wurde von Weinan und Liu [53] zu dem Ausdruck

$$\Delta t \leq C \cdot \left(\frac{u^2}{2\nu} + 2\nu \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) \right)^{-1} \quad (3.28)$$

zusammengefasst. Diese Bedingung wird ebenfalls für das System der Navier-Stokes-Gleichungen verwendet. Zu beachten ist, dass der Koeffizient des diffusiven Transportes für die einzelnen Gleichungen stark variieren kann, während die konvektive Transportgeschwindigkeit für alle gleich ist.

Soll die Zeitintegration auf hierarchisch überlagerten Gittern unterschiedlicher Ortschrittweiten $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ erfolgen, ist die wesentlich handlichere Formel

$$\Delta t \leq C \cdot \left(\frac{|u|}{\Delta x} + \frac{|v|}{\Delta y} + \frac{|w|}{\Delta z} + 2\nu \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) \right)^{-1} \quad (3.29)$$

zu verwenden. Im Fall verschwindender Diffusion $\nu \rightarrow 0$ entspricht diese Formel, dann der CFL-Bedingung für eine reine Konvektions-Gleichung.

Ein oft verwendetes Verfahren für die explizite Zeitintegration ist das Runge-Kutta-Mehrschrittverfahren, das auf A. Jameson [27] zurückgeht. Es enthält nur wenige algorithmische Erweiterungen zu einer gewöhnlichen Einzschritt-Zeitintegration und ist darüber hinaus auch bei einer zentralen Formulierung der Konvektions-Gleichung stabil. Es muss lediglich noch in den Druckkorrektur-Formalismus integriert werden. Die Runge-Kutta-

Zeitintegration lässt sich wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}^{(0)} &= \mathbf{V}^{(n)} \\
\mathbf{V}^{(1)} &= \mathbf{V}^{(0)} - \alpha_1 \Delta t \text{Res}(\mathbf{V}^{(0)}) \\
\mathbf{V}^{(2)} &= \mathbf{V}^{(0)} - \alpha_2 \Delta t \text{Res}(\mathbf{V}^{(1)}) \\
&\cdot \\
&\cdot \\
\mathbf{V}^{(m)} &= \mathbf{V}^{(0)} - \alpha_m \Delta t \text{Res}(\mathbf{V}^{(m-1)}) \\
&\cdot \\
&\cdot \\
\mathbf{V}^{(M)} &= \mathbf{V}^{(0)} - \alpha_M \Delta t \text{Res}(\mathbf{V}^{(M-1)}) \\
\mathbf{V}^{(n+1)} &= \mathbf{V}^{(M)}
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Die aus M -Schritten bestehende Zeitintegration entspricht einer mit den Koeffizienten $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M$ gewichteter Extrapolation. Diese Koeffizienten sind im gewissen Rahmen frei wählbar, bis auf den letzten, der immer $\alpha_M = 1$ sein sollte, um die Zeitkonsistenz des Verfahrens sicherzustellen. Die restlichen Koeffizienten können entsprechend den Anforderungen, entweder für die Stabilität oder für die Genauigkeit des Schemas optimiert werden. Die verwendeten Koeffizienten sind in der Tabelle 3.1 gelistet, jeweils mit der theoretisch zulässigen CFL-Zahl und der Genauigkeit der Zeitdiskretisierung.

M	α_1	α_2	α_3	C	Ordnung
2	1/2	1	-	1	Δt
3	1/2	1/2	1	2	Δt^2
3	1/3	1/2	1	$\sqrt{3}$	Δt^3

Tabelle 3.1: Liste verwendeter Runge-Kutta-Koeffizienten.

Die Anwendung des Runge-Kutta-Schemas auf ein Projektionsverfahren kann für einen vollständigen Projektions- und Korrekturzyklus erfolgen. Der Fractional-Step-Zyklus für den m -ten Schritt der Zeitintegration mit den Geschwindigkeiten \mathbf{u} und dem Satz von skalaren Variablen $\Phi = [\rho, \xi_\beta, T]$ ist dann

$$\begin{aligned}
\mathbf{1} : \quad & \mathbf{u}^{*,m} = \mathbf{u}^n - \alpha_m \Delta t \text{Res}(\mathbf{u}^{m-1}, \rho^{m-1}) \\
& \Phi^m = \Phi^n - \alpha_m \Delta t \text{Res}(\mathbf{u}^{m-1}, \Phi^{m-1}) \\
\mathbf{2} : \quad & \text{div}((1/\rho^m) \text{grad}(p^{(1)})) = (\alpha_m \Delta t)^{-1} \text{div}((\mathbf{u}^m) - \mathbf{u}^{*,m}) \\
\mathbf{3} : \quad & \mathbf{u}^m = \mathbf{u}^{*,m} - \alpha_m \Delta t (1/\rho^m) \text{grad}(p^{(1)})
\end{aligned}$$

wobei der jeweilige Koeffizient α_m in die rechte Seite der Poisson-Gleichung des Druckes einfließt. Diese Prozedur kann sich wegen der erforderlichen Lösung der Druckgleichung in jedem Schritt des Runge-Kutta-Schemas als nicht effizient erweisen. Trotz dieser Gefahr wurde die vorgestellte Prozedur im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet. Es hat sich in praktischen Simulationsrechnungen und während der Validierung gezeigt, dass das elliptische Unterproblem nur zu Beginn einer Rechnung schlechte Konvergenzeigenschaften aufwies. Diese waren in der Regel auf eine ungeschickte Wahl der Anfangsbedingungen zurückzuführen.

Alternativ zu dieser Vorgehensweise, kann das Mehrschrittschema ausschließlich im Projektionsschritt angewendet werden. Allerdings ist dabei zu beachten, dass die Transportgleichung der Enthalpie (2.77), beziehungsweise der Temperatur, mit der Geschwindigkeit u^n der „alten“ Zeit, durchgehend in allen Unterzeitschritten berechnet wird. Desweiteren ist zu beachten, dass die Konvektionsgeschwindigkeit, die in der Berechnung der Zwischenschritte der Impulserhaltungsgleichung (2.72) oder der Geschwindigkeitstransportgleichung (2.76) verwendet wird, die Divergenzbedingung (3.16) beziehungsweise (3.14) nicht erfüllt.

3.3.2 Diskrete Formulierung der Poisson-Gleichung für den Druck

Bevor die Diskretisierung der Ortsableitungen diskutiert wird, sollte auf die Behandlung des dynamischen Druckes $p^{(1)}$ eingegangen werden. Die Erstellung der Poisson-Gleichung für den Druck, also ihre Kompilation aus dem Korrekturschritt des Projektionsverfahrens, ist sehr entscheidend für die Genauigkeit und Robustheit des Verfahrens. Weiterhin hängt die Struktur der Druckgleichung eng mit der Wahl der Gitterlogik zusammen, was ebenfalls die Robustheit und Flexibilität des Verfahrens bestimmt. Da sich daraus in Konsequenz die Frage nach der Verwendung versetzter (*engl.* „*staggered*“) beziehungsweise nicht-versetzter (*engl.* „*collocated*“) Gitter ergibt und davon wiederum die diskreten Ortsableitungen abhängen, muss die Druckgleichung bereits an dieser Stelle diskutiert werden.

Eines der häufigsten Probleme in der Implementierung von Druckkorrektur-Verfahren ist die schachbrettförmige Entkopplung des Druckfeldes. Die Schuld trägt fast immer die Wahl des diskreten Divergenz-Operators bei der Konstruktion der Druckgleichung. Dabei liefert die Anwendung des Divergenz-Operators auf den Korrekturschritt des Algorithmus die diskrete Poisson-Gleichung für den Druck. Wird ein zentraler Differenzen-Operator auf den Korrekturschritt angewendet, wird das Problem deutlich. Der Kor-

rekturschritt selbst, enthält dabei eine zentrale Differenz des Druckes, so dass für die Geschwindigkeit des neuen Zeitschritts $n + 1$ im Ort x_i nach Gleichung (3.20) gilt:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^*}{\Delta t} + \frac{1}{\rho_i} \frac{p_{i+1}^{(1)} - p_{i-1}^{(1)}}{2\Delta x} = 0 . \quad (3.31)$$

Durch Anwendung der zentralen Differenz auf die Gleichung (3.31) folgt dann die diskrete Poisson-Gleichung für den Druck, in der Form

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{1}{\rho_{i+1}} \frac{p_{i+2}^{(1)} - p_i^{(1)}}{2\Delta x} - \frac{1}{\rho_{i-1}} \frac{p_i^{(1)} - p_{i-2}^{(1)}}{2\Delta x} \right) = \\ \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{u_{i+1}^* - u_{i+1}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{u_{i-1}^* - u_{i-1}^{n+1}}{\Delta t} \right) , \end{aligned} \quad (3.32)$$

die für den Druck $p_i^{(1)}$ gelöst wird. Da die Divergenz der neuen Geschwindigkeit u^{n+1} an dieser Stelle bereits bekannt sein muss, wird die Gleichung (3.32) folglich umgeschrieben zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{1}{\rho_{i+1}} \frac{p_{i+2}^{(1)} - p_i^{(1)}}{2\Delta x} - \frac{1}{\rho_{i-1}} \frac{p_i^{(1)} - p_{i-2}^{(1)}}{2\Delta x} \right) = \\ \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_{i+1}^* - u_{i-1}^*}{2\Delta x} - \text{div}(u^{n+1})_i \right) . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Hierbei wird zunächst offengelassen, wie die Divergenz $\text{div}(u^{n+1})_i$ zustande kommt, da es zu sehr von der Problemstellung abhängt. Wie sofort zu sehen ist, liefert die Geschwindigkeit u_i^* am Ort x_i keinen Beitrag zur Berechnung des Druckes $p_i^{(1)}$. Umgekehrt liefert der Druck um den Ort x_i keinen Beitrag zu der entsprechenden Geschwindigkeit. Weiterhin ist bei diesem naiven Ansatz der Differenzenstern nicht kompakt und der Druck wird praktisch auf einem doppelt so groben Gitter gelöst, wie die restliche Lösung. Da der Druck $p^{(1)}$ in den Transport- und Erhaltungsgleichungen lediglich als Gradient vorkommt, ist diese schachbrettförmige Entkopplung, allein in der Lösung der Druckgleichung zu bemerken. Mangels entsprechender Glättungsmechanismen führt sie aber letztlich zur Zerstörung der Lösung. Der Mechanismus der Entkopplung ist in der Skizze 3.1 schematisch dargestellt.

Bei der Suche nach geeigneten, diskreten Divergenz-Operatoren, beziehungsweise bei der Konstruktion der Druckgleichung, sind also mehrere Kriterien zu erfüllen:

- Der diskrete Laplace-Operator soll durch einen kompakten Differenzenstern ersetzt werden.

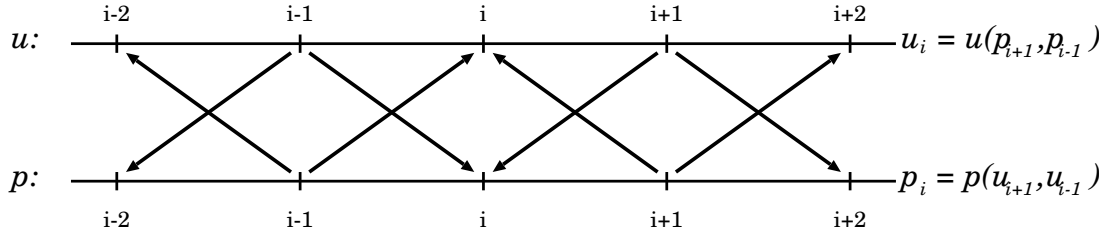


Abbildung 3.1: Abhängigkeit des Druckes $p^{(1)}$ und der Geschwindigkeit u auf nicht-versetzten Gittern.

- Die verwendeten Differenzenapproximationen sollten der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ sein.
- Die Kopplung der Lösung soll auf jeden Fall erhalten bleiben.
- Nach Möglichkeit soll bei der Konstruktion der Druckgleichung derselbe diskrete Divergenz-Operator auf alle Terme des Korrekturschrittes angewendet werden, um die Konsistenz des Verfahrens zu gewährleisten.

Der sicher eleganteste Lösungsvorschlag stammt von van der Wijngaart [54]. Wie bereits im Abschnitt 3.1 erwähnt, ist der dynamische Druck $p^{(1)}$ bis auf eine Konstante bestimmt. Mit anderen Worten, sein Absolutbetrag ist unerheblich. Die schachbrettförmig entkoppelten Lösungen unterscheiden sich aber nur durch einen konstanten Betrag, somit sollte es möglich sein die Entkopplung zu „filtern“.

Kann auf eine Genauigkeit höher als erster Ordnung verzichtet werden, ist für den Korrekturschritt, eine einseitige Differenz erster Ordnung anzusetzen, zum Beispiel eine Rückwärtsdifferenz für den Druckgradienten

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^*}{\Delta t} + \frac{1}{\rho_{i+1/2}} \frac{p_i^{(1)} - p_{i-1}^{(1)}}{\Delta x} = 0 . \quad (3.34)$$

Die entsprechende Druckgleichung kann dann mit dem entgegengesetzten Differenz-Operator konstruiert werden

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{1}{\rho_{i+1/2}} \frac{p_{i+1}^{(1)} - p_i^{(1)}}{\Delta x} - \frac{1}{\rho_{i-1/2}} \frac{p_i^{(1)} - p_{i-1}^{(1)}}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_{i+1}^* - u_i^*}{\Delta x} - \text{div}(u^{n+1})_i \right) . \quad (3.35)$$

Dieser Ansatz garantiert einen kompakten diskreten Laplace-Operator für den Druck und die Entkopplung kann vermieden werden. Die Lösung ist allerdings nur erster Ordnung genau im Ort.

Die populärsten Ansätze verzichten jedoch auf die Erhaltung der Konsistenz bei der Konstruktion der Druckgleichung [40]. Dabei werden unterschiedliche Differenzen-Operatoren auf die einzelnen Schritte des Druckkorrektur-Algorithmus angewendet, so

dass die Druckgleichung die Form hat:

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{1}{\rho_{i+1/2}} \frac{p_{i+1}^{(1)} - p_i^{(1)}}{\Delta x} - \frac{1}{\rho_{i-1/2}} \frac{p_i^{(1)} - p_{i-1}^{(1)}}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*}{\Delta x} - \operatorname{div}(u^{n+1})_i \right). \quad (3.36)$$

Die Verletzung der Konsistenz rührt aus der Bildung der rechten Seite der Gleichung (3.36), mit einer zentralen Differenz gemittelter Größen auf den *nicht vorhandenen* Punkten $i \pm 1/2$. Die Werte auf diesen „Zwischenpunkten“ müssen für die Bildung der Divergenz gemittelt werden. Allerdings führt eine lineare Interpolation zwar auf eine Approximation, die formal zweiter Ordnung genau ist, jedoch wiederum eine Entkopplung provoziert. Einseitige Differenzen höherer Genauigkeit sind hier zu bevorzugen.

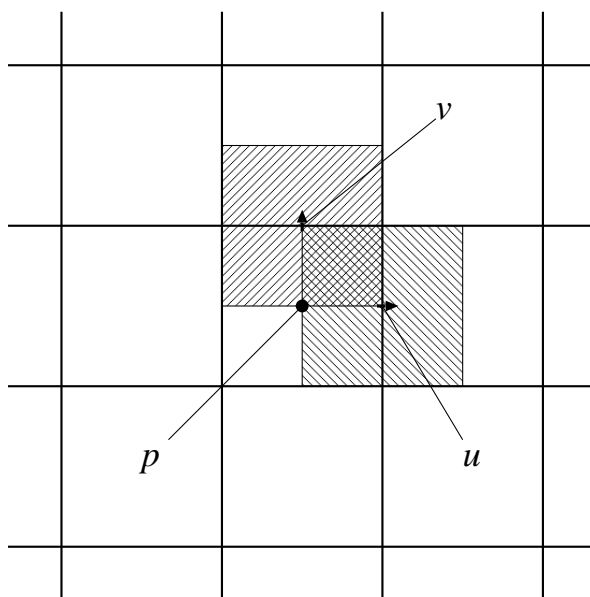


Abbildung 3.2: Skizze des versetzten Gitters für eine Finite-Volumen-Implementierung.

Wie gezeigt, sind die gestellten Forderungen auf einem Gitter, welches alle Variablen am selben Ort hält, nicht vollständig erfüllbar. Als Lösung des Problems bietet sich das so genannte *versetzte Gitter* an. Dabei werden die Variablen so abgelegt, dass die Geschwindigkeiten jeweils um eine halbe Gitterschrittweite in ihrer Richtung zu dem Druck versetzt sind. Ein Beispiel des versetzten Gitters ist in Abbildung 3.2 skizziert mit den entsprechenden Kontrollvolumina für die Geschwindigkeiten und den Druck. Der Korrekturschritt der Geschwindigkeit könnte dann mit zentralen Differenzen wie

folgt implementiert werden

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^*}{\Delta t} + \frac{1}{\rho_{i+1/2}} \frac{p_{i+1}^{(1)} - p_i^{(1)}}{\Delta x} = 0 . \tag{3.37}$$

Ebenfalls durch Anwendung eines zentralen Differenz-Operator hat die Druckgleichung dann konsequenterweise die Form

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{1}{\rho_{i+1/2}} \frac{p_{i+1}^{(1)} - p_i^{(1)}}{\Delta x} - \frac{1}{\rho_{i-1/2}} \frac{p_i^{(1)} - p_{i-1}^{(1)}}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_i^* - u_{i-1}^*}{\Delta x} - \text{div} (u^{n+1})_i \right) . \tag{3.38}$$

Es ist zu bemerken, dass jetzt die jeweiligen Differenzenausdrücke von zweiter Ordnung genau sind, bezüglich der Lage der gesuchten Variablen auf dem versetzten Gitter. Die Kopplung der beiden Lösungen ist schematisch in Skizze 3.3 dargestellt.

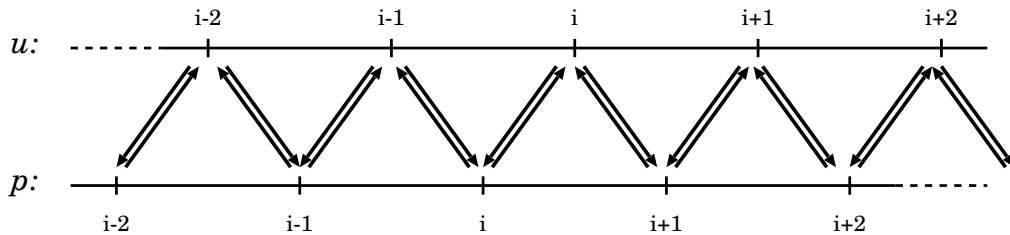


Abbildung 3.3: Abhängigkeit des Druckes $p^{(1)}$ und der Geschwindigkeit u auf versetzten Gittern.

Die Entscheidung, welche Gitterlogik verwendet werden soll, ist pragmatischer Natur und richtet sich letztlich nach den praktischen Anforderungen des zu lösenden Problems. Versetzte Gitter sind elegant bezüglich der Konsequenz in der Konstruktion von Differenzenausdrücken und der Kopplung der einzelnen Lösungsschritte. Nachteilig ist die recht umständliche Formulierung von höheren Ableitungen der Geschwindigkeiten, was jedoch auf ijk -abzählbaren Gittern in der Regel keine Schwierigkeiten bereitet. Die Formulierung von Randbedingungen der Geschwindigkeiten hingegen, erfordert eine gesonderte Behandlung für jede Geschwindigkeitsrichtung, da Situationen denkbar sind, in denen einem Punkt zugeordnete Geschwindigkeiten nur zum Teil von einer Randbedingung direkt betroffen sind. Besonders schwierig ist die Verwendung versetzter Gitter, wenn diese indirekt, zum Beispiel für die Gitteradaption, anhand einer Baumlogik adressiert sind. Die bei Gitterübergängen (abrupte Wechsel der Schrittweite) entstehenden *virtuellen* Kontrollvolumina führen auf eine Vielzahl von Sonderfällen, die einzeln

durch entsprechende Regeln abgefangen werden müssen [36, 37]. In solchen Fällen ist die nicht-versetzte Lage von Variablen, algorithmisch wesentlich einfacher umzusetzen, vor allem wenn durchgehend kompakte Differenzenausdrücke verwendet werden. Eine indirekte Adressierung von Gitterpunktnachbarn ist dann immer noch überschaubar klein. Die Anzahl der Sonderfälle bei der Implementierung von Randbedingungen ist ebenfalls stark reduziert, da alle Variablen die einem Punkt zugeordnet sind, dieselbe Lage auf dem Gitter besitzen.

3.3.3 Diskretisierung der Ortsableitungen

Die zu diskretisierenden Gleichungen (2.74), (2.75), (2.76) und (2.77) enthalten erste und zweite Ableitungen skalarer Variablen $\varphi(t, \mathbf{x})$ vom Typ

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \quad (3.39)$$

und vektorieller Variablen $\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = [u, v, w]^T$, vom Typ

$$\frac{\partial u}{\partial x}, \quad \frac{\partial u}{\partial y}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \quad (3.40)$$

sowie bei variablen Materialkoeffizienten $\nu(t, \mathbf{x})$, noch

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right), \quad \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial x} \right). \quad (3.41)$$

Die gemischten Ableitungen sind die Folge der Anwendung des Divergenz-Operators auf den Tensor der Deformationsgeschwindigkeit (2.32). Sie verschwinden im Falle eines inkompressiblen Fluides mit konstanten Materialeigenschaften. Natürlich enthält die Divergenz des Reibungsspannungstensors weit mehr Komponenten, die jedoch in gleicher Art diskretisiert werden, wie die hier gelisteten.

Da sich die Umsetzung der Diskretisierung je nach Gitterlogik unterscheidet, werden die beiden Gittertypen getrennt behandelt. Bei der Formulierung der Differenzenformeln wird eine konstante Gitterschrittweite $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ vorausgesetzt.

Finite-Differenzen-Diskretisierung auf nicht-versetzten Gittern

Wenn alle Variablen, die demselben Index zugeordnet sind, auch dieselbe diskrete Ortskoordinate besitzen, spricht man von *nicht-versetzten* Gittern. Der Hauptvorteil dieser Gitter ist, dass Ableitungen quer zur Richtung der jeweiligen Geschwindigkeitskomponente nicht gesondert behandelt werden müssen. Desweiteren erfolgt die Implementierung einer

der Körperkontur angepassten Randbedingung (*Bondary-Fitting*) für alle Variablen nach dem selben Schema. Somit ist es durchaus konsequent, sich zusätzlich auf die Verwendung ausschließlich kompakter Differenzenausdrücke zu beschränken. Eine Differenz ist als *kompakt* zu bezeichnen, wenn nur die direkten Nachbarn im Abstand Δx zu ihrer Bildung herangezogen werden. Die Realisierung weiter ausgreifender Differenzenausdrücke, zum Beispiel für Upwind-Verfahren höherer Genauigkeit, erfordert dann zusätzlich die Speicherung der Differenzen zwischen den Gitterpunkten. Natürlich ist dies bei einem abzählbaren Gitter nicht erforderlich, da sich die Nachbarschaftsbeziehungen aller Punkte einfach bestimmen lassen. Trotz der Möglichkeit indirekt adressierte Gitter zu verwenden, wird für die folgenden Erläuterungen die Notation abzählbarer Gitter verwendet. Demnach zeigen die Indizes (i, j, k) auf eine Variable am Ort $\mathbf{x} = [i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z]^T$, beziehungsweise allgemein $\mathbf{x} = [x(i), y(j), z(k)]^T$ bei nicht uniformen Gittern.

Zur Bildung der Differenzenapproximationen erster Ableitungen genügt die Kenntnis der Punkte entlang der Richtung der Ableitung. Direkt aus den benachbarten Werten eines Gitterpunktes (i, j, k) können die *zentrale* (c) Differenz, sowie die einseitigen, *vorwärts* (f) und *rückwärts* (b) Differenzen, gebildet werden. Die Indizierung der Differenzenausdrücke der ersten Ableitung erfolgt hier nur eindimensional, da die anderen Indizes konstant bleiben. Die einfachsten kompakten Differenzenapproximationen der ersten Ableitung sind

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^c = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) , \quad (3.42)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^b = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) , \quad (3.43)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^f = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) . \quad (3.44)$$

Die Taylorreihen-Entwicklung um den Gitterpunkt (i, j, k) zeigt, dass nur die zentrale Differenz (3.42) zweiter Ordnung genau ist. Die für die Anwendung von Upwind-Schemata wichtigen, einseitigen Differenzen (3.43) und (3.44) sind auf dem kompakten Differenzenstern nur erster Ordnung genau. Für die Verwendung von einseitigen, finiten Differenzen höherer Ordnung ist es notwendig, entweder weitere Punkte einzubeziehen oder zusätzlich zu den Werten der entsprechenden Variablen auch noch die Differenz zum nächsten Wert zu speichern. Mit der Definition

$$\Delta u_i^+ = \frac{(u_{i+1} - u_i)}{\Delta x} \quad (3.45)$$

$$\Delta u_i^- = \frac{(u_i - u_{i-1})}{\Delta x} \quad (3.46)$$

lassen sich die Differenzenausdrücke (3.42), (3.43) und (3.44) umformen zu

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i = a \Delta u_i^+ + b \Delta u_i^- + \mathcal{O}(\Delta x^l) , \quad (3.47)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a = \frac{1}{2} \quad b = \frac{1}{2} \quad l = 2 & \quad \text{zentral} \\ a = 1 \quad b = 0 \quad l = 1 & \quad \text{vorwärts} \\ a = 0 \quad b = 1 \quad l = 1 & \quad \text{rückwärts} \end{aligned} \quad (3.48)$$

für die verschiedenen Differenzen. Für Differenzen höherer Genauigkeit ist die Gleichung (3.47) folgendermaßen zu erweitern

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i = a \Delta u_i^+ + b \Delta u_i^- + c \Delta u_{i+1}^+ + d \Delta u_{i-1}^- + \mathcal{O}(\Delta x^l) , \quad (3.49)$$

so dass nun fünf Punkte an der Approximation beteiligt sind. Mit geeigneten Koeffizienten a, b, c, d können jetzt zentrale Approximationen bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^4)$ und einseitige Approximationen bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^3)$ gebildet werden. Die Tabelle 3.2 bietet eine komplette Liste der hier verwendeten Approximationen der ersten Ableitung. In der letzten Spalte ist der Koeffizient κ der MUSCL-Extrapolation eingetragen, der auf eine entsprechendes Differenzenschema führt. Die MUSCL-Extrapolation [32] ist vor allem im Zusammenhang mit Upwind-Schemata sehr populär, da durch die geeignete Formulierung sich die Eigenschaften der Diskretisierung während einer Rechnung ändern lassen. Voraussetzung für diese effiziente Art der Implementierung ist die Formulierung der diskreten ersten Ableitung als finite Differenz der Werte zwischen den Gitterpunkten in $i + 1/2$ und $i - 1/2$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^{up} = \frac{u_{i+1/2}^{up} - u_{i-1/2}^{up}}{\Delta x} \quad \text{für } \lambda > 0 \quad (3.50)$$

und

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^{down} = \frac{u_{i+1/2}^{down} - u_{i-1/2}^{down}}{\Delta x} \quad \text{für } \lambda \leq 0 , \quad (3.51)$$

mit λ , der jeweiligen Transportgeschwindigkeit. Die hochgestellten Indizes stehen hier für die „upstream“, also die rückwärtsgewandte Differenz und für die „downstream“, die vorwärtsgewandte Differenz im Sinne eines Upwind-Verfahrens. Die Werte auf den „Halbpunkten“ sind nach der Interpolationsvorschrift

$$\begin{aligned} u_{i+1/2}^{up} &= u_i + \varphi \frac{1}{4} \left[(1 + \kappa)(u_{i+1} - u_i) + (1 - \kappa)(u_i - u_{i-1}) \right] \\ u_{i+1/2}^{down} &= u_{i+1} - \varphi \frac{1}{4} \left[(1 + \kappa)(u_{i+1} - u_i) + (1 - \kappa)(u_{i+2} - u_{i+1}) \right] \end{aligned} \quad (3.52)$$

zu berechnen. Der Parameter φ ist ein Schalter, der bewirkt, dass das Verfahren auf eine einseitige Differenz erster Ordnung reduziert wird.

a	b	c	d	Typ	Ordnung	
1/2	1/2	0	0	zentral	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	MUSCL, $\kappa = +1$
1	0	0	0	vorwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^1)$	
0	1	0	0	rückwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^1)$	
7/12	7/12	-1/12	-1/12	zentral	$\mathcal{O}(\Delta x^4)$	
3/2	0	-1/2	0	vorwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	MUSCL, $\kappa = -1$
0	3/2	0	-1/2	rückwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	MUSCL, $\kappa = -1$
1	1/4	-1/4	0	vorwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	MUSCL, $\kappa = 0$
1/4	1	0	-1/4	rückwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^2)$	MUSCL, $\kappa = 0$
5/6	1/3	-1/6	0	vorwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^3)$	MUSCL, $\kappa = 1/3$
1/3	5/6	0	-1/6	rückwärts	$\mathcal{O}(\Delta x^3)$	MUSCL, $\kappa = 1/3$

Tabelle 3.2: Koeffizienten der Gleichung (3.49) für verschiedene Approximationen

Die Berechnung von Differenzapproximationen der zweiten Ableitung beschränkt sich auf die Verwendung zentraler Differenzen mit drei Punkten. Die zweite Ableitung mit einem nicht-konstanten Koeffizienten hat dann die Form

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right|_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\bar{\nu}_{i+1/2} \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \bar{\nu}_{i-1/2} \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right) \quad (3.53)$$

mit den gemittelten Koeffizienten

$$\begin{aligned} \bar{\nu}_{i+1/2} &= \frac{\nu_{i+1} + \nu_i}{2} \\ \bar{\nu}_{i-1/2} &= \frac{\nu_i + \nu_{i-1}}{2} . \end{aligned} \quad (3.54)$$

Diese Differenzenapproximation ist von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ genau, solange die Gitterschrittweite konstant ist. Die Approximationen in anderen Raumrichtungen werden nach demselben Schema implementiert.

Die Konstruktion von finiten Differenzen der gemischten Ableitungen hat im Falle inkompressibler Strömung mit konstanten Transportkoeffizienten keine Bedeutung, da der Spannungstensor sich dann auf einen Laplace-Operator des Geschwindigkeitsvektors reduziert. Sind jedoch signifikante Temperatur- und Zusammensetzungsunterschiede im Integrationsgebiet zu erwarten, muss der vollständige Reibungsspannungstensor, beziehungsweise seine Divergenz, diskretisiert werden. Da jetzt die gemischten Ableitungen vom Typ

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (3.55)$$

zu berechnen sind, ist der bisher verwendete Differenzenstern mit 5 Punkten in zwei oder mit 7 Punkten in drei Dimensionen, entsprechend zu erweitern. Vor allem in drei Dimensionen ist die Konstruktion der gemischten Ableitung stark von der Adressierungslogik abhängig. Da die hier vorgestellten Verfahren in Programmbibliotheken einfließen, die auch das Lattice-BGK-Verfahren in drei Dimensionen implementieren, muss die dort verwendete Gitterstruktur berücksichtigt werden. Für eine zweidimensionale Berechnung müssen im allgemein gültigen Fall zwei gemischte Ableitungen mit nicht-konstanten Koeffizienten bestimmt werden. Für einen kompakten Differenzenstern mit 9 Punkten ist die gemischte Ableitung dann

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Big|_{i,j,k} = \frac{1}{2\Delta x} \left(\nu_{i+1,j,k} (\delta_y u)_{i+1,j,k} - \nu_{i-1,j,k} (\delta_y u)_{i-1,j,k} \right), \quad (3.56)$$

mit $\delta_y u$ dem diskreten Differenz-Operator erster Ableitung. Bei einem Differenzenstern mit 9 Punkten ist jeweils der zentrale Operator anzuwenden in der Form

$$\begin{aligned} (\delta_y u)_{i+1,j,k} &= \frac{u_{i+1,j+1,k} - u_{i+1,j-1,k}}{2\Delta y} \\ (\delta_y u)_{i-1,j,k} &= \frac{u_{i-1,j+1,k} - u_{i-1,j-1,k}}{2\Delta y}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

In der Differenzenformel (3.57) wurde die Indizierung eines dreidimensionalen Gitters verwendet, da die Implementierung der Ableitung zu einem zweidimensionalen Gitter, analog verläuft. Diese Analogie gilt aber nur auf Differenzensternen mit 19 Punkten in drei Dimensionen, wie er in der Abbildung 3.4 dargestellt ist. In den hier verwendeten LBGK-Implementierungen sind die Nachbarschaftsbeziehungen auf einen Differenzenstern mit 15 Punkten eingerichtet, dargestellt in der Abbildung 3.5. In diesem Fall ist die gemischte Ableitung etwas komplizierter, da sie einen Mittelungsschritt enthält und somit für $\delta_y u$ gilt:

$$\begin{aligned} (\delta_y u)_{i+1,j,k} &= \frac{1}{4\Delta y} \left(u_{i+1,j+1,k+1} - u_{i+1,j-1,k+1} + u_{i+1,j+1,k-1} - u_{i+1,j-1,k-1} \right) \\ (\delta_y u)_{i-1,j,k} &= \frac{1}{4\Delta y} \left(u_{i-1,j+1,k+1} - u_{i-1,j-1,k+1} + u_{i-1,j+1,k-1} - u_{i-1,j-1,k-1} \right). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Es bleibt zu bemerken, dass auf zweidimensionalen Gittern lediglich zwei gemischte Ableitungen berechnet werden müssen. Wegen der variablen Koeffizienten muss vorausgesetzt werden, dass

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \neq \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (3.59)$$

gilt. Dementsprechend sind in drei Dimensionen, sechs gemischte Ableitungen zu berechnen.

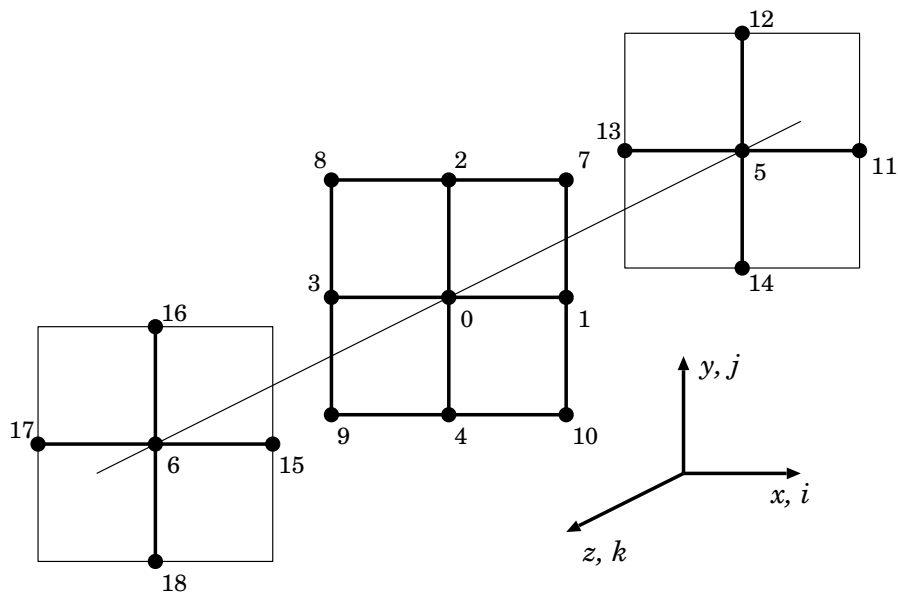


Abbildung 3.4: Differenzstern mit 19 Punkten in drei Dimensionen, Punkt „0“ hat den Index (i, j, k) .

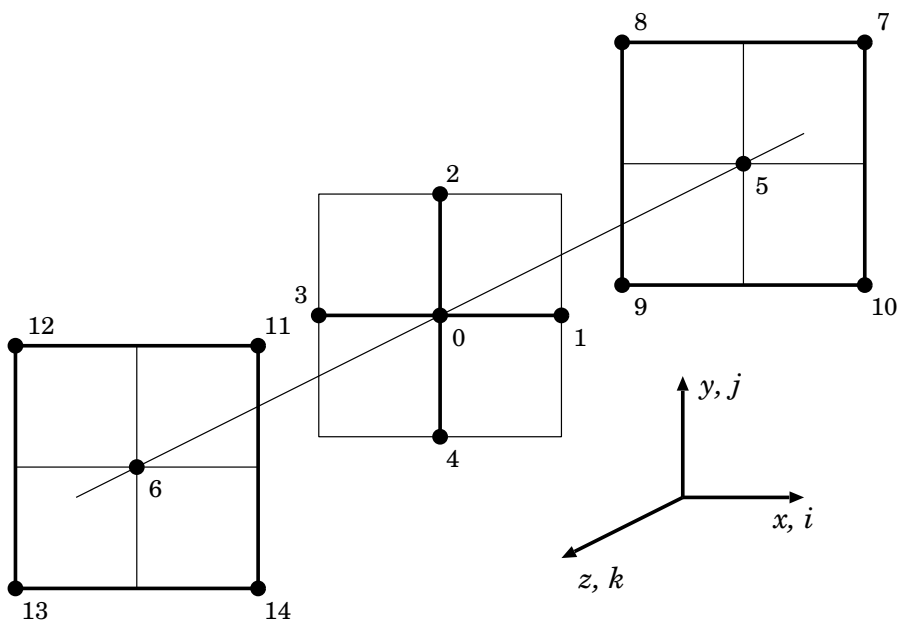


Abbildung 3.5: Differenzstern mit 15 Punkten in drei Dimensionen, Punkt „0“ hat den Index (i, j, k) .

Finite-Differenzen-Diskretisierung auf versetzten Gittern

Auf *versetzten* Gittern sind die Geschwindigkeiten um jeweils eine halbe Gitterschrittweite in ihrer Richtung gegen die skalaren Variablen versetzt. Bei der Bildung von Differenzenformeln zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen ist auf jeden Fall zu beachten, dass die drei kartesischen Komponenten der Impulserhaltungsgleichung (2.72) beziehungsweise des Geschwindigkeitstransportes (2.76), auf unterschiedlichen Gittern gelöst werden. Daraus resultiert vor allem erhöhter Interpolationsaufwand für die Berechnung der Koeffizienten am Gitterpunkt (i, j, k) der jeweiligen Geschwindigkeitskomponente. Die Berechnungsvorschriften der Differenzenapproximationen von ersten Ableitungen bleiben unverändert zu den soeben vorgestellten.

Für die Bildung der zweiten Ableitungen gemäß Gleichung (3.53) ändern sich die variablen Koeffizienten zu

$$\begin{aligned}\bar{\nu}_{i+1/2} &= \nu_{i+1} \\ \bar{\nu}_{i-1/2} &= \nu_i .\end{aligned}\tag{3.60}$$

Natürlich ist zu beachten, dass die Indizes sich auf das, der Variablen zugeordnete Gitter beziehen und alle skalaren Variablen auf dem Gitter des Druckes gespeichert sind.

Komplizierter verhält es sich mit den gemischten Ableitungen. Ist die Divergenz des vollständigen Reibungsspannungstensors zu diskretisieren, müssen z.B. für die Berechnung der Impulserhaltung für die x-Richtung Ableitungen der Form

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial v}{\partial y} \right) ,\tag{3.61}$$

bestimmt werden, wobei die Geschwindigkeitskomponente v einem um $(+\frac{1}{2}\Delta y, -\frac{1}{2}\Delta x)$ versetzten Gitter zugeordnet ist. Die Abbildung 3.6 illustriert die Abspeicherungslogik des versetzten Gitters und die dazugehörige Nummerierungskonvention der Gitterpunkte.

Auf einem zweidimensionalen Gitter ist die Differenzenformel für die gemischte Ableitung (3.56) dann

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \Big|_{i,j}^{(u)} = \frac{1}{\Delta x} \left(\nu_{i+1,j} \frac{v_{i+1,j} - v_{i+1,j-1}}{\Delta y} - \nu_{i,j} \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y} \right) ,\tag{3.62}$$

wobei der Index der Ableitung dem Gitter der Komponente u und die Indizes der Variablen den Gittern der Geschwindigkeit v und des Koeffizienten ν zugeordnet sind. Für die anderen gemischten Ableitungen verfährt man in derselben Weise. Im dreidimensionalen Fall ist das Vorgehen analog zu dem zweidimensionalen umzusetzen. Die in dieser Arbeit verwendeten versetzten Gitter waren immer ijk -abzählbar. Es ist jedoch

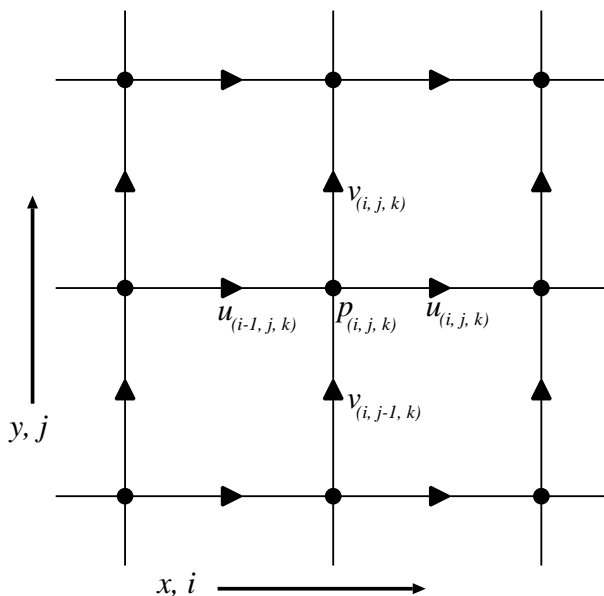


Abbildung 3.6: Skizze eines versetzten Gitters für eine Finite-Differenzen Implementierung.

prinzipiell möglich, versetzte Gitter zusammen mit indirekter Variablen-Adressierung zu verwenden. Die Einschränkungen, die dann existieren rühren allein von der Grundstruktur der indirekten Adressierung. Allerdings verlangt nur die Umsetzung der Navier-Stokes-Gleichungen für kleine Mach-Zahlen nach einer Diskretisierung des „kompressiblen“ Reibungsspannungstensors. Für die numerische Lösung der Gleichungen eines inkompressiblen Fluides mit konstanter Zähigkeit genügen die Nachbarschaftsbeziehungen der Hauptrichtungen des gewählten Koordinatensystems.

3.4 Lösungsverfahren für das elliptische Unterproblem

Die diskrete Poisson-Gleichung des Druckes muss in jedem Zeitschritt gelöst werden. Das elliptische Problem vom Typ

$$\operatorname{div}(a(\mathbf{x}) \operatorname{grad} \varphi(\mathbf{x})) = f(\mathbf{x}) \quad , \quad (3.63)$$

gehört zu den am häufigsten untersuchten partiellen Differentialgleichungen und entsprechend groß ist die Auswahl der verfügbaren Lösungsverfahren. Wegen der einfachen Implementierung und wegen der verwendeten Gitterstruktur bot es sich an,

Punkt-Iterationsverfahren in dem hier implementierten Druckkorrektur-Verfahren zu verwenden. Die Konvergenzeigenschaften von Punkt-Iterationsverfahren, wie das Jacobi-Verfahren oder das Gauß-Seidel-Verfahren sind nicht besonders gut, vor allem wenn die Kondition des zu lösenden Systems schlecht ist [17, 46]. Andererseits verlangen die meisten anderen Lösungsverfahren die Invertierung eines gekoppelten Gleichungssystems der Form

$$\mathbf{A} \boldsymbol{\varphi} = \mathbf{b} . \quad (3.64)$$

Bei inkompressiblen Strömungen ist die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} konstant in der Zeit und ist nur von der Gittergeometrie abhängig. Dementsprechend muss sie nur einmal zu Beginn der Rechnung aufgestellt werden. Die Poisson-Gleichung in der Form (3.63) enthält die variablen Koeffizienten $a(\mathbf{x}, t)$, die zwar während der Lösung der Gleichung konstant bleiben, jedoch eine Neuerstellung der Koeffizientenmatrix nach jedem Zeitschritt der Druckkorrektur notwendig machen. Die Einfachheit der Implementierung eines Punkt-Iterationsverfahrens stand jedoch im Vordergrund, so dass die Matrixform keine Verwendung fand.

Die Randbedingungen, die für die Lösung der Poisson-Gleichung des Druckes berücksichtigt werden sind

Dirichletsche Randbedingungen

$$\varphi \Big|_{\partial V} = g_1(\mathbf{x}) \quad (3.65)$$

und von Neumannsche Randbedingungen

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{\partial V} = g_2(\mathbf{x}) . \quad (3.66)$$

In der Regel ist ein randnaher Punkt des Gitters von einer der beiden Randbedingungen betroffen. Ein Sonderfall stellt sich bei hierarchisch überlagerten Gittern ein. Auf dem in der Hierarchie niedriger stehendem Gitter stellt die Lösung des größeren Gitters die Anfangsbedingung der Iteration, was keine Probleme bereitet, da ein Randwertproblem gelöst wird. Diese Lösung ist aber auf dem Rand des überlagerten Gitters einzuhalten, was auf eine Dirichletsche Randbedingung für den Druck führt. Die numerische Umsetzung der Randbedingungen in einem Finite-Differenzen-Verfahren wird im nachfolgenden Abschnitt behandelt.

Die Grundlage der numerischen Lösung der Poisson-Gleichung bildet die zentrale Diskretisierung auf einem Differenzenstern mit fünf Punkten in zwei, beziehungsweise auf einem Differenzenstern mit sieben Punkten in drei Dimensionen (siehe Skizzen 3.4 und 3.5). Der Übersichtlichkeit halber, wird hier nur der zweidimensionale Fall betrachtet.

Wird der zentrale Differenz-Operator (3.53) auf die Gleichung (3.63) angewendet, entsteht folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x^2} \left(a_{i+1/2,j} (\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}) - a_{i-1/2,j} (\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}) \right) + \\ & \frac{1}{\Delta y^2} \left(a_{i,j+1/2} (\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}) - a_{i,j-1/2} (\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}) \right) = f_{i,j} , \end{aligned} \quad (3.67)$$

beziehungsweise sortiert nach der Variablen $\varphi_{i,j}$:

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j} = & \left(a_{i+1/2,j} \varphi_{i+1,j} + a_{i-1/2,j} \varphi_{i-1,j} + \right. \\ & \left. a_{i,j+1/2} \varphi_{i,j+1} + a_{i,j-1/2} \varphi_{i,j-1} - f_{i,j} \Delta x^2 \Delta y^2 \right) \frac{1}{B} , \end{aligned} \quad (3.68)$$

mit

$$B = \Delta y^2 (a_{i+1/2,j} + a_{i-1/2,j}) + \Delta x^2 (a_{i,j+1/2} + a_{i,j-1/2}) .$$

Der variable Koeffizienten $a(\mathbf{x})$ wird hier jeweils für die diskreten Orte $(i \pm 1/2, j)$ und $(i, j \pm 1/2)$ gemittelt, da die zweite Ableitung als eine zentrale Differenz der diskreten ersten Ableitungen gebildet wird. Die Genauigkeit der Approximation ist von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. Die Diskretisierung verläuft identisch auf versetzten und nicht-versetzten Gittern, da die skalaren Variablen alle auf demselben Gitter abgelegt sind.

Ein weiterer praktischer Grund ein Punkt-Iterationverfahren zu verwenden, ist der unsymmetrische Laplace-Operator in zylindrischen Koordinaten $\mathbf{x} = [r, \Theta, z]^T$. Für ein rotationssymmetrisches Problem ist die Gleichung (3.63) in Komponenten zu schreiben, als

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r a(r, z) \frac{\partial \varphi(r, z)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(a(r, z) \frac{\partial \varphi(r, z)}{\partial z} \right) = f(r, z) . \quad (3.69)$$

Die Diskretisierung dieser Gleichung auf einem äquidistanten Gitter ($j \Delta r, i \Delta z$) verläuft ähnlich zu der vorigen, mit $r_{i,j+1/2} = \frac{1}{2}(r_{i,j} + r_{i,j+1})$.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r_{i,j}} \frac{1}{\Delta r} \left(r_{i,j+1/2} a_{i,j+1/2} \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta r} - r_{i,j-1/2} a_{i,j-1/2} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\Delta r} \right) + \\ & \frac{1}{\Delta z} \left(a_{i+1/2,j} \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta z} - a_{i-1/2,j} \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\Delta z} \right) = f_{i,j} . \end{aligned} \quad (3.70)$$

Um das hier auftretende Problem der Singularität entlang der Symmetrieachse mit der Koordinate $\mathbf{x}_{symm} = (r = 0, z)$ zu vermeiden, wurden alle rotationssymmetrischen Probleme so formuliert, dass die Symmetrieachse gleichzeitig die Berandung des Integrationsgebietes darstellte. Somit gilt für die ersten berechneten Punkte in der r -Richtung mit dem Index $(i, 1)$

$$\frac{1}{r_{i,1}} = \frac{1}{\Delta r} \quad \text{und} \quad r_{i,1-1/2} = \frac{\Delta r}{2} , \quad (3.71)$$

wodurch eine Division durch Null vermieden wird. Eine Sortierung für die Variable $\varphi_{i,j}$ liefert die Grundlage des Iterationsverfahrens zu

$$\varphi_{i,j} = \left(\frac{a_{i,j+1/2} r_{i,j+1/2}}{r_{i,j} \Delta r^2} \varphi_{i,j+1} + \frac{a_{i,j-1/2} r_{i,j-1/2}}{r_{i,j} \Delta r^2} \varphi_{i,j-1} + \frac{a_{i+1/2,j}}{\Delta z^2} \varphi_{i+1,j} + \frac{a_{i-1/2,j}}{\Delta z^2} \varphi_{i-1,j} - f_{i,j} \right) \frac{1}{B}, \quad (3.72)$$

mit

$$B = \frac{a_{i,j+1/2} r_{i,j+1/2} + a_{i,j-1/2} r_{i,j-1/2}}{r_{i,j} \Delta r^2} + \frac{a_{i+1/2,j} + a_{i-1/2,j}}{\Delta z^2}.$$

Die hergeleiteten, diskreten Gleichungen für $\varphi_{i,j}$ haben alle die Form

$$\varphi_{i,j} = A_1 \varphi_{i+1,j} + A_3 \varphi_{i-1,j} + A_2 \varphi_{i,j+1} + A_4 \varphi_{i,j-1} - C f_{i,j}. \quad (3.73)$$

Diese stellt den Ausgangspunkt für die drei meistverwendeten Punkt-Iterationsverfahren, wie das Jacobi-Verfahren

$$\varphi_{i,j}^{t+1} = A_1 \varphi_{i+1,j}^t + A_3 \varphi_{i-1,j}^t + A_2 \varphi_{i,j+1}^t + A_4 \varphi_{i,j-1}^t - C f_{i,j}, \quad (3.74)$$

das Gauß-Seidel-Verfahren

$$\varphi_{i,j}^{t+1} = A_1 \varphi_{i+1,j}^t + A_3 \varphi_{i-1,j}^{t+1} + A_2 \varphi_{i,j+1}^t + A_4 \varphi_{i,j-1}^{t+1} - C f_{i,j} \quad (3.75)$$

und das beschleunigte Gauß-Seidel-Verfahren (SOR)

$$\varphi_{i,j}^{t+1} = (1 - \omega) \varphi_{i,j}^t + \omega [A_1 \varphi_{i+1,j}^t + A_3 \varphi_{i-1,j}^{t+1} + A_2 \varphi_{i,j+1}^t + A_4 \varphi_{i,j-1}^{t+1} - C f_{i,j}]. \quad (3.76)$$

Die Methoden besitzen unterschiedliche Konvergenzeigenschaften, wobei das Jacobi-Verfahren das schlechteste ist. Da aber die beiden Gauß-Seidel-Verfahren rekursiv sind, also auf Werte zugreifen, die in der zurückliegenden Punkt-Operation berechnet wurden, sind sie nicht für alle Rechnerarchitekturen optimal. Vielmehr ist das Jacobi-Verfahren für Vektorrechner wegen seiner Datenunabhängigkeit sehr viel besser geeignet. Die Fließkomma-Einheiten von modernen PC-Prozessoren besitzen in der Regel Vektoreinheiten.

3.5 Formulierung der Anfangs- und Randbedingungen

Das System der Navier-Stokes-Gleichungen für Strömungen kleiner Mach-Zahlen ist als ein Anfangs-Randwert-Problem zu sehen, während die Poisson-Gleichung des Druckes

ein reines Randwert Problem ist. Da aber die meisten gerechneten Probleme, wie auch die Strömung in vielen laminaren Reaktoren, stationär sind, wird die Lösung des Strömungsfeldes hauptsächlich von den Randbedingungen bestimmt. Die Anfangsbedingung spielt vor allem eine Rolle für die Konvergenzgeschwindigkeit zu der stationären Lösung, somit den instationären, nicht notwendiger Weise zeitgenauen Verlauf der Lösung. Die Problematik bei der Wahl von Anfangsbedingungen kann am Beispiel einer einfachen, laminaren Rohrströmung verdeutlicht werden. Eine ungünstige Anfangsbedingung ist zum Beispiel das ruhende Fluid im Integrationsgebiet. Dabei wird am Einströmrand die Geschwindigkeit vorgegeben und am Ausströmrand wird sie aus dem Integrationsgebiet heraus extrapoliert. Die Inkompressibilität verlangt, dass das gesamte Fluid sich bereits im ersten Zeitschritt in Bewegung setzt. Ist das Fluid anfangs in Ruhe, kann es im expliziten Projektionschritt nicht transportiert werden, da die Konvektionsgeschwindigkeit Null ist. Es liegt nun an der Lösung der Poisson-Gleichung des Druckes, das Fluid zu beschleunigen. Das entspricht weitgehend dem, was in der Natur passiert, nur dass in der numerischen Lösung der Zeitschritt nicht infinitesimal klein ist und somit der Druck auch endlich ist. Die Folge ist ein unphysikalischer Anlauf der Strömung.

3.5.1 Boundary-Fitting-Randbedingung

Die Berandung eines Integrationsgebietes durch eine feste Wand wird durch Randbedingungen für die physikalischen Variablen dargestellt.

- Die Dirichletsche Randbedingung gilt zum Beispiel für die isotherme Wand, die Haftbedingung der tangentialen Komponente der Geschwindigkeit oder für die Undurchdringlichkeitsbedingung der normalen Komponente der Geschwindigkeit. Für eine Variable φ gilt dann an der Wand

$$\varphi \Big|_w = g_1(\mathbf{x}) . \quad (3.77)$$

- Die Neumannsche Randbedingung gilt zum Beispiel für die tangentiale Geschwindigkeitskomponente am Symmetrierand oder für einen definierten Wärmestrom zur Wand. Für die Ableitung der Variablen φ in die Normalenrichtung zur Wand gilt dann

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_w = g_2(\mathbf{x}) . \quad (3.78)$$

Die Umsetzung der beiden Typen von Randbedingungen erfolgt nach demselben Prinzip, das heißt dass in einem randnahen Punkt die Differenzenapproximation mit einem Wert der Variablen an der Wand gebildet wird. Liegt jedoch im Fall der Dirichletschen

Randbedingung der Wert vor, muss er für die Neumannsche Randbedingung so bestimmt werden, dass sich die vorgegebene Ableitung an der Wand einstellt.

Die Darstellung von Körperändern auf einem kartesischen Gitter bedarf einer besonderen Behandlung. In den allermeisten technischen Aufgabenstellungen sind die Ränder nicht konform mit dem kartesischen Gitter. Das bedeutet, dass entweder auf die Darstellungsgenauigkeit verzichtet wird oder, dass die Abstände von randnahen Punkten zu dem Körper gesondert gespeichert werden müssen, um sie in einer Randapproximation zu verwenden. Diese Technik ist unter dem Begriff *Boundary-Fitting* bekannt und erst auf diese Weise werden kartesische Gitter für technische Anwendungen flexibel einsetzbar. In der Skizze 3.7 ist ein randnaher Punkt (i, j) dargestellt, in dem die Ableitung nach der x -Koordinate unter Verwendung einer Randbedingung approximiert werden muss. Es wird an dieser Stelle davon ausgegangen, dass der Wandabstand D bekannt ist.

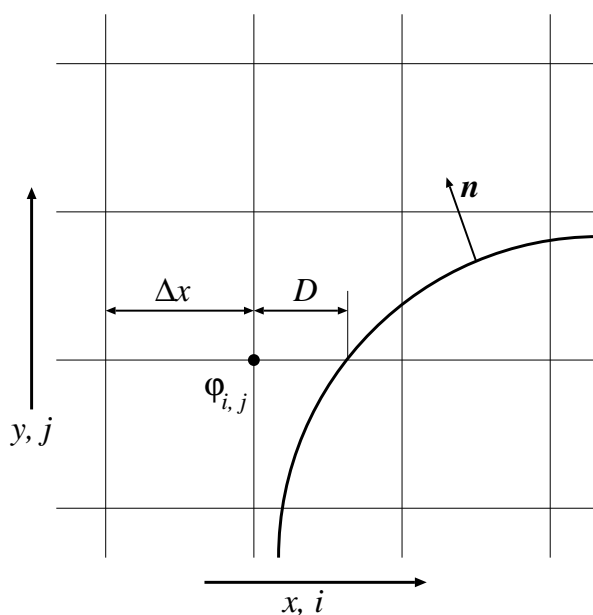


Abbildung 3.7: Nicht körperkonforme Randdarstellung für die Boundary-Fitting-Randbedingung.

Eine naheliegende Möglichkeit, die diskrete Randbedingung zu formulieren, ist die Werte der Variablen an der Wand für eine Differenzenbildung direkt heranzuziehen und Differenzenformeln für variable Gitterschrittweiten zu verwenden. Bei diesem Vorgehen treten jedoch numerische Probleme auf, wenn der Wandabstand D sehr klein wird. Alternativ zu diesem Vorgehen können Differenzen erster Ordnung verwendet werden, in

der Form

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{i,j} = A \frac{\varphi_w - \varphi_{i,j}}{D} + B \frac{\varphi_w - \varphi_{i-1,j}}{\Delta x + D}, \quad (3.79)$$

mit den Schaltern für den Wandabstand

$$A = \frac{|D - 0,5 \Delta x| + (D - 0,5 \Delta x)}{2 |D - 0,5 \Delta x|} \quad (3.80)$$

und

$$B = \frac{|0,5 \Delta x - D| + (0,5 \Delta x - D)}{2 |0,5 \Delta x - D|}. \quad (3.81)$$

Die Schalter A und B sind so gewählt, dass die Schrittweite der Approximation immer von der Größenordnung der Gitterschrittweite ist, um numerische Probleme zu vermeiden.

Eine wesentlich elegantere Formulierung der diskreten Randbedingung verwendet für die Bildung der Differenzen „virtuelle“ Punkte im Abstand Δx von dem betroffenen Punkt, demnach *außerhalb* des Integrationsgebietes. Dazu werden temporär durch Extrapolation Werte der Variablen φ_\star in diesem Punkt bestimmt und zwar so, dass sich an der Wand der gewünschte Wert φ_w einstellt, nach der Formel

$$\varphi_w = W^- \varphi_\star + W^+ \varphi_{i-1} \quad (3.82)$$

entsprechend der Skizze 3.8 mit den Gewichtungsfaktoren

$$W^+ = \frac{\Delta x + D}{2\Delta x} \quad \text{und} \quad W^- = \frac{D}{2\Delta x}. \quad (3.83)$$

Damit lässt sich der Wert der Variablen im virtuellen Punkt \star bestimmen zu

$$\varphi_\star = (\varphi_w - W^- \varphi_{i-1}) / W^+. \quad (3.84)$$

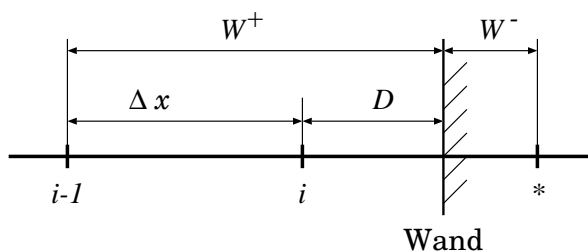


Abbildung 3.8: Punkte und Gewichtungsfaktoren der linearen Interpolation für virtuelle Punkte außerhalb des Integrationsgebietes.

Diese Formulierung hat den Vorteil, dass am Rand dieselben Differenzenschemata auf drei Punkten verwendet werden können wie im Inneren des Integrationsgebietes. Diese Randbedingung ist bei Verwendung von zentralen Differenzen, wie in Gleichung (3.47) formuliert, zweiter Ordnung genau im Ort für $D = \Delta x$. Mit kleineren Wandabständen sinkt die Genauigkeit bis zur ersten Ordnung im Ort. Außerdem gilt hier im Fall der Neumannschen Randbedingung, dass der Wert an der Wand durch Extrapolation aus dem Feldinneren bestimmt werden muss.

3.5.2 Randbedingungen an den Ein- und Ausströmrandern

Für gewöhnlich wird eine technische Strömung durch einen vorgegebenen Massenstrom oder durch einen Volumenstrom bei konstantem Druck $p^{(0)}$ und Temperatur T definiert. Zu diesem Zweck wird am Einströmrand die Geschwindigkeit \mathbf{u}_E und die Temperatur T_E vorgegeben. Der thermodynamische Druck $p^{(0)} = \text{const}(t)$ ist für das gesamte Integrationsgebiet, zumindest innerhalb eines Zeitschritts, konstant. Die Randbedingung am Ausströmrand kann dann, im Sinne einer „Kompatibilitätsbedingung“, ein konstanter dynamischer Druck $p_A^{(1)} = \text{const.}$ sein. Die restlichen Größen werden am Ausströmrand aus dem Inneren des Integrationsgebietes extrapoliert. Der dynamische Druck $p_A^{(1)}$ kann einen beliebigen konstanten Wert haben, da nur sein Gradient in die Impulserhaltungsgleichung (2.72) eingeht. Tabelle 3.3 fasst die Ein- und Ausströmrandbedingungen zusammen.

Variable	Ein	Aus
\mathbf{u}	\mathbf{u}_E	extrapoliert
T	T_E	extrapoliert
$p^{(1)}$	extrapoliert	$p_E^{(1)} = 0$
$\xi^{(\alpha)}$	$\xi_E^{(\alpha)}$	extrapoliert

Tabelle 3.3: Ein- und Ausströmrandbedingung für durchströmte Synthesereaktoren und Rohre.

Bei den hier behandelten Problemen waren die Ein- und Ausströmrandern immer Gitterkonform, so dass eine Boundary-Fitting-Prozedur nicht notwendig war.

3.5.3 Bestimmung der Körperkontur auf einem ebenen, kartesischen Gitter

Feste Objekte und Berandungen können oft als geschlossene Kurven, deren Gleichung bekannt ist, beschrieben werden. Viel häufiger jedoch sind Objekte und Ränder als geschlossene Polygonzüge beschrieben. Zum Beispiel wurde die Geometrie des Synthesereaktors zur Herstellung von Siliziumkarbid so beschrieben, die einzelnen Elemente der Berandung waren also als eine Folge von Punkten bekannt.

Auf dem abzählbaren, kartesischen Gitter wird der Körper als eine Liste randnaher Punkte $D_l < \Delta x$ beschrieben. Diese Liste enthält die Wandabstände D_l zu den l benachbarten Punkten „im Körper“, die für die Berechnung der Randbedingung notwendig sind und sie gibt die Orientierung des Punktes bezüglich des Körperrandes an. Der explizite Lösungsalgorithmus ist so implementiert, dass zunächst die Residuen in denjenigen Punkten des Fluids berechnet werden, die von keiner Randbedingung betroffen sind. Erst danach werden die Residuen in den randnahen Punkten berechnet, indem diese Liste abgearbeitet wird. Die anschließende Zeitintegration erfolgt daraufhin für alle Fluidpunkte gemeinsam, also auch für die randnahen Punkte. Zusätzlich sind die in einem festen Objekt befindlichen Punkte als „nicht beteiligt“ markiert. So sind noch weitere Kodierungen möglich, um zum Beispiel Transportprozesse im Festkörper, gekoppelt mit der Lösung im Fluid, zu simulieren. Die Abbildung 3.9 illustriert eine solche Randbeschreibung.

Mit dem hier implementierten Algorithmus zur Bestimmung der Körperkontur lassen sich beliebige, durch geschlossene Polygonzüge beschriebene, Geometrien auf dem kartesischen Gitter in zwei Dimensionen abbilden. Der hierbei erzeugte Datentyp – die Liste randnaher Punkte – erlaubt allerdings nur die Implementierung von Differenzen auf einem kompakten Stern. Ein Problem, das auftritt, wenn Gitterpunkte mit Punkten des Polygons zusammenfallen, wurde behoben, indem die Polygonpunkte beim unterschreiten einer festgelegten Schranke um einen kleinen Betrag verschoben werden. Dieses Vorgehen ist durchaus üblich und beeinflusst die Genauigkeit der Randabbildung lediglich im sehr geringen Maße, hilft aber numerische Probleme zu vermeiden.

Die Routine zur Bestimmung der Körperkontur teilt sich in drei Arbeitsschritte. Zuerst wird das in Intervalle der Schrittweiten Δx und Δy eingeteilte Integrationsgebiet für jedes Polygonobjekt abgesprochen. Dabei wird zunächst geprüft, ob die Koordinatenlinie entlang der im Ort fortgeschritten wird, z.B. die x -Koordinate bei festgehaltenem y , ein Segment des Polygons schneidet. Ist das der Fall, wird der aktuelle Abstand zum Schnittpunkt der Koordinate mit dem Segment bestimmt und wenn er kleiner als die Gitterteilung Δx ist, ist der nächste Punkt mit Sicherheit in von dem Polygon eingeschlos-

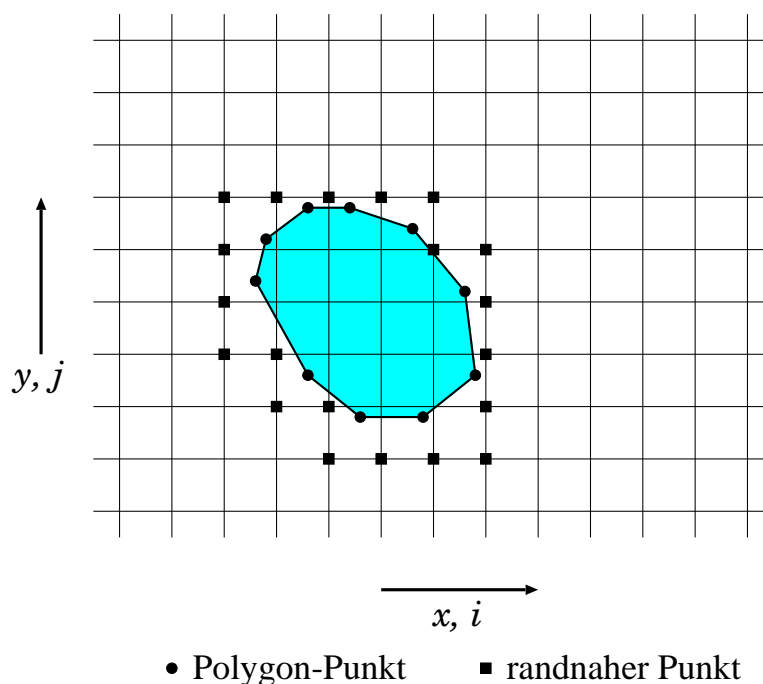


Abbildung 3.9: Repräsentation eines festen Objekts auf dem kartesischen Gitter.

senem Körpergebiet. Die darauf folgenden Punkte werden als „nicht beteiligt“ markiert, bis erneut ein Segment des Polygons geschnitten wird, was bedeutet, dass der Körper verlassen wurde. Auf diese Weise werden die Punkte, die sich im Körper befinden, sicher bestimmt und markiert. Im zweiten Schritt wird die Größe der Liste randnahe Punkte durch Abzählen ermittelt. Anschließend kann die Liste angelegt werden. Sie enthält die Abstände D_l für alle acht Richtungen l zu dem Körper, entsprechend einem kompakten Differenzenstern. Zuletzt wird die Liste randnahe Punkte mit Werten gefüllt, indem die Abstände vom randnahen Punkt zu einem Polygonsegment erneut bestimmt werden. Dies ist nur eine grobe Beschreibung des Algorithmus. Eine Implementierung im Computerprogramm enthält zusätzliche Routinen zur Ausnahmenbehandlung, die die Robustheit des Programms sicherstellen, jedoch den geschilderten Grundablauf nicht verändern.

4 Die Lattice-BGK-Methode

Die Lattice-Boltzmann-Methoden sind eine Klasse von numerischen Verfahren zur Lösung der Boltzmann-Gleichung im kontinuumsnahen Bereich auf uniformen Gittern. Sie gehen auf die Gittergas-Automaten zurück, die bereits in den '80er Jahren entwickelt wurden und die Bewegung von Gasmolekülen in einem diskreten Geschwindigkeitsraum - dem Gitter - nach einer einfachen Automatenregel nachahmen [19, 20]. Die Lattice-BGK-Methode (LBGK) stellt eine Weiterentwicklung der Gittergas-Automaten dar und wurde zum ersten mal von Qian et al. [41] und Chen et al. [6] vorgestellt.

Das BGK-Modell (Bhatnagar-Gross-Krook-Modell) ist eine Näherung der Boltzmann-Gleichung für Zustände nahe des thermodynamischen Gleichgewichts. Das komplexe Kollisionsintegral der Boltzmann-Gleichung wird dabei durch einen linearisierten Quellterm ersetzt, der die Abweichung der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ von der Gleichgewichtsverteilung $f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ beschreibt

$$\frac{D}{Dt} f = \omega(f^{eq} - f) . \quad (4.1)$$

Das thermodynamische Gleichgewicht wird dabei durch die Maxwell-Verteilung beschrieben

$$f^{eq} = \frac{n}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) , \quad (4.2)$$

mit der globalen Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{u} bezüglich raumfester Koordinaten und der Molekülgeschwindigkeit $\boldsymbol{\xi}$.

Die LBGK-Methode ist prinzipiell eine Finite-Differenzen-Approximation des BGK-Modells entlang einer festgehaltenen Geschwindigkeitskoordinate, wie im folgenden Abschnitt kurz erläutert wird. Das ursprüngliche LBGK-Verfahren approximiert die reibungsbehaftete Strömung eines Gases bei kleiner Mach-Zahl, jedoch ohne Wärmetransport. Das Verfahren wurde kontinuierlich weiterentwickelt, sowohl um die Möglichkeit einer hierarchischen Gitterverfeinerung [12, 14, 13] als auch um die Integration von Wärme- und Stoffspeziestransport in das Modell [16, 15], bis es schließlich auch für rotationssymmetrische Probleme verallgemeinert werden konnte [24]. Dementsprechend ist es eine Alternative zu den „konventionellen“ Druckkorrektur basierten Finite-Volumen- und Finite-Differenzen- Methoden für Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen.

Es ist notwendig, an dieser Stelle kurz auf diese Methode einzugehen, da die Integration des Wärme- und Stofftransportes in das LBGK-Modell durch O. Filippova nahezu zeitgleich mit der Entwicklung hier vorgestellter Druckkorrektur-Verfahren statt fand. Durch die zeitliche und räumliche Nähe dieser Entwicklung wurden beide Verfahren zur wechselseitigen Validierung der verwendeten Modelle und für gemeinsame Benchmark-Rechnungen verwendet.

4.1 Diskretisierung der BGK-Gleichung

Die BGK-Gleichung entlang einer Geschwindigkeitskoordinate l ist eine skalare Transportgleichung mit einem Quellterm. Eine explizite Diskretisierung mit einseitiger Rückwärtsdifferenz lässt sich dann für ein abzählbares Gitter schreiben als

$$\frac{(f_{l,i}^{n+1} - f_{l,i}^n)}{\Delta t} + \frac{\Delta x_l (f_{l,i}^n - f_{l,i-1}^n)}{\Delta t \Delta x_l} = \omega (f_{l,i-1}^{eq,n} - f_{l,i-1}^n) \quad , \quad (4.3)$$

mit der diskreten Molekülgeschwindigkeit $|\xi_l| = \Delta x_l / \Delta t$ und L Geschwindigkeiten, die den diskreten Geschwindigkeitsraum bilden. Damit folgt direkt die Geschwindigkeitsverteilung des neuen Zeitschritts als Automatenregel

$$f_l(t + \Delta t, \mathbf{x}_l + \xi_l \Delta t) = f_l(t, \mathbf{x}_l) + \Omega (f_l^{eq}(t, \mathbf{x}_l) - f_l(t, \mathbf{x}_l)) \quad (4.4)$$

mit dem dimensionslosen Relaxationsparameter

$$\Omega = \Delta t \frac{c_s^2}{\nu + (c_s^2 \Delta t) / 2} \quad . \quad (4.5)$$

In die Berechnung des Relaxationsparameters Ω fließt die kinematische Zähigkeit ν des Fluids und die künstliche Schallgeschwindigkeit $c_s^2 = \frac{1}{3} \xi^2$ ein. Die Stabilitätsanalyse der Differenzenapproximation (4.3) zeigt, dass das Verfahren für

$$0 < \Omega < 2 \quad (4.6)$$

stabil ist, woraus eine Einschränkung für die tatsächliche Zeitschrittweite des Verfahrens folgt. Die Formulierung der diskreten BGK-Gleichung als Automatenregel führt zu einer algorithmisch besonders einfachen Umsetzung. Dabei wird die Automatenregel, ausgedrückt durch die Gleichung (4.4), aufgespalten in die Berechnung eines *Kollisionschritts*, der ausschließlich Punkt-Operationen enthält, und eines *Transportschritts*, der nur Kopier-Operationen enthält.

$$\begin{aligned} \tilde{f}_l(t, \mathbf{x}) &= \Omega f_l^{eq} + (1 - \Omega) f_l(t, \mathbf{x}) && \text{Kollision und} \\ f_l(t + \Delta t, \mathbf{x} + \xi_l \Delta t) &= \tilde{f}_l(t, \mathbf{x}) && \text{Transport.} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Der Transportschritt beinhaltet die Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts, der durch die Maxwell-Verteilung beschrieben wird. Ihre diskrete Form für ein Gas der Dichte ρ bei konstanter Temperatur ist

$$f_l^{eq} = \rho t_l \left[\frac{p}{\rho c_s^2} + \frac{u_\alpha \xi_{l,\alpha}}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta}{2 c_s^2} \left(\frac{\xi_{l,\alpha} \xi_{l,\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right] , \quad (4.8)$$

wobei die griechischen Buchstaben für Summationsindizes stehen und das $\delta_{\alpha\beta}$ ein Kronecker-Symbol ist. Die Gewichtungsfaktoren t_l hängen vom gewählten diskreten Geschwindigkeitsraum ab und sind

$$t_l = \begin{cases} 4/9 & \text{for } |\boldsymbol{\xi}_l| = 0 , \\ 1/9 & \text{for } |\boldsymbol{\xi}_l| = 1 , \\ 1/36 & \text{for } |\boldsymbol{\xi}_l| = \sqrt{2} \end{cases} \quad (4.9)$$

im zweidimensionalen Modell mit 9 Geschwindigkeiten (D2Q9) und

$$t_l = \begin{cases} 4/9 & \text{for } |\boldsymbol{\xi}_l| = 0 , \\ 1/9 & \text{for } |\boldsymbol{\xi}_l| = 1 , \\ 1/72 & \text{for } |\boldsymbol{\xi}_l| = \sqrt{3} \end{cases} \quad (4.10)$$

im dreidimensionalen Modell mit 15 Geschwindigkeiten (D3Q15). Die beiden diskreten Geschwindigkeitsräume sind in Abbildung 4.1 skizziert. Die makroskopischen Größen sind als Momente der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion f_l gegeben, so dass für den Druck p und die Geschwindigkeit \mathbf{u} folgt

$$p = c_s^2 \sum_l f_l \quad \text{und} \quad \rho \mathbf{u} = \sum_l f_l \boldsymbol{\xi}_l . \quad (4.11)$$

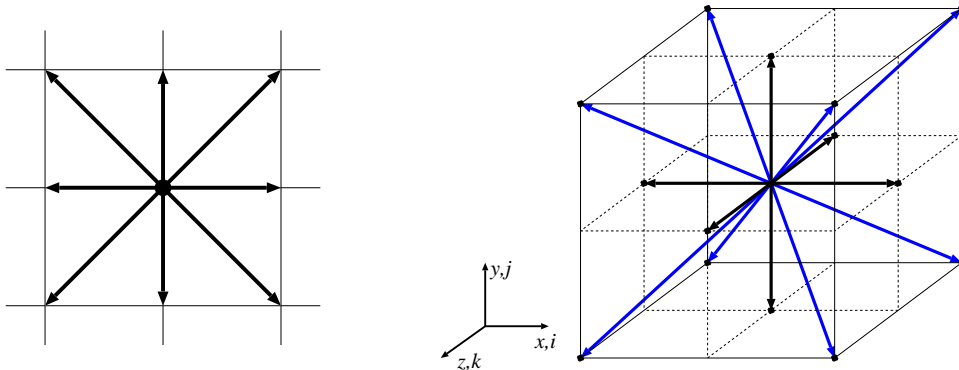


Abbildung 4.1: Diskrete Geschwindigkeitsräume des verwendeten LBGK-Verfahrens, D2Q9 (links) und D3Q15 (rechts).

Eine Analyse der Gleichungen (4.3) bis (4.11) auf der Grundlage der Taylorreihen- und der Chapman-Enskog-Entwicklung und unter Ausnutzung der Symmetrie des diskreten Geschwindigkeitsraumes, führt auf die makroskopischen Bewegungsgleichungen der Momente. Es läßt sich zeigen, dass das hier beschriebene LBGK-Modell die Navier-Stokes-Gleichungen (2.79) und (2.81) für ein reibungsbehaftetes Fluid mit konstanter Dichte, mit einer formalen Genauigkeit zweiter Ordnung im Ort und in der Zeit erfüllt [15].

5 Gitterverfeinerung

Numerische Lösungsverfahren, die auf kartesischen Gittern implementiert sind, sind in ihrem Anwendungsbereich stark eingeschränkt. Das betrifft zum einen die Genauigkeit bei der Abbildung von Körperändern, als auch die schnell steigende Punktezahl bei einer globalen Verfeinerung der Gitterteilung. Für den hier präsentierten Gitter-Verfeinerungs Algorithmus wurde eine hierarchische Struktur von Gitterblöcken gewählt. Dabei steuert die Rangordnung der Blöcke „nur“ den Datentransfer zwischen sich überlagernden Gittern. Somit unterscheidet sich die gewählte Strategie kaum von den herkömmlichen AMR (*Adaptive Mesh Refinement*) Algorithmen [3, 42].

Eines der gesetzten Ziele war eine möglichst weit gehende Unabhängigkeit der Verfeinerungsstrategie von dem benutzten Lösungsverfahren. Es sollte möglich sein, mit vergleichsweise wenig Programmier- und Einarbeitungsaufwand bestehende Lösungsverfahren mit unterschiedlichen Eigenschaften in die Gesamtstruktur des Verfeinerungsalgorithmus einzubinden. Die Abhängigkeiten in der Gitterhierarchie werden durch die Abbildung 5.1 illustriert. Dabei hat die Lösung des in der Gitterhierarchie tiefer liegenden Gitterblocks Vorrang, da diese typischerweise eine Verbesserung der Gesamtlösung erbringen soll.

Bei der Implementierung eines Lösungsverfahrens in dem Gitterverfeinerungs-Algorithmus müssen allerdings einige Besonderheiten beachtet werden:

- Die Skalierbarkeit der verwendeten Größen im Ort und in der Zeit sollte gewährleistet sein, beziehungsweise die Skaliervorschrift sollte bekannt sein. Dies ist für den Transfer der einzelnen Lösungen zwischen den Gitterblöcken notwendig.
- Der Datenaustausch zwischen den Gitterblöcken folgt der Gitterhierarchie. Dadurch soll sichergestellt werden, dass der überlagerte Gitterblock die Genauigkeit der Lösung bestimmt.
- Der Datenaustausch erfolgt immer erst nach komplett abgearbeiteten Zeitschritten. Das bedeutet, dass die „alte“ Lösung des unterliegenden Gitterblocks als Randbedingung der Lösung auf dem überlagerten Gitter dient.

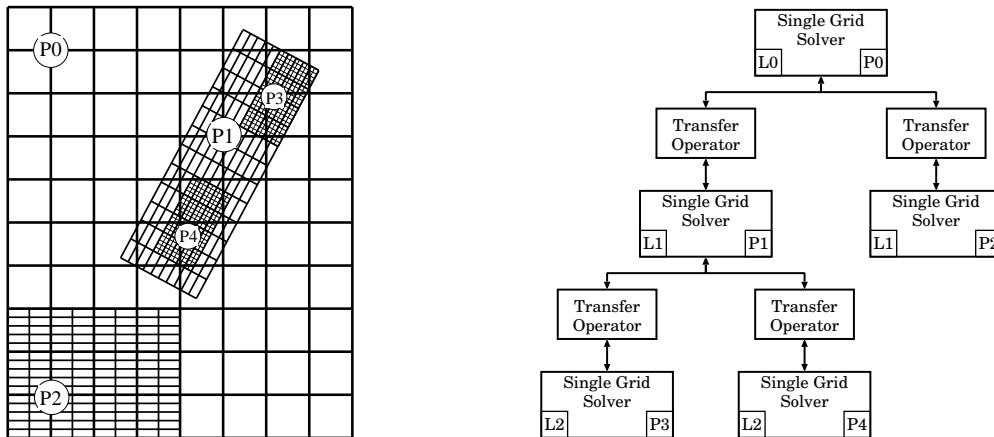


Abbildung 5.1: Beispiel einer Gitter-Hierarchie mit entsprechenden Abhängigkeiten. Das eigentliche numerische Lösungsverfahren, wird immer auf nur ein Gitter angewendet. Der Austausch der Daten erfolgt durch die Transferoperatoren.

Durch die hierarchische Struktur und die angestrebte Unabhängigkeit vom Lösungsverfahren für das Strömungsfeld ist es leicht möglich, auch nicht-konform überlagerte Gitter zu verwenden. Darunter sind Gitterblöcke zu verstehen, bei denen die Gitterknoten nicht notwendiger Weise mit denen des unterliegenden Blocks zusammenfallen. Die Verwendung nicht-konformer Gitter soll helfen, zwei Problemen zu begegnen, die typisch für numerische Verfahren auf kartesischen Gittern sind. Zum Einen können bevorzugte Richtungen von auzulösenden Details berücksichtigt werden und zum Anderen reduziert sich die Komplexität der Gitterverfeinerung auf kartesischen Gittern, wenn die Gitterausrichtung einem Verfeinerungsdetail folgt [49].

5.1 Transferoperatoren für Druckkorrektur-Verfahren

Der Austausch von Daten zwischen den Gitterblöcken geschieht über Interpolationsroutinen. Diese sind in der einfachsten Variante, wenn die Gitter sich konform überlagern, einfache Kopieroperationen für die Punkte mit identischer Ortskoordinate und lineare Interpolationen für alle anderen Punkte des feinen Gitters. Bei dem Transfer der Daten von und zu einem nicht-konformen Gitterblock, werden die physikalischen Größen in das lokale Koordinatensystem transformiert und die Lösung des Strömungsproblems erfolgt in den lokalen Koordinaten des Gitterblocks. Natürlich ist dabei die Lage bezüglich des globalen Koordinatensystems bekannt, so dass die Größen jederzeit für das übergeord-

nete Gitter rekonstruiert werden können.

Die Interpolationsroutinen sind so gewählt, dass ein Punkt die Informationen von den vier ihn umgebenden Punkten des Gitters, das die Information liefert, erhält. Zum Einsatz kommt einfache bilineare Interpolation der Form

$$\varphi_{to} = \sum_{i=1}^4 [A_i \varphi_i]_{from} . \quad (5.1)$$

Der Gewichtungsfaktor A_i der bilinearen Interpolation entspricht dem Punkt i gegenüberliegenden Flächenabschnitt, der jeweils mit der von den vier Punkten eingeschlossenen Gesamtfläche $\sum_{i=1}^4 A_i$ normiert ist. Dank der Abzählbarkeit der Gitter muss nur der *links-unten* gelegene Nachbar des Punktes bekannt sein, um die Speicheradressen der drei weiteren Punkte zu bestimmen. Die Abbildung 5.2 zeigt schematisch wie die Gewichtungsfaktoren für die Interpolation definiert sind. Im Sonderfall des konformen Gitters wird die so angesetzte Interpolation zur gewichteten Mittelung zwischen den Nachbarpunkten entlang einer Koordinatenrichtung. Da die Berechnung eines Zeitschritts immer in den lokalen Koordinaten des Blocks erfolgt, müssen vektorielle Größen wie z.B. die Geschwindigkeit noch in das entsprechende lokale Koordinatensystem gedreht werden. Die Transferoperation eines Vektors \mathbf{a} auf ein in der Hierarchie tiefer liegendes Gitter beinhaltet daher noch die Anwendung der Drehmatrix \mathbf{R} auf den interpolierten Vektor

$$\mathbf{u}_{to} = \mathbf{R} \sum_{i=1}^4 [A_i \mathbf{u}_i]_{from} , \quad (5.2)$$

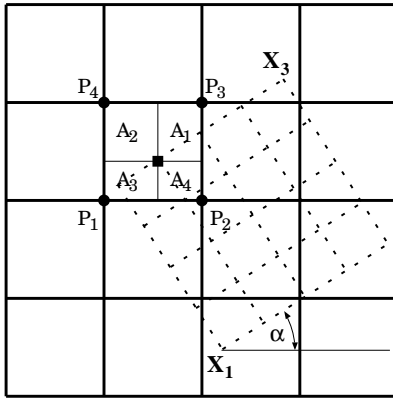
sowie der transponierten Drehmatrix \mathbf{R}^T für den Transfer zurück in der Gitterhierarchie

$$\mathbf{u}_{to} = \mathbf{R}^T \sum_{i=1}^4 [A_i \mathbf{u}_i]_{from} . \quad (5.3)$$

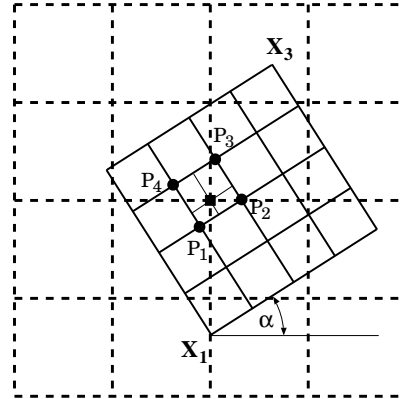
Andere, weiter ausgreifende Interpolationsmethoden lassen sich nach dem gleichen Schema aufbauen, ohne dass die dazugehörige Datenstruktur erweitert werden muss, was allerdings nur mit abzählbaren Gittern möglich ist. Die im Programm eingesetzten Datenstrukturen sind ausschließlich für die Verwendung nicht-versetzter Gitter vorgesehen.

5.2 Skalierung der Zeitschrittweite für ein Druckkorrektur-Verfahren

Um instationäre Effekte der Lösung im Strömungsfeld auch auf sich überlagernden Gitterblöcken korrekt erfassen zu können, muss die Zeitschrittweite so bestimmt werden,



a) Grob zu Fein Interpolation



b) Fein zu Grob Interpolation

Abbildung 5.2: Schematische Darstellung der Datenabhängigkeit auf nicht-konform verfeinerten Gittern. Angedeutet ist jeweils das Gitter, auf das die Werte übertragen werden.

dass das gesamte Verfahren konsistent in der Zeit bleibt. Desweiteren muss auch die Stabilität des numerischen Schemas gewährleistet sein. Neben der trivialen Lösung, die globale Zeitschrittweite an dem Gitterblock mit dem kleinsten Ortsschrittweite zu orientieren, kann die Zeitintegration auf jedem Gitter, der Hierarchie folgend, lokal erfolgen. Als Ausgangspunkt folgender Überlegungen dient die Gleichung (3.29) zur Bestimmung der Zeitschrittweite und das Verhältniss der Ortsschrittweiten $S_x = \Delta x_{grob} / \Delta x_{fein}$ der überlagerten Gitter. Es wird zusätzlich davon ausgegangen, dass das feinere Gitter *immer* über dem groben liegt. Unter Berücksichtigung der kleineren Ortsschrittweite $\Delta x_{fein} = \Delta x_{grob} / S_x$ und weil die physikalischen Transportgrößen gitterunabhängig sind, lässt sich die Zeitschrittweite auf dem feinen Gitter aus der Gleichung (3.29) für zweidimensionale Probleme formal bestimmen zu

$$\Delta t_{fein}^* \leq C \cdot \min \left(\left(S_x \frac{|u|}{\Delta x_{grob}} + S_y \frac{|v|}{\Delta y_{grob}} \right) + 2\nu \left(\frac{S_x^2}{\Delta x_{grob}^2} + \frac{S_y^2}{\Delta y_{grob}^2} \right) \right)^{-1}. \quad (5.4)$$

Mit dem so berechneten Zeitschritt ist noch keine konsistente Zeitintegration möglich. Als nächstes muss die Zeitschrittzahl der expliziten Integration bestimmt werden und zwar als aufgerundetes, ganzzahliges Verhältniss der formalen Zeitschrittweiten der Blöcke

$$N_{fein} = \left\lceil \frac{\Delta t_{grob}}{\Delta t_{fein}^*} \right\rceil. \quad (5.5)$$

Damit ergibt sich die tatsächliche Zeitschrittweite der konsistenten und stabilen Zeitintegration zu

$$\Delta t_{fein} = \frac{\Delta t_{grob}}{N_{fein}}. \quad (5.6)$$

Die Zeitschrittzahl N_{fein} kann auch als Verfeinerungsfaktor in der Zeit gesehen werden, der jedoch wegen des diffusiven Transports nicht identisch mit dem Verfeinerungsfaktor im Ort sein muss. Desweiteren ist es nicht zwingend, dass das Verhältnis S der Ortschaftweiten ganzzahlig ist.

5.3 Grundalgorithmus der hierarchischen Gitterverfeinerung

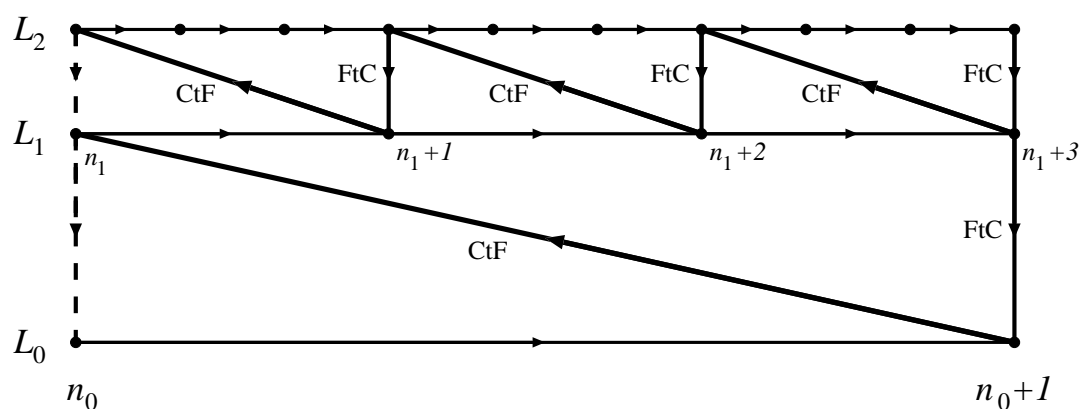


Abbildung 5.3: Ablauf eines globalen Zeitschritts n_0 für drei Gitterebenen L_0 , L_1 und L_2 . Die Transferoperatoren von *grob* zu *fein* heißen „CtF“ und die von *fein* zu *grob* heißen „FtC“.

Um die Konsistenz im Ort und in der Zeit über einen globalen Zeitschritt hinweg zu gewährleisten, muss die Lösung des groben Gitters die Randbedingungen des feinen Gitters stellen. Abgesehen von der Initialisierung des Integrationsgebietes zu Beginn der Rechnung auf einem Gitterblock, werden vom groben Gitter an das feine nur Randwerte übergeben. Dadurch ist das Verfahren so aufgebaut, dass die Lösung auf dem überlagerten Gitter die des groben Gitters „einholen“ muss. Erst dann wird die „bessere“ Lösung des feinen Gitters auf das grobe übertragen. Die Abbildung 5.3 zeigt den Datenfluß in einem Zeitschritt für drei Gitterebenen L_0 , L_1 und L_2 mit der jeweiligen Zeitschrittzahl $N_{fein} = 3 N_{grob}$. Die *grob* zu *fein* Transferoperation für die Randbedingung erfolgt, nachdem der globale Zeitschritt abgearbeitet ist.

Anhand dieses hypothetischen Beispiels lässt sich der rekursive Ablauf des Schemas, wie im Algorithmus C.1 als Pseudo-Code dargestellt, formulieren. Die Variable L_m beschreibt die Ebene des Gitters in der Hierarchie, wobei L_{max} die letzte Hierarchieebene,

unabhängig von der Gitterschrittweite darstellt. Die Variable k ist die fortlaufende Nummer des Gitters innerhalb einer Ebene der baumartigen Hierarchie. Die zur Realisierung eines solchen Algorithmus benötigten Grunddatentypen werden im Anhang C erläutert.

6 Theoretischer Leistungsvergleich vorgestellter Algorithmen

Die beiden hier vorgestellten Verfahren, das Finite-Differenzen-Druckkorrektur-Verfahren und die Lattice-BGK-Methode, zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen auf äquidistanten, kartesischen Gittern bieten keinen direkten Zugang für einen oberflächlichen Vergleich. Auf den ersten Blick scheint jedoch die LBGK-Methode, wegen der algorithmischen Einfachheit das überlegene Verfahren zu sein. In diesem Abschnitt soll untersucht werden, unter welchen Aspekten und ob überhaupt, eine definitive Aussage diesbezüglich möglich ist. Zu untersuchen sind folgende Punkte

1. Welchen Speicherverbrauch haben die vorgestellten Verfahren?
2. Wie groß ist der Rechenaufwand pro Gitterpunkt und eine physikalische Zeiteinheit? Das heißt, wieviele Fließkomma-Operationen sind nötig, um eine zuvor festgelegte physikalische Zeit zu erreichen?

Die Klärung dieser Punkte bedarf einer Untersuchung des Speicherbedarfs und der Zahl arithmetischer Operationen der jeweiligen Implementierung. Desweiteren müssen gewisse Annahmen über das Laufzeitverhalten des Lösungsverfahrens für das elliptische Unterproblem des Druckkorrektur-Verfahrens getroffen werden. Das Ergebnis soll zumindest Anhaltspunkte für Entscheidungen liefern, wann welche Methode am besten einzusetzen ist, beziehungsweise wie die Verfahrensparameter zu wählen sind, um ähnliches Laufzeitverhalten der beiden Verfahren zu erreichen. Die folgende Untersuchung bezieht sich auf die Verfahren für ein inkompressibles Fluid.

6.1 Speicherbedarf der eingesetzten Verfahren

Die Berechnung des Speicherbedarfs der LBGK-Methode stützt sich auf die Verwendung des 9-Punkte Rechenmoleküls in zwei und eines 15-Punkte Rechenmoleküls in drei Dimensionen. Desweiteren wird vorausgesetzt, dass für die Momente, Dichte und

Impuls ebenfalls Speicher reserviert wird. Die Länge einer Fließkomma-Speichereinheit wird nicht genannt, da sie je nach Implementierung unterschiedlich sein kann.

Der LBGK-Algorithmus verlangt das Speichern der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion, sowie eines Zwischenwertes aus dem Kollisionsschritt, wie in Gleichung (4.7) dargestellt. Damit sind 21 Speichereinheiten für die Verteilungsfunktionen und die Momente in zwei und 34 Speichereinheiten in drei Dimensionen zu reservieren. Für das explizite Druckkorrektur-Verfahren müssen hingegen nur die Feldvariablen $(\mathbf{u}, p^{(1)})$ in den zwei Zeitebenen n und $n + 1$, sowie die Residuen der Geschwindigkeiten und die rechte Seite der Poisson-Gleichung gespeichert werden. Daraus ergibt sich ein Bedarf von 9 Speichereinheiten in zwei und 12 Einheiten in drei Dimensionen. Der Speicherbedarf wächst jedoch schlagartig, wenn Differenzen höherer Genauigkeit auf einem kompakten Rechenmolekül berechnet werden. Dann müssen zusätzlich die Differenzen der Variablen für jede Koordinatenrichtung gespeichert werden. Daraus folgt ein Speicherverbrauch von 21 Speichereinheiten in zwei und 36 Einheiten in drei Dimensionen. Damit weist das explizite Druckkorrektur-Verfahren praktisch denselben Speicherverbrauch auf, wie die LBGK-Methode, allerdings mit der theoretischen Möglichkeit bis zur vierten Ordnung genaue Approximationen zu verwenden.

6.2 Theoretischer Rechenzeitbedarf der eingesetzten Verfahren

Der theoretische Rechenzeitbedarf wird durch die Zahl der Fließkomma-Operationen (FLOPS, *Floating Point Operations*) und durch die Zahl von Speicherzugriffen beeinflusst. Die Gewichtung der beiden Faktoren hängt stark von der Rechnerarchitektur ab. Deswegen werden für zwei beispielhafte Algorithmen die Faktoren nicht gewichtet, sondern sie werden getrennt betrachtet. Der Algorithmus der LBGK-Methode ist für einen Zeitschritt Δt_{LBGK} in der Tabelle 6.1 dargestellt. Dabei ist jeweils die Zahl notwendiger Speicherzugriffe und der Fließkomma-Operationen zu jedem Teil des Algorithmus aufgelistet. Bei dieser Betrachtung wurde die Berechnung der Randbedingungen vernachlässigt.

Dieselbe Betrachtung wurde auf das Druckkorrektur-Verfahren angewendet, wobei für die iterative Lösung der Poisson-Gleichung 5 Schritte angesetzt wurden, da dies die durchschnittliche Anzahl von Iterationen in den Validierungsrechnungen war. Die Tabelle 6.2 listet die Speicherzugriffe und Fließkomma-Operationen, ebenfalls ohne Berücksichtigung der Randbedingungen für eine Runge-Kutta Zeitintegration in drei Schritten. Somit ist ein Zeitschritt Δt_{FDM} des Druckkorrektur-Verfahrens mit 183 Speicherzugriffen

	Operation/Gleichung	Zugriffe	FLOPS
1.	Berechnung des Druck-Momentes und der Impulsmomente nach Gl. (4.11)	9+12+12	9+12+12
2.	Berechnung der Gleichgewichtsverteilung nach Gl. (4.8) für alle Punkte und alle Geschwindigkeiten	9 · 7	9 · 16
3.	Kollisionsschritt nach Gl. (4.7)	9 · 3	9 · 3
4.	Transportschritt nach Gl. (4.7)	9 · 2	0
	Summen in 2D	141	204

Tabelle 6.1: Speicherzugriffe und Fließkomma-Operationen in einem Zeitschritt der LBGK-Methode.

und 378 Fließkomma-Operationen für diese Beispiel-Implementierung nicht wesentlich aufwendiger als die LBGK-Methode.

	Operation/Gleichung	Zugriffe	FLOPS
1.	Berechnung der Residuen der Geschwindigkeiten \mathbf{u}	6 + 6	20 + 20
2.	Berechnung des Geschätzten Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u}^*	3 + 3	2 + 2
3.	Berechnung der rechten Seite der Poisson-Gleichung für den Druck	5	7
4.	Lösung der Poisson-Gleichung mit dem beschleunigten Gauß-Seidel-Verfahren	5 · 6	5 · 13
5.	Korrektur der Geschwindigkeit mit dem Gradienten des Druckes	4 + 4	5 + 5
	Summen in 2D	3 · 61	3 · 126

Tabelle 6.2: Speicherzugriffe und Fließkomma-Operationen in einem Zeitschritt des Druckkorrektur-Verfahrens.

Für eine tiefer gehende Untersuchung müssen noch die möglichen physikalischen Zeitschrittweiten verglichen werden. Mittels einer Dimensionsanalyse mit den Referenzgrößen (2.12) und für äquidistante Ortsschrittweiten $\Delta x = \Delta y$ lassen sich die Gleichungen (3.28) und (4.5) für die dimensionslosen Zeitschrittweiten $\Delta \hat{t}_{LBGK}$ und $\Delta \hat{t}_{FDM}$ schreiben als

$$\Delta \hat{t}_{FDM} = C \cdot \left(Re \frac{\hat{u}^2}{2} + \frac{2}{Re} \left(\frac{2}{\Delta \hat{x}^2} \right) \right)^{-1} \quad (6.1)$$

und

$$\Delta \hat{t}_{LBGK} = Re \Delta \hat{x}^2 \frac{1 - \Omega/2}{3\Omega} . \quad (6.2)$$

Demnach hängt das Verhältnis der Zeitschrittweiten und somit auch die Effizienz der Verfahren für ein Problem mit vorgegebener Reynolds-Zahl Re und fester Ortsschrittweite Δx , vor allem von der Wahl des Relaxationsparameters Ω der LBGK-Methode ab. Das dimensionslose Quadrat der Geschwindigkeit $\hat{u}^2 = \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}$ ist in der Größenordnung 1, wenn die Maximalgeschwindigkeit als Referenzgeschwindigkeit gewählt wird und braucht in dem Vergleich nicht berücksichtigt zu werden. Die Courant-Zahl C kann für die hier betrachtete Implementierung mit $C = 2$ angesetzt werden. Die in Abbildung 6.1 dargestellten Diagramme zeigen die Abhängigkeit der Zeitschrittweite Δt von der Ortsschrittweite Δx für unterschiedliche Relaxationsparameter Ω der LBGK-Methode. Die höhere Effizienz der LBGK-Methode ist nur dann gewährleistet, wenn der Zeitschritt größer als der halbe Zeitschritt des Druckkorrektur-Verfahrens ist. Mit dieser Einschränkung wäre der maximale Relaxationsfaktor zur Simulation einer Strömung mit $Re = 100$ und mit einer Ortsschrittweite $\Delta \hat{x} = 0.01$ bei $\Omega = 1, 2$, wenn die LBGK-Methode effizienter als ein Druckkorrektur-Verfahren sein soll. Bei einer Reynolds-Zahl $Re = 1000$ und derselben Gitterteilung wäre die LBGK-Methode für $\Omega \leq 1, 9$ effizienter. Es ist abschließend noch zu erwähnen, dass die Verfahrensparameter, Courant-Zahl C und der Relaxationsparameter Ω , der unterschiedlichen Lösungsmethoden in der Praxis stark von der physikalischen Problemstellung abhängen und daher selten innerhalb ihrer theoretischen Grenzen frei wählbar sind.

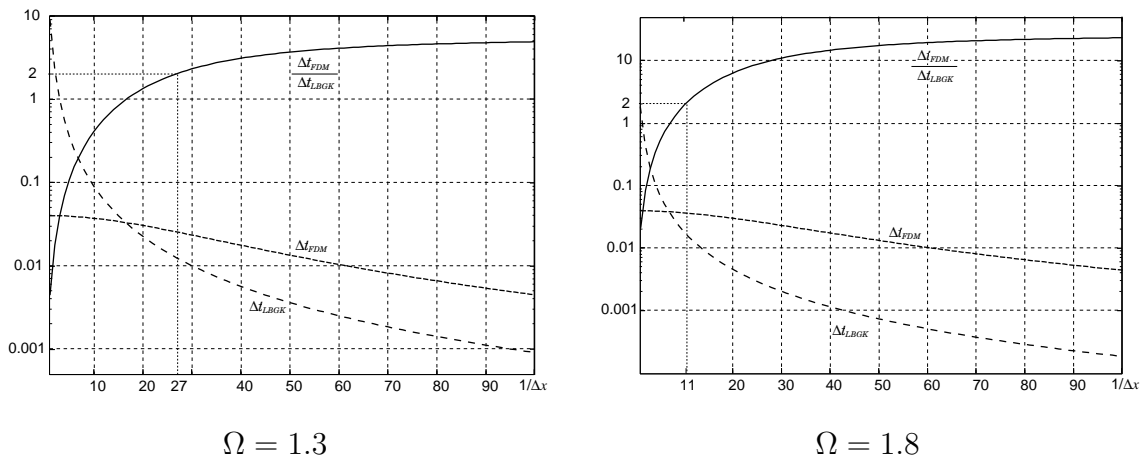


Abbildung 6.1: Entwicklung der dimensionslosen Zeitschrittweiten $\Delta \hat{t}_{FDM}$ und $\Delta \hat{t}_{LBGK}$ als Funktion der Ortsschrittweite Δx bei $Re = 100$.

7 Validierung vorgestellter Verfahren

Numerische Lösungen von partiellen Differentialgleichungen sind aufgrund ihrer diskreten Natur mit einem verfahrensbedingten Fehler behaftet. Die analytischen Methoden zur Untersuchung der Konsistenz und Stabilität von numerischen Verfahren werden in der Regel nur auf Modellgleichungen angewendet. Zudem wird der Einfluß von Randbedingungen auf das Verhalten der numerischen Lösung in der analytischen Betrachtung nur isoliert wiedergegeben. Desweiteren kann nicht ausgeschlossen werden, dass die programmiertechnische Implementierung Fehler enthält und die getroffenen Annahmen bei der Modellierung die Physik des Problems richtig wiedergeben. Aus diesen Gründen ist eine ausführliche Validierung der Verfahren immer notwendig. Erst danach kann der Anwendungsbereich eines Verfahrens mit gewisser Sicherheit benannt werden. Für die Validierung numerischer Verfahren stehen unterschiedliche Strategien zur Verfügung.

Vergleich mit einer analytischen Lösung wäre eigentlich die optimale Validierung für ein numerisches Verfahren. Diesem Weg steht entgegen, dass die Zahl verfügbarer Lösungen klein ist, und dass diese unter teilweise sehr vereinfachenden Annahmen entstanden sind. Die folgende Liste nennt Beispiele solcher Lösungen, sowie die ihnen zugrunde liegenden Annahmen und Einschränkungen.

1. Die *ebene* und *stationäre* Kanalströmung eines *inkompressiblen* Fluides. Sie dient vor allem als ein Testfall für die Wahl von Ein- und Ausströmrandbedingungen. Ebenfalls kann der Wärmetransport zwischen den Kanalwänden analytisch berechnet werden.
2. Die *stationäre* Rohrströmung eines *inkompressiblen* Fluides. Auch hier existieren für den Wärmeübergang analytische Lösungen, sowohl für adiabate als auch für isotherme Rohrwände. Diese Lösung kann als rotationssymmetrisches Analogon zu der ebenen Kanalströmung gelten.

3. Die *instationäre* Couette-Strömung. Die *ebene* und *inkompressible* Strömung zwischen zwei parallelen Platten. Hier existiert eine analytische Lösung für den Fall einer plötzlich in Bewegung gesetzter Wand.

Die Auswahl der verfügbaren Lösungen ist also stark eingeschränkt. Hinzu kommt, dass die getroffenen Einschränkungen, vor allem bezüglich der Geometrie des Problems, selten auf reelle, technische Strömungsprobleme übertragbar sind. Diese Art der Validierung ist vielleicht in der Entwicklungsphase sehr hilfreich, liefert jedoch nur wenige Anhaltspunkte, wie gut ein Verfahren bei komplexen Problemen funktioniert.

Vergleich mit einem bereits validierten numerischen Verfahren ist die meistverwendete Methode zur Validierung numerischer Simulationen. Es existiert eine Vielzahl gut dokumentierter numerischer Lösungen einfacher, beziehungsweise „konstruierter“, Strömungsprobleme und zugehöriger Publikationen. Zwei solcher Testfälle wurden in dieser Arbeit verwendet, um das hier verwendete Druckkorrektur-Verfahren zu validieren: Die *inkompressible Nischenströmung* [4, 22] und der *asymmetrisch im Kanal platzierte Zylinder* [50, 45]. Da beide Testfälle nur für inkompressible Fluide konstruiert wurden, wurde zusammen mit Dr. Olga Filippova noch der Testfall des *porösen Brenners* zusammengestellt [16]. Eine weitere Validierung fand bei der Berechnung des Siliziumkarbid Reaktors statt, indem ein Teil der Simulationsergebnisse mit dem kommerziellen CFD Programm FLUENT „nachgerechnet“ wurde.

7.1 Inkompressible Nischenströmung

Ein sehr beliebter Testfall für die numerische Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen eines inkompressiblen Fluides, ist die zweidimensionale „getriebene Nischenströmung“. Das Integrationsgebiet ist hierbei eine quadratische Nische, bei der die obere Wand die Geschwindigkeit u_w hat. Dadurch stellt sich in der Nische ein stationäres Wirbelsystem ein, dessen Komplexität von der Reynoldszahl abhängt [22]. Das Besondere an diesem Testfall ist, dass das Gebiet \mathcal{V} vollständig durch Wände begrenzt ist und somit immer die Bedingung

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial p^{(1)}}{\partial n} = 0 \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{V} \quad (7.1)$$

gilt, wie in der Gleichung (3.9) gefordert. Die Skizze links in der Abbildung 7.1 zeigt schematisch die Geometrie des Problems und die Lage der zu erwartenden Wirbel. Das Problem wurde sehr eingehend von U. Ghia et al. [22] für die Reynoldszahl $Re = 1000$ untersucht und von O. Botella et al. [4] für $Re = 100$, so dass diese Ergebnisse als

Referenz für die Validierung der hier präsentierten Verfahren dienen. Die dimensionsbehafteten Größen wurden so gewählt, dass die normierten charakteristischen Längen und Geschwindigkeiten jeweils $\hat{L} = 1$ und $\hat{u} = 1$ sind. Die prinzipielle Geometrie des Problems ist in der Abbildung 7.1 skizziert.

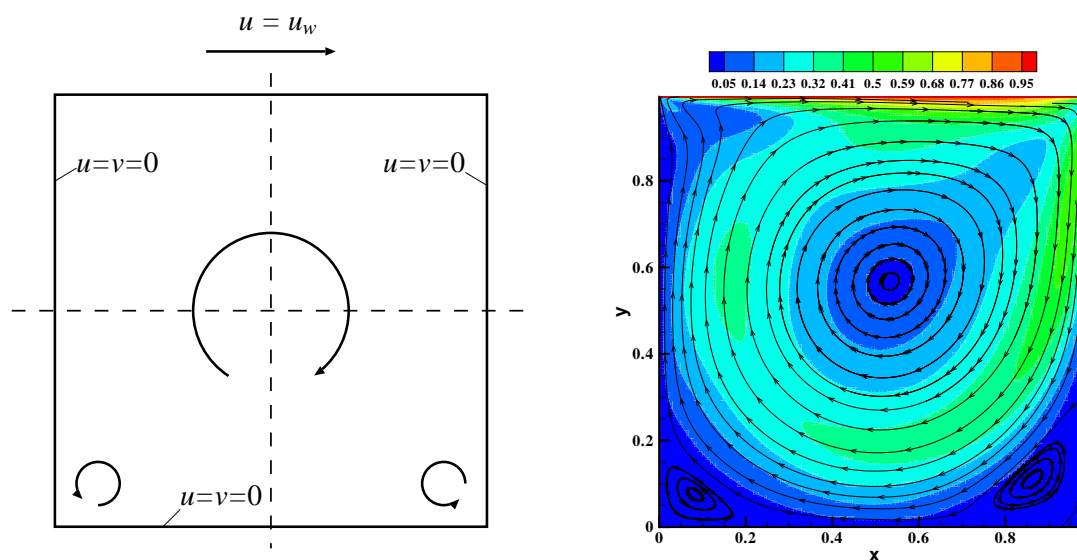


Abbildung 7.1: Links: Angetriebene Nischenströmung, die gestrichelten Linien deuten die Schnittebenen an. Rechts: Betrag der Geschwindigkeit und Verlauf der Stromlinien einer Nischenströmung bei $Re = 1000$.

Untersucht wurde vor allem die Anhängigkeit der Lösung von der Gitterschrittweite. Eine vollkommene Übereinstimmung der Ergebnisse war jedoch nicht zu erwarten, da in [22] ein durch Streckung stark verfeinertes Gitter verwendet wurde. In [4] wurde ein Spektral-Verfahren zusammen mit einem extrem feinen Gitter verwendet. Für das Druckkorrektur-Verfahren wurde ein äquidistantes Gitter verwendet mit dem Ziel, die Genauigkeit des Verfahrens durch sukzessives Verkleinern der Ortsschrittweite abschätzen zu können. Für sehr kleine Ortsschrittweiten ($\Delta x < L/512$) war jedoch kein Unterschied zu den Referenzlösungen zu sehen. Die Abbildung 7.1 zeigt (rechts) exemplarisch den Betrag der Geschwindigkeit und den Verlauf der Stromlinien bei einer Reynolds-Zahl $Re = 1000$. Für quantitative Aussagen ist jedoch eine Schnitt-Darstellung vorzuziehen, wie sie nachfolgend verwendet wird.

Verglichen wurden der Verlauf der u -Komponente der Geschwindigkeit entlang des vertikalen Schnitts durch die Mitte des Integrationsgebietes und der v -Komponente der Geschwindigkeit entlang eines horizontalen Schnittes. Die Abbildungen 7.2 und 7.3 zeigen die Geschwindigkeitsverläufe bei einer Reynolds-Zahl von $Re = 100$ für die Ortsschritt-

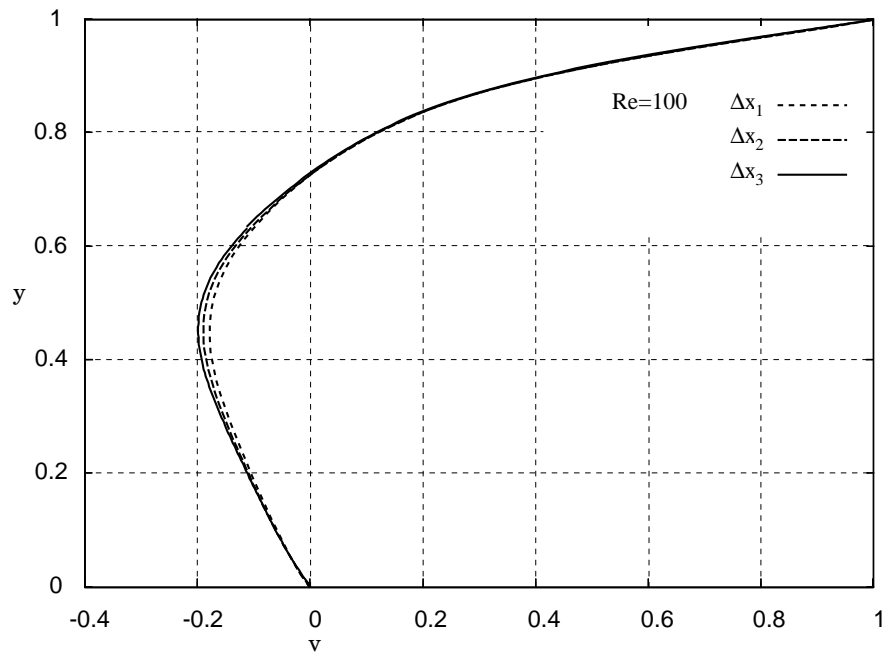


Abbildung 7.2: Geschwindigkeit im vertikalen Schnitt durch das Integrationsgebiet, $Re = 100$.

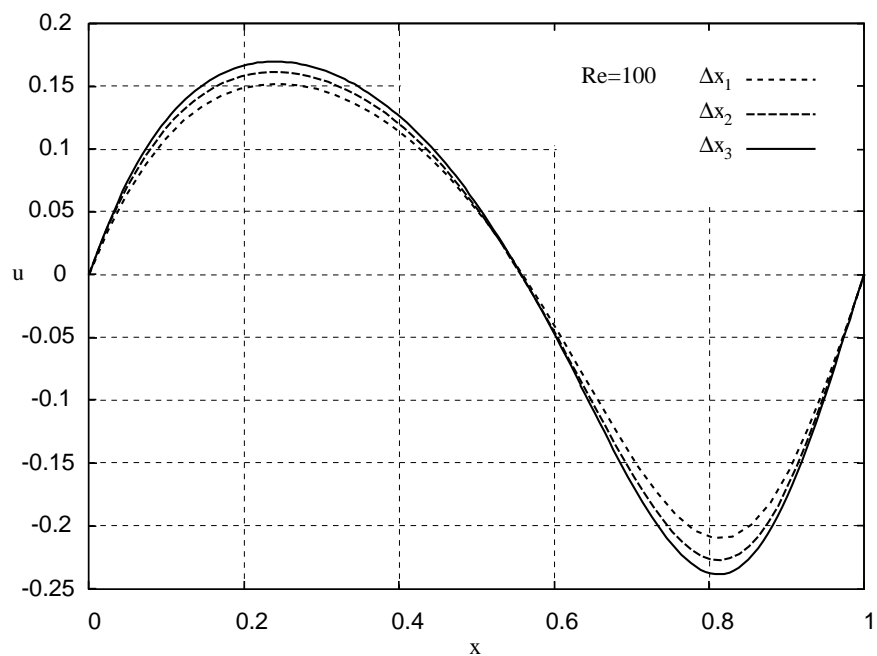


Abbildung 7.3: Geschwindigkeit im horizontalen Schnitt durch das Integrationsgebiet, $Re = 100$.

weiten $\Delta x_1 = L/40$, $\Delta x_2 = L/80$ und $\Delta x_3 = L/160$. Die Genauigkeit des Verfahrens wurde als Exponent ϵ des Abbruchfehlers $\mathcal{O}(\Delta x^\epsilon)$ bestimmt, nach der Formel

$$\epsilon = \frac{\log \frac{u_{2h} - u_{4h}}{u_h - u_{2h}}}{\log 2} \quad (7.2)$$

von Richardson [11]. Demnach war die Ordnung der Genauigkeit (beziehungsweise der Exponent des Abbruchfehlers) im Ort $\epsilon = 1.9$ für die drei Berechnungen mit sukzessiv verfeinertem Gitter. Das entspricht den Erwartungen an eine formal zweiter Ordnung genaue Ortsdiskretisierung.

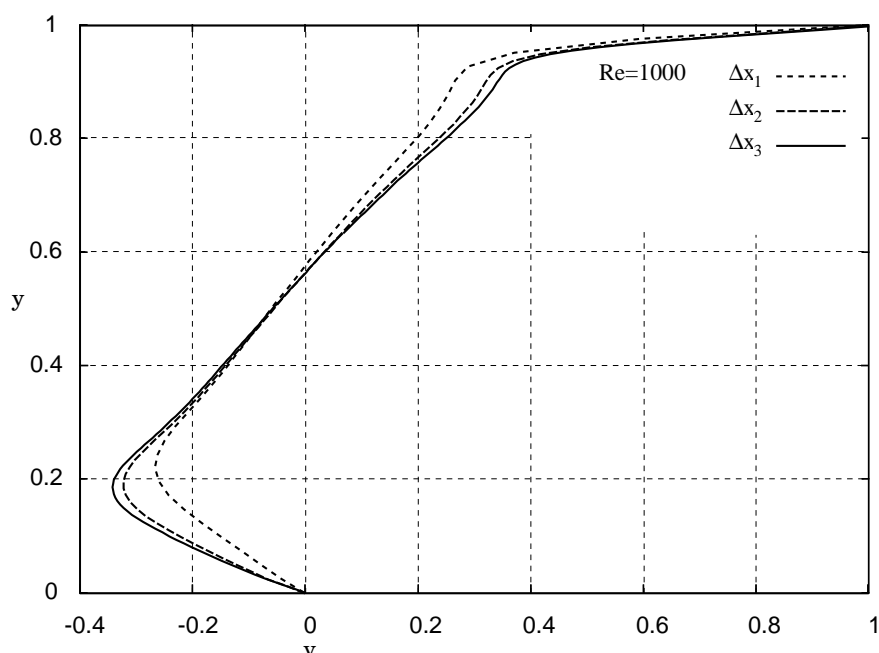


Abbildung 7.4: Geschwindigkeit im vertikalen Schnitt durch das Integrationsgebiet, $Re = 1000$.

Die Ergebnisse für die Reynolds-Zahl $Re = 1000$ sind in den Abbildungen 7.4 und 7.5 für die Ortsschrittweiten $\Delta x_1 = L/40$, $\Delta x_2 = L/80$ und $\Delta x_3 = L/160$ dargestellt. Auch hier ergibt sich dieselbe Ordnung des Fehlers, wie für $Re = 100$. Der direkte Vergleich mit den Referenzergebnissen ist jeweils für die Ortsschrittweite $\Delta x = L/512$ in der Abbildung 7.6 für $Re = 100$ und in der Abbildung 7.7 für $Re = 1000$. Hierbei wurde nur der vertikale Schnitt abgebildet und zeigt eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse.

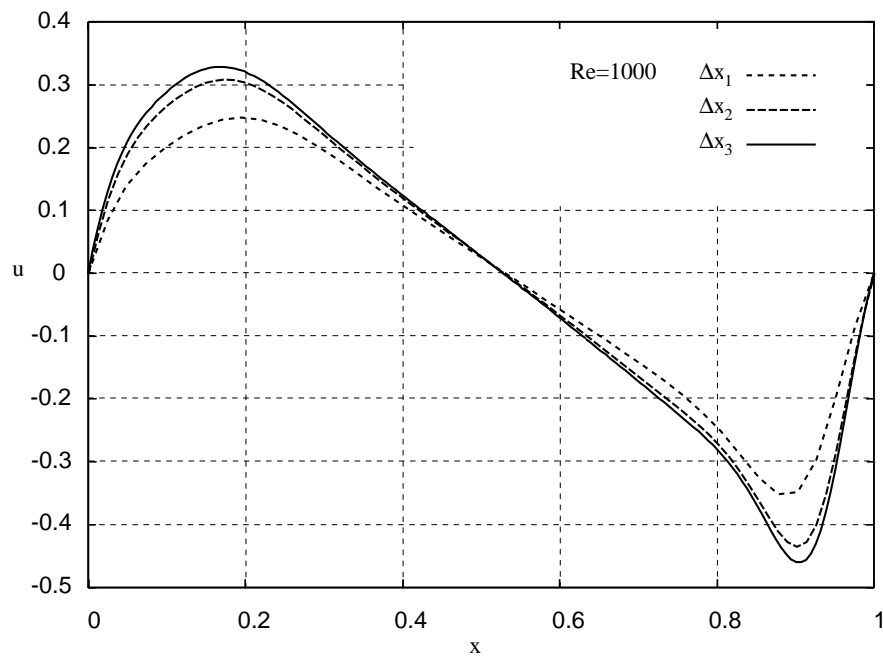


Abbildung 7.5: Geschwindigkeit im horizontalen Schnitt durch das Integrationsgebiet, $Re = 1000$.

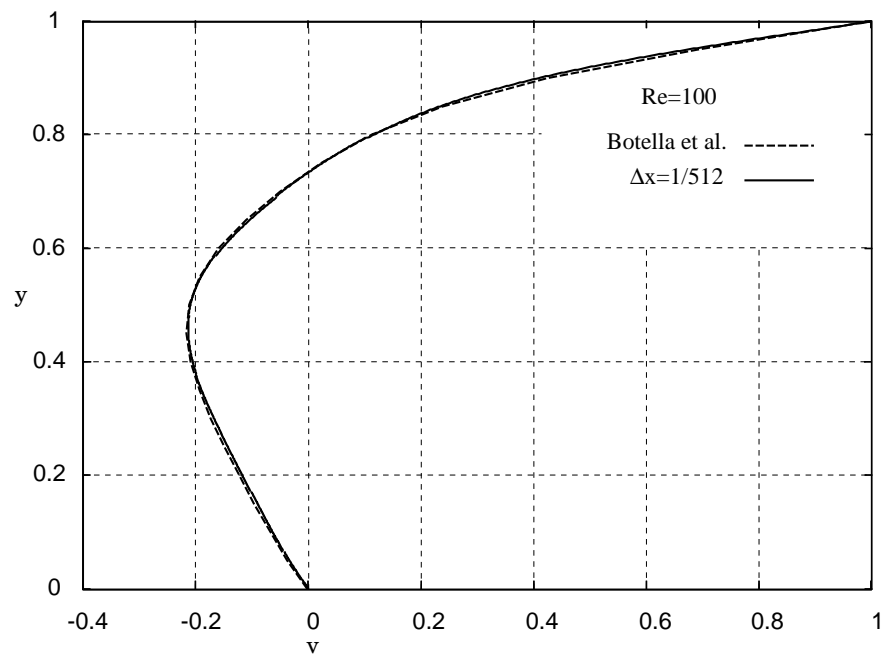


Abbildung 7.6: Geschwindigkeit im vertikalen Schnitt durch das Integrationsgebiet für $Re = 100$. Dargestellt sind die von O. Botella berechneten Werte und die Ergebnisse des Druckkorrektur-Verfahrens.

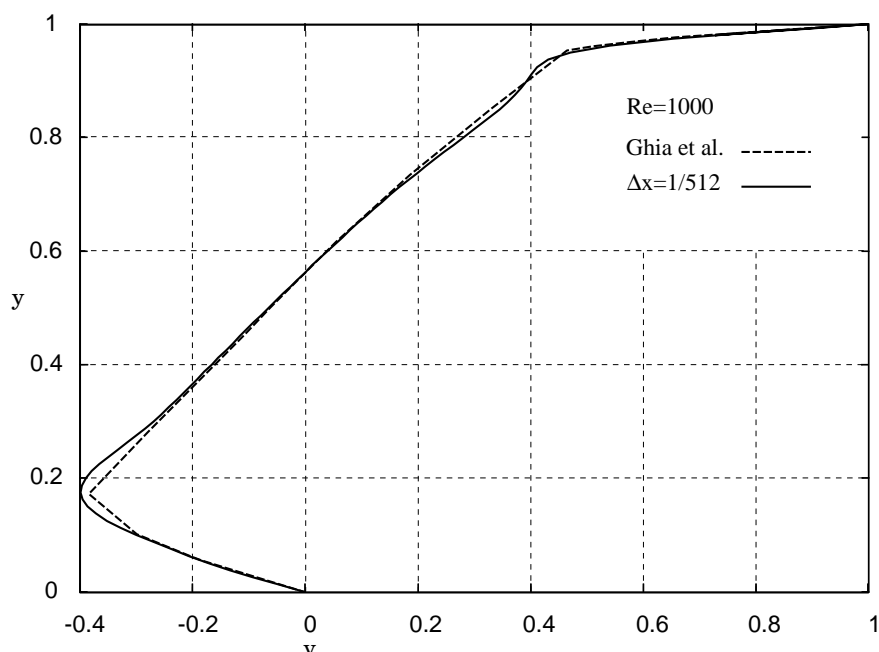


Abbildung 7.7: Geschwindigkeit im vertikalen Schnitt durch das Integrationsgebiet für $Re = 1000$. Dargestellt sind die von U. Ghia et al. berechneten Werte und die Ergebnisse des Druckkorrektur-Verfahrens.

7.2 Zylinderumströmung im Kanal

Als zweiter Testfall zur Validierung des hier implementierten Druckkorrektur-Verfahrens diente die Strömung um einen asymmetrisch im ebenen Kanal platzierten Zylinder. Dieser Testfall geht auf S. Turek und M. Schäfer zurück [50, 45] und wurde als gemeinsamer Benchmarktest im DFG Schwerpunktprogramm „Flow Simulation on High Performance Computers“ entwickelt. Die Zylinderumströmung wurde als geeignet gesehen, die Boundary-Fitting-Randbedingungen zu überprüfen, sowie den Einfluß von konform und nicht-konform überlagerter Gitter auf die Genauigkeit der Lösung im Ort und in der Zeit. Aus der Vielfalt der in [45] beschriebenen Testfall-Konfigurationen werden hier nur der stationäre „2D-1“ und der instationäre „2D-2“ Fall präsentiert, da sie für die gestellten Anforderungen bereits ausreichend sind. Die Abbildung 7.8 zeigt schematisch die Geometrie und die Randbedingungen des Testfalls.

In dem ebenen Testfall ist die Einströmgeschwindigkeit am linken Rand durch ein parabolisches Profil nach der Formel

$$u(0, y) = 4\bar{u} \frac{y(H-y)}{H^2} \quad \text{und} \quad v = 0 \quad (7.3)$$

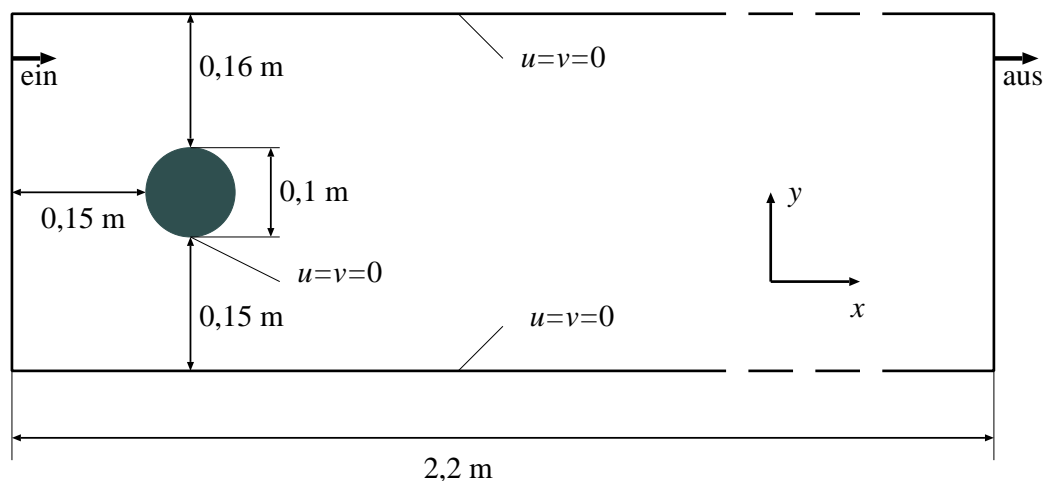


Abbildung 7.8: Geometrie und Randbedingungen für den asymmetrisch im ebenen Kanal platzierten Zylinder.

gegeben und die Kanalhöhe beträgt $H = 0,41$ m. Im stationären Testfall 2D-1 ist die mittlere Einströmgeschwindigkeit $\bar{u} = 0,3$ m/s bei einer Reynolds-Zahl $Re = 20$. Gemessen wurde dabei die Druckdifferenz Δp_z am Zylinder zwischen den Punkten $(x_a; y_a) = (0,15; 0,2)$ m und $(x_e; y_e) = (0,25; 0,2)$ m, sowie die Länge L_r der Rezirkulationszone hinter dem Zylinder. Die Abbildung 7.9 zeigt die Verteilung der Geschwindigkeit und den Verlauf der Stromlinien im Ausschnitt um den Zylinder. Die Berechnungen wurden für unterschiedlich überlagerte Gitterblöcke durchgeführt, wobei die Ergebnisse praktisch identisch sind. In der Tabelle 7.1 sind die Druckdifferenz und die Länge

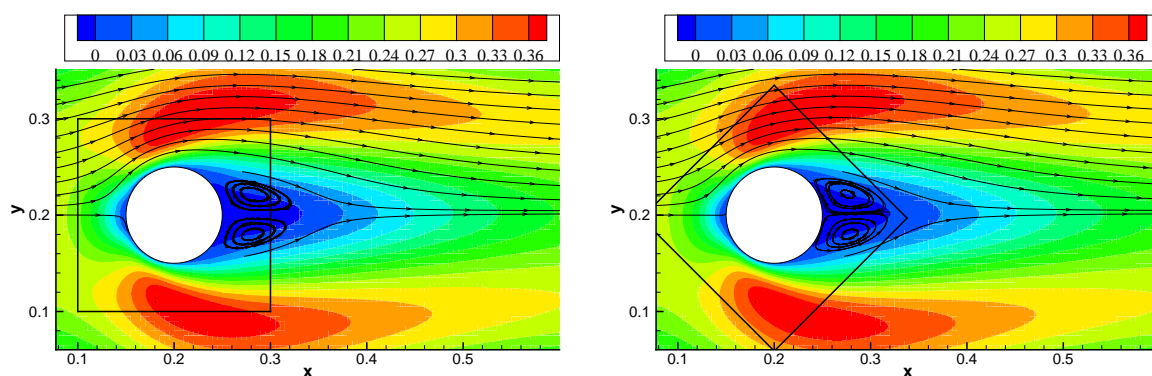


Abbildung 7.9: DFG Testfall 2D-1 für unterschiedlich orientierte, überlagerte Gitter. Im linken Bild sind beide Gitter punkt-konform zueinander. Dargestellt ist die Verteilung der u -Komponente der Geschwindigkeit und die Stromlinien.

Winkel	Δp_z	L_r
0°	0,1112	0,0830
20°	0,1106	0,0828
45°	0,1108	0,0825

Tabelle 7.1: Druckdifferenz am Zylinder und die Länge des Rezirkulationsgebietes bei $Re = 20$ für unterschiedlich platzierte Verfeinerungsgitter.

der Rezirkulation für unterschiedlich gedrehte, verfeinerte Gitter aufgelistet. Das Gitter mit der Drehung 0° war punkt-konform mit dem unterliegenden, gröberen Gitter. Der Faktor der Verfeinerung war 4 ($\Delta x_{grob} = 4 \Delta x_{fein}$). Die Werte können als nahezu gleich gesehen werden und liegen im Bereich der Referenzwerte [50].

Der zweite, instationäre Testfall diente der Prüfung des Verfahrens auf seine Zeitgenauigkeit, vor allem unter dem Aspekt der nicht-konform überlagerter Verfeinerungsgitter. Die mittlere Einströmgeschwindigkeit war hier $\hat{u} = 1,5$ m/s, so dass bei gleichen Bedingungen die Reynolds-Zahl $Re = 100$ betrug. Bei dieser Reynolds-Zahl bildet sich hinter dem Zylinder eine Karmansche-Wirbelstraße, deren Strouhal-Zahl für alle drei Gitterlagen $Sr = 0,283$ betrug und damit um 0,006 unter dem Angegebenen Referenzwert von $Sr = 0,289$ lag. Dieser Referenzwert wurde als Mittelwert aller im Rahmen des Schwerpunktprogramms der DFG erzielten Ergebnisse berechnet. Als Indikator für eventuellen Einfluss des überlagerten Gitters auf die Zeitgenauigkeit des Verfahrens, wurde die Lage der abgelösten Wirbel zu einem willkürlich gewählten, späten Zeitpunkt verwendet. Die Abbildung 7.10 zeigt die Druckverteilung und die Stromlinien für alle drei Berechnungen nach $t = 26$ s. Da nach dieser langen Zeit (und auch für alle Zeiten dazwischen) die Phase der Wirbelstraße gleich geblieben ist, wurde geschlossen, dass der implementierte Gitterverfeinerungs-Algorithmus die Zeitgenauigkeit des Verfahrens nicht negativ beeinflusst. In der Abbildung 7.10 wurde der Druckverlauf durch transparente Isolinien dargestellt, da nicht sein absoluter Betrag im Interesse lag, sondern die Überprüfung der Implementierung des Verfeinerungs-Algorithmus mit seinen Transferoperatoren auf Korrektheit.

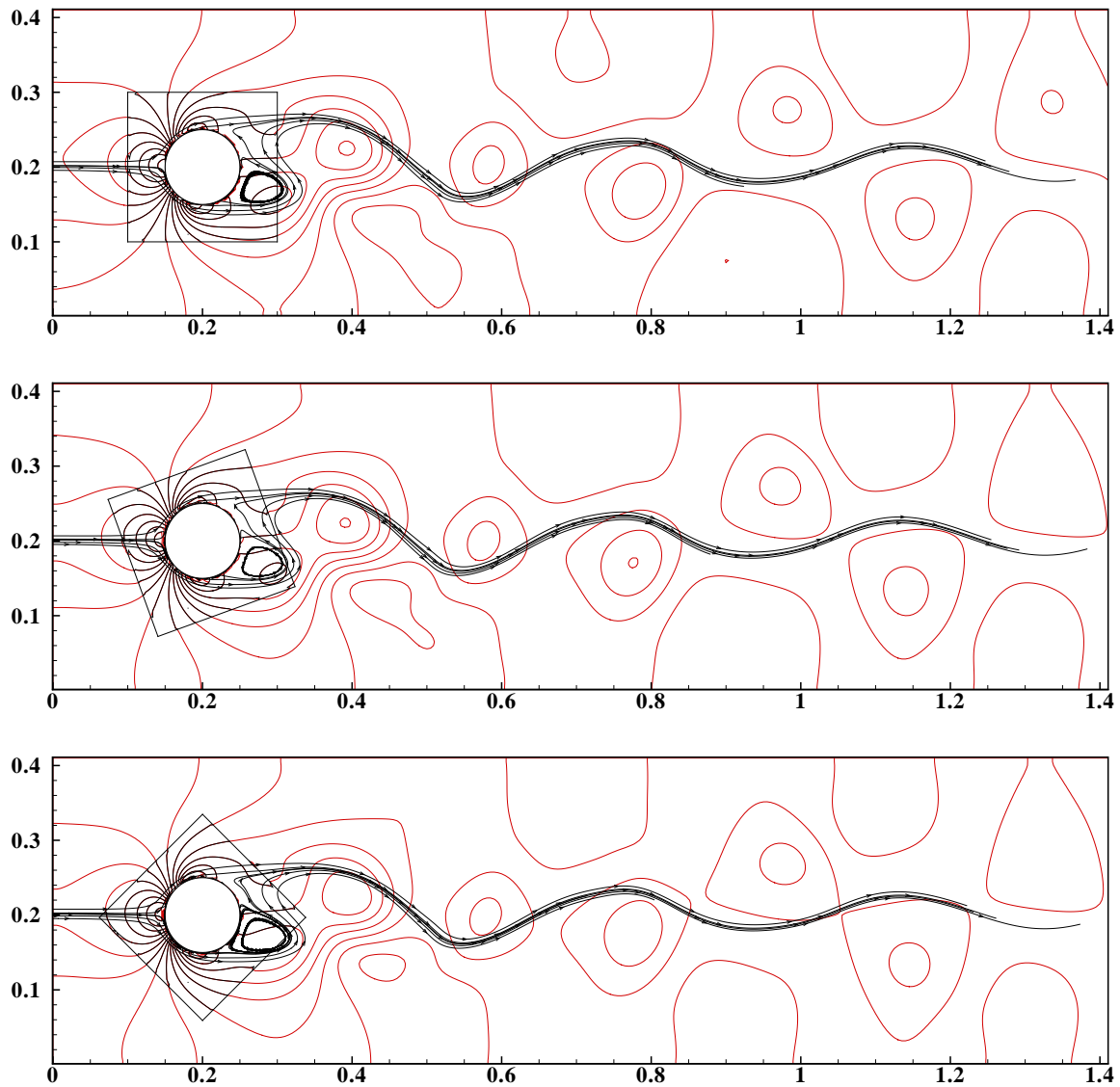


Abbildung 7.10: Stromlinien und Druck der Zylinderumströmung bei $Re = 100$. Die verfeinerten Gitter sind konform (oben) und um 20° (mitte) und 45° (unten) verdreht. Dargestellt sind die Stromlinien und Isolinien des Druckes auf beiden Gittern überlagert nach $t = 26$ s.

7.3 Strömung um eine Reihe poröser Brenner

Die beiden bisher behandelten Validierungsfälle beschäftigten sich hauptsächlich mit inkompressibler Strömung. Somit war nur eine Validierung der programmtechnischen Implementierung und der entwickelten Algorithmen zur nicht-konformen Gitterverfeinerung möglich. Etwa zeitgleich zu der Entwicklung der hier vorgestellten Druckkorrektur-Verfahren wurde von Frau Dr. Filippova am Institut für Verbrennung und Gasdynamik ein Verfahren zur Simulation reaktiver Mehrkomponenten-Strömungen auf Basis des LBGK-Verfahrens entwickelt. Gemeinsam mit ihr, wurde ein Testfall zur wechselseitigen Validierung solcher Lösungsverfahren entwickelt [16]. Die Eingangsparameter des Testfalls waren dimensionslos, um die Kompatibilität der Lösungsverfahren zu gewährleisten. Die Skizze 7.11 zeigt die dimensionslose Geometrie des Problems.

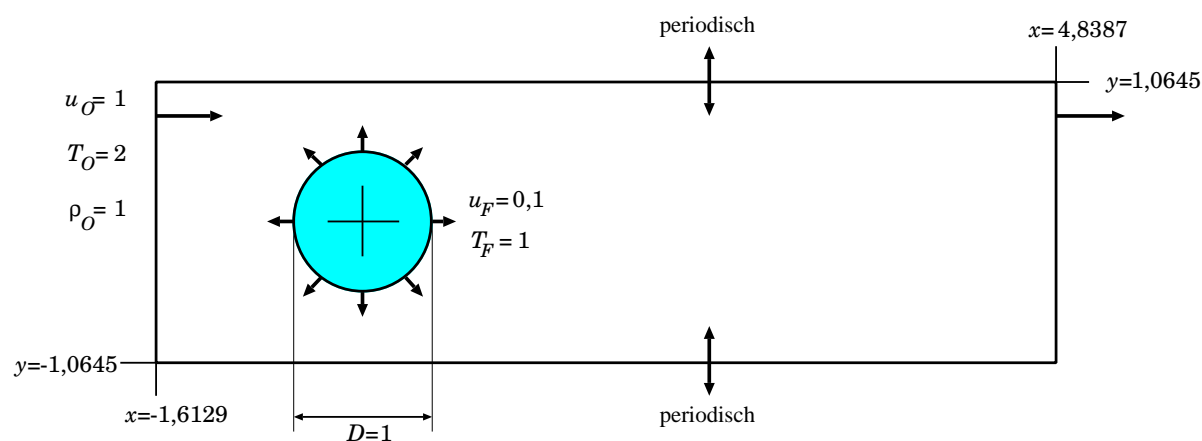


Abbildung 7.11: Prinzipskizze des Testfalls „poröser Brenner“. Der Index 'O' bezieht sich auf das Oxidant und der Index „F“ auf den Brennstoff. Die Größen sind dimensionslos gehalten.

Der Testfall beschreibt die laminare Flamme einer vertikalen Reihe kalter Brenner. Der Brennstoff mit der Temperatur $T_F = 1$ tritt durch den Brenner in eine heiße Atmosphäre mit der Temperatur $T_O = 2$. Der Durchmesser des Brenners ist $D = 1$ und die Reynolds-Zahl der Anströmung ist $Re = 80$, bezogen auf die Anströmgeschwindigkeit der Atmosphäre und den Durchmesser D . Der Brennstoff wird mit der Geschwindigkeit $u_F = 0,1 u_O$ senkrecht zu seiner Oberfläche des zylindrischen Brenners zugeführt. Für die Diffusion der Gase galt eine Schmidt-Zahl von $Sc = 1$. Die Verbrennung selbst wurde

durch eine globale Einschritt-Reaktion



beschrieben, mit der dimensionslosen Produktionsrate

$$\dot{r} = Da \xi_F^1 \xi_O^1 \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right). \quad (7.5)$$

Als repräsentative Damköhler-Zahl wurde $Da = 620$ gewählt bei einer dimensionslosen Aktivierungstemperatur $T_A = 12$. An den horizontalen Wänden des Gebietes wurden periodische Randbedingungen angesetzt, während am Ein- und Ausströmrand die Randbedingungen wie in einem ebenen Kanal waren. Das heißt, alle Größen, bis auf den dynamischen Druck p^1 , wurden am Einströmrand vorgegeben. Für den Druck am zylindrischen Brenner wurde ein verschwindender Gradient in der Normalen-Richtung zur Wand als Randbedingung angenommen. Verwendet wurde die Implementierung des Druckkorrektur-Verfahrens auf nicht-versetzten Gittern und einer zweiter Ordnung genauen Upwind-Diskretisierung der Konvektionsterme. Die Art der Zeitintegrationsmethode hatte keinen Einfluß auf das stationäre Ergebnis.

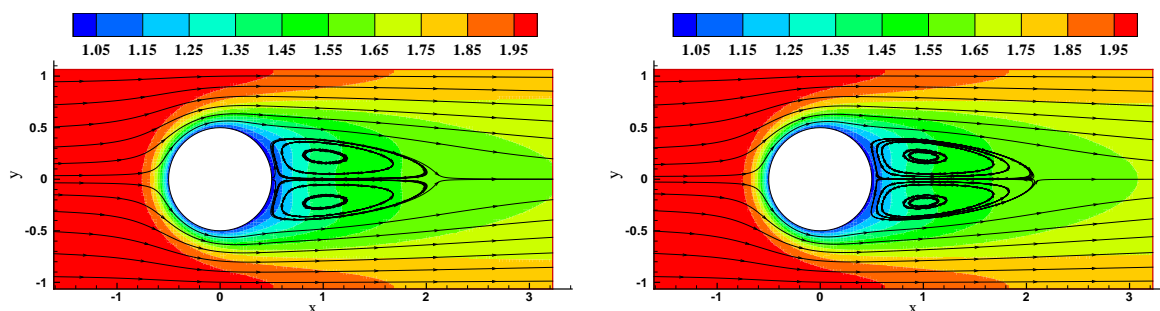


Abbildung 7.12: *Nicht-Reagierende* Strömung in einer Reihe poröser Brenner, gelöst mit einem LBGK-Verfahren (links) und mit einem Druckkorrektur-Verfahren (rechts) [16]. Dargestellt sind die Temperatur im Strömungsfeld und die Stromlinien.

Zunächst wurde nur der reine Stoff- und Wärmetransport ohne Reaktionen ($Da = 0$) gerechnet, um vorab eventuell auftretende Differenzen in der Lösung durch die unterschiedlichen Verfahren festzustellen. Wie der Abbildung 7.12 zu entnehmen ist, stimmten die Ergebnisse sehr gut überein. Das „zuschalten“ der chemischen Reaktionen bewirkte aufgrund der starken Wärmeentwicklung ein Verschwinden der Rezirkulationszone hinter dem Zylinder, wie in Abbildung 7.13 dargestellt. Auch hier zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Zuletzt ist in der Abbildung 7.14 der Massenbruch des Abgases und die Produktionsrate \dot{r} dargestellt.

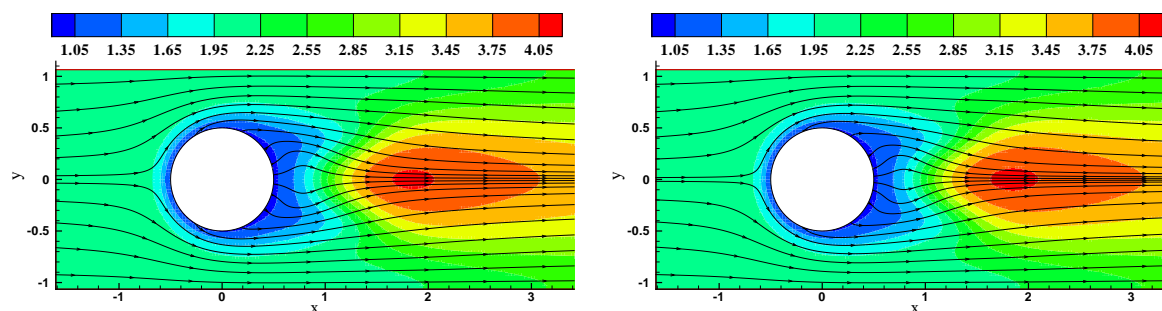


Abbildung 7.13: Reagierende Strömung in einer Reihe poröser Brenner, gelöst mit einem LBGK-Verfahren (links) und mit einem Druckkorrektur-Verfahren (rechts) [16]. Dargestellt sind die Temperatur im Strömungsfeld und die Stromlinien bei einer Damköhler-Zahl von $Da = 620$.

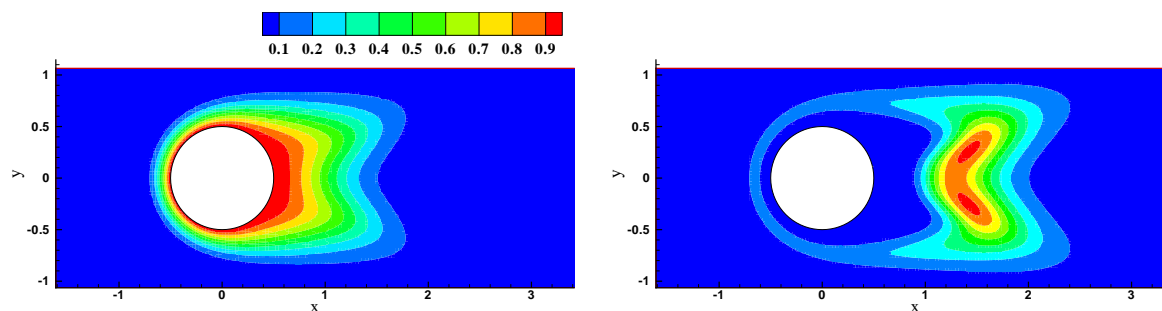


Abbildung 7.14: Reagierende Strömung in einer Reihe poröser Brenner, gelöst mit dem Druckkorrektur-Verfahren. Dargestellt ist der Massenbruch des Brennstoffs (links) und die dimensionslose Produktionsrate \dot{r} (rechts).

Der Vergleich beider Verfahren zeigte gute bis sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Auf dieser Basis wurden die beiden Verfahren noch weiter entwickelt, vorher wurden weitere Modellierungsdetails hinzugefügt, die unerlässlich für den Produktionseinsatz sind. Der Rechenzeitbedarf beider Verfahren war gleich, wobei als Kriterium das Erreichen einer konvergenten Lösung galt und nicht wie sonst üblich, eine fest vorgegebene physikalische Zeit. Somit hatten beide Bearbeiter die Möglichkeit, Techniken zur Konvergenzbeschleunigung einzusetzen, die für eine zeitgenaue Berechnung nicht verwendet werden können. Dennoch wurde bei dem Druckkorrektur-Verfahren auf solche Hilfsmittel verzichtet, da sie zu dem Zeitpunkt nicht implementiert waren. Einen großen Einfluss auf die Rechenzeit des Druckkorrektur-Verfahrens hatte die Lösung der Poissongleichung für den Druck. Hier lassen sich mit hoher Sicherheit noch Verbesserungen hinsichtlich des Rechenzeitbedarfs erzielen.

8 Beispiele technischer Anwendung

Die Entwicklung der hier vorgestellten Verfahren zur Strömungssimulation ist eng mit Forschungsprojekten verbunden, in denen durchströmte Reaktoren zur Gasphasen-Synthese von Partikeln eingesetzt werden. Im Rahmen dieser Projekte ist es notwendig Simulationen und anschließende Analysen der Strömung durchzuführen. Dies gilt sowohl in der Planungs- und Entwurfsphase, um vorab die Reaktorgeometrie und die thermischen Verhältnisse im Reaktor abzuschätzen. Sowie nach Durchführung von Experimenten, um diese interpretieren zu können, insbesondere für Ergebnisse, die messtechnisch nicht direkt erfassbar sind.

Die Ergebnisse solcher Simulationen sind nicht uneingeschränkt zur Validierung der numerischen Verfahren geeignet. Typischerweise ist eine detaillierte Messung des Strömungszustandes in solchen Apparaturen im Projektrahmen nicht zu realisieren und die Berechnungen können nur anhand einer eindimensionalen Abschätzung auf Plausibilität geprüft werden. Weiterhin besteht eine große Unsicherheit bezüglich der richtigen Erfassung und Umsetzung der Randbedingungen am realen Problem. Während davon ausgegangen werden kann, dass eine erfolgreiche Validierung am „akademischen“ Strömungsproblem auf nur gering komplexere Probleme übertragbar bleibt, sind die Randbedingungen für die Temperatur und Spezieskonzentrationen meistens sehr viel komplizierter und durch unterschiedliche physikalische Effekte beeinflusst. Im Folgenden werden die Ergebnisse von Simulationsberechnungen von zwei unterschiedlichen Synthese-Reaktoren vorgestellt. Im ersten Fall wurde die Strömung in einem bereits existierenden Reaktor untersucht, mit dem Ziel die Ergebnisse des Experiments besser interpretieren zu können und daraus eventuelle Massnahmen zur Prozesssteuerung abzuleiten. Der zweite vorgestellte Fall beschäftigt sich mit dem Entwurf eines Synthesereaktors, wobei der Schwerpunkt auf der thermischen und geometrischen Auslegung lag.

8.1 Synthesereaktor zur Herstellung von Diamantpartikeln

Die Entstehung von Diamantpartikeln in einer durch CO₂-Laser induzierten Gasphasenreaktion wurde bereits 1991 von Bürki und Leutwyler nachgewiesen [5]. Zur genaueren Untersuchung der einzelnen Prozessparameter in dem verwendeten Synthesereaktor wurde das ursprüngliche Experiment im größeren Maßstab aufgebaut und teilweise modifiziert. Während im experimentellen Teil des Projektes der Schwerpunkt auf der Partikel-erzeugung und Prozesssteuerung lag, war es Aufgabe der Simulation zu klären, welcher Strömungszustand im Reaktor vorliegt und wie er die Entstehung von Diamantpartikeln beeinflusst. Das Ziel war eine eventuelle industrielle Anwendung des Syntheseprozesses beziehungsweise eine Beurteilung der technischen Relevanz.

Im Verlauf der experimentellen Untersuchung wurden Diamantpartikel reproduzierbar nachgewiesen. Es wurden jedoch auch Betriebspunkte gefunden, in denen keine Diamantpartikel erzeugt werden konnten. Maßgeblich war dabei das unterschiedliche Strömungsfeld bei gleichem Massendurchsatz des Precursors im Synthesereaktor. Da keine experimentelle Möglichkeit zur Visualisierung der Strömung bestand, war eine numerische Simulation notwendig. Die Simulationen der auftretenden physikalischen Effekte der laser-induzierten Gasphasenreaktionen führen zu einem sehr aufwendigen, physikalischen Modellierungsproblem, das nur mit entsprechend aufwendiger Numerik gelöst werden kann.

Der im Versuch verwendete Reaktor zur Laser-Pyrolyse entspricht im Prinzip dem von P. Bürki 1991 verwendeten Reaktor, der jedoch während der Versuchsphase geometrisch verändert wurde. Das Gas wird durch eine koaxiale Düsenanordnung dem Reaktor zugeführt. Während die innere Düse das reagierende Gas beziehungsweise Gasgemisch (hier ist es Ethylen oder ein Ethylen/Wasserstoff Gemisch) zuführt, wird durch die äußere Düse ein inertes Gas (Stickstoff) zugeführt. Zusätzlich wird noch Stickstoff an den Seiten zugeführt um die Verrußung der Fenster durch Rezirkulation des Gasstrahls zu verhindern. Der Gasstrahl ist senkrecht nach oben gerichtet, so dass aufgrund der Dichtedifferenzen ein nicht vernachlässigbarer Schwerkrafteinfluss zu erwarten ist. Als Energiequelle dient ein CO₂-Laser, der den Gasstrahl kreuzt. Von den zugeführten Gasen ist nur Ethylen nennenswert imstande, die Laserstrahlung zu absorbieren. Auf Grund der hohen Absorptionsfähigkeit des Ethylens, ist es erstrebenswert, die Strömung möglichst laminar zu halten, da dann nur die Diffusion für die Konzentrationsabnahme des Ethylens im Freistrahls in Frage kommt und die thermischen Verluste durch Strahlungsmischung minimal werden.

Bei der Modellierung und numerischen Formulierung des Problems müssen folgende physikalische Aspekte beachtet werden:

- Dreidimensionale Formulierung der Strömungs- und Reaktionsvorgänge auf der Basis der Erhaltungsgleichungen von Masse, Impuls und Energie,
- Zeitabhängigkeit wegen möglicher Periodizität der Strömung,
- Laminare, wärmeleitende Gemischströmung,
- Strömung sehr kleiner Machzahlen, aber großer Dichteänderungen und
- Einfluß von Gravitation wegen der hohen Dichteunterschiede,
- Mehrkomponenten-Gasgemisch mit Diffusion.

Mit den in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren hatte man ein geeignetes Werkzeug zur Simulation der Reaktorströmung.

8.2 Modellierung und Simulation der Diamant-Reaktorströmung

Zur ersten, einfachen Modellierung der Laserstrahlung wurde die Tatsache genutzt, dass im wesentlichen nur die Ethylenmoleküle die Strahlung absorbieren und die Strahlintensität über die Lauflänge nicht wesentlich abnimmt. Damit kann der Laserstrahl als eine Wärmequelle betrachtet werden, deren Wärmestromdichte lokal von der Ethylenkonzentration abhängt. Solange keine Partikel oder andere Kohlenwasserstoffe den Strahl kreuzen, ist diese Annahme näherungsweise gerechtfertigt, da keine andere Spezies über entsprechende Absorptionseigenschaften verfügt.

Das verwendete Lösungsverfahren der Navier-Stokes-Gleichungen bei kleinen Mach-Zahlen erlaubt die Simulation der Strömung eines Gemisches idealer Gase in drei Dimensionen. Zu Beginn der Arbeiten wurden Untersuchungen der prinzipiellen Strömungsvorgänge im Reaktor durchgeführt. So konnte die Ausbildung des Freistrahles mit und ohne Wärmequellen, die die Wirkung eines Laserstrahles simulieren, untersucht werden. Abbildung 8.1 zeigt das Beispiel einer 3-D Rechnung eines Freistrahles, der durch einen kreuzenden „Laserstrahl“ gestört wird. Der „Laserstrahl“ wird dabei, wie beschrieben, durch verteilte Wärmequellen simuliert. Die Flächen konstanter Temperatur und achsenparalleler Geschwindigkeit zeigen starke Störungen der Symmetrie des Gasstrahles und

die Ausbildung von Wirbeln, die sich später auch im Experiment zeigten. Die Wärmeleitfähigkeit λ_α einzelner Gasspezies wurde mit der Gleichung (2.57) berechnet, während die Bestimmung der dynamischen Zähigkeit η_α nach der Gleichung (2.36) erfolgte. Die Diffusionskoeffizienten wurden ebenfalls nach Ansätzen der kinetische Gastheorie bestimmt, jedoch unter Vernachlässigung der Thermodiffusion.

Aus den Ergebnissen konnten qualitative Aufschlüsse über das resultierende Strömungs- und Temperaturfeld im Versuchsreaktor erhalten werden, die den Experimentatoren Anhaltspunkte zur Interpretation der Strömungsverhältnisse lieferten.

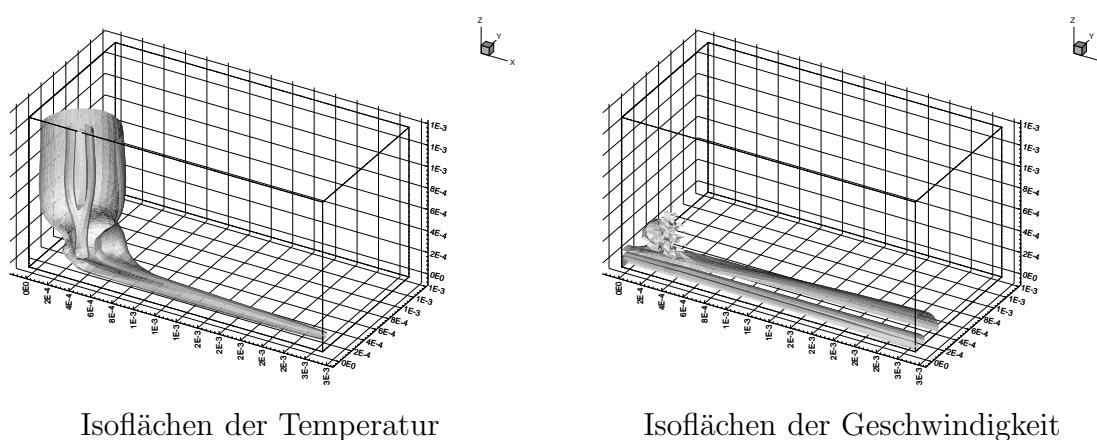


Abbildung 8.1: Dreidimensionale Simulation eines Freistrahles mit kreuzenden „Laserstrahl“, der durch verteilte Wärmequellen simuliert wird. Darstellung der Flächen konstanter Temperatur (links) und konstanter axialer Geschwindigkeit (rechts).

Zur Simulation der Strömungsvorgänge des existierenden Reaktors wurde die Geometrie und die Gaszuführungen aus der im Experiment verwendeten Anordnung übernommen. Entsprechend dem Experiment wurden zahlreiche Strömungsfälle untersucht, wie z.B. unterschiedliche Volumenströme in den koaxial angeordneten Zuleitungsrohren und einschließlich der Berücksichtigung des Schutzgasstromes längs der Fenster.

Die Rechnungen wurden mit dem bereits beschriebenen Algorithmus für kleine Mach-Zahlen, aber große Dichteänderungen durchgeführt. Die Wärmequellen, die die Laserheizung simulieren, sind aus den experimentel ermittelten ein- und austretenden Laserleistungen abgeschätzt worden. Um die gesamte Reaktorgeometrie (äußere Wände, Abzug mit Filter) erfassen zu können, wurde eine dreidimensionale Version des Programmes verwendet.

Das verwendete Gitter ist im Bereich der inneren Rohre und der Wärmequelle uniform und zum Ausgang und den äußeren Wänden hin gestreckt. Bei der Gitterstreckung

wurde sichergestellt, dass sie nicht mehr als 10% von Knoten zu Knoten beträgt, um den numerischen Fehler in den zweiten Ableitungen möglichst klein zu halten. Die Abbildung 8.2 stellt die gewählte geometrische Anordnung mit Abmessungen in mm dar.

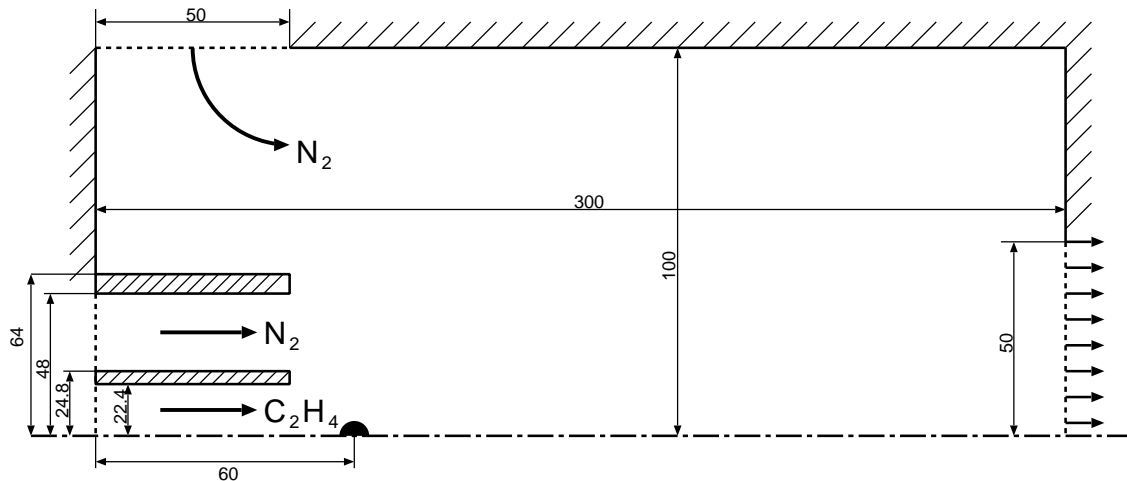


Abbildung 8.2: Innengeometrie des Reaktors zur Gasphasen-Synthese von Diamantpartikeln. Dargestellt ist die ebene Projektion um die Symmetrieachse. Die Längenmaße sind in Millimetern angegeben.

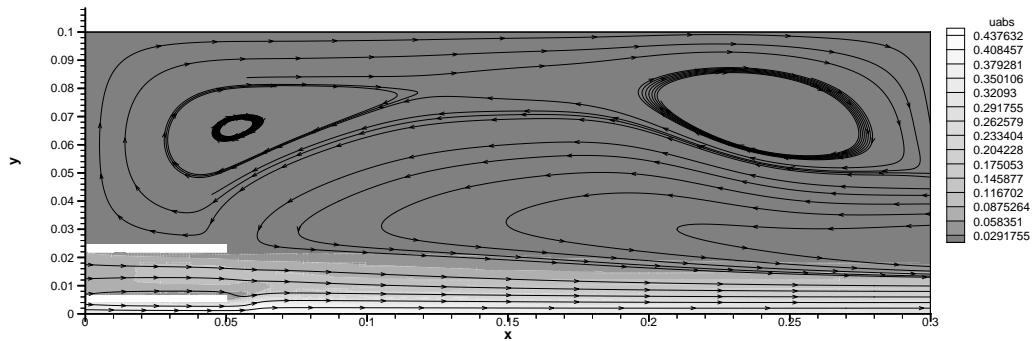
Als Randbedingungen wurden uniforme Geschwindigkeiten der Gase, sowie konstante Temperatur und Konzentrationen am Einströmrand gewählt. Der dynamische Druck wurde am Ausströmrand festgehalten, alle anderen Größen wurden aus dem Inneren des Integrationsgebietes extrapoliert. An den Wänden wurde für die Geschwindigkeit die Haftbedingung angesetzt, die Wandtemperatur wurde, entsprechend der Beobachtung am Experiment, als konstant angenommen. Für die Konzentration der Gasspezies wurde ein verschwindender Konzentrationsgradient angenommen. Die Strömungsdaten sind im Folgenden aufgelistet:

mittlere Geschw. C_2H_4 :	$0.32 \frac{m}{s}$
mittlere Geschw. N_2 , Außenrohr:	$0.32 \frac{m}{s}$ oder $0.072 \frac{m}{s}$
mittlere Geschw. N_2 , Seiten:	$0.11 \frac{m}{s}$
thermodynamischer Druck:	1 bar
Einströmtemperatur:	300 K

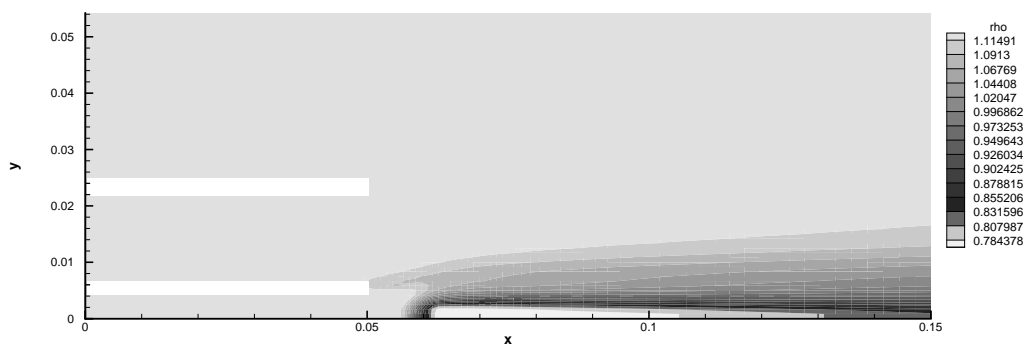
In den dargestellten Rechnungen wurde bei einem konstanten C_2H_4 -Volumenstrom der N_2 -Volumenstrom in dem äußeren Rohr variiert. Der seitlich zugeführte Stickstoffstrom entsprach dem, im Experiment verwendeten Wert von 20 l/min oder er wurde vollkom-

men abgestellt. Die hier dargestellten numerischen Experimente zeigen in Abbildung 8.3 die Reaktorströmung bei abgestelltem Gasstrom von den Seiten und verkleinertem Gasstrom aus dem äußeren Rohr, sowie in Abbildung 8.4 bei eingeschaltetem Gasstrom von den Seiten. Die Abbildungen zeigen einen zweidimensionalen Schnitt normal zum Laserstrahl durch das dreidimensionale Integrationsgebiet. Es hat sich gezeigt, dass der zusätzliche Gasstrom eine mögliche Rückströmung aus der Absaugvorrichtung verhindert und einen stabilisierenden Einfluss auf die sich bildenden Wirbel hat.

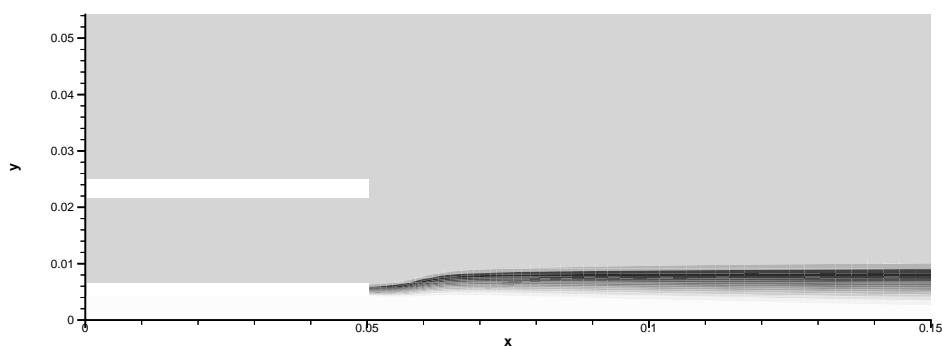
Die durchgeführten Strömungsrechnungen zeigten deutlich die Ausbildung von Wirbelsystemen, die den Transport von Gas bzw. Partikelkomponenten im Flammenbereich beeinflussen. Diese Rezirkulationsströmung, zum Teil mit Rußpartikeln beladen, zeigte wesentlichen Einfluss auf die Diamantbildung, während die ursprünglich angenommenen Mechanismen zur Diamantbildung geringeren Einfluss hatten. Die durchgeführten Experimente und die Simulationen lieferten wesentlich die Grundlage zu dieser reaktiven Mehrphasen- und Mehrkomponenten-Strömung. Das eigentliche Ziel der Entwicklung eines effizienten Verfahrens zur Herstellung von Industriediamanten konnte nicht erreicht werden. Das von der DFG geförderte Vorhaben wurde aus Zeitgründen beendet.



Absolutgeschwindigkeit und Stromlinien

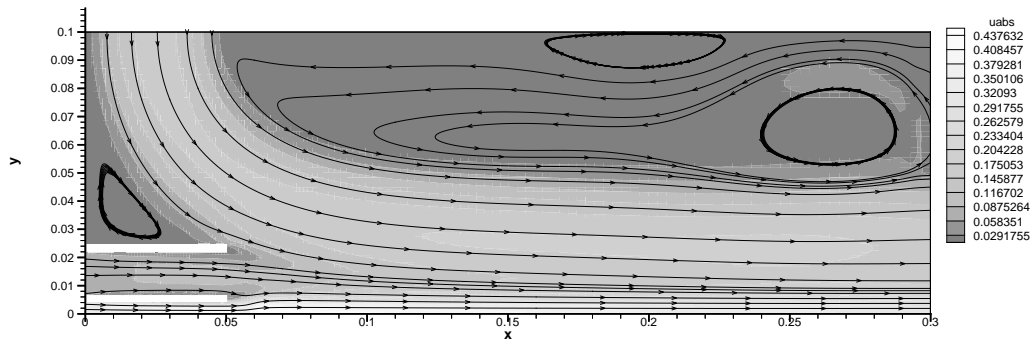


Dichteverteilung (Ausschnitt)

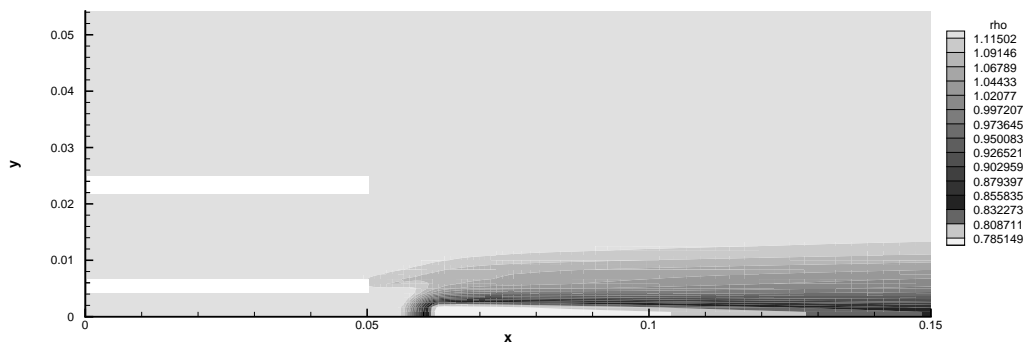


Ethylenkonzentration (Ausschnitt)

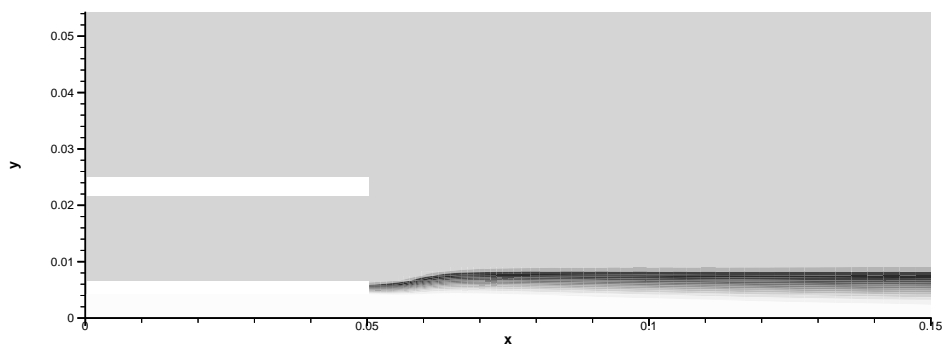
Abbildung 8.3: Reaktorströmung bei abgeschaltetem Gasstrom von den Seiten. Die Stromlinien zeigen eine Rückströmung aus dem Absaugbereich, sowie zwei stationäre Wirbel in den Ecken. Im Experiment führte diese Rückströmung zu Partikelablagerung an den Fenstern.



Absolutgeschwindigkeit und Stromlinien



Dichteverteilung (Ausschnitt)



Ethylenkonzentration (Ausschnitt)

Abbildung 8.4: Reaktorströmung bei eingeschaltetem Gasstrom von den Seiten. Eine Rückströmung ist nicht mehr zu beobachten und die stationären Wirbel sind deutlich vom inneren Gasstrahl getrennt. Im Experiment wurde keine Partikelablagerung an den Fenstern beobachtet.

8.3 Reaktor zur Synthese von Siliziumkarbid

Die zweite vorgestellte Anwendung der hier entwickelten Verfahren ist die Simulation eines Synthesereaktors zur Züchtung von Siliziumkarbid-Kristallen. Die extremen Materialeigenschaften von Siliziumkarbid (SiC) verhindern Verfahren zur Kristallzüchtung, die auf Kristallisation aus der Schmelze basieren. Das Material hat eine Sublimationstemperatur von 3100 K bei einem Druck von 1 bar. Entsprechend zielen existierende Züchtungsverfahren auf eine Abscheidung von SiC aus der Gasphase, mit entsprechend extremen thermischen Zustand im Reaktor. Das Lely-Verfahren ist zur Zeit das meistverwendete. Nach dieser Methode wird zuvor erzeugtes SiC-Pulver verdampft und als Einkristall an einem Kristallisationskeim abgeschieden. Die Kristallwachstumsraten sind hierbei verfahrensbedingt beschränkt und die Reinheit des Einkristalls ist über die Prozesslaufzeit nicht konstant. Alternativ dazu wurde von Ellison et al. [30, 31] ein Hochtemperatur-CVD-Verfahren entwickelt. Hier wird das SiC im Prozess durch eine Gasphasenreaktion erzeugt und sofort zur Kristallzüchtung verwendet. Als Ausgangsstoffe zur SiC-Synthese werden Silan (SiH_4) mit einem Kohlenwasserstoff (HC) verwendet, die als Precursor vorgemischt im inerten Trägergas in den Reaktor geleitet werden. Im Reaktor wird die Wärme zur SiC Synthese und zur eventuellen Partikelverdampfung über eine Wandheizung zugeführt. Diese wird durch ein induktiv beheiztes Graphitrohr realisiert. Eine der ersten Entwurfskizzen zeigt Abbildung 8.3.

Der Reaktor besteht hauptsächlich aus einem zylindrischen Heizungskörper, der vom Inertgas und Precursorgas durchströmt wird. In diesem Abschnitt soll das Gas aufgeheizt werden, so dass die Bildung von SiC, eventuell SiC-Partikeln, sowie anschließende Verdampfung stattfindet. Das aufgeheizte Gas trifft anschließend auf den Substratträger und strömt an ihm vorbei zu einer Absaugvorrichtung. Der Prozess ist isobar. Angestrebt wird eine laminare Strömung mit einem vorgegebenen Volumenstrom. Dementsprechend kann die Simulation für eine rotationssymmetrische Geometrie erfolgen.

Die kleine Strömungsgeschwindigkeit im Reaktor und die extremen thermischen Verhältnisse machten die hier vorgestellten numerischen Verfahren zu einer guten Wahl für die Simulation des Reaktors. In diesem Rahmen muss die Simulation für den Entwurf folgende Fragestellungen beantworten:

1. Welche inerten Trägergase sollen (wo) verwendet werden und welchen Einfluss haben ihre Stoffeigenschaften auf den Zustand im Reaktor?
2. Welchen Einfluss hat die Innengeometrie auf die Temperaturverteilung im Reaktor und wie soll die Innengeometrie am günstigsten, hinsichtlich der Temperatur und der Konzentrationen einzelner Spezies, gestaltet werden?

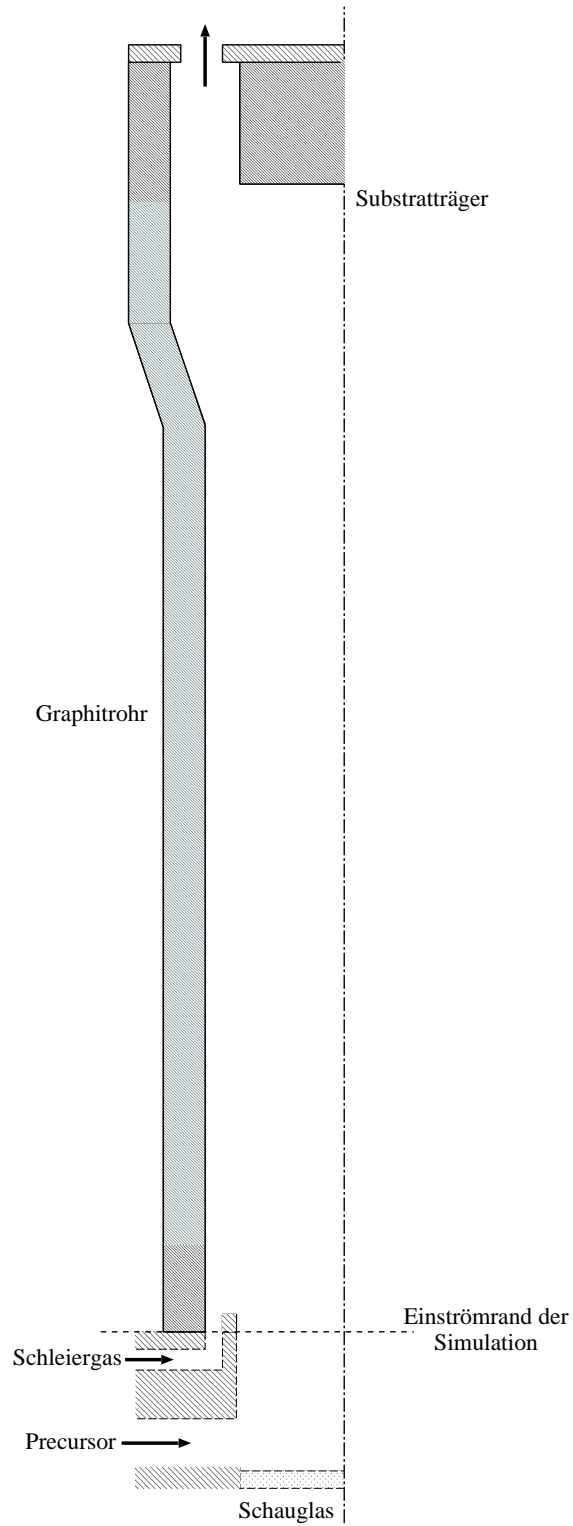


Abbildung 8.5: Prinzipskizze des Reaktor-Innenaufbaus.

3. Welche Verweilzeiten haben die Edukte bei vorgegebenem Massenstrom des Precursors?
4. Wie ist die Außengeometrie zu gestalten bzw. welche thermischen Belastungen könnten auftreten bei vorgegebener Geometrie?

Der letzte Punkt in dieser Liste verlangt nach einer Berechnung des Wärmetransports im Gehäusematerial des Reaktors und betrifft die Strömungssimulation nicht direkt. Da aber durch technische Zwänge die Lösungsfindung der gelisteten Fragen gekoppelt ist, darf er nicht unerwähnt bleiben.

Die Forderung nach einer laminaren Strömung, zusammen mit dem vorgegebenen Volumenstrom und der Gastemperatur, resultiert in einem Kriterium für die Länge und Durchmesser des ersten Reaktorabschnitts. Der Heizrohrdurchmesser ist durch den Außendurchmesser des Reaktorgehäuses und durch die Dicke der notwendigen Isolation begrenzt. Weiterhin ist bei einem transparenten Gas in einer rotationssymmetrischen, laminaren Strömung der diffusive Wärmetransport der einzige Transportmechanismus, so dass bei festgehaltenem Durchmesser nur die Länge des Rohres variiert werden muss beziehungsweise kann.

Im weiteren Verlauf weitet sich das Rohr, um Platz für den Substratträger zu bieten. Hierdurch wird die Strömung verzögert und die Verweilzeit in der Zone unmittelbar vor dem Substratträger wird verlängert. Ein weiteres Heizen des Gases kann hier durchaus erwünscht sein um die Deposition von SiC an den Reaktorwänden zu verhindern. Um eine möglichst gleichmäßige Deposition zu gewährleisten und eventuelle messtechnische Vorrichtungen nicht zu stören, soll die Strömung im gesamten Bereich von der Erweiterung bis zum Austrittsrand laminar und anliegend sein, das heißt Ablösungen sind zu vermeiden. Sich daraus ergebende Restriktionen betreffen vor allem die Durchmesser der Bauteile, sowie den Gradient der Durchmessererweiterung.

Die Simulation sollte vor allem klären, ob die vorgeschlagene Geometrie sinnvoll ist und ob eine deutlich einfachere Bauweise die verlangten Parameter erfüllt.

8.3.1 Messtechnische Einbauten und Restriktionen

Der geplante Reaktor soll über zwei wichtige messtechnische Erweiterungen verfügen:

- Ein Quarzglasfenster im Reaktorboden, gegenüber dem Substratträger zur Temperaturmessung und für die Mikroskopie.
- Eine Magnet-Schwebe-Waage, die einzelne SiC-Schichten wiegen können soll.

Im Gegensatz zu einem reinen Produktionsreaktor, ist im vorliegenden Fall, die Strömungsführung so zu wählen, dass messtechnische Einbauten und Vorrichtungen Platz finden und nicht negativ beeinflusst werden. Andererseits soll die Strömungsführung von der Messtechnik unbeeinflusst bleiben und der in einem Produktionsreaktor entsprechen.

Um die Gaszuführung ähnlich der des Produktionsreaktors zu gestalten, musste das Quarzglasfenster weit nach hinten verlegt werden, was aber nicht unbedingt nachteilig ist, da so das Glas nicht den extremen Temperaturen ausgesetzt ist und noch zusätzlich vom Precursorgas gekühlt werden kann. Die Lage des Substratträgers und somit auch der Waage ist durch das Arbeitsprinzip des Reaktors festgelegt. Strömungstechnische Einschränkungen, die sich hier einstellen, betreffen vor allem die Empfindlichkeit der Waage und reduzieren die möglichen, realisierbaren Volumenströme und die mit ihnen verbundenen Störungen.

8.3.2 Thermische Grenzen der Materialien

Aufgrund der hohen Temperaturen im Reaktor werden die Bauteile extrem beansprucht. Das gesamte Innenrohr und der Substratträger werden aus Graphit gefertigt. Für dieses Material wird vom Lieferanten die Beanspruchungs-Obergrenze mit 3000 K angegeben. Für die anderen Materialien liegen die Grenzen weit tiefer, bei 1200 K für das Quarzglas des Gehäuses und des Schauglases, sowie 600 K für den Edelstahl am Boden und im Deckel des Reaktors. Das Quarzglas des Gehäuses ist durch eine Lage Graphitfilz vom Heizrohr getrennt und soll nicht aktiv gekühlt werden. Die Edelstahlteile werden aktiv gekühlt.

8.3.3 Anforderungen an die Prozess-Inertgase

Als Inertgase stehen die Edelgase Argon und Helium zur Verfügung mit ihren Vor- und Nachteilen. Argon hat eine Dichte, die annähernd der der Produktgase entspricht, leider ist seine Wärmeleitfähigkeit klein. Helium hat eine sehr kleine Dichte, allerdings ist die Wärmeleitfähigkeit rund 8 mal höher als die von Argon, was die Aufheizstrecke verkürzt. Die Materialeigenschaften beider Gase sind in der Tabelle 8.3.3 aufgelistet. Weiterhin gilt in guter Näherung für die dynamische Zähigkeit und Wärmeleitfähigkeit beider Edelgase das Potenzgesetz

$$\eta(T) = \eta_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{0.72} \quad \text{und} \quad \lambda(T) = \lambda_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{0.72} \quad (8.1)$$

mit $T_{ref} = 300 \text{ K}$.

Eigenschaft:		Helium He	Argon Ar	
Molmasse	M	4,0	39,95	$\frac{\text{g}}{\text{Mol}}$
Wärmeleitfähigkeit	λ_{300}	0,152	0,01772	$\frac{\text{W}}{\text{mK}}$
dyn. Zähigkeit	η_{300}	$19,9 \cdot 10^{-6}$	$22,1 \cdot 10^{-6}$	$\frac{\text{kg}}{\text{ms}}$
Wärmekapazität	$c_p = \text{const.}$	5193	520	$\frac{\text{J}}{\text{kgK}}$

Tabelle 8.1: Materialeigenschaften von Argon und Helium bei $T_{ref} = 300$ K.

Die ersten Simulationen des Synthesereaktors zielten auf die Entscheidung, welches Trägergas zu wählen ist. Dazu wurde eine etwas vereinfachte Geometrie verwendet. Die Abbildung 8.7 zeigt die Temperaturverteilung im Reaktor für beide Trägergase bei einem thermodynamischen Druck $p^{(0)} = 0,2$ bar. Aufgrund dieses Ergebnisses wurde für alle folgenden Simulationen, Helium als Trägergas gewählt.

8.3.4 Ergebnisse der Strömungssimulation

Zu Beginn der numerischen Untersuchung wurden unterschiedliche Innenraumgeometrien des Reaktors diskutiert. Unter Berücksichtigung der thermischen Grenzen der verwendeten Materialien hat sich der in Abbildung 8.6 dargestellte Aufbau als Kompromiss aus Forschungs- und Produktionsreaktor herausgestellt. Die in der Skizze angedeutete Gaszuführung wurde so gewählt, dass ein gleichmäßiges Geschwindigkeitsprofil an den Einströmrändern angenommen werden darf. Der Substratträger wird in der realen Ausführung in unterschiedlichen Varianten vorliegen.

Entsprechend der Reaktorgeometrie und der Gaszu- und Gasababfuhr wurde vereinfachend eine rotationssymmetrische Strömung angenommen, was den Rechenaufwand erheblich reduziert. Diese Annahme ist allerdings nur gerechtfertigt, solange keine Wirbelablösungen auftreten und die Geometrie symmetrisch ist.

Die Berechnungen erfolgten sowohl mit Argon als auch mit Helium als Inertgas. Zunächst wurde nur ein Wärmetransport über die Reaktorwände auf ein transparentes Gas angenommen, wobei die nicht extern durch die Induktionsspulen beheizten Graphitrohr-Flächen als adiabat galten. Die Annahme einer isothermen Wand im beheizten Bereich ist nicht realistisch und wurde durch eine vorgegebene Leistungsdichte an der Wand ersetzt, wobei die maximale Materialtemperatur als Leistungsgrenze diente. Die Geometrie „C“ hatte eine etwas anders gestaltete Gasabfuhr (siehe Abbildung 8.6), wobei das heiße Gas mit dem wassergekühlten Edelstahl-Flansch in Berührung kam. Der Flansch wurde als eine isotherme Fläche definiert.

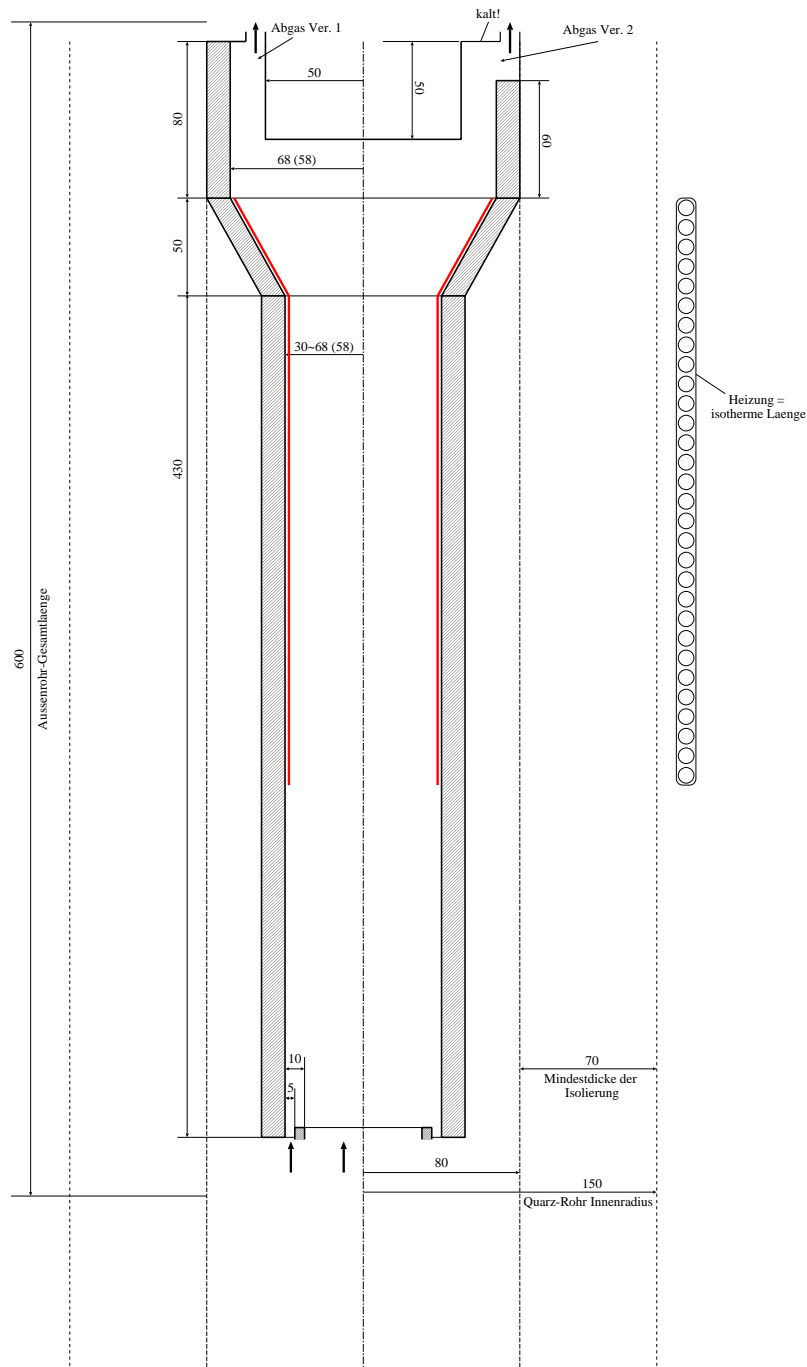


Abbildung 8.6: Ausgangsgeometrie für die Strömungssimulation im Reaktor. Der Durchmesser des ersten Abschnitts wurde variiert, zwischen $R_1 = 30\text{mm}$ und $R_1 = 65\text{mm}$. Der linke Schnitt stellt die Geometrien A und B dar. Der Rechte Schnitt zeigt die Geometrie C, die eine anders gestaltete Gasabfuhr aufweist. Der beheizte Bereich ist Rot gekennzeichnet.

Ein anderer Aspekt der Simulationsrechnung ist die Abschätzung des Temperaturfeldes bei Wand-zu-Wand-Strahlung. Hier wurde dem Substratträger die mittlere Temperatur der ihn umgebenden Wände aufgeprägt. Dadurch wurde er als isotherm betrachtet, unter der Annahme eines Strahlungsgleichgewichts. Angesichts der langen Betriebszeiten des Reaktors, ist eine solche Annahme durchaus gerechtfertigt.

Die Gaszuführung wurde als eine koaxiale Rohranordnung angesetzt, wie in der Abbildung 8.6 angedeutet. Dabei wird das vorgemischte Precursor-Gas aus Silan und Helium durch das innere Rohr geleitet. Der Precursor-Massenstrom war dabei für alle Berechnungen gleich, da er direkt dem angestrebten Stoffumsatz im Reaktor entspricht. Durch das äußere Rohr wurde Helium als inertes Schleiergas zugeführt, mit dem Ziel die Silan-Konzentration an dem nicht beheizten Wandabschnitt zu minimieren. Um die Bildung von Scherschichten zwischen dem Precursor und dem Schleiergas zu vermeiden, wurde der Schleiergas-Massenstrom so gewählt, dass er dieselbe Geschwindigkeit hatte wie der Precursor. Das hatte zur Folge, dass der Schleiergas-Massenstrom bei kleinerem Reaktordurchmesser im Verhältniss zu dem Precursor, grösser war als bei dem großen Durchmesser. Der Anfang des induktiv beheizten Bereiches wurde bei 130 mm stromab der Gaszuleitung angesetzt.

Zur Berechnung der Transportkoeffizienten wurden die im Kapitel 2 beschriebenen Formeln aus der kinetischen Gastheorie verwendet. Bei der Berechnung der Diffusionsmassenstroms wurde die Thermodiffusion vernachlässigt.

R_1 [mm]	$p^{(0)}$ [bar]	u_{in} [m/s]	ξ_{SiH_4}	He/Ar	Abb. Nr.
30 (A)	0,5	0,0988	0,075106	He	8.8, 8.9, 8.10
65 (B)	0,5	0,0211	0,075106	He	8.8, 8.9, 8.10
65 (C)	0,1	0,1052	0,075106	Ar	8.7
65 (C)	0,2	0,0526	0,075106	He	8.7
65 (C)	0,5	0,0211	0,075106	He	8.7
65 (C)	1,0	0,0105	0,075106	He	8.7

Tabelle 8.2: Varianten der Simulationsparameter zur Berechnung der Strömung im SiC-Synthesereaktor. Der Volumenstrom des Precursors wurde bei $\dot{V} = 6\text{ l/min}$, bezogen auf einen Druck $p^{(0)} = 1\text{ bar}$ gehalten.

Da das Ziel der Simulation die Bestimmung von bevorzugten Betriebspunkten und einer dem Problem gerechten Geometrie war, wurden unterschiedliche Parameter variiert. Tabelle 8.2 listet die Parametersätze für die hier gezeigten Ergebnisse. Die Zahl der tatsächlich durchgeführten Simulationen war deutlich höher als in der Tabelle dar-

gestellt, im ungünstigsten Fall wären alle Kombinationen der freien Parameter zu berechnen gewesen. Jedoch wurde die Reaktorgeometrie „A“ aus zwei Gründen schon früh ausgeschlossen. Zum Einen war diese Form des Graphitrohres, wegen der großen Wärmeausdehnung bei den angestrebten Temperaturen, in der technischen Realisierung riskant. Der andere Grund war die höhere Strömungsgeschwindigkeit im Reaktor. Dabei sank die Verweilzeit der Edukte im Reaktor um das fünffache, wodurch der Prozess kritischer wurde hinsichtlich der zu diesem Zeitpunkt noch nicht bekannten charakteristischen Reaktionszeiten und eventuell notwendiger Zeit für die Partikelverdampfung.

Die am häufigsten berechnete Reaktorgeometrie war das gerade Heizungsrohr mit der modifizierten Gasabfuhr (C). Die Ergebnisse zeigen, dass die Temperaturverteilung bei Verwendung von Helium als Trägergas, von der Strömungsgeschwindigkeit praktisch unabhängig ist, wie der Abbildung 8.11 zu entnehmen ist. Anders verhält es sich bei der Konzentration, hier sinkt bei kleineren Geschwindigkeiten der Massenanteil des Silan im Hauptstrom des Gases, wie die Abbildung 8.12 zeigt.

Zusammenfassend können die Ergebnisse der Simulationen wie folgt bewertet werden:

1. Die niedrige Wärmeleitfähigkeit von Argon senkt die Effizienz der Wandheizung bzw. erhöht die notwendige Baulänge. Um bei gleicher Reaktorlänge eine ähnliche Temperaturverteilung wie mit Helium zu erreichen, muss der Volumenstrom gesenkt werden.
2. Die Annahme eines transparenten Gases kann nur für niedrige Precursorkonzentrationen getroffen werden. Strahlungseinfluss auf eventuelle Partikel blieb ebenfalls unberücksichtigt.
3. Bei der gewählten Gaszuführung und Volumenstrom ist die Annahme rotations-symmetrischer Strömung gerechtfertigt.

Ein Teil der hier durchgeführten Berechnungen wurde zusätzlich mit dem kommerziellen CFD Programm FLUENT berechnet und mit Resultaten aus diesem Verfahren verglichen. Dabei zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse.

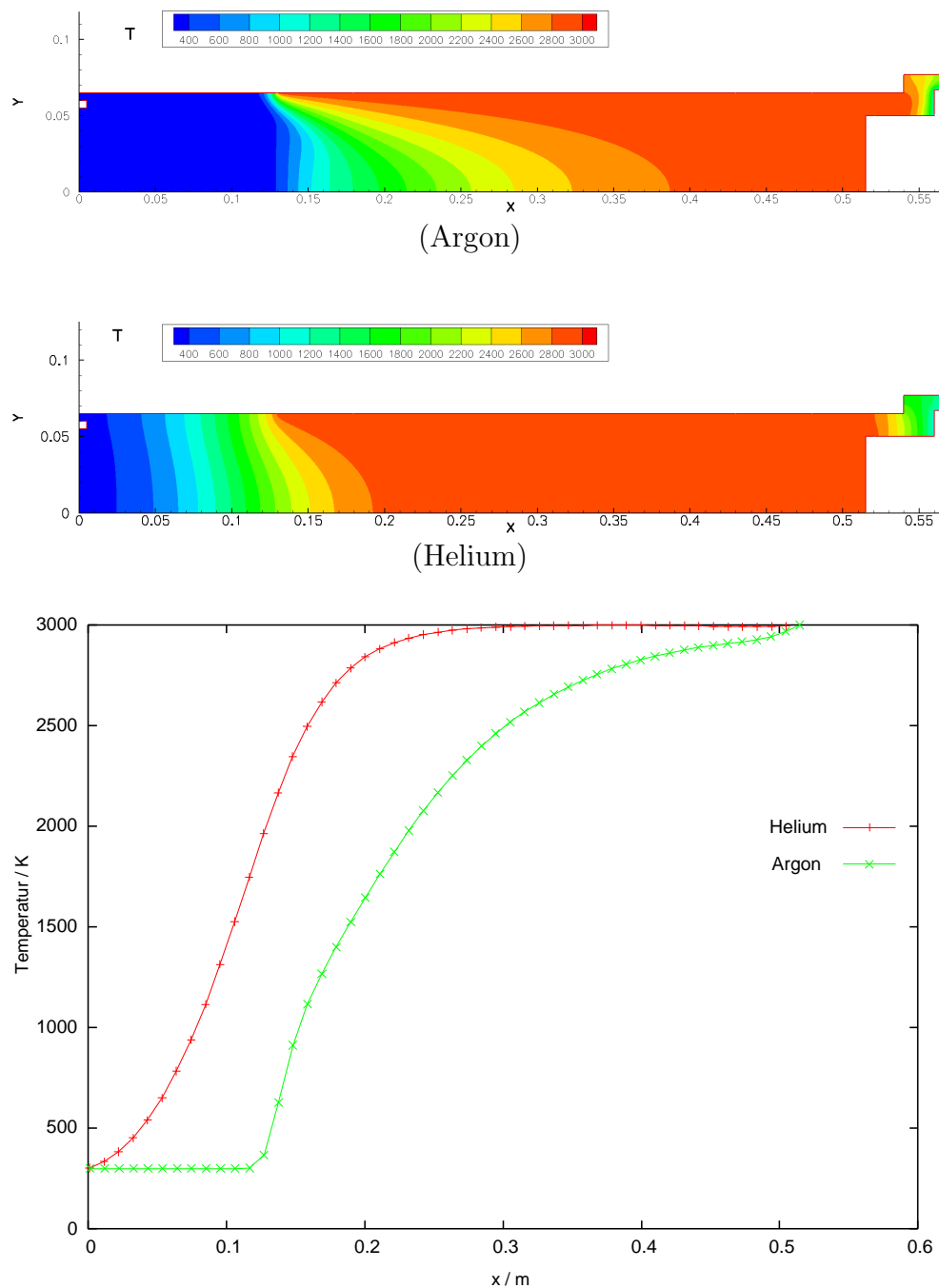


Abbildung 8.7: Temperaturverteilung im Reaktor bei Verwendung unterschiedlicher Inertgase Argon und Helium. Das untere Diagramm stellt den Temperaturverlauf für beide Trägergase längs der Symmetrieachse dar. Die Berechnung wurde für einen thermodynamische Druck $p^{(0)} = 0,2 \text{ bar}$ durchgeführt.

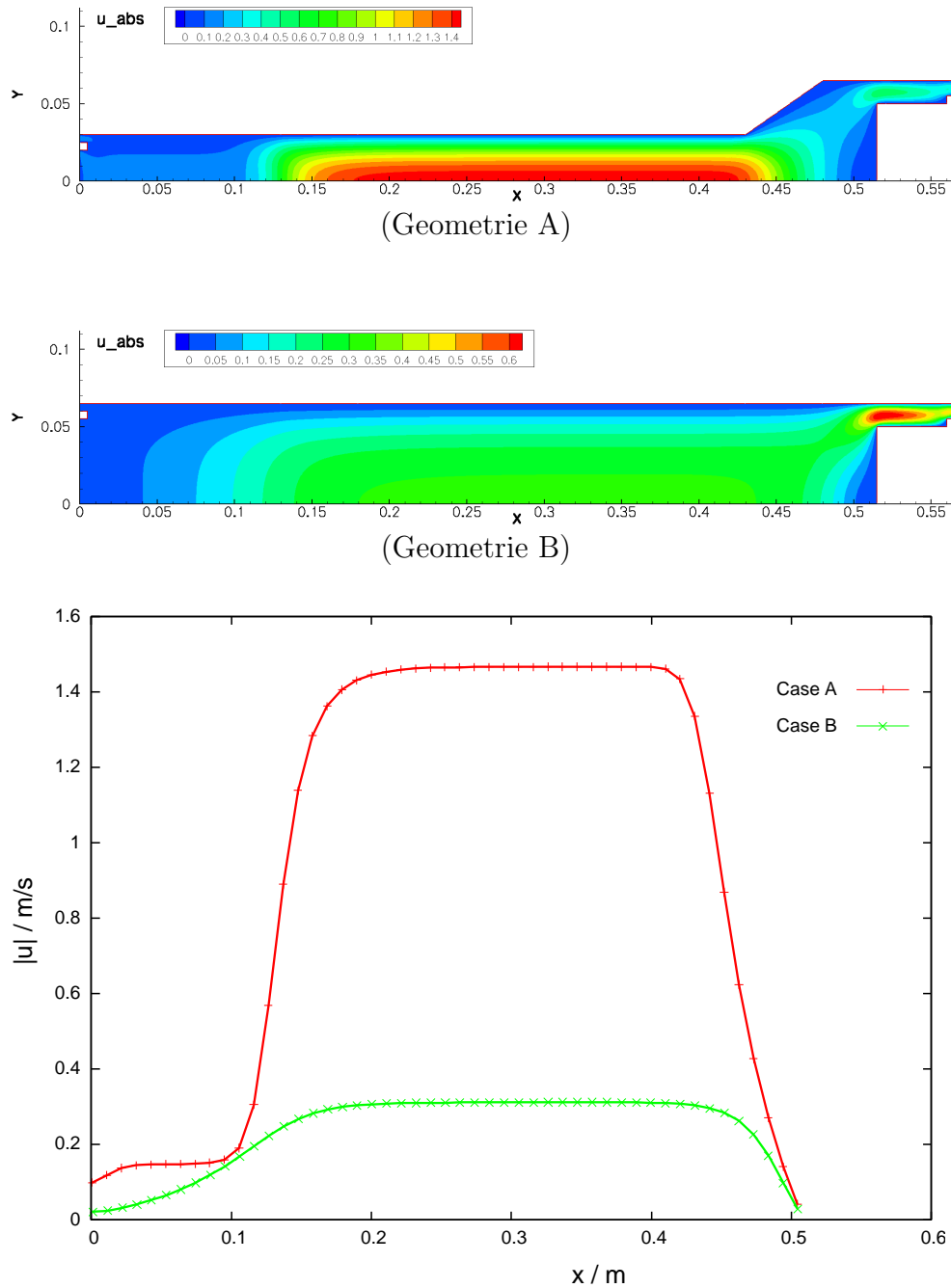


Abbildung 8.8: Betrag der Geschwindigkeit für die Geometrien A und B. Das unter Diagramm stellt die Entwicklung der Geschwindigkeit entlang der Symmetrieachse für beide Geometrien dar. Die Berechnung wurde für einen thermodynamischen Druck $p^{(0)} = 0,5\text{bar}$ durchgeführt.

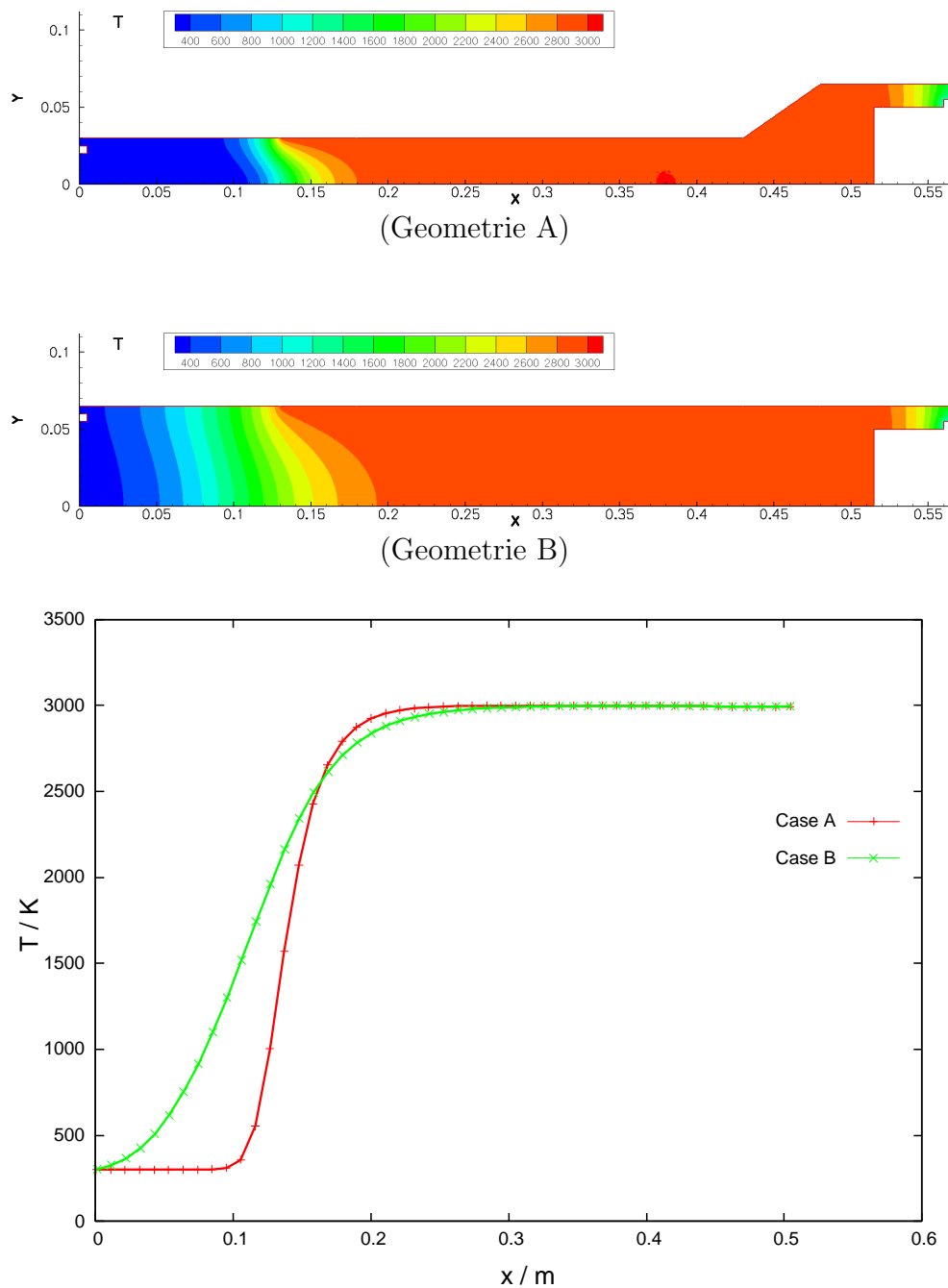


Abbildung 8.9: Temperaturverteilung in den Geometrien A und B. Das unter Diagramm stellt die Entwicklung der Temperatur entlang der Symmetrieachse für beide Geometrien dar. Die Berechnung wurde für einen thermodynamischen Druck $p^{(0)} = 0,5$ bar durchgeführt.

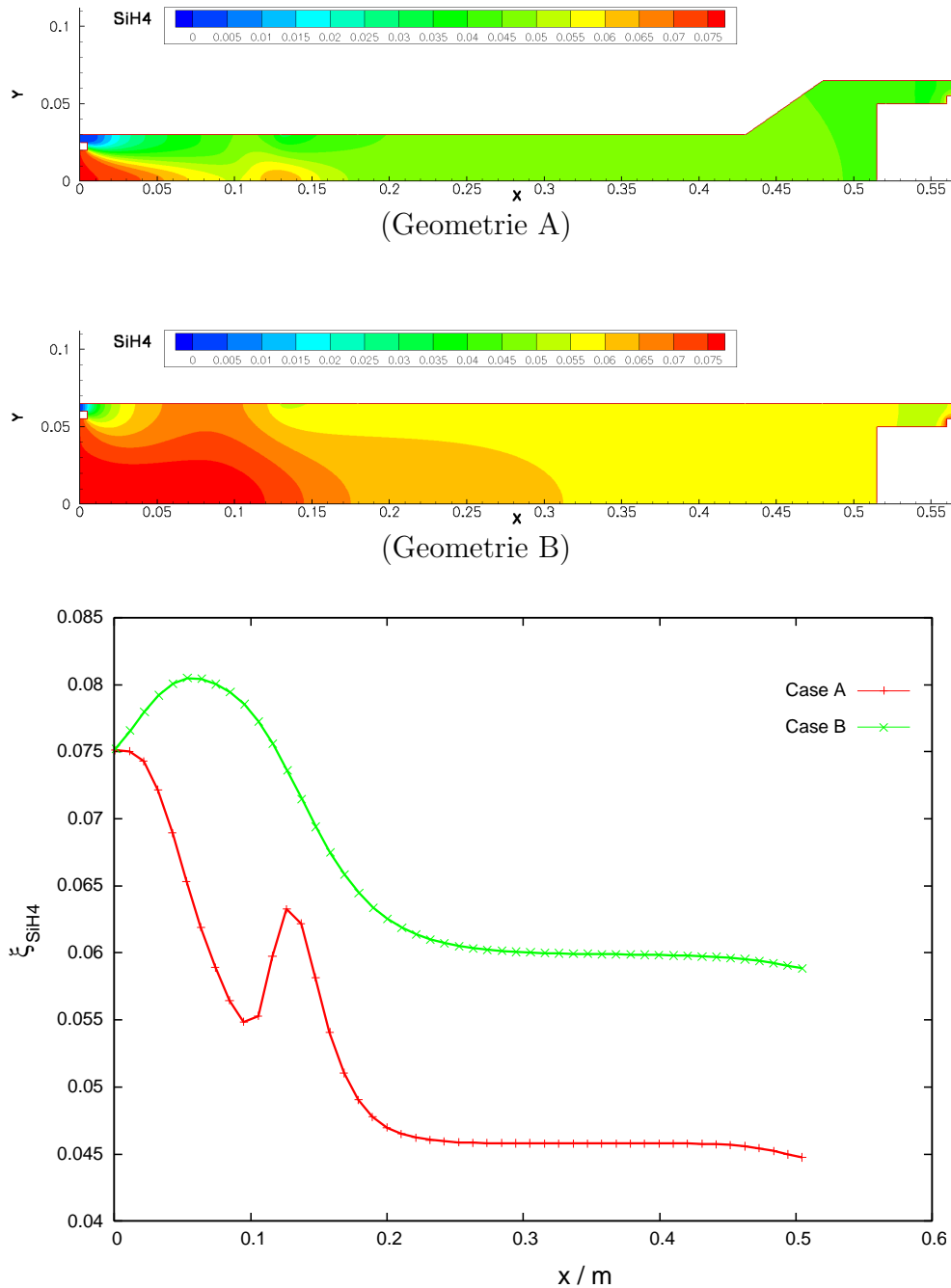


Abbildung 8.10: Massenbruch des Silan in den Geometrien A und B. Das unter Diagramm stellt die Entwicklung der massebezogenen Silankonzentration entlang der Symmetrieachse für beide Geometrien dar. Die Berechnung wurde für einen thermodynamischen Druck $p^{(0)} = 0,5 \text{ bar}$ durchgeführt.

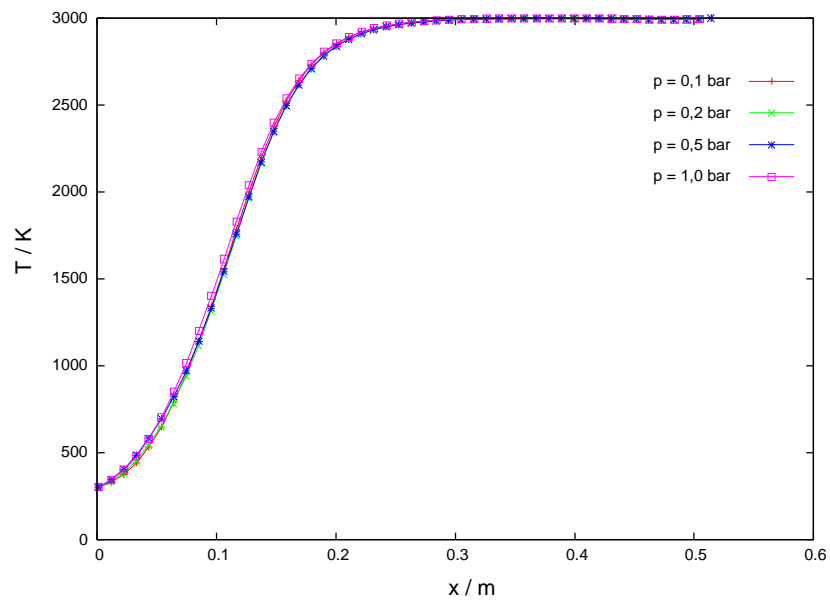


Abbildung 8.11: Temperaturentwicklung entlang der Symmetrieachse in der Geometrie C. Das Trägergas war Helium, die Berechnungen wurden für Drücke von $p^{(0)} = 0,1$ bar bis $p^{(0)} = 1,0$ bar durchgeführt.

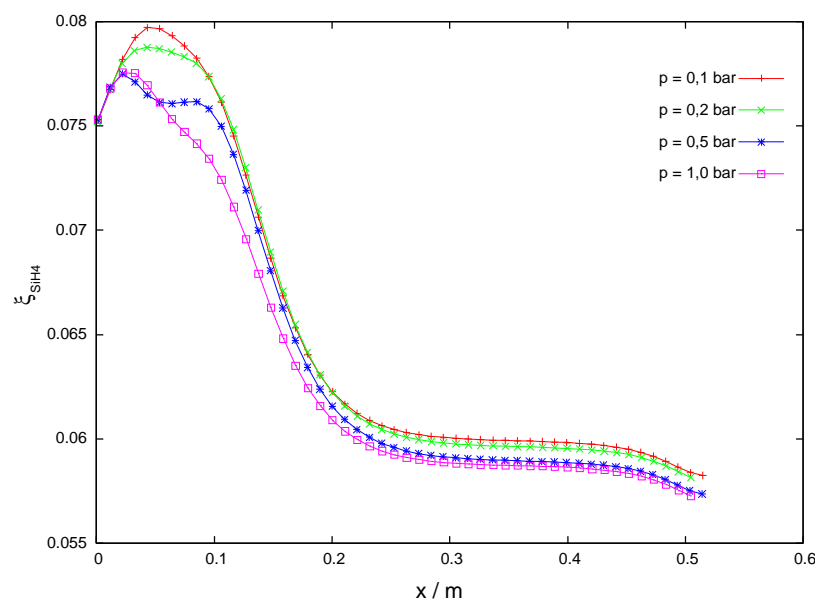


Abbildung 8.12: Verlauf der massebezogenen Konzentration entlang der Symmetrieachse in der Geometrie C. Das Trägergas war Helium, die Berechnungen wurden für Drücke von $p^{(0)} = 0,1$ bar bis $p^{(0)} = 1,0$ bar durchgeführt.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Die numerische Berechnung von reaktiver Mehrkomponenten-Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen ist von großer technischer Relevanz mit einer breiten Anwendungspalette, speziell in der Verfahrenstechnik. Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen zeichnen sich dadurch aus, dass die Dichte eine Funktion der Temperatur und der Zusammensetzung ist, dabei jedoch nur schwach oder gar nicht vom Druck abhängt. Insbesondere die Strömung in chemischen Synthesereaktoren steht hier im Mittelpunkt des Interesses. Aber auch offene Flammen, Klimatisierungsprobleme oder gänzlich inkompressible Strömungen können mit den hier vorgestellten numerischen Verfahren berechnet werden.

Das hier entwickelte Verfahren zeichnet sich durch eine hohe Robustheit und gleichzeitig durch eine Genauigkeit zweiter Ordnung im Ort und in der Zeit aus. Als Ausgangspunkt der Entwicklung diente ein Projektionsverfahren zur numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen eines inkompressiblen Fluides. Durch eine Neuformulierung der Divergenzbedingung für die Geschwindigkeit, beziehungsweise für den spezifischen Impuls, wurde es möglich, den Formalismus eines Druckkorrektur-Verfahrens auf Strömungen bei kleinen Mach-Zahlen und großen Dichteunterschieden anzuwenden. Die Zerlegung des Vektorfeldes, die allen Projektionsverfahren für inkompressible Fluide zugrunde liegt, ist jedoch bei nicht verschwindender Divergenz der Geschwindigkeit, beziehungsweise des spezifischen Impulses, nicht eindeutig. Daraus ergeben sich Unsicherheiten bezüglich der Gültigkeit der numerischen Lösung für instationäre Probleme bei zeitlicher Änderung der Dichte. Dieser Punkt muss zukünftig geklärt werden, da er die Grundlage dieser Klasse von Lösungsverfahren für Strömungen kleiner Mach-Zahlen berührt.

Die Basis des Verfahrens bildet eine Finite-Differenzen-Methode auf kartesischen Gittern. Die einfache Struktur der numerischen Algorithmen und der gut beherrschbare numerische Fehler sind ein großer Vorteil solcher Verfahren. Die Nachteile – aufwendige Verfeinerungsprozeduren anisotroper Strömungsdetails und die schwierige Formulierung geometrisch komplexer Körperländer – traten bei den hier behandelten Reaktorströmungen weniger in Erscheinung. Zur Vervollständigung des Algorithmus wurde dennoch eine Option zur hierarchischen Gitterverfeinerung in zwei Dimensionen umgesetzt, wobei

punkt-konform und nicht-konform überlagerte Gitterverfeinerungen möglich sind. Die Validierung des Gitterverfeinerungs-Algorithmus hat gezeigt, dass sowohl die Orts- als auch die Zeitgenauigkeit des Verfahrens erhalten bleiben. Die Ränder beliebig geformter Konturen, durch Polygonzüge oder komplexere Funktionen beschrieben, wurden mittels einer Boundary-Fitting Prozedur approximiert.

Im Rahmen einer ausführlichen Validierung wurde die Robustheit des vorgestellten Verfahrens für unterschiedliche Problemstellungen und die Genauigkeit im Ort und in der Zeit nachgewiesen. Die Effizienz des Verfahrens wurde unter anderem durch Vergleich mit Rechnungen mittels Lattice-BGK-Methoden überprüft. Obwohl die LBGK-Verfahren als besonders effizient gelten, konnte eine vergleichbare Leistung bei gleicher Genauigkeit erzielt werden.

Die Notwendigkeit zu einer Neuentwicklung des Lösungsverfahrens ergab sich während der Bearbeitung des von der DFG finanzierten Verbundprojektes „HN-Diamant“, da zu diesem Zeitpunkt keine vergleichbaren numerischen Verfahren zur Verfügung standen. Durch den erfolgreichen Einsatz der Strömungssimulation konnte zum Verstehen der Vorgänge in dem verwendeten Reaktor beigetragen werden. Die dort entwickelten Methoden wurden über die Projektlaufzeit hinaus kontinuierlich weiterentwickelt und um Details zur Modellierung von Transportprozessen und chemischer Reaktionen erweitert. Das Verfahren wurde daraufhin auch im vom Bundesministerium für Wirtschaft unterstützten Vorhaben „Energie-effiziente Züchtung defektarmer Siliziumkarbid-Kristalle (SiC) für Hochleistungsbauelemente“ erfolgreich zur Auslegung des geplanten Synthesereaktors eingesetzt. Gegenstand der Untersuchung waren hier die thermischen Verhältnisse im Reaktor hinsichtlich der Materialbelastung und der Auswahl geeigneter Prozess-Inertgase bei einem vorgegebenen Massenumsatz. Aufgrund der Simulation wurde die Reaktorgeometrie festgelegt und Argon als Inertgas ausgeschlossen. Desweiteren hat sich gezeigt, dass das hier entwickelte Verfahren eine konkurrenzfähige Alternative zu kommerziell vertriebenen Simulationsprogrammen auf der Basis des SIMPLE-Algorithmus ist.

A Kurze Einführung in die verwendete Vektornotation

Die meisten in dieser Arbeit verwendeten Formeln folgen der Einsteinschen Tensornotation. In diesem Anhang werden die verwendeten Vektor-Operationen, Integralsätze und Ableitungen kurz in Stichpunkten erklärt.

- Einsteinsche Index Notation

- Indices entsprechen den Ortskoordinaten ($i = 1, 2, 3$ im kartesischen, dreidimensionalen Raum (x, y, z)).
- Doppelt vorkommende Indizes in einem Produkt bedeuten Summation.

- Ortsvektor \mathbf{x}

Allgemein $\mathbf{x} = (r_1, r_2, \dots, r_i, \dots)$

Kartesisch $\mathbf{x} = (x, y, z)$

Zylindrisch $\mathbf{x} = (r, \Theta, z)$

- Einheitstensor, Einheitsmatrix \mathbf{I}

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 1 \end{bmatrix} = \overline{\overline{\mathbf{I}}} = (\delta_{ij})$$

- Kronecker-Delta δ_{ij}

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{if } i \neq j \\ 1 & \text{if } i = j \end{cases}$$

- Skalare Feldvariable φ (Temperatur, Druck, Dichte,...)

$$\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$$

- Vektorielle Feldvariable \mathbf{a} (Geschwindigkeit, Wärmestromdichte,...)

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \vec{a} = (a_i)$$

- Tensorielle Feldvariable \mathbf{A} (Spannungstensor, ...)

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \overline{\overline{\mathbf{A}}} = (A_{ij})$$

- Addition zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b}

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_x + b_x \\ a_y + b_y \\ a_z + b_z \end{bmatrix} = a_i + b_i$$

- Skalarprodukt zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b}

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = a_i b_i$$

- Vektorprodukt (Kreuzprodukt) zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b}

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_y b_z - a_z b_y \\ a_z b_x - a_x b_z \\ a_x b_y - a_y b_x \end{bmatrix}$$

- Dyadisches Produkt zweier Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b}

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_x b_x & a_x b_y & a_x b_z \\ a_y b_x & a_y b_y & a_y b_z \\ a_z b_x & a_z b_y & a_z b_z \end{bmatrix} = (a_i b_j)$$

- Tensor \mathbf{A} angewendet auf einen Vektor \mathbf{c}

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \begin{bmatrix} A_{xx} & A_{xy} & A_{xz} \\ A_{yx} & A_{yy} & A_{yz} \\ A_{zx} & A_{zy} & A_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{xx}c_x & A_{xy}c_y & A_{xz}c_z \\ A_{yx}c_x & A_{yy}c_y & A_{yz}c_z \\ A_{zx}c_x & A_{zy}c_y & A_{zz}c_z \end{bmatrix} = (A_{ij}c_j)$$

- Substantielle Ableitung $\frac{D}{Dt}$

$$\frac{D}{Dt} \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\text{grad } \varphi) \cdot \mathbf{v} \quad ; \quad \frac{D}{Dt} \mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v})\mathbf{v}$$

- Gauß'sches Integrationstheorem

$$\int_{\mathcal{V}} \operatorname{div} \mathbf{u} \, dV = \int_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dA$$

- Reynolds'sches Transporttheorem

$$\frac{D}{Dt} \Phi = \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \varphi(\mathbf{x}, t) \, dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \varphi(\mathbf{x}, t) \, dV + \int_{\mathcal{A}} \varphi(\mathbf{x}, t) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dA$$

B Differentialoperatoren in zylindrischen Koordinaten

Die Herleitung der Erhaltungsgleichungen in Zylinderkoordinaten erfolgte über die Anwendung der entsprechenden Differentialoperatoren auf die vollständigen Gleichungen in allgemeiner Form. Da die allgemeine Formulierung von der Wahl des Koordinatensystems unabhängig ist, ist dies der bequemste Weg zu den speziellen Gleichungen. Die Komponenten der verwendeten Differentialoperatoren sind im Folgenden für den Ortsvektor $\mathbf{r}^T = (r, \Theta, z)$ aufgeführt.

- Gradient eines Skalarfeldes φ

$$\nabla\varphi = \begin{bmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial\Theta} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial z} \end{bmatrix} = \text{grad } \varphi$$

- Gradient eines Vektorfeldes $\mathbf{a} = (a_r, a_\Theta, a_z)$

$$\nabla\mathbf{a} = \begin{bmatrix} \frac{\partial a_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial\Theta} - \frac{a_\Theta}{r} & \frac{\partial a_r}{\partial z} \\ \frac{\partial a_\Theta}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial a_\Theta}{\partial\Theta} + \frac{a_r}{r} & \frac{\partial a_\Theta}{\partial z} \\ \frac{\partial a_z}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial a_z}{\partial\Theta} & \frac{\partial a_z}{\partial z} \end{bmatrix} = \text{grad } \mathbf{a}$$

- Divergenz eines Vektorfeldes \mathbf{a}

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(r a_r)}{\partial r} + \frac{\partial a_\Theta}{\partial\Theta} \right) + \frac{\partial a_z}{\partial z} = \text{div } \mathbf{a}$$

- Divergenz eines Tensorfeldes \mathbf{A}

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(r A_{rr})}{\partial r} + \frac{\partial A_{r\Theta}}{\partial\Theta} \right) + \frac{\partial A_{rz}}{\partial z} - \frac{A_{\Theta\Theta}}{r} \\ \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(r A_{\Theta r})}{\partial r} + \frac{\partial A_{\Theta\Theta}}{\partial\Theta} \right) + \frac{\partial A_{\Theta z}}{\partial z} - \frac{A_{\Theta r}}{r} \\ \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(r A_{zr})}{\partial r} + \frac{\partial A_{z\Theta}}{\partial\Theta} \right) + \frac{\partial A_{zz}}{\partial z} \end{bmatrix} = \text{div } \mathbf{A}$$

- Laplace-Operator eines Skalarfeldes φ

$$\Delta\varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2\varphi}{\partial\Theta^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = \operatorname{div} \operatorname{grad} \varphi$$

- Laplace-Operator eines Vektorfeldes \mathbf{a}

$$\Delta\mathbf{a} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial a_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 a_r}{\partial\Theta^2} + \frac{\partial^2 a_r}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_\Theta}{\partial\Theta} - \frac{a_r}{r^2} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial a_\Theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 a_\Theta}{\partial\Theta^2} + \frac{\partial^2 a_\Theta}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_r}{\partial\Theta} - \frac{a_\Theta}{r^2} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial a_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 a_z}{\partial\Theta^2} + \frac{\partial^2 a_z}{\partial z^2} \end{bmatrix} = \operatorname{div} \operatorname{grad} \mathbf{a}$$

Die Komponenten der Erhaltungsgleichungen werden durch die Anwendung der aufgeführten Operatoren bestimmt. In dieser Arbeit werden die Zylinderkoordinaten verwendet, wenn ein Problem durch die Annahme einer Rotationssymmetrie reduziert werden kann. Dabei entfallen sowohl die Umfangskomponente a_Θ der entsprechenden Vektorfelder, als auch die Ableitungen $\frac{\partial}{\partial\Theta}$ in Umfangsrichtung.

C Grunddatentypen der hierarchischen Gitterverfeinerung

Die beschriebenen Anforderungen, wie die Unabhängigkeit vom Lösungsverfahren und der Ablauf der Zeitintegration, an das Gitterverfeinerungs-Verfahren erfordern die Bereitstellung problemangepasster Datentypen, die folgende Eigenschaften aufweisen:

- Die Blockbeschreibung muss eindeutig sein.
- Die Datenhaltung muss das Anlegen und Löschen von Blöcken ermöglichen.
- Die Überlappungsgebiete müssen für die Interpolations- und Datentransfer-Routinen in Listen erfasst sein.
- Erfassung und Darstellung der Geometrie soll mittels einer Randpunkt-Liste erfolgen.
- Eine Liste zur eindeutigen Abhängigkeitsbeschreibung eines Blocks muss bereitgestellt werden.

Zu diesem Zweck werden folgende Datentypen benötigt:

BlockDescription[M]

Der Datentyp `BlockDescription[M]` kann eine beliebige, zur Compile-Zeit festgelegte Zahl von Blöcken M aufnehmen. Dieser Datentyp enthält Angaben, die beim Anlegen des Blocks benötigt werden. Tabelle C.1 erklärt die Bedeutung der Einträge und gibt Auskunft über die Art wie der Eintrag erzeugt wird. Dabei wird unterschieden, ob ein Eintrag von „Außen“ durch die aufrufende Routine beim Erzeugen vorgegeben wird oder ob er dank der Abzählbarkeit des Gitters errechnet wird. Die Blöcke und die zugehörigen Listen werden entsprechend den Einträgen angelegt. Der erste Eintrag mit $M=0$ ist immer für den Basisblock reserviert.

CompanyTree[M]

Die Verkettung bzw. die Abhängigkeiten zwischen den Blöcken werden in dem Datentyp

Eintrag	Erklärung	Zeitpunkt
Boss	Zeiger (Adresse) auf den übergeordneten Block	anlegen
active	gibt an, ob der Eintrag einen aktiven Block enthält	anlegen
Level	beschreibt den Platz bzw. Ebene in der Hierarchie	anlegen
Kon	Angabe, ob ein Block punkt-konform ist	anlegen
angle	Winkellage bezüglich der globalen Koordinaten	anlegen
Reffactor	der Verfeinerungsfaktor relativ zum Boss	anlegen
$P_1 = (x_1, y_1)$	untere linke Ecke des Blocks in globalen Koordinaten	anlegen
$P_3 = (x_3, y_3)$	obere rechte Ecke des Blocks in globalen Koordinaten	anlegen
$(\Delta x, \Delta y)$	Ortsschrittweite	errechnet
Δt	Zeitschrittweite	errechnet
i_{\max}, j_{\max}	Knotenzahl in der lokalen (x,y)-Richtung	errechnet
N_{\max}	Zahl der auszuführenden Zeitschritte	errechnet
FTCL	Länge der FineToCoarse-Liste	errechnet
CTFL	Länge der CoarseToFine-Liste	errechnet

Tabelle C.1: Einträge im Datentyp `BlockDescription[M]`.

`CompanyTree[M]` gespeichert. So können die Adressen bestimmt werden, unter denen sich die übergeordneten Blöcke (als `Boss` bezeichnet) und deren eigene untergeordnete Blöcke (als `Employee` bezeichnet) in der Liste `BlockDescription[M]` finden. Theoretisch ist so eine Querverkettung möglich, das heißt ein Block kann aus mehreren unterliegenden beziehungsweise übergeordneten Gittern seine Daten beziehen. Diese Möglichkeit wurde zunächst ausgeschlossen, da keine dynamische Adaption implementiert wurde, die solche Fälle provozieren könnte.

`CoarseToFine[M][CTFL]`

Der Datentyp `CoarseToFine[M][CTFL]` enthält die notwendigen Angaben für eine Randwert-Initialisierung des aktuellen Blocks `M` mit den interpolierten Daten des ihm hierarchisch übergeordneten `Boss`-Blocks.

`FineToCoarse[M][FTCL]`

Der Datentyp `FineToCoarse[M][FTCL]` enthält eine Liste der Gitterpunkte des zugehörigen `Boss`-Blocks, die mit interpolierten Daten des aktuellen Blocks beschrieben werden. Er regelt den Transfer der verbesserten Lösung vom feinen an das unterliegende (in der Hierarchie übergeordnete), gröbere Gitter.

Algorithmus C.1 SolveOneBlock(M)

Berechne Gitterblock k in L_m

if $L_m = 0$ **then**

 berechne Δt_m

 berechne die Lösung für $(n_m + 1)$

if $L_m < L_{max}$ **then**

for all Gitterblöcke k in $(L_m + 1)$ **do**

if Gitterblock ist aktiv **then**

 Berechne Gitterblock k in $L_m = L_m + 1$

end if

end for

end if

else if $L_m > 0$ **then**

 Transferiere die Randwerte vom Gitterblock der Ebene $L_m - 1$

 berechne Δt_m

for $n = 1$ to $n \leq n_{max}$ **do**

 berechne die Lösung für $(n_m + 1)$

if $L_m < L_{max}$ **then**

for all Gitterblöcke k in $(L_m + 1)$ **do**

if Gitterblock ist aktiv **then**

 Berechne Gitterblock k in $L_m = L_m + 1$

end if

end for

end if

end for

 Transferiere die Lösung auf Gitterblock der Ebene $L_m - 1$

end if

Literaturverzeichnis

- [1] ALMGREN, A. ; BELL, J. ; COLELLA, P. ; HOWELL, L. ; WELCOME, M. *A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier-Stokes Equations*. 1998
- [2] BELL, J. ; COLELLA, P. ; GLAZ, H.: A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. In: *Journal of Computational Physics* 85 (1989), S. 257–283
- [3] BERGER, M. J. ; COLELLA, P.: Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics. In: *Journal of Computational Physics* 82 (1989), S. 67–84
- [4] BOTELLA, O. ; PEYRET, R.: Computations of Singular Solutions of the Navier-Stokes Equations using Chebyshev Collocation Method. 1996. – Forschungsbericht
- [5] BÜRKI, P.: *CO₂-Laser induzierte Gasphasensynthesen von Siliziumnitrid und Diamant*, Universität Bern, Diss., 1991
- [6] CHEN, S. ; WANG, Z. ; SHAN, X. ; DOOLEN, G. D.: Lattice BGK Models for the Navier-Stokes Equation. In: *J. Stat. Phys.* 68 (1992), S. 379
- [7] CHORIN, A. J.: A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems. In: *Journal of Computational Physics* (1967), Nr. 2(1), S. 12–26
- [8] CHORIN, A. J.: On the convergence of discrete approximations to the Navier-Stokes equations. In: *Mathematics of Computation* 23 (1969), S. 341–353
- [9] CHORIN, A. J. ; MARSDEN, J. E.: *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Texts in Applied Mathematics 4, Springer Verlag, 1990
- [10] COURANT, R. ; HILBERT, D.: *Methods of Mathematical Physics*. John Wiley and Sons, 1953
- [11] FERZIGER, J. H. ; PERIĆ, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 2002

- [12] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Lattice Boltzmann Simulation of Gas-Particle Flow in Filters. In: *Computers and Fluids* 26(7) (1997), S. 697
- [13] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Boundary Fitting and Local Grid Refinement for Lattice BGK Models. In: *Int. Journal of Modern Physics C* 9; N 8 (1998)
- [14] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Grid Refinement in Lattice-BGK models. In: *Journal of Computational Physics* 147 (1998), S. 219
- [15] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: A Novel Lattice BGK Approach for Low Mach Number Combustion. In: *Journal of Computational Physics* 158 (2000), S. 136–160
- [16] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D. ; WLOKAS, I.: Two Approaches for Reactive Flow at Low Mach Number. In: *16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn.* (1998)
- [17] FORSYTHE, G. E. ; MOLER, C. B.: *Computer Solutions of Linear Algebraic Systems*. Englewood, Cliffs : Prentice-Hall, 1967
- [18] FRENKLACH, M. ; BOWMAN, T. ; SMITH, G. ; GARDINER, B.: (2000)
- [19] FRISCH, U. ; HASSLACHER, B. ; POMEAU, Y.: Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. In: *Physical Review Letters* 56 (1986), S. 1505–1508
- [20] FRISCH, U. ; HASSLACHER, B. ; POMEAU, Y. ; D’HUMIERES, D. ; LALLEMAND, P. ; RIVET, J. P.: Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. In: *Complex Systems* 1 (1987), S. 649–707
- [21] GERATZ, K.J. ; KLEIN, R. ; MUNZ, C.D. ; ROLLER, S. *Multiple Pressure Variable (MPV) Approach for Low Mach Number Flows Based on Asymptotic Analysis*. 1996
- [22] GHIA, U. ; GHIA, K.N. ; SHIN, C.T.: High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. In: *Journal of Computational Physics* (1982), Nr. 48, S. 387–411
- [23] HÄNEL, D. ; BREUER, M.: A Dual Time-Stepping Method for 3-D, Viscous, Incompressible Vortex Flow. In: *Computer and Fluids* 22 (1993), S. 467–484
- [24] HÄNEL, D. ; LANTERMANN, U. ; KAISER, R. ; WLOKAS, I.: Generalized Lattice-BGK concept for thermal and chemically reacting flows at low Mach numbers. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (2006). – in Druck
- [25] HIRSCH, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows: Volume 1*. New York NY USA : John Wiley and Sons, 1995

- [26] HIRSCHFELDER, J. ; CURTIS, C. ; BIRD, R.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York NY USA : John Wiley and Sons, 1954
- [27] JAMESON, A. ; W., Schmidt ; TURKEL, E.: Numerical solution of the Euler equations by the finite volume method using Runge-Kutta time-stepping schemes. In: *AIAA 81* (1981), S. 1259
- [28] KEE, Rober J. ; COLTRIN, Michael E. ; GLARBORG, Peter: *Chemically Reacting Flow: Theory and Practice*. John Wiley and Sons, 2003
- [29] KLEIN, R.: Semi-Implicit Extension of a Godunov-Type Scheme Based on Low Mach Number Asymptotics I: One-Dimensional Flow. In: *Journal of Computational Physics* 121 (1995), S. 213–237
- [30] KORDINA, O. ; HALLIN, C. ; ELLISON, A. ; BAKIN, A. S. ; IVANOV, I. G. ; HENRY, A. ; YAKIMOVA, R. ; TOUMINEN, M. ; VEHANEN, A. ; JANZÉN, E.: High temperature chemical vapor deposition of SiC. In: *Applied Physics Letters* 69 (1996), S. 1456–1458
- [31] KORDINA, O. ; HALLIN, C. ; HENRY, A. ; BERGMAN, J. P. ; IVANOV, I. ; ELLISON, A. ; SON, N. T. ; JANZÉN, E.: Growth of SiC by “Hot-Wal” CVD and HTCVD. In: *Physica Status Solidi (B)* 202 (1997), S. 321
- [32] LEER, B. v.: Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov’s Method. In: *Journal of Computational Physics* 32 (1979), S. 397
- [33] LIOU, M-S. ; STEFFEN, C. J.: A new flux splitting scheme. In: *Journal of Computational Physics* 107 (1993), S. 23–29
- [34] MCBRIDE, B.J. ; GORDON, S. ; RENO, M.A.: Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species. NASA Report TM-4513, 1993. – Forschungsbericht
- [35] MEISTER, Andreas: Asymptotic Single and Multiple Scale Expansions in the Low Mach Number Limit. In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 60 (2000), Nr. 1, S. 256–271
- [36] NOELLE, S. ; ROSENBAUM, W. ; RUMPF, M.: An Adaptive Staggered Grid Scheme for Conservation Laws. In: *Int. Ser. of Numer. Math* 141 (2001)

- [37] NOELLE, S. ; ROSENBAUM, W. ; RUMPF, M.: Multidimensional Adaptive Staggered Grids. In: *Analysis and Numerics for Conservation Laws* (2005), S. 479–493
- [38] PATANKAR, V: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Washington, DC : Hemisphere, 1980
- [39] PATANKAR, V. ; SPALDING, D.: A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. In: *Journal of Heat Mass Transfer* 15 (1972), S. 1787–1807
- [40] PERIĆ, M. ; KESSLER, R. ; SCHEUERER, G.: Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and colocated grids. In: *Computers & Fluids* 16(4) (1988), S. 389
- [41] QIAN, Y. H. ; D'HUMIERES, D. ; LALLEMAND, P.: Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. In: *Europhys. Lett* 17(6) (1992)
- [42] QUIRK, J. J.: *An Adaptive Grid Algorithm for Computational Shock Hydrodynamics*. U.K., Cranfield Inst. of Technology, Diss., 1991
- [43] ROE, P.: Approximate Riemann Solvers, parameter vectors and difference schemes,” *Journal of Computational Physics*. In: *Journal of Computational Physics* 43/2 (1981), S. 357–372
- [44] ROLLER, S. ; MUNZ, C.-D. ; GERATZ, K.J. ; KLEIN, R.: The Multiple Pressure Variables Method for Weakly Compressible Fluids. (1996)
- [45] SCHÄFER, M. ; RANNACHER, R. ; TUREK, S. *Evaluation of a CFD Benchmark for Laminar Flows*
- [46] SCHWARZ, H. R.: *Numerische Mathematik*. Stuttgart : Teubner, 1988
- [47] STREHLOW, Roger A.: *Combustion Fundamentals*. McGraw-Hill Series in Energy, Combustion, and Environment, 1984
- [48] SVEHLA, R. A.: Transport Coefficients for the NASA Lewis Chemical Equilibrium Program. – Forschungsbericht
- [49] THILL, C.: *Numerische Berechnung von Aerosolströmungen mit anisotroper Gitteradaptation*, Diss., 1998
- [50] TUREK, S. *Recent Benchmark Computations of Laminar Flow Around a Cylinder*. 1996

-
- [51] TURKEL, E.: Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. In: *Journal of Computational Physics* (1987), Nr. 72, S. 277–298
- [52] VIOZAT, Cecile: Implicit Upwind Schemes for Low Mach Number Compressible Flows. 1997 (RR-3084). – Forschungsbericht
- [53] WEINAN, E. ; LIU, J.-G.: Vorticity boundary condition and related issues for finite difference schemes. In: *J. Comput. Phys.* 124 (1996), Nr. 2, S. 368–382. – ISSN 0021–9991
- [54] WIJNGAART, R. Van d.: *Composite Grid Techniques and Adaptive Mesh Refinement in Computational Fluid Dynamics*, Stanford University, Diss., 1990