

**Multidiffusive Konvektion mit Koagulation und Breakup —
Numerische Untersuchungen zur Erweiterung der
thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion auf veränderliche
Partikelgrößen**

Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von
Michael Pullmann
aus
Köln

Bonn 2003

Summary

This thesis reports on the conception, development and evaluation of an own, new approach to study thermo diffusive sedimentary convection systems for various particle sizes with integrated coagulation and break-up processes.

Thermo diffusive sedimentary convection (TDSC) systems describe the creeping flow of a suspension of a fluid with solid particles. Preceding studies of TDSC systems had shown the strong dependence of the resulting system states on the particle size. Extending the TDSC system to different particle sizes permits the analysis of this dependence. Moreover, the implementation of coagulation and break-up processes simulates dynamic changes of the particle size distribution.

We could examine an up to now in convection models unknown form of episodic system behaviour, which can be clearly separated from pulsatoric states by the temporary complete disappearance of convection. These newly discovered episodic states can be characterised through alternate periods of relatively short convective and considerably longer periods of non-convective system behaviour. During the non-convective phases, the particle size distribution is changed by coagulation and break-up processes in a way which causes triggering of convection. In a system-theoretical view, episodic system behaviour passes through qualitatively different phases, whereas phases of pulsatoric convection differ merely quantitatively.

The observed episodic system states can be understood as a consequence of different time scales of coagulation, break-up, and fluid flow processes. They can be proved not only for some break-up mechanisms but also for the variation of the coagulation probability on several orders of magnitude. Break-up mechanisms whose decay probabilities grow stronger than proportional with the volume are supplying most development possibilities to the convection system. Analysing the parameter dependence of the system states, we could reveal that the probability of coagulation has a comparable effect to the spreading of the scale of sink rate.

The enhanced convection model makes it possible to examine micro and macro scales of the development of system states in more detail. This was possible by the combination of a discrete with a continuous description of concentration by the use of density numbers of particles. The initial concept of a natural extension of the concentration boundary conditions of the original TDSC model had to be abandoned because otherwise the additionally enabled degree of freedom through adaption of the particle size distribution would have been annihilated.

The extension of the TDSC model towards variable particle sizes improves the understanding of the structure forming process of the sedimentary layering. We were able to build a scheme of the principal sequence of system states under an increase of settling rate. Apart from the formation of a new system state we could also detect modified mechanisms of emergence of well-known system states. The development of bimodal particle size distributions and thus the simultaneous preference of two relatively different particle sizes could be proved. For this reason we were able to contribute to improving the understanding of convective flows in the interior of the earth.

Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit ist die Konzeption, Entwicklung und Untersuchung eines neuen Ansatzes zum Studium thermo-diffusiv-sedimentärer Konvektionssysteme für verschiedene Partikelgrößenklassen mit integrierten Koagulations- und Breakup-Prozessen.

Thermo-diffusiv-sedimentäre Konvektionssysteme (TDSC) beschreiben die kriechende Strömung eines Suspensats aus einem Fluid mit festen Partikeln. Vorhergehende Studien von TDSC haben gezeigt, daß die sich einstellenden Systemzustände stark von der Partikelgröße abhängen. Die Erweiterung des TDSC-Systems auf unterschiedliche Partikelgrößen ermöglicht die Analyse dieser Abhängigkeit. Die Implementierung eines Koagulations- und eines Breakup-Prozesses gestattet es, dynamische Veränderungen der Partikelgrößenverteilung zu simulieren.

Bei den Untersuchungen konnte eine bislang in Modellen nicht bekannte Form episodischen Systemverhaltens nachgewiesen werden. Diese kann anhand des zwischenzeitlich vollständigen Absterbens der Konvektion eindeutig von den pulsatorischen Zuständen unterschieden werden. Episodischen Zustände sind somit durch abwechselnde Phasen von relativ kurzen konvektiven und relativ langen Phasen nicht-konvektiven Systemverhaltens gekennzeichnet. Während der letzteren wird die Partikelgrößenverteilung durch die Koagulations- und Breakup-Prozesse in einer Weise geändert, die das Einsetzen der Konvektion auslöst. Das episodische Systemverhalten durchläuft daher aus systemtheoretischer Sicht qualitativ verschiedene Phasen, während jene der pulsatorischen Konvektion sich lediglich quantitativ unterscheiden.

Die beobachteten episodischen Systemzustände können als eine Folge unterschiedlicher Zeitskalen von Koagulations- und Breakup-Prozessen auf der einen Seite und Fließprozessen auf der anderen Seite aufgefaßt werden. Sie konnten nicht nur für verschiedene Breakup-Mechanismen, sondern auch für eine Variation der Koagulationswahrscheinlichkeit über mehrere Größenordnungen nachgewiesen werden. Unter den Breakup-Mechanismen haben jene mit einer stärker als proportional zum Volumen wachsenden Zerfallswahrscheinlichkeit dem Konvektionssystem die meisten Entfaltungsmöglichkeiten eröffnet. Die Koagulationswahrscheinlichkeit selbst zeigt eine der Spreizung der Sinkgeschwindigkeitsskala vergleichbare Wirkung.

Das erweiterte Konvektionsmodell ermöglicht es, Mikro- und Makroskala der Ausprägung von Systemzuständen eingehender zu studieren. Dazu galt es eine Kombination aus einer diskreten mit einer Kontinuumsbeschreibung der Konzentration unter Verwendung von Partikelanzahldichten zu entwickeln. Das Vorhaben einer natürlichen Erweiterung der Konzentrationsrandwertbedingungen des TDSC-Modells mußte verworfen werden, da diese zumeist den Freiheitsgrad der Anpassung des Partikelgrößenspektrums aufhebt.

Die Erweiterung des TDSC-Modells auf veränderliche Partikelgrößen verbessert das Verständnis des Strukturbildungsprozesses der Schichtbildung. Es ist gelungen, ein Schema der prinzipiellen Abfolge der Systemzustände unter Erhöhung der Sedimentationsgeschwindigkeit zu erstellen. Neben der Ausbildung eines neuen Systemzustandes ließen sich auch veränderte Mechanismen der Entstehung bereits bekannter Systemzustände beobachten. Die Entwicklung bimodaler Partikelgrößenverteilungen und damit die Bevorzugung zweier relativ unterschiedlicher Partikelgrößen konnte nachgewiesen werden. Damit war es möglich, zu einem vertieften Verständnis der Konvektionsströmungen im Erdinneren beizutragen.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Motivation | 1 |
| 1.1 | Erforschung der Strukturbildung | 1 |
| 1.2 | Das Phänomen der Konvektion | 1 |
| 1.3 | Historische Untersuchungen zur Konvektion | 2 |
| 1.4 | Konvektionsprozesse in der Geodynamik | 3 |
| 1.5 | Theoretische Modelle der Konvektion | 5 |
| 1.6 | Vorgehensweise und Ziele dieser Arbeit | 7 |
| 1.7 | Aufbau der Arbeit | 8 |
| 2 | Mathematisches Modell | 9 |
| 2.1 | Grundlegende Modelle der Konvektion | 9 |
| 2.2 | Vorausgehende Arbeiten | 10 |
| 2.3 | Motivation des Differentialgleichungsansatzes | 11 |
| 2.4 | Konzentrationsmodell | 11 |
| 2.5 | Thermo-diffusiv-sedimentäre Konvektion | 12 |
| 2.5.1 | Motivierung der Gleichungen | 12 |
| 2.5.1.1 | Massenerhaltung | 12 |
| 2.5.1.2 | Impulserhaltung | 16 |
| 2.5.1.3 | Energieerhaltung | 17 |
| 2.5.2 | Vereinfachungen | 17 |
| 2.5.2.1 | BOUSSINESQ-Näherung | 18 |
| 2.5.2.2 | Entdimensionierung der Gleichungen | 19 |
| 2.5.2.3 | Einführung einer Stromfunktion | 20 |
| 2.6 | Randwertbedingungen | 22 |
| 2.7 | Erweiterung auf Partikel veränderlicher Größe | 25 |
| 2.7.1 | Motivierung | 25 |
| 2.7.2 | Erweiterung auf unterschiedliche Partikelgrößen | 26 |
| 2.7.3 | Veränderung der Partikelgrößenverteilung | 26 |
| 2.7.3.1 | Koagulation | 27 |
| 2.7.3.2 | Breakup | 29 |
| 2.8 | Modifizierung der Randwertbedingungen | 31 |
| 2.9 | Koagulation und Fließfeld | 33 |
| 2.10 | Unterschiede zur thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion | 33 |
| 2.11 | Wechselwirkungen des erweiterten TDSC-Modells | 35 |
| 3 | Numerische Realisierung | 37 |
| 3.1 | Motivierung | 37 |
| 3.2 | Diskretisierung | 37 |
| 3.3 | Randwertbedingungen | 39 |
| 3.4 | Anfangswertbedingungen | 42 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.5 | Implementierung | 43 |
| 3.5.1 | Automatische Zeitschrittweitensteuerung des Systems | 44 |
| 3.5.2 | Parabolische Gleichungen | 45 |
| 3.5.2.1 | Upwind-Schema | 45 |
| 3.5.2.2 | Flux-Corrected-Transport | 46 |
| 3.5.2.3 | Charakteristiken-Verfahren | 47 |
| 3.5.3 | Elliptische Gleichungen | 48 |
| 3.5.3.1 | Konventionelle Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme | 48 |
| 3.5.3.2 | Mehrgitter-Verfahren | 52 |
| 3.5.4 | Koagulationsgleichung | 57 |
| 3.5.5 | Breakup-Gleichung | 62 |
| 3.5.5.1 | Anpassung an die logarithmisch diskretisierte Volumeneinteilung | 62 |
| 3.5.5.2 | Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit von der Partikelgröße | 63 |
| 3.6 | Validierung des numerischen Codes der Implementierung | 64 |
| 3.6.1 | Analytische Tests | 65 |
| 3.6.2 | Benchmark-Tests | 67 |
| 4 | Ergebnisse | 69 |
| 4.1 | Untersuchungsmethode | 69 |
| 4.2 | Erklärung der Beobachtungsgrößen | 69 |
| 4.3 | Definition der Kenngrößen | 70 |
| 4.4 | Vorausgehende Untersuchungen | 71 |
| 4.5 | Modifikation der horizontalen Konzentrationsrandwertbedingungen | 71 |
| 4.6 | Koagulations- und Breakup-Wahrscheinlichkeit | 74 |
| 4.6.1 | Notwendigkeit und Ziele einer Parameterstudie | 74 |
| 4.6.2 | Klassenabhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit | 74 |
| 4.6.3 | Untersuchung der Parameterbereiche | 75 |
| 4.7 | Die sich einstellenden Systemzustände | 79 |
| 4.7.1 | Keine Konvektion | 80 |
| 4.7.2 | Quasistationäre Konvektion | 81 |
| 4.7.3 | Periodische Konvektion | 82 |
| 4.7.4 | Pulsatorische Konvektion | 83 |
| 4.7.5 | Chaotisches Systemverhalten | 85 |
| 4.7.6 | Episodische Konvektion | 86 |
| 4.8 | Einfluß der Partikelgrößenverteilung auf das Systemverhalten | 89 |
| 4.8.1 | Quasistationäre Konvektion nach nicht-konvektivem Systemverhalten | 89 |
| 4.8.2 | Auftreten bimodaler Partikelgrößenverteilungen | 92 |
| 4.9 | Systematik der Systemzustände | 94 |
| 4.10 | Untersuchungen zur Parameterabhängigkeit der Systemzustände | 99 |
| 4.10.1 | Abhängigkeit von der Koagulationswahrscheinlichkeit | 99 |
| 4.10.2 | Abhängigkeit von der Breakup-Wahrscheinlichkeit | 100 |
| 4.10.3 | Abhängigkeit von der Sedimentationsgeschwindigkeit | 100 |
| 4.10.4 | Abhängigkeit von der LEWIS-Zahl | 102 |
| 4.10.5 | Abhängigkeit von der Dichtezahl | 102 |

| | |
|--|------------|
| 5 Diskussion | 103 |
| 5.1 Zusammenfassung | 103 |
| 5.2 Geophysikalische Anwendungsmöglichkeiten | 104 |
| 5.3 Ausblick | 105 |
| Literaturverzeichnis | 107 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|----------|--|----|
| 3 | Numerische Realisierung | |
| 3.1 | Randwertbedingungen des konventionellen TDSC-Modells | 39 |
| 3.2 | Randwertbedingungen des erweiterten TDSC-Modells | 40 |
| 3.3 | Analytische Tests für unterschiedliche Diskretisierungen | 66 |
| 3.4 | Benchmark-Ergebnisse | 68 |
| 4 | Ergebnisse | |
| 4.1 | Eigenschaften der Dominanzbereiche | 79 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|----------|--|----|
| 1 | Motivation | |
| 1.1 | Hexagonale Basaltsäulen infolge Zellularkonvektion an Erstarrungsfronten . . . | 3 |
| 1.2 | Zellenstruktur bei Konvektion unter freien Oberfläche bzw. bei durch eine Platte begrenzter Oberfläche | 4 |
| 1.3 | Hexagonale Ablagerungsstrukturen infolge Zellularkonvektion im Salzsee bzw. Sodasee | 4 |
| 1.4 | Strukturierung der Sonnenoberfläche | 5 |
| 1.5 | Diagramm des Verhaltens eines thermo-diffusiv-sedimentären Konvektionssystems unter Erhöhung der Sedimentationsgeschwindigkeit | 6 |
| 2 | Mathematisches Modell | |
| 2.1 | Schema der rein thermisch getriebenen Konvektion | 9 |
| 2.2 | Geometrie des Modellierungsgebietes Ω und Wahl des Koordinatensystems . . . | 23 |
| 2.3 | Randwertbedingungen des TDSC-Modells für Temperatur und Konzentration . | 23 |
| 2.4 | Randwertbedingungen des TDSC-Modells für Stromfunktion und Vortizität . . | 24 |
| 2.5 | Closed-box-Szenario bezüglich der Konzentrationsrandwertbedingungen des erweiterten TDSC-Modells | 32 |
| 2.6 | Schematische Darstellung der Wechselwirkungen des erweiterten TDSC-Modells | 35 |
| 3 | Numerische Realisierung | |
| 3.1 | Benutzung versetzter Gitter für die Feldgrößen | 38 |
| 3.2 | Randwertbedingungen des konventionellen und des erweiterten TDSC-Modells . | 40 |
| 3.3 | Geisterzellen zur Realisierung der Randwertbedingungen | 41 |
| 3.4 | Realisierung der Randwertbedingungen mittels Geisterzellen am Beispiel der Temperatur | 41 |
| 3.5 | Schießverfahren zur Bestimmung der klassenabhängigen anfänglichen Konzentrationsverteilung | 43 |
| 3.6 | Erläuterung des Stabilitätskriteriums | 44 |
| 3.7 | Gittervergrößerung | 53 |
| 3.8 | Prolongation eines Vektors vom gröberen Gitter Ω^{2h} auf das feinere Gitter Ω^h . | 54 |
| 3.9 | Restriktion eines Vektors vom feineren Gitter Ω^h auf das gröbere Gitter Ω^{2h} unter full weighting | 55 |
| 3.10 | Verschiedene Mehrgitter-Zyklen | 56 |
| 3.11 | Klasseneinteilung zur Volumendiskretisierung | 58 |
| 3.12 | Zuordnung des Volumens zweier koagulierter Partikel anhand der Repräsentanten der beteiligten Klassen | 60 |
| 3.13 | Anwendung der Koagulationsgleichung auf eine GAUSS-Verteilung | 61 |
| 3.14 | Wachstum der mittleren Partikelgröße und Ausdünnung einer Klasse mit der Zeit | 62 |

| | | |
|----------|--|-----|
| 4 | Ergebnisse | |
| 4.1 | Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl | 70 |
| 4.2 | Parameterbereiche für die Koagulations- und die Breakup-Wahrscheinlichkeit bei partikelgrößenklassen-unabhängiger Breakup-Wahrscheinlichkeit | 76 |
| 4.3 | Parameterbereiche für die Koagulations- und die Breakup-Wahrscheinlichkeit bei Skalierung der Breakup-Wahrscheinlichkeit mit dem Volumen | 77 |
| 4.4 | Parameterbereiche für die Koagulations- und die Breakup-Wahrscheinlichkeit bei stärker als das Volumen wachsender Breakup-Wahrscheinlichkeit | 78 |
| 4.5 | Keine Konvektion | 80 |
| 4.6 | Quasistationäre Konvektion | 81 |
| 4.7 | Quasistationäre Partikelgrößenverteilung | 82 |
| 4.8 | Periodische Konvektion | 82 |
| 4.9 | Periodische Partikelgrößenverteilung | 83 |
| 4.10 | Pulsatorische Konvektion | 84 |
| 4.11 | Pulsatorische Partikelgrößenverteilung | 84 |
| 4.12 | Chaotisches Systemverhalten | 85 |
| 4.13 | Chaotische Partikelgrößenverteilung | 86 |
| 4.14 | Episodisches Systemverhalten | 87 |
| 4.15 | Episodische Partikelgrößenverteilung | 88 |
| 4.16 | Quasistationäre Konvektion nach Oszillation | 89 |
| 4.17 | Mittlere Fluidgeschwindigkeit und effektive LEWIS-Zahl | 90 |
| 4.18 | Partikelgrößenverteilung eines Einklassenfalls | 90 |
| 4.19 | Stabilität der Oszillationsperiodizität | 91 |
| 4.20 | Bimodale Partikelgrößenverteilung | 93 |
| 4.21 | Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl für verschiedene Sinkgeschwindigkeiten | 95 |
| 4.22 | Abhängigkeit der zeitlichen Entwicklung des Wärmetransportes von der Sinkgeschwindigkeit | 96 |
| 4.23 | Diagramm des prinzipiellen Verhaltens eines auf veränderliche Partikelgrößen erweiterten Konvektionssystems unter Erhöhung der Sedimentationsgeschwindigkeit | 97 |
| 4.24 | Nicht-konvektiver Bereich zwischen episodischen und periodischen Systemzuständen | 98 |
| 4.25 | Vergrößerung des zeitlichen Abstandes und Abnahme der Amplitude bei episodischen Ereignissen | 101 |

1 Motivation

Dieses Kapitel führt in den Forschungsgegenstand ein und motiviert die gewählte Fragestellung. Es zeigt auf, daß die Erforschung von Konvektionsphänomenen das Verständnis von Strukturbildungsprozessen, die selbst Einblicke in naturwissenschaftliche Gesetzmäßigkeiten gewähren, verbessert.

Nach einem Abriß historischer Untersuchungen zur Konvektion werden einige in der Geodynamik untersuchte Konvektionsprozesse exemplarisch aufgeführt. Anschließend wird der Nutzen theoretischer Modelle erläutert, bevor einige gängige Konzepte skizziert werden.

Schließlich werden die im Rahmen dieser Arbeit gewählte Vorgehensweise aufgezeigt, ihre Ziele dargelegt und der Aufbau dieses Forschungsberichtes geschildert.

1.1 Erforschung der Strukturbildung

Die letzten Jahrhunderte waren wie kaum eine Zeit zuvor von naturwissenschaftlichen Fragestellungen geprägt. Als grundlegend für unser heutiges Wissenschaftsverständnis hat sich dabei die Erforschung von Gesetzmäßigkeiten erwiesen. Tiefgehende Einsichten erbrachte vor allem die Untersuchung der verschiedensten Aspekte von Strukturbildungsprozessen. Diese eröffnen Einblicke in die naturwissenschaftlichen Voraussetzungen und Bedingungen, denen unsere Welt und alles Leben in ihr folgt. Strukturbildungsprozesse umfassen nahezu alle Lebensbereiche, seien es jene der materiellen Grundlagen unserer Existenz (Wie bildeten sich aus der „Urmaterie“ so hochkomplizierte Strukturen wie die unserer Welt?) oder auch jene des Lebens (Welches sind die strukturellen Voraussetzungen für Leben?) an sich.

Auch wenn diese Fragestellungen angesichts der Komplexität der Problematik vermessen erscheinen, so basieren weite Teile des wissenschaftlichen Erkenntnisfortschrittes auf der Einsicht, daß bereits das Studium von Teilproblemen verständnisfördernd sein kann. Dieses läßt sich anhand kleiner, in sich geschlossener Systeme realisieren, die experimentell reproduzierbar sowie theoretisch faßbar sein sollten.

Die Geodynamik interessiert sich vorrangig für die physikalischen Grundlagen der Erdentstehung und -entwicklung. Strukturbildungsprozesse werden dabei unter anderem im Rahmen der Konvektionsforschung untersucht. Diese widmet sich zumeist Prozessen im Erdinneren, die der Beobachtung nicht direkt zugänglich sind und daher vorwiegend mittels mathematisch-physikalischer Modelle behandelt werden müssen.

1.2 Das Phänomen der Konvektion

Konvektion ist ein grundlegender und allgegenwärtiger Prozeß unserer Welt. Die gleichmäßige Verteilung der Luft in unseren Lungen ist ebenso wie das Wettergeschehen der Erde und die Ausdifferenzierung ganzer Planeten eng mit ihr verbunden. Über die Schaffung eines lebensfreundlichen Umfeldes hat sie somit direkten Bezug zu den uns bekannten Formen des Lebens. Konvektionsprozesse treten damit auf allen für den Menschen relevanten Größenskalen auf, indem sie sowohl im Mikrokosmos als auch in stellaren Dimensionen anzutreffen sind.

Allgemein läßt sich sagen, daß unter *Konvektion* das Mitführen einer physikalischen Eigenschaft oder Größe infolge der Bewegung des Trägers dieser Eigenschaft verstanden wird. Dieses kann beispielsweise die elektrische Ladung (Ladungskonvektion) oder thermische Energie (Energie- bzw. Wärmekonvektion) sein.

Viele Vorgänge in der Natur gehen mit einem Transport bzw. der Umverteilung von Energie einher. Diese kann beispielsweise durch Wärmestrahlung, Wärmeleitung oder Wärmedissipation erfolgen. Konvektion kennzeichnet dabei eine materiegebundene Form des Energietransports, bei der der Transport von (Wärme-)Energie an die Strömung eines Mediums gebunden ist. Bedingen äußere Kräfte (z. B. Pumpe, Gebläse) die Strömung, so wird diese als *erzwungene Konvektion* bezeichnet. In der Technik spielt die erzwungene Konvektion eine bedeutende Rolle. Sie ist beispielsweise Grundlage der Wärmepumpe.

Bei der *freien Konvektion* stellt sich eine Strömung vor allem als Folge von Dichteunterschieden ein. Die Dichte flüssiger und gasförmiger Körper hängt unter anderem von ihrer Temperatur ab. In der Regel sinkt diese bei zunehmender Temperatur, die Stoffe werden spezifisch leichter. So steigt beispielweise erwärmte Luft, wenn sie von kälterer umgeben ist, entgegen der Schwerkraft nach oben. Konvektionsströmungen entstehen also in Gasen oder Flüssigkeiten, wenn sich Dichte- oder Temperaturunterschiede ausgleichen. Freie Konvektion spielt beispielsweise eine entscheidende Rolle bei der Entwicklung des Wetters (z. B. Luftbewegungen in der Atmosphäre, Passatwinde, Strömungen in den Ozeanen), der Entstehung von Schlieren beim Erwärmen einer Flüssigkeit oder dem Trocknen einer Lackschicht.

1.3 Historische Untersuchungen zur Konvektion

Konvektionsphänomene wurden erstmalig von dem englischen Mikroskopbauer CROMWELL FLEETWOOD VARLEY im Jahre 1836 anhand verdunstender Flüssigkeiten beschrieben. Dazu hatte er unter dem Mikroskop Flüssigkeitsfilme mit fein geriebener Kohle versetzt. Im Jahre 1855 beschrieb E. H. WEBER mosaikartige Strukturen in einem verdunstenden Alkohol-Wasser-Gemisch. Fälschlicherweise versuchte er jedoch, die beobachtete Flüssigkeitszirkulation durch elektrische Phänomene zu erklären. JAMES THOMSON gab schließlich im Jahre 1882 eine akzeptable Erklärung des Phänomens, indem er Temperaturgradienten als Ursache der treibenden Kräfte ausmachte.

Im Jahre 1901 veröffentlichte H. BÉNARD die auf heuristischem Wege gewonnene, richtige Erklärung für die Flüssigkeitsbewegung, nach der Gradienten in der Oberflächenspannung eine Kraft erzeugen, die die Flüssigkeit zur Seite mitzieht (siehe beispielsweise [Velarde/Normand 1980]).

JOHN WILLIAM STRUTT, der spätere LORD RAYLEIGH, untersuchte 1916 die dynamischen Grundlagen der Konvektionsbewegungen. Ausgehend von der Annahme, daß nicht die Gradienten in der Oberflächenspannung, sondern die durch die angelegten Temperaturgradienten hervorgerufenen Dichteunterschiede die Bewegung antrieben, entwickelte er eine Theorie, die eine Kennzahl für die Parameter, oberhalb derer Konvektion einsetzt, zu definieren gestattete. Seine Untersuchungen basierten dabei bereits auf den drei Grundgleichungen der Hydrodynamik, die selbst jeweils aus einem physikalischen Erhaltungssatz folgen.

Heute werden mit RAYLEIGH-BÉNARD-Konvektion all diejenigen Prozesse bezeichnet, bei denen die Flüssigkeitsbewegungen durch die räumliche Änderung der Fluidichte aufgrund ihrer Temperaturabhängigkeit angetrieben werden. Das von BÉNARD untersuchte Phänomen, bei dem die durch Temperaturgradienten hervorgerufenen Oberflächenspannungsgradienten die Bewegung bedingen, bezeichnet man dagegen als MARANGONI-Konvektion.

1.4 Konvektionsprozesse in der Geodynamik

Die bei Konvektion auftretenden Massenströme führen zu zahlreichen, in der Natur beobachtbaren und unsere Lebensumstände mitbestimmenden Prozessen. Konvektion beeinflusst jedoch nicht nur das Wettergeschehen der Erde¹ (z. B. durch die Thermik oder durch die Oberflächen- und Tiefseeströmungen der Weltmeere), sondern das nahezu aller Planeten, die eine Atmosphäre über einem auskühlenden Kern haben. Bei der Auskühlung des Planetenkerns stellt sie den bedeutendsten Prozeß dar und bedingt vielfältige geomorphologische Erscheinungen, wie Vulkanismus, Erdbeben, Gebirgsaufaltung und Grabenbildung. Diese natürlichen Vorgänge lassen sich alle als Folgen der für die Kontinentaldrift² verantwortlichen Plattentektonik auffassen.

Ursache der großskaligen Mantelkonvektion sind thermische und chemische Dichtegradienten, die sich über die gesamte Manteltiefe erstrecken können. Die Kenntnis der dabei im Erdmantel ablaufenden petrologischen, chemischen und thermischen Prozesse vertieft daher das Verständnis der Erdentwicklung.

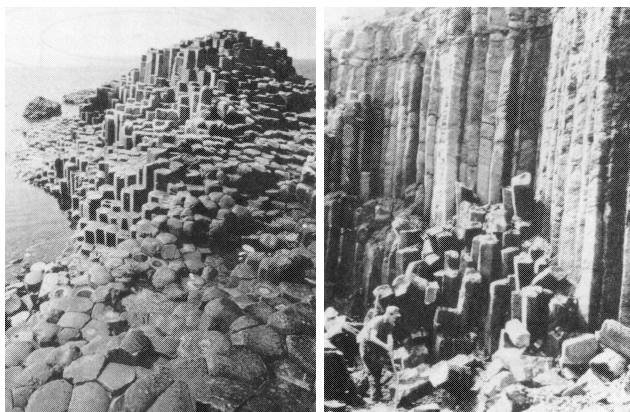


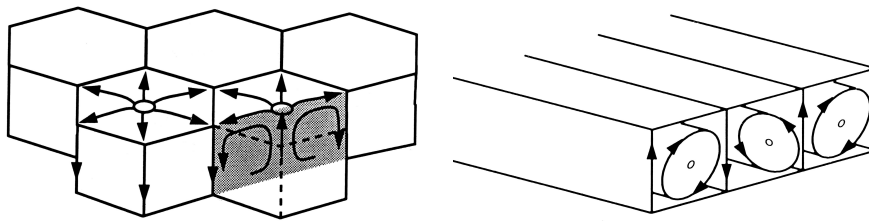
Abbildung 1.1: Hexagonale Basaltsäulen infolge Zellularkonvektion an Erstarrungsfronten (aus [Oertel/Delfs 1996])

Konvektion und gravitative Differentiation sind zudem in vielen weiteren geophysikalischen Systemen die dominierenden Faktoren, die die zeitliche und räumliche Struktur der in Erscheinung tretenden Prozesse bestimmen:

- Der Erdkern ist teilweise durch gravitative Differentiationsprozesse aus der sogenannten *primären Erde* (Protoerde) entstanden. Konvektion ermöglicht dabei bis heute den schnellen und effektiven Transport von Wärmeenergie an die Erdoberfläche.
- Magmaozeane entstanden möglicherweise in der Akkretionszeit der Erde durch die in Wärme umgesetzte potentielle Energie bei der Entstehung des Erdkerns und durch die auf die Protoerde einschlagenden Planetesimale [Melosh 1990]. Differentiationsprozesse führten zur chemischen Differenzierung des Mantels (gravitative Fraktionierung von Kristallen und Schmelze).

¹In der Meteorologie ist *Konvektion* die Bezeichnung für eine vertikale Luftbewegung. *Advektion* bezeichnet im Gegensatz dazu die Heranführung von Luftmassen in vorwiegend horizontaler Richtung.

²Die Drift der Kontinente, welche von ALFRED WEGENER 1912 als Hypothese zur Erklärung von Ähnlichkeiten in geologischen Strukturen, Flora und Fauna zwischen Europa und Afrika einerseits und Amerika andererseits aufgestellt wurde, gilt heute als vorherrschendes Modell zur Erklärung der vielfältigen geodynamischen Prozesse auf der Erdoberfläche. Als Ursache der Kontinentaldrift werden dabei die Konvektionsströmungen im Erdmantel angesehen.



(a) Unter freier Oberfläche bilden sich hexagonale Konvektionszellen aus.

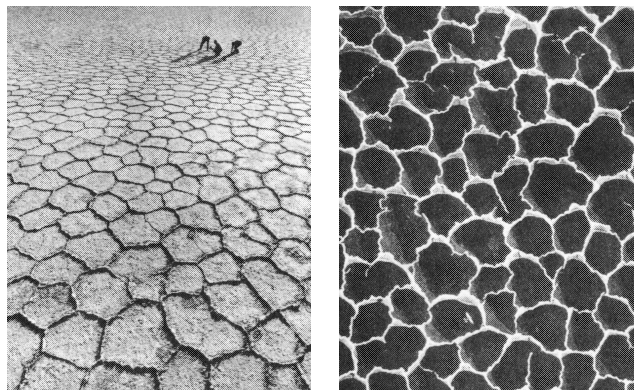
(b) Eine Begrenzung der Oberfläche bedingt horizontal gestreckte Konvektionsrollen.

Abbildung 1.2: Zellenstruktur bei Konvektion unter freier Oberfläche bzw. durch eine Platte begrenzter Oberfläche (aus [Oertel/Delfs 1996]). Die Elementarzellen sind stets so angeordnet, daß Strömungen mit unterschiedlichem Drehsinn aneinander angrenzen.

- In Magmenkammern finden großvolumige Differentiationsprozesse statt, die Triebkraft hydrothermaler Systeme in der darüberliegenden Kruste sein können. Ferner werden sie als antreibender Mechanismus von Spreizungszonen (Zonen, an denen Krustenplatten auseinander driften) vermutet.

Neben diesen die Erdentwicklung prägenden Vorgängen tritt Konvektion auch im wesentlich kleineren Maßstab oberflächennah auf, so daß sie sich dort direkt beobachten läßt. Beispielsweise geht der Abkühlungsvorgang von flüssigen Magmamassen mit RAYLEIGH-BÉNARD-Konvektion einher (vgl. [Oertel/Delfs 1996]). Die Oberfläche des ausgetretenen Magmas kühlt sich ab, so daß sich eine (instabile) Temperaturgrenzschicht im Magma ausbildet. In dieser Grenzschicht stellt sich eine in hexagonale Zellen strukturierte Konvektionsströmung ein, die nach dem Erstarren typische Basaltsäulen hinterläßt (siehe Abbildung 1.1).

Ursache der die Konvektionsströmungen auslösenden Dichteunterschiede können jedoch auch Konzentrationsgradienten in einer Lösung sein. Analog der BÉNARD-Konvektion führen dann kleine Störungen innerhalb der Schichtung bei freier Oberfläche ebenfalls zu hexagonalen Strö-



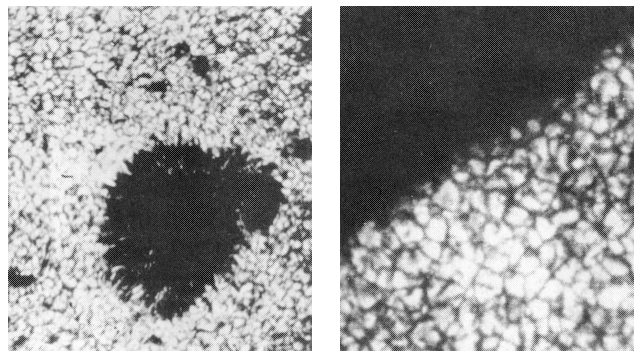
(a) Salzsee

(b) Sodasee

Abbildung 1.3: Hexagonale Ablagerungsstrukturen infolge Zellularkonvektion im Salzsee bzw. Sodasee (aus [Oertel/Delfs 1996])

mungszellen. Dieser Prozeß tritt beispielweise beim Austrocknen eines Salzsees auf. Das an der Oberfläche verdunstende Wasser hinterläßt eine relativ hohe Salzkonzentration und bedingt dadurch eine Erhöhung der Dichte, so daß schweres Fluid (instabil) über leichterem geschichtet ist.

Beim Überschreiten eines kritischen Konzentrationsunterschiedes entsteht eine Konvektionsströmung, die in Bodennähe, wo sie in Richtung der Zellenzentren fließt, Sand und Staubteilchen aufnimmt. Diese Partikel werden von dem Fluid durch die Auftriebszone im Zellenzentrum mitgetragen und entsprechend der in der Abbildung 1.2(a) skizzierten Strömung zu den Zellrändern verteilt. Hier schließlich sinken sie mit der Konvektionsströmung zu Boden, wo sie sich am Ende ablagern. So entstehen die in Abbildung 1.3 gezeigten Strukturen am Grunde ausgetrockneter Salz- bzw. Sodaseen.



(a) Sonnenflecken

(b) Granulation entlang der magnetischen Feldlinien

Abbildung 1.4: Strukturierung der Sonnenoberfläche (aus [Oertel/Delfs 1996]). In der Umgebung der Sonnenflecken orientieren sich die Konvektionszellen entlang der starken Magnetfelder als längliche Rollen.

Weist die Konvektionszelle nicht eine freie, sondern eine begrenzte Oberfläche auf, so bilden sich Konvektionsrollen aus (siehe Abbildung 1.2(b)), da diese gestreckte Anordnung unter den gegebenen Bedingungen strömungsmechanisch stabiler als die hexagonale Wabenstruktur ist. Beobachten lassen sich derartige hydrodynamische Instabilitäten mit zellularen Strukturen auch in stellaren Dimensionen, beispielsweise bei der Sonne. Die Strukturierung ihrer Oberfläche (auch *Granulation* genannt) wird ebenfalls auf BÉNARD-Instabilitäten zurückgeführt (siehe Abbildung 1.4). Da die Temperatur der Sonne in Oberflächennähe mit dem Radius abnimmt, entsteht eine instabile Dichteschichtung. Die sich so ausbildenden Konvektionszellen orientieren sich in der Umgebung der Sonnenflecken (siehe Abbildung 1.4(a)) entlang der starken Magnetfelder als längliche Rollen.

1.5 Theoretische Modelle der Konvektion

Zum Verständnis der Konvektion tragen in der heutigen Zeit nicht nur experimentelle Untersuchungen bei, sondern es werden vermehrt numerische Studien unternommen, da die zugrundeliegenden komplexen nichtlinearen Prozesse nur in sehr begrenztem Maße auf analytischem Wege theoretisch verstanden werden können und die Durchführung von Experimenten starken Einschränkungen unterliegt.

Meist tritt jedoch ein weiteres Moment hinzu, das theoretische Ansätze besonders geeignet erscheinen läßt, nämlich das Experimentieren mit dem Modell selbst; ein solches Vorgehen wird erforderlich, wenn man nicht nur einzelne konkrete Zustände des realen Systems untersuchen will, sondern das Verhalten des Systems insgesamt studieren oder optimale Zustände ermitteln möchte [Bronstein/Semendjajew 1991]. Deswegen eignen sich Simulationen insbesondere zum Studium des Systemverhaltens und ermöglichen auf diesem Wege direkte Einblicke in die zugrundeliegenden Strukturbildungsprozesse.

Daher werden die Ursachen und Eigenschaften der Konvektion schon seit mehreren Jahrzehnten theoretisch anhand mathematischer Modelle untersucht. So berücksichtigt das Modell der rein thermisch getriebenen Konvektion (sogenannte *Wärmekonvektion*) lediglich eine Dichteänderung infolge von Temperaturgradienten.

Doppelt-diffusive Konvektion ist die Wärmekonvektion einer homogenen Mischung aus zwei Komponenten (Partikel, Fluid) unterschiedlicher Dichten und Aggregatzustände. Bei diesem Ansatz geht also neben der thermisch induzierten auch die durch Konzentrationsgradienten bedingte Konvektion in die Modellvorstellung ein.

Zur Beschreibung des gravitativen Absinkens der schwereren Komponente wurde von TRUBITSYN und KHARYBIN [1987] ein vereinfachtes Modell geschaffen. Diese *thermo-diffusiv-sedimentäre Konvektion* erweitert den doppelt-diffusiven Ansatz um die Einbeziehung gravitativer Kräfte, die einen advektiven Sedimentationsstrom in Richtung des Gravitationsgradienten bewirken.

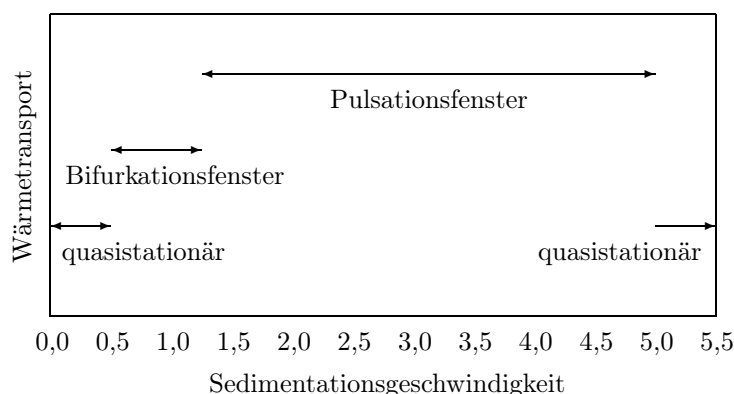


Abbildung 1.5: Diagramm des Verhaltens eines thermo-diffusiv-sedimentären Konvektionssystems unter Erhöhung der (dimensionslosen) Sedimentationsgeschwindigkeit (nach [Leu 1997])

Das Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion beschreibt einen Energie- und Massentransportprozeß in Form eines Fluids, dessen Dichte durch die Temperatur und die in ihm suspendierten Partikel bestimmt wird. Bisherige Untersuchungen haben gezeigt, daß die sich einstellenden Systemzustände in starkem Maße von der Größe der Partikel abhängen (vgl. Abbildung 1.5). Diese wird von außen durch die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikel, welche im Rahmen des Modells über die STOKES-Geschwindigkeit den mittleren Partikelradius kennzeichnet, vorgegeben.

Eine Erweiterung des Modells der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion auf Partikel mit unterschiedlichen, zeitgleich vorliegenden Partikelgrößen würde es gestatten, diese Abhängigkeit eingehender zu untersuchen. Über die Sedimentationsgeschwindigkeit würde dann nicht mehr die Größe aller suspendierten Partikel bestimmt, sondern die größenabhängige Wirkung der Gravitation auf diese vorgegeben. Dies ermöglichte beispielsweise Ausfällungserscheinungen, die nur die größeren Partikel betreffen, kleinere hingegen verschonten.

1.6 Vorgehensweise und Ziele dieser Arbeit

Gegenstand dieser Arbeit ist die systematische Untersuchung der Abhängigkeit der sich einstellenden Systemzustände von der Partikelgröße. Dazu wird das Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion zum einen auf mehrere Partikelklassen erweitert, welche Partikel unterschiedlicher Größe, aber gleicher physikalischer Eigenschaften beschreiben. Zum anderen wird es um Prozesse ergänzt, die eine lokale Veränderung der Partikelgrößenverteilung ermöglichen und dabei eine Rückkopplung der Fluidgeschwindigkeit auf das Konvektionssystem realisieren.

So gestattet ein angekoppelter *Koagulationsprozeß* die Bildung größerer Partikel. Die dahinterstehende Modellvorstellung geht davon aus, daß Partikel, welche zusammenstoßen, sich mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit zu einem größeren Partikel verbinden, wobei dann das resultierende Partikel das Gesamtvolumen der koagulierten Partikel aufweist. Dieser Prozeß ist also streng massenerhaltend, gestattet jedoch eine Umverlagerung der Masse von kleineren zu größeren Partikeln.

Damit die Änderung der Partikelgröße nicht nur zu einer Verschiebung der Verteilung in Richtung größerer Partikel führen kann, bedarf es eines antagonistischen Prozesses, der den Zerfall einzelner Partikel ermöglicht. Dazu wird zu einem hinsichtlich der Konzentration vollständig abgeschlossenen System mit integriertem *Breakup-Prozeß* übergegangen. Dem Breakup-Prozeß liegt dabei die Modellvorstellung zugrunde, daß Partikel mit wachsender Größe ein ungünstigeres Verhältnis zwischen Oberflächenspannung und Masse aufweisen, wodurch sie in ihrer Stabilität zunehmend gefährdet sind.

Somit dient die Integration eines Breakup-Prozesses nicht nur zur Begrenzung des Größenwachstums der Partikel, sondern ermöglicht es dem Konvektionssystem, sich die Partikelverteilung selbst auszuwählen, d. h. unter gegebenen Modellbedingungen eine spezielle Partikelgrößenverteilung zu bevorzugen.

Das Ziel dieser Arbeit besteht daher darin, über das Studium des Einflusses der Partikelgröße auf die Ausbildung der Systemzustände zu einem besseren Prozeßverständnis im Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion zu gelangen. Von großem Interesse ist beispielsweise, wie der in der veränderlichen Partikelgrößenverteilung zu sehende zusätzliche Freiheitsgrad in dem Konvektionssystem in Erscheinung tritt. Koagulation und Breakup könnten sich dabei nicht nur auf die Ausbildung einzelner Systemzustände auswirken, sondern eventuell sogar bisher nicht bekannte ermöglichen. Damit könnten die beiden das Konvektionssystem auf der Mikroskala erweiternden Prozesse Einfluß auf dessen Makroskala gewinnen, indem sie auf die räumliche und zeitliche Ausprägung von Systemzuständen einwirken.

Experimentell sind solche, verschiedene Skalen verbindende physikalische Systeme nur sehr schwer zugänglich, da die Untersuchungen sowohl Aufschluß über die Prozesse auf der Partikelebene geben müßten als auch durch den Beobachtungs- bzw. Meßprozeß die Entwicklung des Gesamtsystems auf der Ebene einer Kontinuumsbetrachtung nicht beeinträchtigt werden dürfte.

Gerade weil sich die betrachteten Prozesse auf der Ebene ihrer chemischen Wechselwirkung nur sehr ungenügend experimentell untersuchen lassen, gewährt das entwickelte numerische Modell Einblicke in das Systemverhalten. Trotz der fehlenden Möglichkeit, die Ergebnisse unmittelbar mittels experimenteller Daten zu evaluieren, besteht die Erwartung, daß die auf der Grundlage physikalischer Gesetzmäßigkeiten gewonnenen Erkenntnisse dennoch das Verständnis dieses hochkomplexen Systems verbessern, indem sie beispielsweise die für die Strukturbildung maßgeblichen Einflußgrößen zu identifizieren helfen.

Die Computersimulationen dienen somit als numerische Experimente zur Untersuchung ei-

ner hochkomplexen Fragestellung. Aufgrund der technischen Unzugänglichkeit dieser geophysikalischen Prozesse in der Natur und ihrer nur in geologischen Zeiträumen zu messenden Geschwindigkeit, lassen sich Laborexperimente nur sehr eingeschränkt durchführen.

1.7 Aufbau der Arbeit

Nach dieser kurzen Einführung in die historische Entwicklung, die Beweggründe und Vorgehensweise der theoretischen Konvektionsforschung wird in Kapitel 2 das zur Beschreibung des Konvektionsmodells benutzte mathematische Modell vorgestellt und das zu seiner Formulierung verwendete System gekoppelter partieller Differentialgleichungen in seiner Herleitung ausgehend von den hydrodynamischen Grundgleichungen, die selbst auf Erhaltungssätzen basieren, skizziert. Nach der Vorstellung des Modells der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion können dann die beiden zusätzlich integrierten Prozesse physikalisch motiviert und mathematisch gefaßt werden.

Anschließend werden in Kapitel 3 die zur numerischen Implementierung verwendeten Diskretisierungen dargestellt, die vorrangig untersuchten Randwertbedingungen erläutert und die zur Lösung des gekoppelten partiellen Differentialgleichungssystems sowie der Breakup- und Koagulationsgleichung eingesetzten numerischen Verfahren beschrieben. Deren Gültigkeit wird abschließend durch analytische Tests verifiziert und ihre Effizienz mittels Benchmarks evaluiert.

In Kapitel 4 werden die anhand von Simulationen des Modells erhaltenen Ergebnisse im Vergleich zu jenen der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion aufgeführt sowie die zur Simulation verwendeten Modellparameter erläutert.

Kapitel 5 faßt schließlich die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen, zeigt geophysikalische Anwendungsmöglichkeiten auf, erläutert Schwierigkeiten ihrer Verbindung mit einer systemtheoretischen Untersuchung und gewährt einen Ausblick auf sinnvoll erscheinende Ansätze zur Fortführung dieser Thematik.

2 Mathematisches Modell

In diesem Kapitel wird das zur Beschreibung des Konvektionssystems benutzte mathematische Modell vorgestellt. Dieses baut auf dem zur Modellierung der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion verwendeten gekoppelten System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen auf.

Zur Erweiterung des Modells auf Partikel veränderlicher Größe werden zwei physikalische Prozesse mathematisch formuliert, die es dem Konvektionssystem ermöglichen, Einfluß auf die Verteilung der Partikelgrößen zu nehmen. Koagulation und Breakup werden dazu so in das Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion integriert, daß sie zusätzlich zur Partikelkonzentration auch über das Fließ- bzw. Temperaturfeld des Fluids an dieses angekoppelt sind.

Dabei wird darauf geachtet, daß sich die so vorgenommene Erweiterung als eine natürliche Verallgemeinerung des Ausgangsmodells der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion auffassen läßt. Um den Einfluß der Randwertbedingungen auf die Entwicklung des Partikelgrößenspektrums zu begrenzen, müssen jene der Konzentration jedoch modifiziert werden.

2.1 Grundlegende Modelle der Konvektion

Der physikalische Prozeß der rein *thermischen Konvektion* läßt sich wie folgt veranschaulichen (siehe Abbildung 2.1): Wenn ein Fluid erwärmt wird, so nimmt seine Dichte infolge thermischer Ausdehnung ab. Eine von unten geheizte (bzw. von oben gekühlte) Flüssigkeitsschicht ist daher schwerer und kühler an der oberen Begrenzung sowie heißer und damit leichter an der unteren Begrenzung. Da diese Situation gravitativ instabil ist, tendiert das kühlere Fluid dazu abzusinken, während das heißere Fluid dazu neigt aufzusteigen.

Grundsätzliche Voraussetzung für die Entstehung eines konvektiven Systems ist daher die

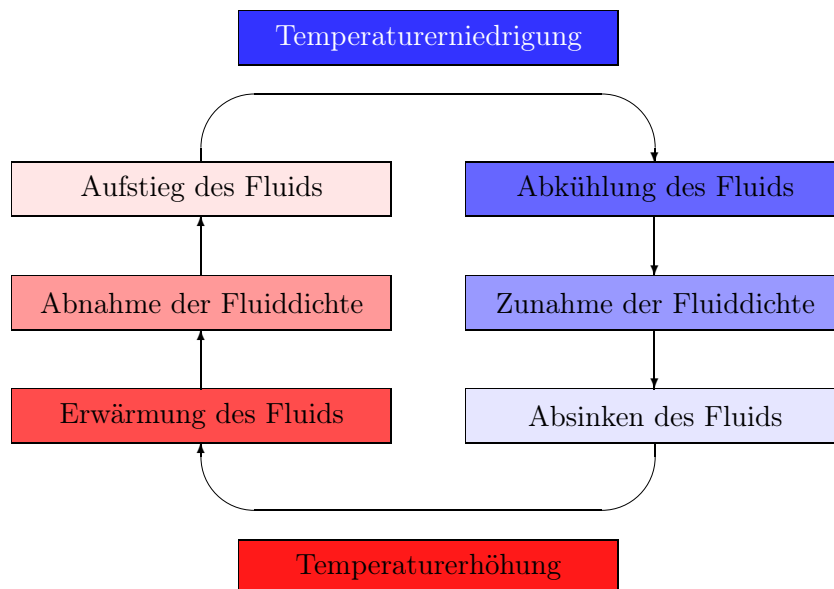


Abbildung 2.1: Schema der rein thermisch getriebenen Konvektion als Prozeß zur Aufhebung der durch Dichtedifferentiation entstandenen Dichteinversion (unter Voraussetzung der Temperaturabhängigkeit der Fluiddichte)

Abhängigkeit der Fluidichte von den betrachteten Systemkomponenten (z. B. Temperatur, Konzentration), da sich ansonsten keine Dichtedifferentiation ergeben kann.

Diffusive Konvektionssysteme zeichnen sich dabei durch die Eigenschaft aus, daß in ihnen die relative Bewegung einzelner Volumina eines Einkomponentenfluids zum Hauptteil des Fluids aufgrund von Advektion und Diffusion beschrieben werden kann.

Doppelt-diffusive Konvektionssysteme (double diffusive convection, DDC) erfassen dagegen Suspensionen, also Fluide, die Partikel als weitere Komponente enthalten. Durch Ausfällung aus der Lösung bzw. Auflösen ausgefällter Bestandteile können diese Zwei-Komponenten-Fluide dann nicht nur thermisch bedingt ihre Dichtezusammensetzung verändern. Wie die thermischen können auch die solutalen Effekte konvektive Prozesse auslösen.

Ein *thermo-diffusiv-sedimentäres Konvektionssystem* (thermo diffusive sedimentary convection, TDSC) mit Schwebeteilchen, die in einen NAVIER-STOKES-Fluß eingebettet sind, weist schließlich Fluidfluß, Wärmeverteilung (Temperatur) und sedimentierende Partikel als interagierende Komponenten auf. Es läßt sich damit als eine Erweiterung des Modells der doppelt-diffusiven Konvektion auffassen, bei dem ein weiterer Prozeß, der einen zusätzlichen Sedimentationsfluß in Richtung der Gravitationsbeschleunigung beschreibt, in das physikalische Modell einbezogen wird. Damit kann dieses Modell beispielsweise bei der Simulation von Magmenkammern Anwendung finden.

2.2 Vorausgehende Arbeiten

Im folgenden soll nur punktuell die Kette derjenigen Arbeiten aufgezeigt werden, in deren Tradition das im Rahmen dieser Arbeit erweiterte Modell steht.

Im Jahre 1987 veröffentlichten TRUBITSYN und KHARYBIN das theoretische Modell eines konvektierenden Fluids mit suspendierten Partikeln. Später nahmen sie eine lineare Stabilitätsanalyse der sedimentären und thermo-sedimentären Konvektion mit einer anfänglich linearen Verteilung der schwereren Komponente hinsichtlich der Tiefe vor [Trubitsyn/Kharybin 1991]. Dabei konnten sie zeigen, daß sich der Konzentrationsgradient und die Sedimentationsgeschwindigkeit zu einer sogenannten *sedimentären RAYLEIGH-Zahl* zusammenfassen lassen, die einen kritischen Parameter des Problems darstellt. Dieser ermöglicht es, Voraussagen über das Systemverhalten in Abhängigkeit zur Sedimentationsgeschwindigkeit der suspendierten Partikel abzuleiten.

Hansen und Ebel fanden 1988 heraus, daß nicht nur die RAYLEIGH-Zahl, sondern auch das Seitenverhältnis und die Anfangsbedingungen im Modell der rein thermischen Konvektion dafür entscheidend sind, ob sich quasistationäre oder zeitabhängige Zustände beobachten lassen. Christensen und Yuen [1989] stellten fest, daß bei höheren RAYLEIGH-Zahlen der Fluß in einer nicht-NEWTONschen Rheologie größere zeitliche und räumliche Schwankungen als in einer NEWTONschen Rheologie zeigt.

Anfang der neunziger Jahre wiesen KOYAGUSHI et al. [1990, 1993] experimentell nach, daß die Anwesenheit von Partikeln in Fluid-Systemen einen großen Einfluß auf die turbulente Konvektionsbewegung hat, selbst wenn die Volumenkonzentration sehr gering ist, jedoch einen kritischen Wert übersteigt. Sie führten die Änderungen in den Konvektionsmustern auf Veränderungen der Dichte infolge der Fluid-Partikel-Zusammensetzung, die Sedimentation von Schnittstellen und die Heizung des Systems zurück. In ihren Experimenten stellte sich heraus, daß die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikel erheblich geringer als der Betrag der mittleren Fluidgeschwindigkeit ist. So wurde experimentell gezeigt, daß die sich unter Konvektion einstellende Fließstruktur des Fluids und das transitive Verhalten der entsprechenden thermischen RAYLEIGH-Zahlen im Falle turbulenter Konvektion stark von der Partikelkonzentration

und der Setzungsgeschwindigkeit abhängen.

LEU [1997] untersuchte den Einfluß einer exponentiell von der Temperatur abhängenden Viskosität auf den Strukturbildungsprozeß im Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion. Er stellte dabei fest, daß sich bei Heizung des Konvektionssystems ein pulsatorisches Verhalten der Lösung beobachten läßt. Dieses ist durch das periodische Auftreten quasistationärer Zustände, die eine Folge der durch die Sedimentation bedingten Konzentrationsstratifikation sind, mit eingeschlossenen quasichaotischen Phasen gekennzeichnet.

In mathematischer Hinsicht bricht der zusätzliche gravitative Sedimentationsterm im TDSC-Modell die vorliegende Symmetrie der Gleichungen für Temperatur und Konzentration des DDC-Modells. Als Folge entsteht ein neuer Lösungstyp in TDSC, der durch Pulsationen gekennzeichnet ist [Leu 1997].

2.3 Motivation des Differentialgleichungsansatzes

Zur theoretischen Beschreibung eines zweiphasigen Flusses mit suspendierten Partikeln werden hauptsächlich zwei unterschiedliche Ansätze verwendet.

Der *Partikelansatz* betrachtet jedes individuelle Partikel als einen aktiven oder passiven Marker und versucht die Wechselwirkungen der Partikel untereinander und mit dem Fluid möglichst vollständig zu erfassen. Der Vorteil dieses Ansatzes liegt in der präzisen Beschreibung der Koppelung zwischen Fluid und Partikel bzw. Partikel und Partikel.

Umfaßt das betrachtete System jedoch viele Partikel, so stößt dieser Ansatz schnell an seine Grenzen, da für jedes einzelne Partikel die Koppelungen zu berechnen, der Bewegungspfad in der Zeit zu integrieren und die Wechselwirkungsterme in den Bewegungsgleichungen abzuschätzen sind. Dieses erschwert qualitative Aussagen über das Verhalten des Systems, da das ihm zugrundeliegende Modell von zuvielen Parametern abhängt, welche durch die Anzahl der Partikel, ihre räumlichen Koordinaten, Größen usw. gegeben sind [Fradkov et al. 1995].

Der *Kontinuumsansatz* beschreibt die Verteilung der Partikel und ihre relative Bewegung zum Fluid auf einer Kontinuumsebene. Dazu wird bei der Aufstellung des Modells ein räumlicher Mittelungsprozeß durchgeführt, wobei die für die Mittelung zu erfüllenden Voraussetzungen zu beachten sind. Infolgedessen hängen diese Modelle von einer relativ geringen Anzahl effektiver Kontrollparameter ab und können daher sowohl theoretisch als auch numerisch einfacher untersucht werden.

Der Nachteil dieser Ansatzes besteht in der Notwendigkeit zusätzlicher Zustandsgleichungen für die gemittelten inhärenten Größen wie den Spannungs-Tensor oder die thermodynamischen Variablen. Im Falle einer geringen Partikelkonzentration des Fluids können dazu als Parameter die Größen Konzentration, relative Sedimentationsgeschwindigkeit und effektive Diffusion verwendet werden [Trubitsyn/Kharybin 1987, Trubitsyn/Kharybin 1991].

Das im folgenden beschriebene Modell soll vor allem hinsichtlich des Strukturbildungsprozesses bei stark gekoppelten, konvektiven Systemen unter dem Einfluß von Sedimentation untersucht werden. Da in dieser Arbeit vor allem das Verhalten des Gesamtsystems von Interesse ist, bietet es sich an, eine Kontinuumsformulierung als Grundlage des mathematischen Modells zu wählen.

2.4 Konzentrationsmodell

Das Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion stellt eine vereinfachte Beschreibung des gravitativen Absinkens der schwereren Komponente eines Zwei-Komponenten-Fluids dar. Es ist ein sogenanntes *Konzentrationsmodell*, dessen Konzeption auf der Beschreibung der

Suspension der Partikel und des Fluids als eines Ganzen beruht. Dazu werden die Erhaltungsgleichungen der Gesamtmasse, des Gesamtimpulses und der Gesamtenergie aufgestellt. Die Eigenschaften der Partikel-Flüssigkeit-Mischung lassen sich dann einerseits durch eine Funktion, die die Konzentration der Partikel beschreibt, und andererseits durch eine Diffusionsgleichung, die die zeitliche Entwicklung der Konzentration bestimmt, berücksichtigen.

Der Vorteil dieser Betrachtungsweise liegt in der Reduzierung der Anzahl unabhängiger Variablen. Nachteilig ist die Notwendigkeit, zusätzliche Einschränkungen und Modellannahmen für die Wechselwirkung zwischen den beiden Komponenten vorzunehmen [Nauheimer 1993].

Konzentrationsmodelle sind aus der Theorie der Mischungen (z. B. [Landau/Lifschitz 1991]) hinlänglich bekannt. Dort werden sie stets dann verwendet, wenn die beiden Phasen stark miteinander gekoppelt sind, d. h. in ihrer Dynamik im wesentlichen durch ein effektives Medium beschrieben werden können. Daher lassen sich Konzentrationsmodelle auch bei der Simulation makroskopischer Zwei-Phasen-Strömungen anwenden.

2.5 Thermo-diffusiv-sedimentäre Konvektion

Im folgenden soll zuerst das konventionelle TDSC-Modell anhand seiner Gleichungen und Randwertbedingungen vorgestellt werden. Anschließend werden die vorgenommenen Erweiterungen erläutert und die geänderten Randwertbedingungen motiviert.

Für die Beschreibung des Fluid-Partikel-Systems wird ein modifiziertes Konzentrationsmodell aus der Theorie des Zwei-Phasen-Flusses verwendet, in dem die Verteilung schwebender Partikel durch eine kontinuierliche Feldvariable beschrieben wird. Da die Aufmerksamkeit auf die mechanischen Effekte der Relativbewegung zwischen den Partikeln und dem Massenzentrum der Mischung gerichtet werden soll, können die Effekte des Kristallwachstums oder -ausfalls im TDSC-Modell vernachlässigt werden.¹ Zudem läßt sich annehmen, daß ein lokaler thermischer Gleichgewichtszustand zwischen Fluid und Partikeln vorliegt.

2.5.1 Motivierung der Gleichungen

Die im folgenden skizzierte Ableitung der mathematischen Gleichungen zur Beschreibung eines thermo-diffusiv-sedimentären Konvektionssystems bedient sich des phänomenologischen Rahmens der Kontinuumsmechanik. Einerseits benutzt dieser Zugang die grundlegende physikalische Eigenschaft der Gültigkeit von Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie auf makroskopischer Ebene in Form von allgemeingültigen Bilanzen. Andererseits benötigt diese Betrachtungsweise einige von den Bilanzgleichungen unabhängig gewonnene Zustandsgleichungen zur Beschreibung „innerer Größen“, wie beispielsweise des Spannungstensors oder der Wärmeleitung.

2.5.1.1 Massenerhaltung

Da sich der modelltheoretische Einfluß der beiden Feldgrößen Temperatur und Konzentration auf das Konvektionssystem nur im zusätzlichen sedimentären Anteil der Konzentration unterscheidet, wird deren Zustandsgleichung zunächst erläutert.

Das TDSC-Modell geht von einem Fluid aus, das Partikel gleicher physikalischer Eigenschaften (insbesondere identischer Dichte aller Partikel) mit sich führt. Zur Erfüllung der Massenerhaltung muß die Gesamtkonzentration dieses Suspensats einer Erhaltungsgleichung

¹Im Gegensatz zum doppelt-diffusiven und dem auf ihm basierenden thermo-diffusiv-sedimentären Ansatz können die Partikel in unserem erweiterten Modell unterschiedliche und veränderliche Volumina aufweisen.

genügen. Dabei bezeichnet C die Gesamtkonzentration des Suspensats, ermittelt als Volumenanteil der Partikel am insgesamt vom Fluid in Anspruch genommenen Raum. Damit lassen sich nun die Massenerhaltungsgleichungen für die Partikel- und die Fluid-Komponente in Form von Kontinuitätsgleichungen formulieren²:

$$\frac{\partial C \varrho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (C \varrho_p \mathbf{v}_p) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial (1 - C) \varrho_f}{\partial t} + \nabla \cdot ((1 - C) \varrho_f \mathbf{v}_f) = 0. \quad (2.2)$$

C ist die Volumenkonzentration der Partikel-Komponente, T die Temperatur des Suspensats, ϱ_p , ϱ_f sind die Dichten der Partikel- bzw. Fluid-Komponenten, und \mathbf{v}_p , \mathbf{v}_f sind die Fließgeschwindigkeiten der Partikel- bzw. Fluid-Komponenten.

Der jeweils erste Term auf der linken Seite beschreibt somit die zeitliche Änderung der Konzentrationsdichte und der jeweils zweite Term die Rate der Ansammlung bzw. Zerstreuung der Materie durch zusammen- oder auseinanderfließende Strömungen.

Die Dichte der Mischung ϱ_m und die Geschwindigkeit des Massenzentrums \mathbf{v}_m sind durch die Beziehungen

$$\varrho_m(T, C) = (1 - C) \varrho_f(T) + C \varrho_p(T) \quad (2.3)$$

und

$$\varrho_m(T, C) \mathbf{v}_m = (1 - C) \varrho_f(T) \mathbf{v}_f + C \varrho_p(T) \mathbf{v}_p \quad (2.4)$$

gegeben. Für die aus der Massenerhaltung abzuleitenden Gleichungen werden dabei die folgenden Annahmen zugrunde gelegt:

- Es werden keine Phasenübergänge simuliert.
- Die Dichte der in der Schmelze verteilten Kristalle ist konstant.
- Es wird nur eine bestimmte Kristallspezies betrachtet.
- Die Kristalle sind schwerer als die Flüssigkeit, neigen also dazu, aus dem Fluid auszufallen.
- Die Variation der Mischungsdichte ϱ_m ist sehr gering und wird nur durch Temperatur- und Konzentrationsänderungen bewirkt.
- Alle anderen Materialparameter (z. B. eine bestimmte Dichte des Suspensats) werden als konstant angenommen.

Da zur Untersuchung ein Konzentrationsmodell benutzt wird, benötigen wir Evolutionsgleichungen für die Dichte der Mischung ϱ_m und die Verteilung der Partikel-Komponente $C \varrho_p$. Erstere ergibt sich aus der Addition der beiden Massenerhaltungsgleichungen (2.1) und (2.2) für die Partikel- bzw. Fluid-Komponente, welche unter Zuhilfenahme der Gleichungen (2.3) und (2.4) durch die Geschwindigkeit des Massenzentrums ausgedrückt werden kann:

$$\frac{\partial \varrho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_m \mathbf{v}_m) = 0.$$

²Im allgemeinen sind alle im folgenden aufgeführten Größen Funktionen des Ortes und der Zeit. So bezeichnet beispielsweise $\mathbf{v} = \mathbf{v}(x, y, z, t)$ die Geschwindigkeit der Flüssigkeit an einem Punkt (x, y, z) zur Zeit t .

Da nur geringe Variationen in der Mischungsdichte ϱ_m betrachtet werden sollen (d. h. $\nabla\varrho_m \approx 0$), läßt sich aus der Gleichung für die Erhaltung der Gesamtmasse

$$\frac{\partial\varrho_m}{\partial t} + \mathbf{v}_m \cdot \nabla\varrho_m = -\varrho_m \nabla \cdot \mathbf{v}_m$$

folgern, daß die Geschwindigkeit des Massenzentrums divergenzfrei ist:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m \approx 0. \quad (2.5)$$

Da die Dichte der Suspension nur in geringem Maße aufgrund von Änderungen in Temperatur und Zusammensetzung variiert, ist die Voraussetzung der Inkompressibilität des Fluids bei Abwesenheit von Quellen gegeben. Experimentell ist diese Näherung für langsame Fluidbewegungen sehr gut erfüllt, da im allgemeinen mehrere hundert bar (10 MPa) Druck benötigt werden, um die Dichte eines Fluids auch nur um ein Prozent zu ändern.

Die zeitliche Entwicklung der Verteilung der Partikel-Komponente läßt sich unter Verwendung der Massenerhaltungsgleichung (2.1)

$$\frac{\partial C\varrho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (C\varrho_p \mathbf{v}_p) = 0$$

beschreiben durch:

$$\frac{\partial C\varrho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (C\varrho_p \mathbf{v}_m) = -\nabla \cdot (C\varrho_p (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_m)). \quad (2.6)$$

In einem Konzentrationsmodell wird, da die einzelnen Komponenten nicht unabhängig voneinander betrachtet werden können, nur mit einer Geschwindigkeit gerechnet. Deswegen ist es notwendig, die auftretende Relativgeschwindigkeit $\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_m$ der Partikel zum Massenzentrum durch geeignete Modellannahmen zu erfassen. ISHII [1975] entwickelte dazu die Vorstellung, daß sich die Relativgeschwindigkeit aus zwei Beiträgen zusammengesetzt denken läßt: Neben der Kollektivgeschwindigkeit des gravitativen Absinkens der Partikel, die durch den Dichteunterschied zwischen Suspensat und Fluid bedingt ist, gilt es auch, die Fluktuationen in der Sinkgeschwindigkeit der Partikel auf dem Kontinuumslevel zu berücksichtigen:

$$C\mathbf{v}_m = -D\nabla C + C\mathbf{v}_s. \quad (2.7)$$

Dabei bezeichnet D die Diffusivität der Partikel im Fluid und \mathbf{v}_s die Sinkgeschwindigkeit der Partikel.

Im einfachsten Fall, wenn die Partikel als kleine Kugeln betrachtet werden können und weit voneinander entfernt sind, d. h. die Gesamtkonzentration der Partikel sehr gering ist, entspricht die Sinkgeschwindigkeit \mathbf{v}_s der STOKES-Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{\text{Stokes}}$. Falls die Konzentration der Kristalle dagegen nicht vernachlässigbar klein ist, so tritt das Phänomen des sogenannten *hindered settlings* auf [Davis/Acrivos 1985]. In diesem Fall ist die Sinkgeschwindigkeit eine stark abfallende Funktion der Partikelkonzentration, da sich die Konzentrationspartikel zusehends selbst beim ungestörten gravitativen Absinken behindern.

Der Diffusionsterm in Gleichung (2.7) stellt ein Modell für die Dispersion dar, d. h. er beschreibt die zufällige Bewegung einzelner Partikel infolge von Fluktuationen in der Sinkgeschwindigkeit auf dem Kontinuumslevel. Wenn die Diffusion verschwindet, so liegt eine einfache Sedimentation der schwereren Komponente mit STOKES-Geschwindigkeit vor.³

³In fortgeschritteneren Theorien muß die Diffusion ein Tensor sein, dessen Komponenten von den Feldvariablen und ihren Ableitungen abhängen.

Die Fluktuationen in der Partikelrelativgeschwindigkeit haben im allgemeinen zwei Ursachen. Zum einen die BROWNSche Bewegung, die für Partikel mit Radien R von maximal einigen Millimetern in dem betrachteten hochviskosen Fluid ($\eta \geq 100 \text{ Pa s}$) vernachlässigbar sind ($D = \frac{kT}{6\pi\eta R} \approx 10^{-18} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$). Der zweite Beitrag trägt der Anwesenheit und dem Absinken der anderen Partikel Rechnung; er berücksichtigt also die hydrodynamischen Wechselwirkungen benachbarter Partikel [Nauheimer 1993].

Ein Diffusionsmodell läßt sich für diesen Anteil nur dann verwenden, wenn die Zeit $\tau_1 = \frac{L}{v_m}$, in der sich das Strömungsmuster ändert (L Größe der Zelle, v_m Betrag der Geschwindigkeit des Massenzentrums), wesentlich größer als die Zeit $\tau_2 = \frac{R}{v_{\text{Stokes}}}$ ist, in der sich die Partikelkonfiguration in der Umgebung eines Partikels ändert. Diese Bedingung ist in unserem Fall erfüllt, da die Sinkgeschwindigkeit nicht geringer als 1% der Geschwindigkeit des Massenzentrums ist und die Partikelgröße wesentlich kleiner als die Zellengröße ist (d. h. $\frac{v_{\text{Stokes}}}{v_m} \geq \frac{R}{L}$). BATCHELOR und VAN RENSBURG [1986] schätzen diesen Beitrag zur Diffusion durch den Ausdruck

$$D \approx R \cdot |v_{\text{Stokes}}|$$

ab. Im Falle einer hochviskosen magmatischen Schmelze ($T \approx 2000 \text{ K}$) mit Kristalleinschlüssen von wenigen Zentimetern Größe ergibt diese Abschätzung beispielsweise eine Sedimentationsgeschwindigkeit von $v_s \approx v_{\text{Stokes}} \approx 10^{-5} \frac{\text{m}}{\text{s}}$ bzw. eine Diffusivität von $D = R \cdot v_{\text{Stokes}} \approx 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. In diesem Fall beträgt der korrespondierende Wert der LEWIS-Zahl, die dem Verhältnis zwischen thermischer und chemischer Diffusivität entspricht, ungefähr 10 [Fradkov et al. 1993b].

Diese stark vereinfachte Abschätzung zeigt, daß der Wert der effektiven Diffusion in einem Zwei-Komponenten-Fluß erheblich größer als die übliche molekulare chemische Diffusion einer Komponente in einer Schmelze sein kann. Im Falle schwacher Konvektion und verdünnter Suspensionen kann der Koeffizient der effektiven Diffusion jedoch auch geringer als die obige Abschätzung sein und möglicherweise praktisch überall gegen Null gehen, vielleicht mit Ausnahme einer Konzentrationsschicht am unteren Gebietsrand, wo dieses hilfreich für die Verschmierung der Grenzschichtdicke ist.

Obwohl es relativ schwierig ist, auf experimentellem Wege konsistente Werte für LEWIS-Zahlen im Falle von in Schmelzen suspendierten Kristallen zu bestimmen, werden wir nur endliche LEWIS-Zahlen verwenden, um damit die zufälligen Bewegungen der Partikel auf dem Kontinuumslevel zu berücksichtigen. Neben der physikalischen Modellvorstellung wird dieses auch durch zwei eher mathematisch-numerische Gründe motiviert [Nauheimer 1993]. Einerseits ergäbe sich bei Vernachlässigung jeglicher Diffusion (d. h. LEWIS-Zahl unendlich) eine rein hyperbolische Konzentrationsgleichung, so daß dieses Modell keine triviale Lösung mit ortsabhängiger Konzentrationsverteilung hat, die als Anfangswertbedingung für eine Stabilitätsuntersuchung herangezogen werden kann. Andererseits läßt sich eine als *numerische Diffusion* D_{num} bezeichnete Störung bei der zeitlichen Integration der Konzentrations- und der Temperaturgleichung prinzipiell nicht verhindern. Zwar kann ihr Wert durch die Verwendung eines Marker-Ansatzes oder einer Verfeinerung der räumlichen Diskretisierung verringert werden, aber selbst diese kann die Fließstruktur stark stören, wenn die betrachtete Zeit erheblich größer als die Diffusionszeit $t_D = \frac{L^2}{D_{\text{num}}}$ ist. Daher gewährleistet die Wahl einer hinreichend großen, den Wert der numerischen Diffusion übersteigenden effektiven Diffusion, daß selbst im Falle der numerischen Integration über eine lange Zeit und in der Nähe der Randschichten, wo die numerischen Effekte den größten Einfluß ausüben, die numerische Diffusion keinen wesentlichen Einfluß auf die Ergebnisse hat.

Da in dieser Arbeit das Konvektionsverhalten an der Grenze zur verdünnten Lösung (d. h. für eine Konzentration unterhalb eines Volumenprozents) und für kleine Relativgeschwindigkeiten zwischen Partikeln und Fluid untersucht wird, können die rheologischen Effekte infolge

der Anwesenheit von Partikeln sowie des mit der Relativgeschwindigkeit zwischen den beiden Phasen verbundenen Energietransportes vernachlässigt werden. Zudem läßt sich annehmen, daß alle Parameter mit Ausnahme der Dichte der Suspension unabhängig von der Partikelkonzentration C sind. Daher sind in diesem Modell die Haupteffekte an der Verdünnungsgrenze Dichteänderungen infolge inhomogener Temperatur- und Partikelverteilungen sowie Massentransport infolge der Relativbewegung zwischen den Partikeln und dem Massenzentrum der Mischung [Fradkov et al. 1993b].

Unter Annahme konstanter Materialparameter (ρ_p , D) reduziert sich die Massenerhaltung auf eine Evolutionsgleichung für die Konzentration

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C \mathbf{v}_m) = \nabla \cdot D \nabla C - \nabla \cdot \mathbf{v}_s \quad (2.8)$$

mit \mathbf{v}_m als Geschwindigkeit des Massenzentrums und \mathbf{v}_s als gemittelter Setzungsgeschwindigkeit.

Die dieser Gleichung zugrundeliegenden Näherungen sind jedoch nur zulässig, wenn die Partikel eine vergleichbare Dichte und Geschwindigkeit haben wie das umgebende Medium, die Konzentration der Partikel klein ist und die Wärmekapazität eines Partikels vergleichbar mit jener eines gleich großen Flüssigkeitsvolumens ist [Nauheimer 1993].

Mit dem Massentransport durch Segregation geht auch ein Impuls- und Energietransport einher. Dieser Transportanteil kann jedoch in den im folgenden motivierten Impuls- und Energiegleichungen vernachlässigt werden, da er im Vergleich zu den anderen Beiträgen klein ist, was sich aus der Annahme vergleichbarer Wärmekapazitäten für beide Phasen sowie $v_s < |\mathbf{v}_m|$ und $\rho_p \approx \rho_f$ bei einer insgesamt geringen Partikelkonzentration im Fluid ergibt [Fradkov et al. 1995].

2.5.1.2 Impulserhaltung

Für die Aufstellung des Impulserhaltungssatzes wird vorausgesetzt, daß

- die Dichten und Geschwindigkeiten der Partikel und des sie umgebenden Fluids vergleichbar sind (Dichteunterschied beträgt ungefähr 10 %),
- die Gesamtkonzentration der Partikel klein ist (maximal 0,5 %),
- die Wärmeenergie eines Partikels vergleichbar mit der Wärmeenergie eines gleich großen Flüssigkeitsvolumens ist,
- eine kriechende Strömung betrachtet wird (d. h. die REYNOLDS-Zahl Re sehr klein ist) und
- die relativen Geschwindigkeiten zwischen den einzelnen Phasen und dem Massenzentrum klein im Vergleich zur Geschwindigkeit des Massenzentrums sind.

Da im Erdmantel nur geringe Schergeschwindigkeiten und große Zähigkeiten herrschen, können die Trägheitskräfte vernachlässigt werden, und der Spannungstensor läßt sich in erster Ordnung durch den linearen NEWTONSchen Ansatz approximieren.

Unter Zerlegung des Druckes p in den hydrostatischen und den dynamischen Anteil ergibt sich der Impulserhaltungssatz dann zu (z. B. [Nauheimer 1993]):

$$0 = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v}_m - \rho_m \mathbf{g}. \quad (2.9)$$

Dabei bezeichnet η die dynamische Scherviskosität.

Im Rahmen der Untersuchungen dieser Arbeit wurde die Viskosität als konstant aufgefaßt. In der Natur hängt sie näherungsweise exponentiell von der Temperatur [Dingwell et al. 1993] und linear von der Partikelkonzentration [Einstein 1906] ab. Experimentelle Untersuchungen [Lebedev/Khitarov 1979, Krieger 1972] zeigten, daß die Abhängigkeit der Viskosität von der Temperatur und der Konzentration im allgemeinen nicht vernachlässigbar ist. Die eingehende Analyse der Temperaturabhängigkeit der Viskosität in numerischen Studien der Mantelkonvektion [Christensen 1984] und bei Untersuchungen der Magmenabkühlung [Hansen/Yuen 1987] zeigte ihren großen Einfluß auf die Entwicklung der Strömungsmuster.

Für die doppelt-diffusive Konvektion konnte anhand experimenteller Daten zur Konzentrationsabhängigkeit der Viskosität $\eta(C)$ deren Einfluß auf das Strömungsmuster und die Abkühlungsgeschichte nachgewiesen werden [Bogdassarov/Fradkov 1993]. Im Rahmen der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion untersuchte LEU [1997] die exponentielle Abhängigkeit $\eta(T) = e^{-\xi \cdot T}$ der Viskosität von der Temperatur, wobei er jedoch lösungsbedingte Einflüsse vernachlässigte.

Für die Untersuchung der Mantelkonvektion stellen die Annahme einer konstanten Viskosität und die Vernachlässigung von Phasenübergängen die stärksten Einschränkungen dar. Im Rahmen dieser Arbeit ist dieses jedoch zulässig, da in erster Linie der Einfluß der Kristallisation auf die thermo-diffusiv-sedimentäre Konvektion untersucht werden soll.

2.5.1.3 Energieerhaltung

Für die Aufstellung des Energieerhaltungssatzes wird vorausgesetzt, daß

- der turbulente Wärmestrom im Vergleich zum Gesamtwärmestrom klein ist und somit vernachlässigt werden kann sowie
- die Wärmeproduktion durch Reibung im Vergleich zum Wärmeinhalt der Suspension klein ist.

Unter Anwendung der aus diesen Annahmen resultierenden Näherungen reduziert sich der Energieerhaltungssatz auf eine Evolutionsgleichung für die Temperatur des Mediums:

$$\frac{\partial \varrho_0 c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_0 c_p T \mathbf{v}_m) = \nabla \cdot \chi \nabla T.$$

ϱ_0 stellt dabei die Referenzdichte der Suspension, c_p deren spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck und χ ihre Wärmeleitfähigkeit dar. Im Falle konstanter Materialparameter läßt sich die Gleichung für die thermische Entwicklung dann wie folgt schreiben:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T \mathbf{v}_m) = \kappa \Delta T. \quad (2.10)$$

Dabei bezeichnet $\kappa = \frac{\chi}{\varrho_0 c_p}$ die thermische Diffusivität, welche die Wärmediffusivität infolge molekularer Kollisionen darstellt.

2.5.2 Vereinfachungen

Die Gleichungen (2.5), (2.8), (2.9) und (2.10) sind für eine numerische Behandlung immer noch sehr schwierig. Zudem liegen sie in einer Allgemeingültigkeit vor, die im Rahmen dieser Untersuchungen nicht benötigt wird. Daher bietet es sich an, durch gezielte Vereinfachungen, welche den Charakter der angestrebten Untersuchung respektieren, d. h. die Gültigkeit ihrer Ergebnisse nicht einschränken, eine numerisch einfacher zu handhabende Form der Gleichungen anzustreben.

Dazu wird zum einen vorausgesetzt, daß die Dichte der Mischung nur in geringem Maße von Änderungen der Temperatur oder Konzentration abhängt. Als nächstes kann das Gleichungssystem zur Erleichterung der Reskalierung auf dimensionslose Größen gebracht werden. Schließlich soll ausgenutzt werden, daß sich die im Rahmen dieser Arbeit durchzuführenden Untersuchungen auf eine zweidimensionale, kartesische Geometrie beschränken lassen.⁴

2.5.2.1 Boussinesq-Näherung

Grundlegende Voraussetzung für das Entstehen eines Konvektionssystems ist die Abhängigkeit der Fluidichte von den Feldgrößen Temperatur und Konzentration. Eine vielfach gewählte Näherung besteht dabei in der Annahme, daß sich die Materialparameter des Fluids (wie Viskositäten, Wärmediffusionskonstanten und Wärmekapazität) nicht mit der Temperatur ändern.

Die Dichten des Fluids ϱ_f und der Partikel ϱ_p werden als konstant betrachtet. Ausgenommen davon ist einzig der Auftriebsterm der Impulserhaltung (2.9), in dem die Mischungsdichte ϱ_m eine Funktion der Temperatur und der Zusammensetzung des Fluids ist. In allen anderen Termen wird die Dichte des Fluids ϱ_f als Referenzdichte ϱ_0 der Mischung gewählt:

$$\varrho_0 := \varrho_m(T = T_0, C = 0) = \varrho_f.$$

Im Auftriebsterm soll die Änderung der Dichte ϱ_m nur sehr klein und lediglich durch Temperatur- und Konzentrationsänderungen bewirkt sein. Die Abhängigkeit der Mischungsdichte ϱ_m von der Temperatur und der Partikelkonzentration wird daher gemäß der sogenannten *BOUSSINESQ-Näherung* in linearer Näherung berücksichtigt [Landau/Lifschitz 1991]:

$$\varrho_m(T, C) = \varrho_0 [1 - \alpha(T - T_0) + \beta(C - C_0)]. \quad (2.11)$$

Dabei bezeichnen T die Temperatur, T_0 eine Referenztemperatur und α den thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Der Ausdehnungskoeffizient der Volumenkonzentration $\beta = \frac{\varrho_p - \varrho_f}{\varrho_f}$ beschreibt die Dichteänderung der Mischung infolge der Verschiebung der Zusammensetzung von reiner Fluid-Komponente zu reiner Partikel-Komponente.

Diese vielfach einzig BOUSSINESQ zugeschriebene Näherung wurde in den Jahren 1879 und 1880 von OVERBECK eingeführt. Sie besagt zum einen, daß die Dichte des Fluids nur linear und damit schwach von der Temperatur abhängt und unabhängig vom Druck ist. Zum anderen werden der thermische Ausdehnungskoeffizient, die thermische Leitfähigkeit, die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck, die Gravitationsbeschleunigung und die Scherviskosität als konstant betrachtet [Walzer/Hendel 1997].

Somit ergibt sich der Impulserhaltungssatz in BOUSSINESQ-Näherung zu

$$0 = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v}_m - \varrho_p(\alpha(T - T_0) - \beta C)\mathbf{g}. \quad (2.12)$$

Es wird also eine inkompressible Mischung von Festkörperpartikeln in einem Fluid betrachtet. Die Volumenkonzentration des Suspensats ist durch C gegeben. Den Festkörperpartikeln wird in den Simulationen eine höhere Dichte gegenüber der Flüssigkeit (d. h. $\beta > 0$) zugewiesen, so daß sie zum gravitativen Absinken innerhalb der Flüssigkeit neigen.

⁴Obwohl Konvektionsprozesse dreidimensionale Probleme darstellen, sind Systemanalysen aufgrund der für ihre Behandlung benötigten Rechenzeit- und Speicherplatzanforderungen so aufwendig, daß man sich im allgemeinen mit zweidimensionalen Näherungen begnügen muß.

2.5.2.2 Entdimensionierung der Gleichungen

Die in den Gleichungen enthaltenen Größen weisen einen immanenten Maßstab auf, der eine Reskalierung der Gleichungen und damit die Übertragung des Problems auf eine andere Größenskala erschwert. Werden nun die dimensionsbehafteten Größen durch Normierung auf eine jeweils geeignet gewählte Bezugsgröße zu relativen Skalierungsfaktoren gemacht, so kann durch Multiplikation der gesamten Gleichung mit einem der ursprünglichen Dimension inversen Vorfaktor eine dimensionslose Form erlangt werden. Die Entdimensionierung der Gleichungen ermöglicht es damit, das Problem in einer maßstabunabhängigen Form zu beschreiben.

Die Entdimensionierung des vorliegenden Differentialgleichungssystems erfolgt durch Vorgabe eines Geschwindigkeitsmaßstabes v_0 , eines Längenmaßstabes L , eines Temperaturmaßstabes ΔT und eines Konzentrationsmaßstabes C_0 . Die dimensionslosen Gleichungen ergeben sich dann durch Multiplikation der Impulsgleichung (2.9) mit $\frac{L^2}{\eta v_0}$, der Temperaturgleichung (2.10) mit $\frac{L}{\Delta T v_0}$ und der Konzentrationsgleichung (2.8) mit $\frac{L}{C_0 v_0}$:

$$\nabla' \cdot \mathbf{v}' = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{L p_0}{\eta v_0} \nabla' p' = \Delta' \mathbf{v}' = - \left(\frac{\varrho_0 \alpha \Delta T g L^2}{\eta v_0} T' + \frac{\varrho_0 \beta C_0 g L^2}{\eta v_0} C' \right) \mathbf{e}_z, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} + \nabla' \cdot (T' \mathbf{v}') = \frac{\kappa}{L v_0} \Delta' T', \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial C'}{\partial t'} + \nabla' \cdot (C' \mathbf{v}') = \frac{D}{L v_0} \Delta' C' - \nabla' \cdot C' \frac{\mathbf{v}_s}{v_0}. \quad (2.16)$$

Der Druckmaßstab p_0 , der noch unabhängig gewählt werden kann, wird im allgemeinen so festgelegt, daß die dimensionslose Kennzahl vor dem Ausdruck $\nabla' p'$ den Wert Eins annimmt (d. h. $p_0 = \frac{\eta v_0}{L}$). Im folgenden werden die zur Kennzeichnung entdimensionierter Größen verwendeten Striche weggelassen.

Je nach Wahl der verbleibenden Größenmaßstäbe ergeben sich unterschiedliche Skalierungen. Für die numerische Simulation des TDSC-Modells werden zumeist zwei Skalierungen verwendet: So benutzt die hier verwendete *RAYLEIGH-Skalierung* als Temperaturmaßstab die Temperaturdifferenz ΔT zwischen dem oberen und dem unteren Rand der Konvektionszelle. Die alternativ wählbare *MCKENZIE-Skalierung* benutzt hingegen eine Vergleichstemperatur T_0 und ist daher unabhängig von den Randwertbedingungen des Modellgebiets [McKenzie et al. 1974].

Die *RAYLEIGH-Skalierung* verwendet die sogenannte *thermische Diffusionsgeschwindigkeit* als Einheit für die Geschwindigkeitsnormierung:

$$v_0 = \frac{\kappa}{L}.$$

Die sich durch die Entdimensionalisierung der Gleichungen ergebenden Skalierungsfaktoren der Feldgrößen lassen sich durch die Einführung aussagekräftiger Kenngrößen besser handhabbar machen. In der *RAYLEIGH-Skalierung* lauten diese dimensionslosen Kennzahlen:

$$\text{RAYLEIGH-Zahlen:} \quad Ra_T = \frac{\varrho_0 \alpha \Delta T g L^3}{\eta \kappa} \quad Ra_C = \frac{\varrho_0 \beta C_0 g L^3}{\eta \kappa}, \quad (2.17)$$

$$\text{Dichtezahl:} \quad Rp = \frac{Ra_C}{Ra_T}, \quad (2.18)$$

$$\text{Segregationsparameter:} \quad a = \frac{v_s}{v_0}. \quad (2.19)$$

Dabei bezeichnen Ra_T die durch die Temperaturdifferenz ΔT zwischen unterem und oberem Rand bedingte thermische *RAYLEIGH-Zahl*, Ra_C die Konzentrations-*RAYLEIGH-Zahl*, Rp die

Dichtezahl (Verhältnis zwischen zusammensetzungs- und temperaturbedingtem Auftrieb) und a die dimensionslose Setzungsgeschwindigkeit infolge Gravitation. C_0 stellt die Startkonzentration dar und gibt damit zugleich die maximal mögliche Konzentrationsänderung vor. Im folgenden werden die Kennzahlen Ra_T , Rp und a als unabhängige Parameter benutzt.

Die MCKENZIE-Skalierung verwendet hingegen

$$v_0 = \frac{\varrho_0 \alpha T_0 g L^2}{\eta}$$

als Geschwindigkeitsmaßstab, so daß die dimensionslosen Kennzahlen für sie die folgenden sind [Leu 1994]:

$$\begin{aligned} \text{Wärmediffusivität :} & \quad \kappa_T = \frac{\kappa \eta}{\varrho_0 \alpha T_0 g L^3}, \\ \text{Konzentrationsdiffusivität :} & \quad \kappa_C = \frac{\kappa}{D}, \\ \text{Dichtezahl :} & \quad Rp = \frac{\beta C_0}{\alpha T_0}, \\ \text{Sinkparameter :} & \quad a = \frac{v_s}{v_0}, \\ \text{LEWIS-Zahl :} & \quad Le = \frac{\kappa}{D}. \end{aligned}$$

Die LEWIS-Zahl Le stellt dabei das Verhältnis zwischen thermischer Diffusivität und effektiver Partikeldiffusivität dar.

Während die RAYLEIGH-Skalierung Anwendung vor allem bei der systematischen Untersuchung des Modells findet, wird die MCKENZIE-Skalierung beispielsweise bei der numerischen Simulation der Abkühlung einer Magmenkammer verwendet.

2.5.2.3 Einführung einer Stromfunktion

Der bislang skizzierte Modellansatz ist aufgrund seiner recht allgemeingültigen Formulierung mittels vektorieller Größen in allen Feldvariablen dreidimensional.

Da das vorrangige Ziel dieser Arbeit in einer systematischen Analyse der Abhängigkeit der Zustände des Gesamtsystems von der Partikelgröße besteht, wobei in erster Linie das Verhalten des Systems und weniger die genauen geometrischen Erscheinungen der sich dabei ausprägenden Strukturen von Interesse sind, können die Untersuchungen in hinreichender Genauigkeit mit einem zweidimensionalen Modell durchgeführt werden. Zweidimensionale Simulationen zeichnen sich nicht nur durch einen erheblich verringerten Rechenaufwand infolge der geringeren Variablenanzahl aus, sondern sie bieten in diesem Fall zudem den Vorteil, daß für sie die Lösung der Impulserhaltungsgleichung durch Verwendung eines sogenannten *Stromfunktionsansatzes* vereinfacht werden kann. Dieser Formalismus gestattet es, eine skalare Formulierung des Problems zu benutzen, die zudem automatisch die Kontinuitätsgleichung erfüllt.

Die Differentialgleichungen werden in einem zweidimensionalen rechteckigen Gebiet mit kartesischer Geometrie untersucht. Für kleine Dichteänderungen gilt aufgrund der Massenerhaltung die Inkompressibilität der kriechenden Strömung, so daß der Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_z \end{pmatrix}$ wegen $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ aus einer Stromfunktion ψ abgeleitet werden kann, die die Strömung vollständig beschreibt: $v_x = -\frac{\partial \psi}{\partial z}$ und $v_z = \frac{\partial \psi}{\partial x}$. Durch die Einführung der Stromfunktion $\psi(z, x)$ läßt sich daher von einer vektoriellen zu der einfacheren skalaren Darstellung übergehen.

Wenn die Bewegung also lediglich in der x - z -Ebene stattfindet und alle Variablen daher unabhängig von y sind, können die Stromfunktion ψ und das Wirbelfeld ω durch die Beziehungen

$$\mathbf{v}(z, x) = v_x(z, x)\mathbf{e}_x + v_z(z, x)\mathbf{e}_z = \nabla \times (\psi(z, x)\mathbf{e}_y)$$

bzw.

$$\begin{aligned} v_x(z, x) &= -\frac{\partial\psi(z, x)}{\partial z}, \\ v_z(z, x) &= \frac{\partial\psi(z, x)}{\partial x}, \\ \omega &= \frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \end{aligned}$$

definiert werden. Dabei bezeichnet ω die sogenannte *Vortizität*, welche ein Maß für die Wirbeligkeit des Fließfeldes ist. Wird nun der Rotationsoperator auf die entdimensionierte Impulserhaltungsgleichung (2.14) angewendet, so ergeben sich mit Hilfe der Beziehung

$$\nabla \times \mathbf{v} = \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \mathbf{e}_y = \omega \mathbf{e}_y = -\Delta \psi \mathbf{e}_y$$

und den dimensionslosen Kennzahlen der MCKENZIE-Skalierung folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} -\Delta \omega &= \frac{\partial T}{\partial x} - Rp \frac{\partial C}{\partial x}, \\ \Delta \psi &= -\omega, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T\mathbf{v}) &= \kappa_T \Delta T, \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{v}) &= \kappa_C \Delta C - a \frac{\partial C}{\partial z}. \end{aligned}$$

Mit den dimensionslosen Kennzahlen (2.17) bis (2.19) der RAYLEIGH-Skalierung ergibt sich dasjenige Gleichungssystem, das im Rahmen dieser Arbeit erweitert wird:

$$-\Delta \omega = Ra_T \left(\frac{\partial T}{\partial x} - Rp \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (2.20)$$

$$\Delta \psi = -\omega, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T\mathbf{v}) = \kappa \Delta T, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{v}) = \frac{1}{Le} \Delta C - a \frac{\partial C}{\partial z}. \quad (2.23)$$

Es handelt sich bei diesem um ein gekoppeltes System aus vier nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung, die den advektiven und diffusiven Transport der Temperatur T und der Konzentration C in einer kriechenden Strömung ($Re \ll 1$), also die thermo-solutale Entwicklung des Systems, beschreiben.

Zusätzlich ermöglicht die Konzentrationsgleichung (2.23) den Transport der Konzentration mit einer von außen vorgegebenen Sinkgeschwindigkeit \mathbf{v}_s . Diese relative Bewegung des Suspensats zum Massenzentrum der Suspension wird durch die auf die Partikel wirkende Auftriebskraft bewirkt, da die Partikel und das Fluid unterschiedliche Dichten haben können. Damit wird ein sedimentärer Prozeß beschrieben. Im einfachsten Fall ist die Form der Partikel sphärisch und sie sind so weit voneinander entfernt, daß sie nicht interagieren können und die Sedimentationsgeschwindigkeit durch die STOKES-Geschwindigkeit gegeben ist. Der

so simulierte relative Transport des Suspensats (gravitative Differentiation) stellt die bedeutende Weiterentwicklung des TDSC-Modells gegenüber den rein doppelt-diffusiven Modellen dar (Konvektionsmodelle eines zweikomponentigen Gemisches). Die Impuls- und die Energieübertragung der Partikel in diesem Strom werden vernachlässigt, da sie im Vergleich zu den anderen Beiträgen der Impuls- und Energieflüsse sehr klein sind.

Die Fließgleichung (2.21) beschreibt die Bewegung des als inkompressibel betrachteten Fluids. Es ist eine vereinfachte NAVIER-STOKES-Gleichung, wobei sich die Vereinfachung aus dem charakteristisch langsamen Fließverhalten der Fluide (z. B. Magmen) begründet, d. h., es wird eine beliebig große PRANDTL-Zahl und eine verschwindend geringe REYNOLDS-Zahl angenommen.

Die Gleichungen ohne Sedimentationsanteil (d. h. verschwindende Sedimentationsgeschwindigkeit a und damit $a \frac{\partial C}{\partial z} = 0$) werden als *doppelt-diffusive Konvektion* (double diffusive convection, DDC) bei unendlicher PRANDTL-Zahl (d. h. ohne Trägheitsterm) bezeichnet. In physikalischer Hinsicht stellen die obigen Gleichungen also eine Erweiterung des Modells der doppelt-diffusiven Konvektion um einen Sedimentationsprozeß dar.

Wird hingegen die Partikeldiffusion vernachlässigt (d. h. die LEWIS-Zahl Le strebt gegen Unendlich), so erhält man eine hyperbolische Gleichung für die Konzentration und damit das sogenannte *thermo-sedimentäre Konvektionssystem* (thermo sedimentary convection, TSC). Dieses geht im isothermischen Fall in das sogenannte *sedimentäre Konvektionssystem* (sedimentary convection, SC) über [Trubitsyn/Kharybin 1991].

Mathematisch bricht der zusätzliche gravitative Sedimentationsterm mit \mathbf{v}_s die vorliegende Symmetrie der Gleichungen für Temperatur und Konzentration in DDC. Als Folge entsteht ein neuer Lösungstyp in TDSC, der durch Pulsationen gekennzeichnet ist.

2.6 Randwertbedingungen

Aus der Theorie der (partiellen) Differentialgleichungen ist bekannt (siehe beispielsweise [Michlin 1980]), daß zur eindeutigen Bestimmung des Problems neben den Gleichungen auch die Anfangs- und Randwerte gegeben sein müssen. Anschaulich läßt sich die Bedeutung dieser drei Komponenten wie folgt charakterisieren: Während die Differentialgleichungen im wesentlichen die zeitlich-räumliche Entwicklung des Modells und die Randwertbedingungen dessen Interaktion mit seinem Umfeld beschreiben, geht über die Anfangswertbedingungen die „Vorgeschichte des Modells“ in die Beschreibung ein. Sie stellen also die Ausgangssituation dar, die durch das Modell fortgeschrieben wird.

In der Geophysik behandeln Konvektionsmodelle zumeist Regime, wie sie für die Kern-Mantel-Grenze vorhergesagt werden. Diese zeichnen sich dadurch aus, das in ihnen im allgemeinen der untere Gebietsrand einer höheren Temperatur als der obere ausgesetzt ist.

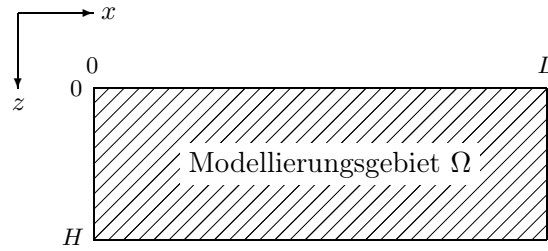
Das TDSC-Modell wird zumeist für relativ einfache Randwertbedingungen aufgestellt. Dazu wird das System von Differentialgleichungen üblicherweise auf einem rechteckigen Gebiet

$$\Omega = \{(z, x) | 0 \leq z \leq H; 0 \leq x \leq L\}$$

dargestellt und gelöst. Zumeist wird dabei eine quadratische ($L = H$) oder längs gestreckte Geometrie ($L > H$) verwendet, da diese eine Konvektionszelle bzw. eine Reihe von Konvektionszellen erfaßt.⁵ Abbildung 2.2 veranschaulicht die Gebietsgeometrie.

Dabei wird angenommen, daß die vertikalen Ränder bei $x = 0$ und $x = L$ Spiegelränder für alle Feldgrößen sind. Dieses bedeutet, daß sich das Gebiet in horizontaler Richtung durch

⁵Gemäß der linearen Stabilitätstheorie wachsen Störungen in Konvektionszellen mit dem Seitenverhältnis $L = \sqrt{2}H$ am schnellsten [Turcotte/Schubert 1982].

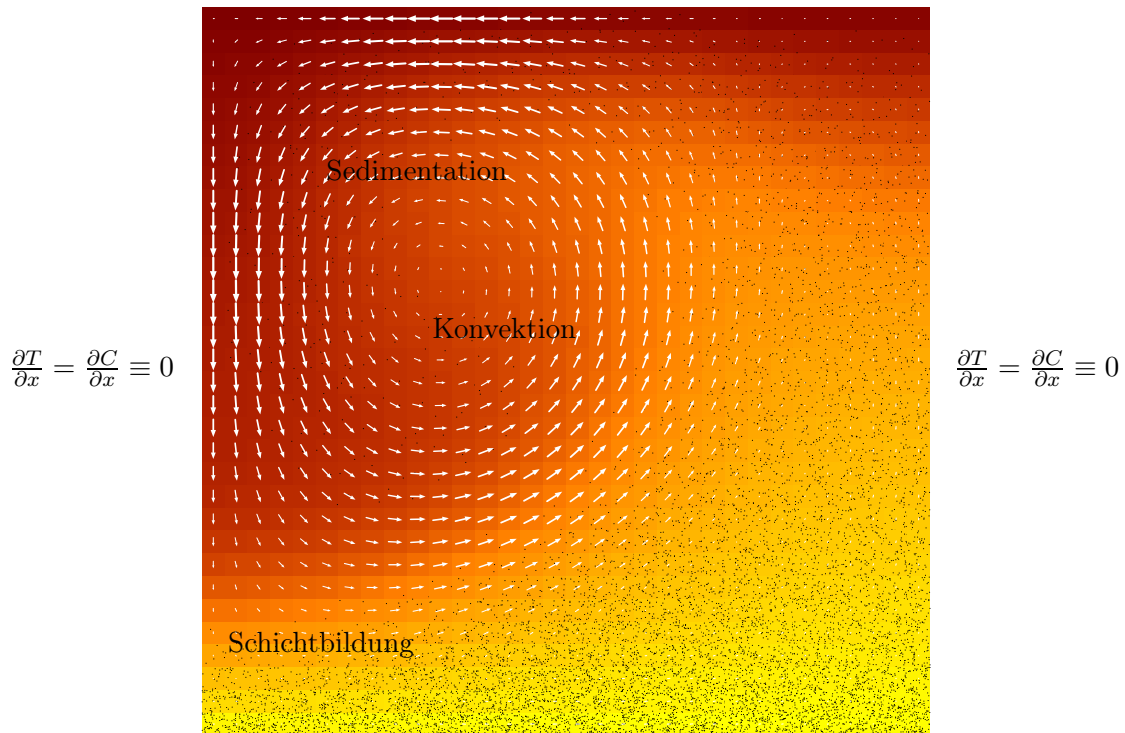
Abbildung 2.2: Geometrie des Modellierungsgebietes Ω und Wahl des Koordinatensystems

Spiegelsymmetrie beliebig fortsetzen läßt. Insbesondere sind Spiegelränder sogenannte *free-slip-Ränder* für die Geschwindigkeit \mathbf{v} des Fluids, d. h., sie sind scherspannungsfreie Ränder, da die Geschwindigkeit jener der Benetzung entspricht. Wenn auch die horizontalen Ränder für die Geschwindigkeit \mathbf{v} free-slip-Ränder und damit impermeabel für das Fluid sind, gilt

$$\psi|_{\text{Rand}} = \text{const.} = 0, \quad \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right|_{z=\text{const.}} = 0 \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right|_{x=\text{const.}} = 0.$$

Die Stromfunktion $\psi(z, x)$ muß daher aufgrund der free-slip-Bedingung auf allen Rändern konstant sein. Diese Konstante ist frei wählbar und wird Null gesetzt. Die beiden POISSON-Gleichungen für die Stromfunktion ψ und die Vortizität ω können also mit der gleichen Implementierung eines numerischen POISSON-Lösers ausgewertet werden.

$$T = C \equiv 0$$



$$T = C \equiv 1$$

Abbildung 2.3: Randwertbedingungen des TDSC-Modells für Temperatur T und Konzentration C . Das Temperaturfeld ist farbig kodiert, die Konzentration wird durch die Dichte schwarzer Punkte und das Fließfeld durch Vektoren symbolisiert.

Für die Temperatur T und die Konzentration C gelten an den vertikalen Rändern mit

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} \equiv 0$$

NEUMANNsche Randwertbedingungen. Diese geben die räumlichen Änderungsraten der Feldgrößen vor und beschreiben in diesem Fall Wände, die für den Wärmefluß und den Konzentrationstransport undurchlässig sind. Die Magmenkammern werden also als weitgehend isoliert betrachtet.

$$\psi = \omega \equiv 0$$

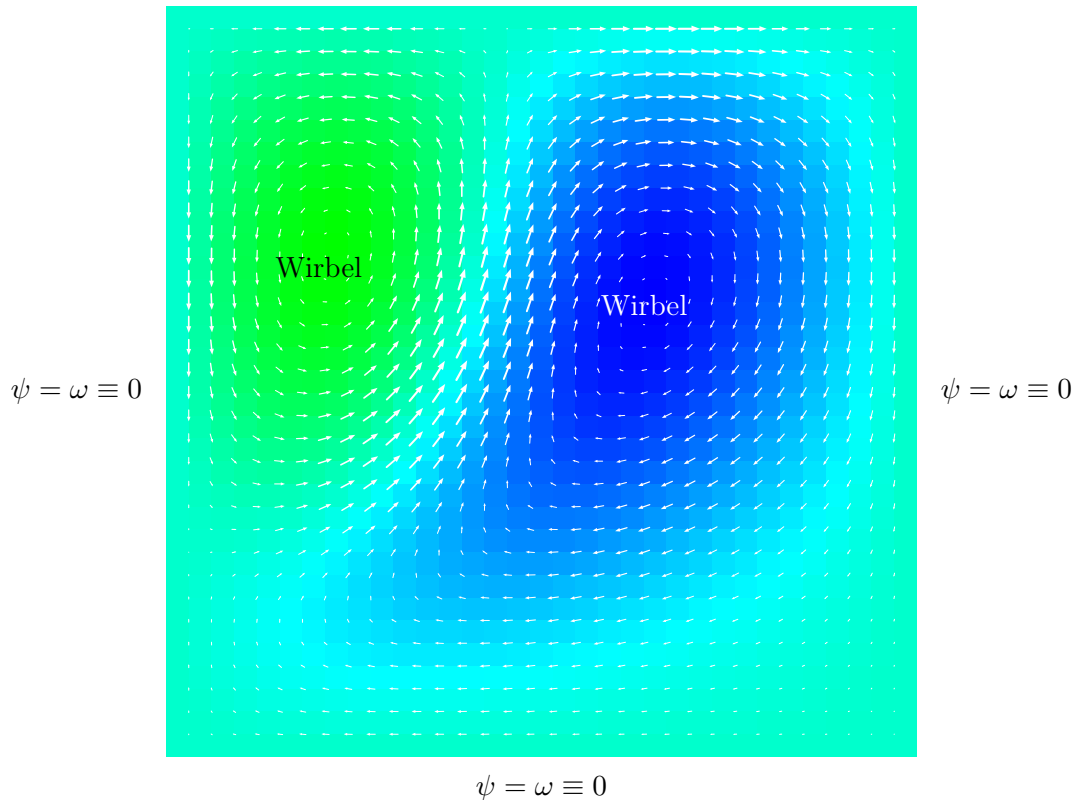


Abbildung 2.4: Randwertbedingungen des TDSC-Modells für Stromfunktion ψ und Vortizität ω . Die Stromfunktion ist farblich kodiert, und das aus ihr resultierende Fließfeld wird durch Vektoren symbolisiert. Die Wirbel haben gegenläufigen Drehsinn und sind deswegen unterschiedlich eingefärbt. Da die Ränder scherspannungsfrei sind, verlaufen die Geschwindigkeitsfeldlinien an den Rändern parallel zu diesen.

Auf den horizontalen Rändern werden für die Temperatur und die Konzentration DIRICHLETSche Randwertbedingungen angenommen und damit die Werte der Feldgrößen selbst vorgegeben: $T = C \equiv 0$ auf dem oberen und $T = C \equiv 1$ auf dem unteren Rand. In der Modellierung entspricht dieses einer Kühlung der Zelle von oben und einer Erwärmung der Zelle vom Boden her. Hinsichtlich der Konzentrationsverteilung bedeuten diese Randwertbedingungen die Einstellung eines lokalen Minimums auf dem oberen Rand und die eines lokalen Maximums auf dem unteren Rand. Anschaulich läßt sich dieses durch die Angrenzung des Modellgebietes an ein unerschöpfliches Wärme- und Konzentrationsreservoir erklären, aus dem Wärme und Konzentration über den Gebietsboden nachgefüllt wird. Dies zeigt die Analogie der Randwertbedingungen zu den vermuteten Begebenheiten an der Kern-Mantel-Grenze, die durch aufgeschmolzene Magmen und aus dem Erdkern aufsteigende Wärme gekennzeichnet ist.

Die Gleichungen des *klassischen* TDSC-Modells werden damit zumeist unter den folgenden Randwertbedingungen gelöst (siehe Abbildungen 2.3 und 2.4):

$$\begin{aligned}
 \psi = \omega &\equiv 0 && \text{auf allen Rändern (d. h. für } x = 0, x = L \text{ oder } z = 0, z = H), \\
 T = C &\equiv 0 && \text{auf dem oberen Rand (d. h. für } z = 0), \\
 T = C &\equiv 1 && \text{auf dem unteren Rand (d. h. für } z = H) \text{ und} \\
 \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} &\equiv 0 && \text{auf den seitlichen Rändern (d. h. für } x = 0 \text{ und } x = L).
 \end{aligned}$$

Das im TDSC-Modell betrachtete Regime ist also dadurch gekennzeichnet, daß die unteren und oberen Ränder isothermisch und die Seitenwände isolierend sind. Alle Ränder sind zudem impermeabel für den Fluidtransport.

Neben den in unserem Modell verwendeten gibt es noch eine Vielzahl weiterer Randwertbedingungen. Beispielsweise sorgen die sogenannten *periodischen Randwertbedingungen* dafür, daß zwei Gebietsgrenzen aufeinander abgebildet werden. Damit ist die betreffende Topologie hinsichtlich dieser Gebietsgrenze geschlossen, d. h., das Gebiet kann über diesen Rand periodisch durchlaufen werden. Beispielsweise ergibt sich im Falle eines zweidimensionalen Gebietes bei Verwendung periodischer Randwertbedingungen in einer Dimension ein Zylinder, bei ausschließlicher Verwendung von periodischen Randwertbedingungen dagegen ein Torus.

2.7 Erweiterung auf Partikel veränderlicher Größe

Im folgenden soll dargelegt werden, wie das Ausgangsmodell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion im Rahmen unserer Untersuchungen erweitert wurde. Dazu muß zum einen die Vorstellung von der durch die Konzentration im Modell beschriebenen Komponente verallgemeinert werden, so daß nun Partikel verschiedener Größe gleichzeitig berücksichtigt werden können. Dann gilt es, Prozesse zu integrieren, die die Verteilung des Größenklassenspektrums zu verändern vermögen. Schließlich werden die Konzentrationsrandwertbedingungen so modifiziert, daß sie das System in dem gewonnenen Freiheitsgrad nicht zu stark einschränken.

2.7.1 Motivierung

Aufgrund der leicht unterschiedlichen Dichten von Fluid und suspendierten Partikeln tritt infolge der Gravitationsbeschleunigung eine Dichtedifferentiation der beiden Komponenten auf. Die Partikel sinken in Richtung der Gravitationsbeschleunigung, werden dabei jedoch durch Reibungsprozesse gebremst. Für sphärische, nicht miteinander interagierende Partikel führen diese bei laminarer Strömung zu einer effektiven Sinkgeschwindigkeit, die nach STOKES quadratisch vom Radius R der Partikel abhängt (z. B. [Kuchling 1989]):

$$v_s \approx v_{\text{Stokes}} = \frac{2}{9} \frac{\varrho g}{\eta} R^2 \quad \implies \quad R \sim \sqrt{v_{\text{Stokes}}}, \quad (2.24)$$

mit $\varrho = \varrho_p - \varrho_f$ als Dichtedifferenz zwischen Partikel und Fluid, g als Betrag der Gravitationsbeschleunigung und η als dynamischer Viskosität des Fluids. Die von außen vorgegebene Sinkgeschwindigkeit (in Form des normierten Segregationsparameters $a = \frac{v_s}{v_0}$) ist daher ein Maß für die Größe der Partikel.

Die Untersuchungen von LEU [1997] haben unter anderem gezeigt, daß das Systemverhalten des TDSC-Modells in starkem Maße von der Größe der Partikel abhängt. So entstand die Zielsetzung, diese Abhängigkeit eingehender zu untersuchen. Dazu ist es jedoch notwendig, das TDSC-Modell auf Partikel veränderlicher Größe zu erweitern.

Dies geschieht in zwei Schritten: Zuerst werden unter Beibehaltung der Rahmenbedingungen des TDSC-Modells Partikel unterschiedlicher Größe eingeführt. Dann wird das Modell um die Fähigkeit erweitert, die Verteilung der Partikelgrößen dynamisch zu bestimmen. Der hierfür gewählte Ansatz sieht den Übergang zwischen einzelnen Partikelgrößen vor, so daß Partikel veränderlicher Größe betrachtet werden können.

2.7.2 Erweiterung auf unterschiedliche Partikelgrößen

Im einfachsten Fall unterscheiden sich Partikel unterschiedlicher Größe lediglich in ihrem Volumen, d. h., alle anderen physikalischen Eigenschaften, wie Form und Dichte, sind für alle Partikel gleich. Kann zudem angenommen werden, daß die Gestalt der Partikel kugelförmig ist, so unterscheiden sie sich einzig in ihrem Radius.

Aufgrund der Abhängigkeit der Sinkgeschwindigkeit (2.24) von der Partikelgröße impliziert eine derartige Erweiterung des TDSC-Systems die Berücksichtigung unterschiedlicher Sinkgeschwindigkeiten. Da damit für jede einzelne Partikelgröße eine eigene Konzentrationsgleichung in der Art (2.23) gelöst werden muß, dieses jedoch nicht für ein kontinuierliches Partikelgrößenpektrum sinnvoll möglich ist, bietet es sich an, die Partikel in Größenklassen zusammenzufassen, d. h., auf der Ebene der Differentialgleichungen nur diskrete Partikelgrößen zu betrachten.

Damit muß das Gleichungssystem der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion für jede Partikelgrößenklasse um eine Massenerhaltungsgleichung der Form

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \nabla \cdot (C_k \mathbf{v}_m) = D_k \Delta C_k - a_k \frac{\partial C_k}{\partial z}$$

ergänzt werden. Die Partikelkonzentration C_k stellt dabei die Konzentration der Partikel der Größenklasse k dar. Da nicht nur die Sinkgeschwindigkeit a_k von der Partikelgröße

$$a_k \sim R_k^2, \tag{2.25}$$

sondern auch die Partikeldiffusivität D_k von dieser abhängt, müssen nun auch für jede Partikelgrößenklasse unterschiedliche Diffusivitäten berücksichtigt werden (z. B. [Landau/Lifschitz 1991]):

$$D_k \sim \frac{1}{R_k}. \tag{2.26}$$

Dabei bleiben alle Partikel in *einem* Fluid suspensiert, so daß weiterhin kein Mehrphasenfluß betrachtet werden soll. Daher können die verbleibenden Gleichungen für die Energie- und Impulserhaltung unverändert vom klassischen TDSC-Modell übernommen werden. Somit bezeichnet die Konzentration C weiterhin den Volumenanteil des Suspensats, nun jedoch aufgefaßt als Gesamtvolumenanteil der Partikel aller Größenklassen.

2.7.3 Veränderung der Partikelgrößenverteilung

Das durch die Erweiterung auf verschiedene Partikelgrößen entstandene Modell verhält sich in der bislang skizzierten Form wie ein übliches TDSC-Modell, welches eine von der Partikelverteilung abhängige effektive Partikelgröße aufweist. Ursache dessen ist der zugrundeliegende Kontinuumsansatz, in den die Partikeleigenschaft nur als integralen Wert eingehen. Die effektive Partikelgröße bedingt damit lediglich eine Reskalierung des externen Parameters Sinkgeschwindigkeit und der ihr zugrundeliegenden Längenskala (siehe Gleichung 2.24).

Damit besitzt das System noch nicht die Möglichkeit, sich selbständig eine geeignete Partikelgröße auszuwählen, d. h., ein bestimmtes Partikelgrößenpektrum zu bevorzugen. Dazu

ist es notwendig, daß sich die Partikelgrößenverteilung im Laufe der Simulation ändern kann. Diese Veränderung sollte in möglichst geringem Maße fremdbestimmt sein, da sich ansonsten der durch die Partikelgrößenwahl gewonnene Freiheitsgrad nicht entfalten kann.

Die Partikelgrößenverteilung kann unter Beibehaltung der Erhaltungssätze auf unterschiedliche Weise verändert werden. Neben einem *Quellen- und Senkenansatz*, der innerhalb des Modellgebietes Partikel geeigneter Größe auftreten bzw. verschwinden läßt, kann eine Veränderung auch beispielsweise mittels eines *Randwertbedingungsansatzes*, bei dem über die Randwertbedingungen Einfluß auf die Partikelgrößenverteilung genommen wird, erfolgen.

Neben diesen das Spektrum direkt beeinflussenden Vorgehensweisen gibt es auch die Möglichkeit, in das System *Umverteilungsprozesse* zu integrieren, die aus sich heraus eine Veränderung bewirken. Als Beispiele dafür können Koagulation und Breakup, also die Bildung größerer Partikel aus kleineren durch Anlagerung bzw. Verschmelzung und das Auseinanderbrechen größerer Partikel in kleinere, dienen. Beide Prozesse realisieren eine Umverteilung der Partikelmasse unter strikter Erhaltung der Gesamtmasse.

2.7.3.1 Koagulation

Unter Koagulation soll im folgenden ein Prozeß der Vereinigung von kugelförmigen Partikeln homogener Dichte verstanden werden. Da das hinter dem Koagulationsprozeß stehende Modell in erster Linie auf einem Partikelansatz beruht, gilt es eine Formulierung zu wählen, die sich in das TDSC-Ausgangsmodell, dem ein Kontinuumsansatz zugrunde liegt, integrieren läßt. Dieses läßt sich dadurch erreichen, daß die Koagulation durch eine Koagulationsrate $\frac{\partial}{\partial t}N(V, \dots)$ makroskopisch beschrieben wird. In diese geht die Konzentration $C(\mathbf{x}, t, V)dV$ an Partikeln mit Volumina im Intervall $[V, V + dV]$ in Gestalt von Partikelanzahldichten $N(V, \dots)$ ein.

Eine allgemeine Formulierung des Koagulationsprozesses läßt sich in Form einer Bilanzgleichung vornehmen. Dazu wird die zeitliche Änderungsrate $\frac{\partial N}{\partial t}$ der Partikelanzahldichte $N(V, \dots)$ als Integralgleichung aufgestellt:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) \right]_{\text{coa}} = \int_0^{\frac{V}{2}} n(V', V - V') dV' - \int_0^{\infty} n(V, V') dV'. \quad (2.27)$$

Darin bezeichnet $n(V_1, V_2) dV_1 dV_2$ die mittlere Anzahl von Vereinigungen zwischen Partikeln mit Volumina aus den Intervallen $[V_1, V_1 + dV_1]$ und $[V_2, V_2 + dV_2]$ pro Volumen und Zeit.

Das erste Integral in der allgemeinen Koagulationsgleichung (2.27) beschreibt den Gewinn an Partikeln des Volumens V durch Koagulation von Partikeln der Volumina V' und $V - V'$, wobei $V' < V$ ist. Das zweite Integral trägt dem Verlust an Partikeln des Volumens V durch Koagulation mit einem anderen Partikel beliebigen Volumens Rechnung und gewährleistet somit die Massenerhaltung dieser Integro-Differentialgleichung. Letzteres ermöglicht dann einen reinen Umverteilungsprozeß bezüglich der Masse, wobei die Gesamtmasse erhalten bleibt.

Um diese allgemeingültige Gleichung nun auf das betrachtete Modell anwenden zu können, müssen konkrete Annahmen über den eigentlichen Koagulationsprozeß gemacht werden. Im folgenden wird daher davon ausgegangen, daß die Koagulation auf der Vorstellung eines Stoßprozesses mit geometrisch bestimmter Vereinigungswahrscheinlichkeit beruht. Zudem wird angenommen, daß sich der modellierte Koagulationsprozeß stets als Folge von sukzessiven Interaktionen zwischen jeweils zwei Partikeln betrachten läßt.

Zur Bestimmung der Koagulationswahrscheinlichkeit zweier Partikel gilt es zuerst, die Wahrscheinlichkeitsdichte der Relativgeschwindigkeit zwischen beiden aufzustellen. Dazu wird vorausgesetzt, daß sich die Geschwindigkeit der koagulierenden kugelförmigen Partikel aus zwei

Anteilen zusammengesetzt läßt: der Sinkgeschwindigkeit \mathbf{v}_s des Partikelstromschwerpunktes und einer nach MAXWELL zufällig verteilten Individualgeschwindigkeit der Partikel. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\phi(V_1, V_2, \mathbf{v})$ für die Relativgeschwindigkeit

$$\mathbf{v} := \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}$$

zwischen den zunächst betrachteten zwei Partikeln mit den Einzelvolumina V_1 und V_2 und den Individualgeschwindigkeiten \mathbf{v}_1 und \mathbf{v}_2 beträgt

$$\phi(V_1, V_2, \mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{v_x^2 + v_y^2 + (v_z + v_s^r)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Darin bezeichnet v_s^r den Betrag der Relativgeschwindigkeit der Partikel bezüglich des Partikelstromschwerpunktes

$$v_s^r = v_s(V_1) - v_s(V_2)$$

und σ die Streuung des Erwartungswertes der Wahrscheinlichkeitsdichte für die Relativgeschwindigkeit:

$$\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = \frac{2\bar{E}}{\varrho_p} \left(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{V_2} \right).$$

\bar{E} entspricht der mittleren kinetischen Energie der Partikel und ϱ_p ihrer Dichte.

Dem gewählten geometrischen Ansatz liegt eine den Wechselwirkungsquerschnitten analoge Vorstellung zugrunde. Für zwei kugelförmige Partikel der Radien R_1 und R_2 mit der Gesamtprojektionsfläche $\pi(R_1 + R_2)^2$ beträgt die Koagulationswahrscheinlichkeit dann

$$\begin{aligned} p_{\text{coa}}(V_1, V_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(V_1, V_2, \mathbf{v}) \frac{\pi(R_1 + R_2)^2 \delta t |\mathbf{v}|}{|\Omega|} p(V_1, V_2, \dots) dv_x dv_y dv_z \\ &= \delta t \frac{\pi(R_1 + R_2)^2}{|\Omega|} \bar{p}v(V_1, V_2). \end{aligned}$$

Dabei bezeichnen δt die Zeit zwischen zwei Stößen, $|\Omega|$ das während dieser Zeit durchstrichene Raumsegment und $p(V_1, V_2, \dots)$ die Vereinigungswahrscheinlichkeit der beiden Partikel. Da die Größe des pro Zeitintervall durchstrichenen Raumsegmentes direkt von der Geschwindigkeit zwischen den Partikeln abhängt, führt die Annahme, daß die Vereinigungswahrscheinlichkeit zweier zusammenstoßender Partikel

$$p(V_1, V_2, \dots) = q(V_1, V_2) \cdot |\mathbf{v}|$$

proportional zur Relativgeschwindigkeit \mathbf{v} zwischen den beiden Partikeln ist, zu dem Erwartungswert

$$\begin{aligned} \bar{p}v(V_1, V_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(V_1, V_2, \mathbf{v}) p(V_1, V_2, \dots) |\mathbf{v}| dv_x dv_y dv_z \\ &= q(V_1, V_2) \left[\sigma^2 + (v_s(V_1) - v_s(V_2))^2 \right] \\ &= q(V_1, V_2) \left[\frac{2\bar{E}}{\varrho_p} \left(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{V_2} \right) + \left(\frac{2}{9} \frac{\varrho_p g}{\eta} \right) \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{4}{3}} \left(V_1^{\frac{2}{3}} - V_2^{\frac{2}{3}} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

$q(V_1, V_2)$ läßt sich als eine Art Anheftwahrscheinlichkeit, die gemäß des geometrischen Ansatzes einzig von den Einzelvolumina der wechselwirkenden Partikeln abhängt, auffassen.

Beim Übergang zu mehreren Partikeln ergibt sich dann die mittlere Anzahl der insgesamt innerhalb der Voluminare $[V_1, V_1+dV_1]$ und $[V_2, V_2+dV_2]$ pro Zeitintervall koagulierenden Partikel zu

$$\begin{aligned} n(V_1, V_2) dV_1 dV_2 &= |\Omega| C(V_1) dV_1 C(V_2) dV_2 \frac{p_{\text{coa}}(V_1, V_2)}{\delta t} \\ &= \pi (R_1 + R_2)^2 \bar{p}\bar{v}(V_1, V_2) C(V_1) C(V_2) dV_1 dV_2 \\ &= \left(\frac{9\pi}{16}\right)^{\frac{1}{3}} \left(V_1^{\frac{1}{3}} + V_2^{\frac{1}{3}}\right) \bar{p}\bar{v}(V_1, V_2) C(V_1) C(V_2) dV_1 dV_2. \end{aligned}$$

Damit läßt sich die Koagulationsrate als durch Koagulation bedingte Änderungsrate der Partikelanzahldichte $N(V, \dots)$ schreiben:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots)\right]_{\text{coa}} &= \int_0^{\frac{V}{2}} n(V', V - V') dV' - \int_0^{\infty} n(V, V') dV' \\ &= \left(\frac{9\pi}{16}\right)^{\frac{1}{3}} \left[\int_0^{\frac{V}{2}} C(V') C(V - V') \bar{p}\bar{v}(V', V - V') \left(V'^{\frac{1}{3}} + (V - V')^{\frac{1}{3}}\right)^2 dV' \right. \\ &\quad \left. - C(V) \int_0^{\infty} C(V') \bar{p}\bar{v}(V, V') \left(V^{\frac{1}{3}} + V'^{\frac{1}{3}}\right)^2 dV' \right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Die so bestimmte Koagulationsrate kann dann über die Konzentrationsgleichung in das erweiterte TDSC-Modell eingekoppelt werden.

In diesem Modell beschreibt die Koagulation also einen Prozeß, bei dem kugelförmige Partikel durch Zusammenstoß ihren Durchmesser vergrößern können. Ohne weitere Prozesse würde sich dadurch bei hinreichender Koagulationsrate das Größenspektrum zu immer größeren Partikeln verschieben. Da größere Partikel zudem mit einer höheren Wahrscheinlichkeit koagulieren, ließe das System nach einer im wesentlichen durch die Koagulationsrate bestimmten Zeitspanne in einen quasistationären Zustand, der durch die jeweils größten Partikel dominiert wird.

2.7.3.2 Breakup

Alle Versuche, über geeignet gewählte Randwertbedingungen in das modellierte System eine Möglichkeit zu integrieren, große Partikel durch kleinere zu ersetzen, führten dazu, daß das Systemverhalten sehr stark durch eben diese Randwertbedingungen bestimmt wurde. Da die Verwendung eines Senkenansatzes die zu modellierenden geologischen Prozesse nur sehr unvollständig wiederzugeben vermocht hätte, wurde ein weiterer Prozeß in das System einbezogen. Dieser als Antagonist zum Koagulationsprozeß integrierte Breakup-Prozeß ist durch die Anforderung charakterisiert, daß es sich um einen spontanen Prozeß der Umverteilung von Masse handeln soll, bei dem die Gesamtmasse ebenfalls stets erhalten bleiben muß.

Der im folgenden mathematisch formulierte Breakup-Prozeß basiert auf der Modellvorstellung, daß Partikel stets in zwei Teile zerfallen. Die mit dieser Annahme einhergehende Einschränkung ist jedoch nicht so stark, wie dieses auf den ersten Blick erscheinen mag, da die

durch den Breakup-Prozeß entstandenen Partikel selbst wiederum in Form einer Kaskade weiter zerfallen können. Der Zerfallsprozeß ist dabei instantan, d. h., durch ihn entsteht keine zeitliche Verzögerung in der Zerfallskette.

Betrachten wir nun den Zerfall eines Partikels des Volumens V' in zwei Fragmente. Seien $\varphi_1(V', V)$ und $\varphi_2(V', V)$ die Wahrscheinlichkeitsdichten für das Volumen V der beiden Fragmente. Die von der Partikelgröße V abhängende Partikelanzahldichte $N(V, \dots)$ erhöht sich bei einem Zerfall demnach um die Summe der Wahrscheinlichkeitsdichten für das Entstehen von Partikeln entsprechender Größe vermindert um die Dichte der zerfallenen Partikel $\delta(V - V')$:

$$N(V, \dots) \rightarrow N(V, \dots) + \varphi_1(V', V) + \varphi_2(V', V) - \delta(V - V').$$

Bezeichnet nun $p_{\text{bre}}(V')$ die Zerfallswahrscheinlichkeit eines Partikels des Volumens V' pro Zeitintervall, dann ergibt sich die zeitliche Änderung der Partikelanzahldichte zu:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) \right]_{\text{bre}} = \int_0^{\infty} N(V', \dots) p_{\text{bre}}(V') [\varphi_1(V', V) + \varphi_2(V', V) - \delta(V - V')] dV'.$$

Die Integration über den Term der zerfallenen Partikel führt unmittelbar zu einer allgemeinen Formulierung des Breakups in zwei Fragmente:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) \right]_{\text{bre}} = \int_0^{\infty} N(V', \dots) p_{\text{bre}}(V') [\varphi_1(V', V) + \varphi_2(V', V)] dV' - N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V).$$

Die Anzahl der Partikel mit Volumina zwischen V und $V + dV'$, die durch Zerfall eines Partikels des Volumens V' entstanden sind, beträgt also $[\varphi_1(V', V) + \varphi_2(V', V)] dV'$. Der Subtrahend $N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V)$ entspricht der Anzahl der in dem betrachteten Zeitintervall zerfallenen Partikel des Volumens V .

Zum Nachweis der Massenerhaltung gilt es nun zu zeigen, daß die Gesamtmasse aller Partikel zeitlich konstant ist, d. h., deren zeitliche Änderung verschwindet. Bezeichnet $m(V)$ die Masse eines Partikels des Volumens V , so ergibt sich die Gesamtmasse M aller Partikel als Integral der Partikeleinzelmassen mit den jeweiligen Anzahldichten über alle Partikelgrößen:

$$M = \int_0^{\infty} m(V) N(V, \dots) dV.$$

Die zeitliche Änderung der Gesamtmasse M läßt sich als Integral aller mit der jeweiligen Masse gewichteten zeitlichen Änderungen der Partikelanzahldichten auffassen:

$$\frac{\partial}{\partial t} M = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\infty} m(V) N(V, \dots) dV = \int_0^{\infty} m(V) \frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) dV.$$

Im Falle des betrachteten Breakup-Prozesses kann die Änderungsrate $\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots)$ mit Hilfe der Gleichung für den Zerfall in zwei Fragmente ermittelt werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} M &= \int_0^{\infty} N(V', \dots) p_{\text{bre}}(V') \left[\int_0^{\infty} m(V) \varphi_1(V', V) dV + \int_0^{\infty} m(V) \varphi_2(V', V) dV \right] dV' - \\ &\quad \int_0^{\infty} m(V) N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V) dV. \end{aligned}$$

Nach Integration über die Volumina V der Fragmente ergibt sich eine verschwindende zeitliche Änderung der Gesamtmasse und damit der Nachweis der Massenerhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} M = \int_0^{\infty} N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V) [\overline{m}_1(V) + \overline{m}_2(V) - m(V)] dV = 0.$$

Dabei wurde vorausgesetzt, daß die zeitlichen Mittelwerte $\overline{m}_1(V)$ und $\overline{m}_2(V)$ den Erwartungswerten für die Massen der Fragmente entsprechen.

Betrachten wir abschließend den Spezialfall, daß der Breakup-Prozeß stets zu zwei Partikeln mit dem halben Volumen des Ausgangspartikels führt, d. h., beide Fragmente immer dasselbe Volumen aufweisen. Dann sind die Wahrscheinlichkeitsdichten für die Größen beider Fragmente identisch und entsprechen derjenigen der Partikel halben Volumens $\frac{V'}{2}$:

$$\varphi_1(V', V) = \varphi_2(V', V) = \delta\left(V - \frac{V'}{2}\right).$$

Damit ergibt sich die durch den Zerfall bedingte zeitlichen Änderung der Partikelanzahldichte $N(V, \dots)$ zu

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) \right]_{\text{bre}} = 4 \cdot N(2V, \dots) p_{\text{bre}}(2V) - N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V). \quad (2.29)$$

Die so bestimmte Breakup-Rate kann dann über die Konzentrationsgleichung in das erweiterte TDSC-Modell eingekoppelt werden.

Damit ist ein zur Koagulation antagonistischer Prozeß definiert, so daß eine Veränderung der Partikelgröße nicht nur im Wachstum der Partikel, sondern auch in deren Zerfall bestehen kann.

2.8 Modifizierung der Randwertbedingungen

Durch Koagulation und Breakup wurde das Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion um zwei Prozesse erweitert, die innerhalb des Modells die Verteilung der Partikelgröße zu ändern vermögen. Da im Rahmen dieser Arbeit vor allem eine Studie des prinzipiellen Systemverhaltens bei Erweiterung des TDSC-Modells auf veränderliche Partikelgrößen durchgeführt werden soll, bietet es sich an, das Modell möglichst gut von nicht direkt systemimmanenten Einflüssen zu isolieren.

Die im Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion zumeist verwendeten Konzentrationsrandwertbedingungen sehen am oberen und unteren Gebietsrand DIRICHLET-Randwertbedingungen vor. Diese geben den Wert der entsprechenden Größe auf dem Gebietsrand selbst vor. Anschaulich läßt sich ihr Mechanismus zur Aufrechterhaltung der vorgegebenen Randwerte durch einen Strom in das Modellierungsgebiet (unterer Gebietsrand) bzw. aus diesem heraus (oberer Gebietsrand) interpretieren.

Durch die Erweiterung des TDSC-Modells auf Partikel veränderlicher Größe reichen die Konzentrationsrandwertbedingungen des TDSC-Modells nicht mehr aus, um die diesbezügliche Interaktion des Modells mit seinem Umfeld eindeutig zu charakterisieren. Sie geben nur die resultierenden Massenströme an sich vor, nicht jedoch deren Verteilung auf die einzelnen Partikelgrößen.

Unser Ziel bei der Verallgemeinerung war es dabei für lange Zeit, Randwertbedingungen zu konstruieren, die sich als natürliche Erweiterung jener des TDSC-Modell auffassen lassen

und diesen somit im Einklassenfall entsprechen. Trotz intensiver, systematischer Suche nach geeigneten Randwertbedingungen mußten wir jedoch bei deren jeweiligen Erprobung feststellen, daß nahezu alle diese Randwertbedingungen in unangemessener Weise den Partikelumbildungsprozeß beeinflussen, indem sie den durch die veränderliche Partikelgröße gegebenen Freiheitsgrad langfristig aufheben. Sie stellten stets einen außerhalb des eigentlichen Modellgebietes angekoppelten Prozeß zur Veränderung der Partikelgrößenverteilung dar, der zumeist die Partikelgrößenverteilung aufhob und das Modell in den Einklassenfall überführte.

Um den Einfluß auf die Veränderung der Partikelgrößenverteilung gering zu halten, wurden die meisten Untersuchungen daher unter gegenüber dem TDSC-Modell modifizierten Randwertbedingungen durchgeführt. Dazu wurden die DIRICHLET-Randwertbedingungen für die Konzentration am oberen und unteren Rand des Gebietes durch NEUMANN-Randwertbedingungen ersetzt (siehe Abbildung 2.5).

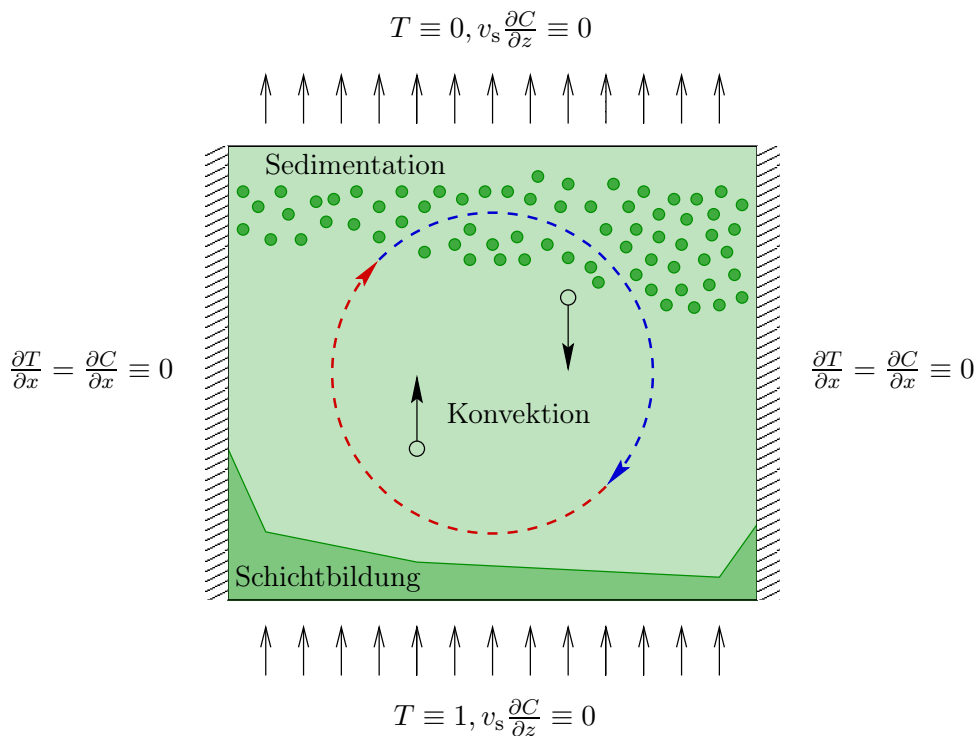


Abbildung 2.5: Closed-box-Szenario bezüglich der Konzentrationsrandwertbedingungen des erweiterten TDSC-Modells. Die Änderung der Konzentration verschwindet auf allen Rändern. Die Temperatur wird auf den horizontalen Rändern konstant gehalten, über die vertikalen Ränder vermag sie sich nicht zu ändern. Stromfunktion und Vortizität verschwinden auf allen Rändern: $\psi = \omega \equiv 0$.

Durch die Veränderung dieser beiden Randwertbedingungen ergibt sich dann ein sogenanntes *Closed-box-Szenario* hinsichtlich der Konzentration, da nun alle Ränder des Modellgebietes für den Massenaustausch isolierend sind. Damit ist die Entwicklung der Verteilung der Partikelgrößen unabhängig von der Ankopplung der Konvektionszelle an ihre Umgebung und wird, da weder Quellen noch Senken innerhalb des Gebietes vorliegen, einzig durch die Kinematik des Differentialgleichungssystems bestimmt.

Alle anderen Randwertbedingungen bleiben unverändert, so daß weiterhin die horizontalen Gebietsgrenzen auf einer konstanten Temperatur gehalten werden und sämtliche Ränder hinsichtlich der Fluidgeschwindigkeit scherspannungsfrei sind.

2.9 Koagulation und Fließfeld

In der bislang vorgestellten Formulierung kann der Koagulationsprozeß über die Veränderung des Größenklassenspektrums und der damit verbundenen Änderung der effektiven Partikel-sinkgeschwindigkeit bzw. der effektiven Konzentrationsdiffusivität das Fließfeld beeinflussen. Es gibt jedoch noch keinen direkten Einfluß des Fließfeldes auf den Koagulationsprozeß, so daß eigentlich nicht von einer Wechselwirkung zwischen diesem und dem Fließfeld gesprochen werden kann.

Die Koagulationsgeschwindigkeit hängt nicht direkt vom Fließfeld, sondern im wesentlichen nur von den Konzentrationsanteilen und der Koagulationswahrscheinlichkeit der beteiligten Partikelgrößen ab. Die Koagulationswahrscheinlichkeit wird dabei aufgrund des gewählten geometrischen Ansatzes in erster Linie durch die Volumina der koagulierenden Partikel bestimmt und nimmt daher für Partikel größeren Durchmessers stark zu, so daß diese beschleunigt weiterwachsen.

Der Einfluß der Ausbreitung der Partikel durch Dispersion im Verhältnis zu jener durch Diffusion wird dabei einerseits von den thermischen Fluktuationen und andererseits von den lokalen Inhomogenitäten des Fließfeldes bestimmt. Zur Realisierung einer Rückkopplung des Fließfeldes auf die Koagulation wird daher angenommen, daß die Geschwindigkeit der Koagulation direkt von der Fließgeschwindigkeit des Fluides abhängt:

$$\sigma^2 \sim v_f^2.$$

Es wird also davon ausgegangen, daß das Quadrat der Geschwindigkeitsstreuung σ proportional zum Quadrat des Betrages der Fluidgeschwindigkeit v_f ist.

Die Voraussetzung für diese Annahme ist eine *lokale* Variation der Koagulationsgeschwindigkeit. So wird diese sicherlich in stark konvektierenden Bereichen hoher Fluidgeschwindigkeit größer als in jenen niedriger Fließgeschwindigkeit sein. Anschaulich wird damit der Vorstellung Rechnung getragen, daß Partikel mit höherer Geschwindigkeit in der gleichen Zeit größere Volumenbereiche durchstreifen und dadurch die Wahrscheinlichkeit des Zusammentreffens mit einem anderen Partikel wächst. Zudem weisen sie beim Zusammenstoß eine höhere kinetische Energie auf, die in diesem Modell zu einer Vergrößerung der Anheftwahrscheinlichkeit q führt (siehe Abschnitt 2.7.3.1).

2.10 Unterschiede zur thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion

Zur Erhöhung der Übersichtlichkeit werden im folgenden die Unterschiede des erweiterten Modells der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion gegenüber dem Ausgangsmodell zusammengefaßt:

- Innerhalb des Modelles können nun Partikel unterschiedlicher Größe existieren. Da größere Partikel schneller sinken und langsamer diffundieren als kleinere, ändern sich die physikalischen Bedingungen des Gesamtsystems bei Veränderung der Partikelgrößenverteilung.
- Partikel können durch Koagulation und Breakup ihre Größe ändern. Dieses sind reine Umverteilungsprozesse auf der Ebene der Volumenkonzentration, wobei die Gesamtvolumenkonzentration der beteiligten Partikel erhalten bleibt.
- Durch die Einbeziehung der partikelbasierenden Koagulations- und Breakup-Ansätze entsteht eine Kombination aus diskreter und Kontinuumsbeschreibung, die durch Verwendung von Anzahldichteänderungsraten zusammengeführt werden.

- Die Gestalt der Partikel wird als kugelförmig angenommen. Partikel verschiedener Größe unterscheiden sich daher in ihrem Radius und damit in ihrem Volumen. Mit dem Radius variieren die Sinkgeschwindigkeit und die Diffusivität der Partikel. Bezeichnet V_0 das Volumen eines Partikels im TDSC-Modell, so ergeben sich die folgenden Volumenabhängigkeiten:

- Sinkgeschwindigkeiten (nach STOKES):

$$v_s(V_0) \sim R^2 \quad \Longrightarrow \quad v_s(V) \sim v_s(V_0) \cdot \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{2}{3}}$$

- Konzentrationsdiffusivitäten:

$$D_C(V_0) \sim \frac{1}{R} \quad \Longrightarrow \quad D_C(V) \sim D_C(V_0) \cdot \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-\frac{1}{3}}.$$

- Da für jede Partikelgröße eine eigene Konzentrationsgleichung getrennt zu lösen und über die Bewegungsgleichung in das Gesamtsystem einzukoppeln ist, werden die Partikel in Größenklassen eingeteilt, die das gesamte Größenspektrum abdecken.
- Auf der Ebene des Ausgangsgleichungssystems tritt somit nur noch die Gesamtvolumenkonzentration aller Partikelgrößen in Erscheinung. Für jede einzelne Klasse gibt deren eigene Volumenkonzentration dabei den Anteil an, den die Partikel der betreffenden Klasse am Volumen der Mischung haben.
- Für die Startlösung wird die Gesamtkonzentration gemäß der Partikelgrößenangangsverteilung auf die Klassen verteilt (siehe Abschnitt 3.4).
- Die Randwertbedingungen für die Konzentration werden dahingehend geändert, daß die Ränder nun auch an der oberen und der unteren Gebietsgrenze undurchlässig sind, d. h., es werden anstatt den DIRICHLET- nun NEUMANN-Randwertbedingungen verwendet.

Zur einfacheren Vergleichbarkeit mit dem ursprünglichen TDSC-Modell, das nur eine Partikelgröße kennt, bietet es sich an, sogenannte *effektive Größen* einzuführen. Diese lassen sich als mit dem Volumenanteil gewichtete Mittelwerte der Partikelgröße, der Sinkgeschwindigkeit und der Konzentrationsdiffusivität definieren.

Die Vergleichbarkeit läßt sich zudem dadurch verbessern, daß die Parameter so gewählt werden, daß sie jenen des TDSC-Modells entsprechen. Dazu wird im folgenden diejenige Partikelklasse, in die ein Partikel des TDSC-Modells aufgrund seiner Größe fallen würde, als *Referenzklasse* bezeichnet. Die Partikel dieser Klasse weisen dieselben physikalischen Eigenschaften wie die Partikel des TDSC-Modells auf, d. h., sie haben die gleiche Sinkgeschwindigkeit und die gleiche Konzentrationsdiffusivität.

Das erweiterte Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion wird so eingerichtet, daß

- die Gesamtkonzentration unabhängig von der Anzahl der betrachteten Partikelgrößenklassen ist. Sie entspricht dabei stets jener des ursprünglichen TDSC-Modells.
- der Schwerpunkt der initialen Partikelverteilung mit der Referenzklasse zusammenfällt.

Damit verhält sich das Modell wie eine *natürliche Erweiterung* des Modells der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion, bei dem die Sinkgeschwindigkeit und die Konzentrationsdiffusivität der Referenzklasse jenen des TDSC-Modells entsprechen. Daher fällt das erweiterte Modell für eine einzige Klasse mit dem Ausgangsmodell in einem Closed-box-Szenario zusammen, weswegen dieses im folgenden auch als *Einklassenfall* bezeichnet werden soll.

2.11 Wechselwirkungen des erweiterten TDSC-Modells

Abschließend soll der Versuch unternommen werden, das sich ergebende erweiterte Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion in seinen Wechselwirkungen schematisch darzustellen (siehe Abbildung 2.6).

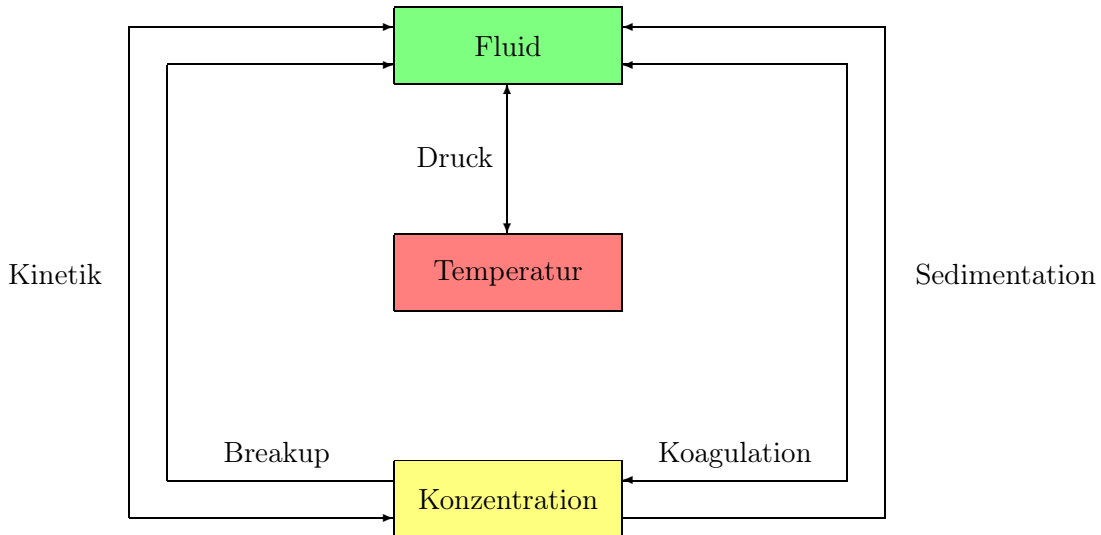


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen des erweiterten TDSC-Modells

Im ursprünglichen TDSC-Modell sind Konzentration und Fluid über die Kinetik gekoppelt. Zudem kann der Prozeß der Sedimentation über die Einschränkung der Konvektionszelle auf das Fließvermögen des Fluids einwirken. Die gravitative Sinkgeschwindigkeit der Partikel des Suspensats ist dabei ein Maß ihrer Größe.

Die im erweiterten Modell hinzugefügten Prozesse der Koagulation und des Breakups ermöglichen eine direkte Wechselwirkung zwischen Konzentration und Fluid, da eine Veränderung der Partikelgröße direkt mit einer Änderung der Sinkgeschwindigkeit und der Partikeldiffusivität einhergeht. Steigt die Partikelgröße durch Koagulation, so erhöht sich die Sinkgeschwindigkeit und die Diffusivität nimmt ab, d. h., die Sedimentation wird beschleunigt und verstärkt. Wird die Partikelgröße hingegen durch den Breakup verringert, so vermindert sich die Sinkgeschwindigkeit und die Partikeldiffusivität wächst, d. h., die zu Boden gesunkenen Partikel können leichter in den Fluidstrom zurückkehren.

Durch die Betrachtung von Partikeln veränderlicher Größe weist das erweiterte Konvektionsmodell einen zusätzlichen Freiheitsgrad gegenüber dem TDSC-Modell auf. Da die Partikelgrößenverteilung sowohl durch die implementierten Prozesse beeinflusst wird als auch diese zu beeinflussen vermag, entsteht ein weiterer Wechselwirkungsmechanismus.

3 Numerische Realisierung

In diesem Kapitel werden die numerischen Methoden zur Lösung des gekoppelten Differentialgleichungssystems beschrieben.

Die parabolischen Gleichungen für die Temperatur und die Konzentration werden mittels einschritt-expliziter Zeitdiskretisierung und der fractional-step-Methode gelöst. Damit die durch das Stabilitätskriterium von COURANT-FRIEDRICHS-LEWY begrenzte Zeitschrittweite durch die starke Spreizung der Sinkgeschwindigkeit für die einzelnen Klassen nicht zu stark reduziert wird, gilt es, den gravitativen Term von den Konzentrationsgleichungen durch Operator-Splitting abzutrennen und mittels eines Charakteristiken-Verfahrens separat zu lösen. Zur schwingungsfreien Reduktion der numerischen Diffusion wird die Methode des flußkorrigierten Transportes verwendet.

Die elliptischen Gleichungen für die Vortizität ω und die Stromfunktion ψ lassen sich mit einem POISSON-Löser in Angriff nehmen. Dieser wird in Form eines Mehrgitter-Verfahrens implementiert und profitiert dadurch nicht nur von dessen guten Konvergenzeigenschaften, sondern eignet sich aufgrund des iterativen Ansatzes auch für die Simulation von Zeitschrittfolgen.

Die Integralgleichung für die Koagulation wird mittels eines Stellvertreter-Verfahrens gelöst und zusammen mit dem separat realisierten Breakup-Prozeß in die Konzentrationsgleichungen eingekoppelt.

Zur Validierung der Realisierung des Konvektionsmodells werden die implementierten Lösungsverfahren anhand analytischer Tests verifiziert und das entwickelte Programm sodann mittels internationaler Benchmarks evaluiert.

3.1 Motivierung

Die im Rahmen des letzten Kapitels aufgestellten Differentialgleichungen (2.20) bis (2.22) lassen sich aufgrund ihrer Nichtlinearität und der Komplexität ihrer Koppelung nicht allgemeingültig analytisch lösen (z. B. [Nauheimer 1993]), sondern nur in Spezialfällen. Daher mußte ein numerisches Verfahren zur Lösung der Gleichungen entwickelt werden. Im folgenden wird der von uns beschrittene Weg zur numerischen Lösung dieses gekoppelten partiellen Differentialgleichungssystems beschrieben.

Um die analytischen Gleichungen numerisch lösbar zu machen, müssen diese Gleichungen selbst durch ein numerisches Modell approximiert werden. Dazu sind die Differentialgleichungen zu diskretisieren, d. h., die in ihnen enthaltenen kontinuierlichen Größen durch diskrete zu ersetzen. Dieses geschieht, indem die (partiellen) Differentiale durch Differenzenquotienten angenähert werden, die auf vielfältigen Approximationsschemata (beispielsweise Finite Differenzen, Finite Elemente oder Finite Volumina) beruhen können [Schwarz 1997]. Dabei gilt es, neben der Genauigkeit auch die Stabilität des Verfahrens sowie den zu ihrer Behandlung benötigten Berechnungsaufwand (Komplexität) bei der Entscheidung für ein spezielles Diskretisierungsverfahren zu berücksichtigen.

3.2 Diskretisierung

Für der Diskretisierung bieten sich die Methoden der Finiten Differenzen, Finiten Elemente und Finiten Volumina an. Finite Elemente sind bei einer komplizierten, im allgemeinen nicht

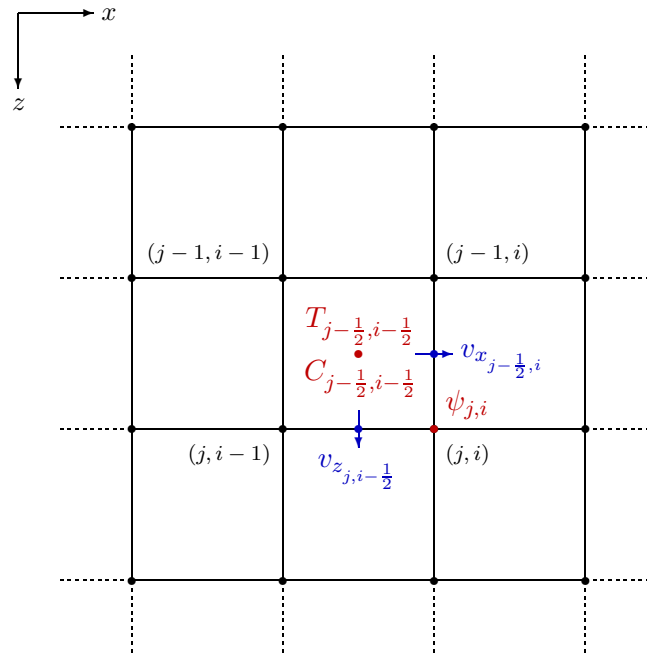


Abbildung 3.1: Benutzung versetzter Gitter für die Feldgrößen (schwarz die Gebietsdiskretisierung, rot die Feldgrößen und blau die abgeleiteten Größen)

regelmäßigen Geometrie des Modellgebietes zu bevorzugen, da mit ihnen die Diskretisierung der Geometrie angepaßt werden kann [Schwarz 1991]. Konvektionsforschung findet vorrangig auf rechteckigen Modellgebieten statt, so daß diese Flexibilität nicht benötigt wird. Damit war lediglich zwischen den Finiten Differenzen und den Finiten Volumina zu entscheiden. Letztere haben dabei den Vorteil, besser die Massenerhaltung¹ zu gewährleisten [Wendt 1992], so daß ihnen der Vorzug gegeben wurde.

Dazu wird mittels des GAUSSschen Integralsatzes

$$\int_{\square_{\mu\nu}} \nabla \cdot \mathbf{j} \, dV = \oint_{\partial \square_{\mu\nu}} \mathbf{j} \mathbf{n} \, dA$$

beispielsweise das Flächenintegral über die Divergenz der Stromdichtefunktion

$$\mathbf{j} := -D\nabla C + C(\mathbf{v}_f - v_s \cdot \mathbf{e}_z)$$

in eine Summation über den Flächenrand umgewandelt. Dieses Vorgehen birgt sowohl Vorteile für die Diskretisierung als auch für die Implementierung des Algorithmus, da Terme höherer Ordnung unterdrückt werden.

Da die zu untersuchenden Strömungsphänomene im allgemeinen großräumige Prozesse darstellen und daher lokale Ereignisse nur ein geringeres Interesse auf sich ziehen, wurde von einer adaptiven Verfeinerung der Gebietsdiskretisierung abgesehen. Um dennoch starke Konzentrations- oder Temperaturkontraste, d. h. große Gradienten, hinreichend gut auflösen zu können, wurden horizontal und vertikal variable Gitterabstände vorgesehen. Aufgrund der einfacheren Nachvollziehbarkeit werden in dieser Ausarbeitung jedoch nur die Formulierungen

¹Finite Volumina werden als *konservativ* oder auch *Kontroll-Volumen-Verfahren* bezeichnet, da durch sie die Größe, für die der Erhaltungssatz gilt (also nicht nur Masse, sondern auch Energie oder Impuls), bei der numerischen Integration innerhalb der Maschinengenauigkeit auf dem gewählten Gitter erhalten bleibt [Samarsky/Nikolaev 1978].

eines äquidistanten Gitters benutzt. Dieser Spezialfall wird auch bei den numerischen Simulationen verwendet, um eine bessere Vergleichbarkeit der Resultate mit den bereits vorhandenen Rechnungsergebnissen der Benchmarks zu erreichen.

Die Diskretisierung benutzt sogenannte *versetzte Gitter* (engl. *staggered grids*), eine Gitteranordnung, bei der die Feldgrößen räumlich so angeordnet sind, daß die zu bestimmenden Größen mit geringem Aufwand in relativ hoher Genauigkeit ermittelt werden können.

In Abbildung 3.1 sind die für die Gebietsdiskretisierung verwendeten Gitternotationen schematisch dargestellt:

- Die vertikale Koordinatenachse (z -Achse) wird von oben nach unten in die Punkte $1 \leq j \leq m$, die horizontale Koordinatenachse (x -Achse) von links nach rechts in die Punkte $1 \leq i \leq n$ unterteilt.
- Die Stromfunktion ψ wird in den Gitterpunkten (j, i) als $\psi_{j,i}$ definiert. Damit sind die vertikalen und horizontalen Geschwindigkeitskomponenten v_z und v_x auf den Zellkanten direkt durch Differenzenquotienten erster Ordnung zu approximieren.
- Temperatur T und Konzentration C sind in den Zellmitten als $T_{j-\frac{1}{2},i-\frac{1}{2}}$ bzw. $C_{j-\frac{1}{2},i-\frac{1}{2}}$ definiert.

Wir diskretisieren also ein zweidimensionales, rechteckiges Gebiet mit kartesischer Geometrie. Die Temperatur und die Konzentration sind dabei in den Zellmittelpunkten, die Stromfunktion und das Wirbelfeld auf den Ecken der einzelnen Zellen definiert. Dadurch sind die Geschwindigkeitsfelder, welche die (advektiven) Flüsse bestimmen, unter einfacher Differenzenbildung auf den Zellwänden in zweiter Ordnung der Genauigkeit gegeben.

3.3 Randwertbedingungen

Damit die Lösungen von Differentialgleichungen eindeutig bestimmt sind, müssen für diese Gleichungen auch Anfangs- und Randwertbedingungen gegeben sein [Michlin 1980]. Während Anfangswertbedingungen den Ausgangszustand des Modells beschreiben, legen Randwertbedingungen dessen Interaktion mit dem Modellumfeld fest. Damit spiegelt sich in den Randwertbedingungen die räumliche Endlichkeit des Modells wider, während die Anfangswertbedingungen eine zeitliche Ankopplung an die Vorgeschichte des Modells darstellen.

Im folgenden sollen zuerst die üblicherweise für Modellierungen der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion verwendeten Randwertbedingungen vorgestellt werden, bevor die im Rahmen der vorgenommenen Erweiterungen benutzten erläutert werden. Zum Studium des ursprünglichen TDSC-Modells werden vor allem die in Tabelle 3.1 aufgeführten Randwertbedingungen verwendet.

$$\begin{aligned}
 \psi = \omega &\equiv 0 && \text{auf allen Rändern (DIRICHLET)} \\
 T = C &\equiv 0 && \text{auf dem oberen Rand (DIRICHLET)} \\
 T = C &\equiv 1 && \text{auf dem unteren Rand (DIRICHLET)} \\
 \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} &\equiv 0 && \text{auf den seitlichen Rändern (NEUMANN)}
 \end{aligned}$$

Tabelle 3.1: Randwertbedingungen des konventionellen TDSC-Modells

Sowohl die vertikalen als auch die horizontalen Ränder sind im TDSC-Modell Spiegelränder für die Fluidgeschwindigkeit \mathbf{v} . Spiegelränder sind insbesondere auch free-slip-Ränder (d. h. scherspannungsfreie Ränder), so daß nicht nur die Geschwindigkeitskomponenten senkrecht

zu den Rändern, sondern auch die Normalenableitungen der Parallelkomponenten auf den Rändern verschwinden.

Für Temperatur und Konzentration werden auf den vertikalen Rändern NEUMANNsche Randwertbedingungen vorausgesetzt, d. h., die seitlichen Ränder sind für den Wärmefluß und den Massentransport undurchlässig. Auf den horizontalen Rändern werden für die Temperatur und die Konzentration DIRICHLETSche Randwertbedingungen angenommen. In der Modellie-

$$\begin{aligned}
 \psi = \omega &\equiv 0 && \text{auf allen Rändern (DIRICHLET)} \\
 T &\equiv 0 && \text{auf dem oberen Rand (DIRICHLET)} \\
 T &\equiv 1 && \text{auf dem unteren Rand (DIRICHLET)} \\
 \frac{\partial C}{\partial z} + v_s C &\equiv 0 && \text{auf dem oberen und dem unterem Rand (NEUMANN)} \\
 \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} &\equiv 0 && \text{auf den seitlichen Rändern (NEUMANN)}
 \end{aligned}$$

Tabelle 3.2: Randwertbedingungen des erweiterten TDSC-Modells

rung entspricht dies für die Temperatur einer Erwärmung des Gebiets von unten und einer Abkühlung von oben. Im Falle der Konzentration bedeuten DIRICHLET-Randwertbedingungen einen permanenten Partikelstrom durch das Gebiet, da Partikel oben abgesaugt und von unten aus einem unbeschränkten Reservoir nachgeliefert werden, so daß sich ein lokales Minimum der Konzentrationsverteilung auf dem oberen Rand einstellt.

Alle Ränder sind somit für das Fluid impermeabel. Die unteren Ränder sind isothermisch und die Seitenwände isolierend. Diese Randwertbedingungen modellieren beispielsweise eine Konvektionszelle im Erdmantel. Dort wächst mit zunehmender Tiefe die Temperatur und es liegt ein nahezu unerschöpfliches Wärmereservoir vor.

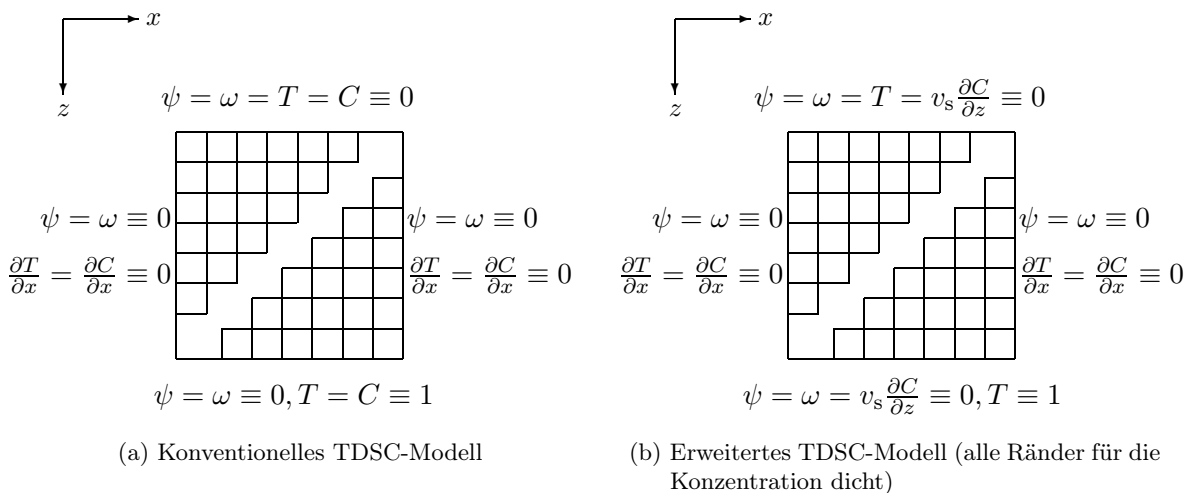


Abbildung 3.2: Randwertbedingungen des konventionellen und des erweiterten TDSC-Modells

Aufgrund der im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Modellerweiterungen hat es sich als sinnvoll erwiesen, das Konvektionssystem hinsichtlich seines Materialflusses hermetisch gegenüber seinem Umfeld zu isolieren, damit die Partikelgrößenverteilung nur durch das System selbst bestimmt und dabei nicht von äußeren Randwertbedingungen beeinflusst wird.² Daher

²Alle Versuche unter Verzicht auf den Breakup-Prozess eine zur Koagulation antagonistische untere Randwertbedingung für die Konzentration zu entwickeln, haben das Konvektionssystem so stark in dem durch den Koagulationsprozess gewonnenen Freiheitsgrad beschränkt, daß die Möglichkeit zur dynamischen Ausbildung einer Partikelgrößenverteilung stets sehr stark eingeschränkt war.

werden nun auch die horizontalen Ränder für die Partikelkonzentration abgeschlossen, so daß ein closed-box-Szenario bezüglich der Partikelkonzentration vorliegt (siehe Tabelle 3.2). In Abbildung 3.2 werden die in TDSC-Modellen üblicherweise benutzten Randwertbedingungen (linke Abbildung) den von uns verwendeten (rechte Abbildung) schematisch gegenübergestellt.

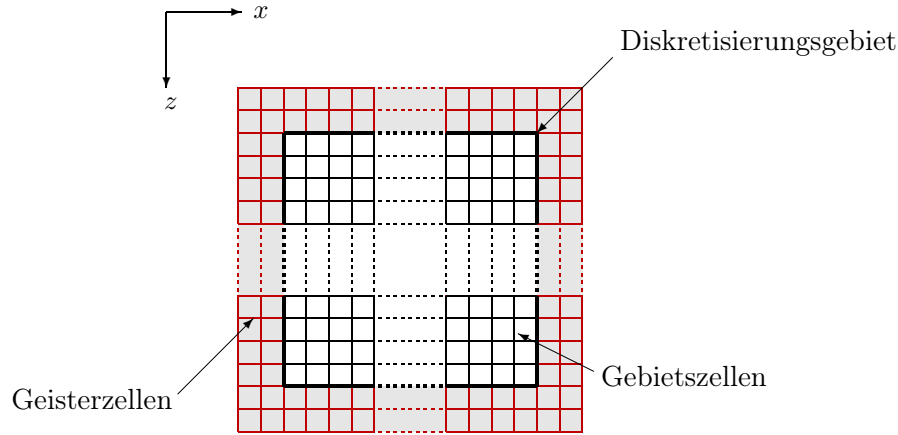


Abbildung 3.3: Umrandung des Diskretisierungsgebiets mit Geisterzellen zur Realisierung der Randwertbedingungen (Geisterzellen schattiert)

Zur Realisierung der Randwertbedingungen bedienen wir uns einer Technik, die auf der Verwendung zusätzlicher Gitterzellen beruht. Abbildung 3.3 stellt diesen Ansatz schematisch dar. Das Rechengebiet ist das Gebiet innerhalb der stärker ausgezogenen Umrandung. Die äußeren beiden Zellenreihen und -spalten dienen der Realisierung der Randwertbedingungen durch sogenannte *Geisterzellen*. Mittels dieser zusätzlichen Zellen ist es möglich, die gewünschten Randwertbedingungen auf dem Gebietsrand zu realisieren. Im Falle einer DIRICHLET-Randwertbedingung wird der gewünschte Temperatur- bzw. Konzentrationswert auf dem Gebietsrand durch eine lineare Interpolation zwischen Gebiets- und Geisterzellen approximiert (siehe Abbildung 3.4). Die Randwertbedingungen für die Vortizität und die Stromfunktion können direkt auf den Gitterpunkten realisiert werden.

Eine NEUMANN-Randwertbedingung läßt sich dadurch realisieren, daß der Gradient des Wertes zwischen Gitter- und Geisterzelle gerade dem gewünschten Wert entspricht. Da wir

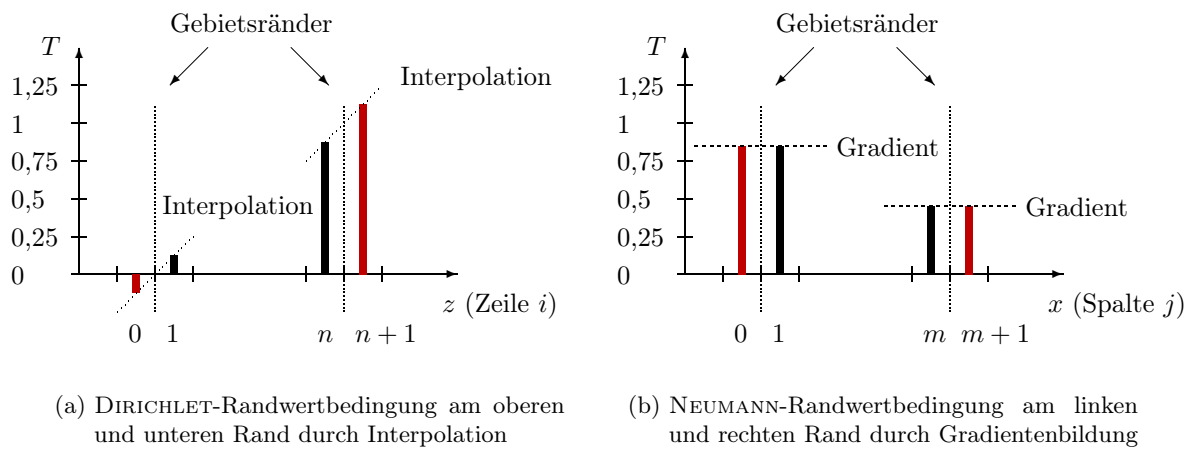


Abbildung 3.4: Realisierung der Randwertbedingungen mittels Geisterzellen am Beispiel der Temperatur

dieses auch für $\omega := \Delta\psi$ mit guter Genauigkeit erreichen wollen, verwenden wir zwei Spalten bzw. Reihen von Geisterzellen zu deren Approximation.

3.4 Anfangswertbedingungen

Während die Differentialgleichungen die räumlich-zeitliche Entwicklung des Modells vorgeben, beschreiben die Anfangswertbedingungen den Zustand des Systems zum Zeitpunkt des Simulationsstartes. In ihnen ist somit implizit die Vergangenheit des Modells niedergelegt. Da sie im allgemeinen die Fortentwicklung des Systems vorzeichnen, stellen sie eine Einschränkung des Lösungsraumes dar. Im Falle einer modelltheoretischen Untersuchung ist daher besonderer Wert darauf zu legen, daß die sich einstellenden Systemzustände möglichst unabhängig von den Anfangswertbedingungen sind.

Da wir daran interessiert sind zu verstehen, wie die Partikelgröße über die Sedimentation das Einsetzen der Konvektion in dem auf TDSC aufbauenden Modell beeinflusst, untersuchen wir den schwach nichtlinearen Fall numerisch. Aus diesem Grund verwenden wir die zeitunabhängigen trivialen Lösungen des hydrodynamischen Ruhezustandes ($\mathbf{v} = 0$) der Gleichungen (2.20) bis (2.23) als Startbedingungen [Fradkov et al. 1993b]:

$$\psi(z, x)|_{t=t_0} = 0 \quad (3.1)$$

$$\omega(z, x)|_{t=t_0} = 0 \quad (3.2)$$

$$T(z, x)|_{t=t_0} = z \quad (3.3)$$

$$C(z, x)|_{t=t_0} = \frac{e^{a \cdot Le \cdot z} - 1}{e^{a \cdot Le} - 1}. \quad (3.4)$$

Die triviale Lösung der Temperaturgleichung (3.3), also die Lösung der Gleichung im zeitunabhängigen Fall, entspricht in der Natur der nahezu linear mit der Tiefe wachsenden Temperaturverteilung des Erdmantels. Der linearen Temperaturverteilung wurde eine kleine Störung (Kosinus-Schwingung mit einer Amplitude von 2%) aufgeprägt, um das System anzuregen und so das dynamische Verhalten des Modells studieren zu können:

$$T(z, x) = z \cdot \left(1 - 2 \cdot 10^{-2} \cdot \cos(\pi x)\right) \quad \text{für } 0 \leq x \leq 1 \text{ und } 0 \leq z \leq 1.$$

Ohne diese leichte Nichtlinearität entstünden keine horizontalen und vertikalen Verschiebungs-kräfte. Die Ausgangssituation wäre gravitativ stabil, so daß Konvektion überhaupt nicht auftreten könnte, da ja auch das Fluid anfänglich in Ruhe ist (siehe Gleichungen 3.1 und 3.2). Die Störung ist so gewählt, daß sie nachweislich keinen Einfluß auf das längerfristig gezeigte Verhalten des Konvektionssystems hat. Sie dient lediglich dazu, die Simulation zu starten.

Die anfängliche Konzentrationsverteilung (3.4) wird offensichtlich zunehmend linear, wenn der Sedimentationsparameter a oder die LEWIS-Zahl Le gegen Null tendiert. Mit wachsendem Produkt $a \cdot Le$ zieht sich die Konzentration in einer immer schmaler werdenden Schicht am unteren Gebietsrand zusammen, d. h., es wird die Situation modelliert, daß sich die schwerere Komponente nahe des Gebietsbodens ansammelt.

Als Anfangswertbedingungen werden damit also eine schwach gestörte lineare Temperaturverteilung und ein exponentielles Anwachsen der Konzentration mit der Tiefe verwendet. Für mehrere Klassen muß die Konzentration gemäß der Ausgangsverteilung auf alle Klassen verteilt werden. Dazu wird für jede Partikelklasse die Lösung der eindimensionalen, zeitunabhängigen, advektionslosen Konzentrationsgleichung (unter Berücksichtigung der jeweiligen klassenabhängigen Sinkgeschwindigkeiten und Konzentrationsdiffusivitäten) bestimmt:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{v}) = D \Delta C - \nabla \cdot (C\mathbf{v}_s) \quad \implies \quad 0 = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z}(Cv_s).$$

Bei äquidistanter Diskretisierung $z_i = h \cdot i$ der Tiefe z mit h als Diskretisierungsweite ergibt sich dann aus

$$0 = D^k \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{h^2} - v_s^k \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{h}$$

die Konzentrationsverteilung $C_i^k := C^k(z_i)$ für die Klasse k gemäß

$$C_{i+1}^k = \left(2 + \frac{1}{D^k} v_s^k h\right) C_i^k - \left(1 + \frac{1}{D^k} v_s^k h\right) C_{i-1}^k.$$

Zur Lösung dieser Differenzgleichung läßt sich das sogenannte *Schießverfahren* heranziehen (z. B. [Stoer/Bulirsch 1990]), bei dem ausgehend vom Konzentrationswert am oberen Rand die Werte der jeweils folgenden Zellen aus den beiden vorangegangenen bestimmt werden (siehe Abbildung 3.5). Durch eine Iteration werden die Steigungen so angepaßt, daß der

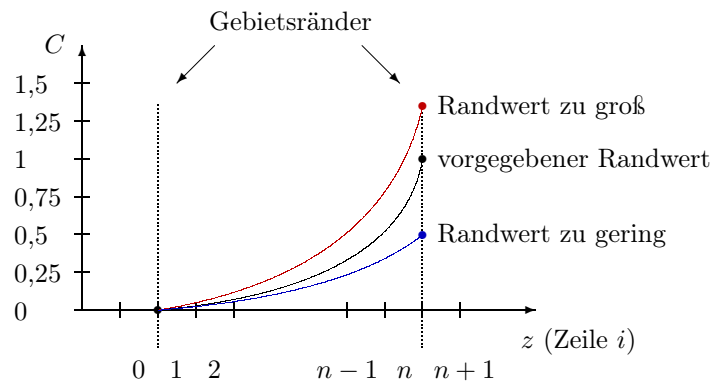


Abbildung 3.5: Schießverfahren zur Bestimmung der klassenabhängigen anfänglichen Konzentrationsverteilung. Ausgehend vom Konzentrationswert am oberen Rand werden die Werte der jeweils folgenden Zellen aus den beiden vorangegangenen bestimmt und durch Iteration die Steigungen so angepaßt, daß der vorgegebene Konzentrationswert des unteren Randes möglichst gut eingestellt wird.

vorgegebene Konzentrationswert des unteren Randes möglichst gut eingestellt wird (siehe [Press et al. 1995]). Nachdem auf diesem Wege die Anfangsverteilung ermittelt worden ist, kann die Konzentration anteilig auf die einzelnen Klassen verteilt werden. Nach Normierung der Gesamtkonzentration auf jene des Einklassenfalls (TDSC-Modell) ist die Konzentration gemäß des anfänglichen Partikelgrößenklassenspektrums verteilt.

3.5 Implementierung

Die Zeitableitungsterme in der Temperatur- und den Konzentrationsgleichungen führen dazu, daß das mathematische Modell zur Beschreibung des um einen Koagulations- und Breakup-Prozeß erweiterten Konvektionssystems zeitabhängig ist. Die Anwendung numerischer Verfahren erfordert nicht nur eine räumliche Diskretisierung des Modellgebietes, sondern verlangt ebenso eine Diskretisierung der Modellzeit. Die im mathematischen Modell kontinuierlich formulierten Feldgrößen wie Stromfunktion, Temperatur und Konzentration sind daher in der numerischen Realisierung durch diskrete Approximationen zu ersetzen, die sowohl räumlich als auch zeitlich variieren können. Die mittels numerischer Lösungsverfahren gewonnenen Ergebnisse entsprechen daher dem Zustand des Systems zu einem bestimmten Zeitpunkt.

Die Verfahren zur Lösung zeitabhängiger Problemstellungen lassen sich anhand der ihnen zugrundeliegenden Methoden zur Berücksichtigung der zeitlich diskretisierten Modellgrößen

zwischen zwei Extremen anordnen: Während die *expliziten* Lösungsverfahren zur Bestimmung der Ergebnisse des neuen Zeitschrittes nur jene der bereits zurückliegenden Zeitschritte heranziehen, werden in den *impliziten* Lösungsverfahren die im jeweiligen Zeitschritt bereits aktualisierten Werte verwendet. Dieses führt zu einer im allgemeinen besseren globalen Stabilität der Verfahren und ermöglicht damit größere Zeitschrittweiten als bei expliziten Lösungsverfahren [Schwarz 1997].

Bei der Auswahl und Implementierung geeigneter Lösungsverfahren für das gekoppelte System partieller Differentialgleichungen sind neben der benötigten Lösungsgenauigkeit und angestrebten Lösungseffizienz weitere Aspekte zu beachten. So sind explizite Verfahren vielfach einfacher zu implementieren, da sich der Algorithmus unmittelbar aus der diskretisierten Form der Differentialgleichung ergibt. Zudem eignen sie sich aufgrund der explizit einfließenden Zeitdiskretisierung im allgemeinen besser zur Integration verschiedener Lösungsmethoden für unterschiedliche Gleichungen.

In dem vorliegenden Fall wurde eine durchgängig explizite Lösungsstrategie gewählt, da diese die Synchronizität der jeweiligen Lösungen für die unterschiedlichen Feldgrößen in den Transportgleichungen und den angekoppelten Massenumverteilungsgleichungen einfacher gewährleistet.

3.5.1 Automatische Zeitschrittweitensteuerung des Systems

Da für jeden Zeitschritt alle Gleichungen des gekoppelten Differentialgleichungssystems zu lösen sind, ist es zur Reduzierung des Berechnungsaufwandes erstrebenswert, die zwischen zwei Zeitschritten vergehende Modellzeit, die sogenannte *Zeitschrittweite*, jeweils möglichst groß zu wählen, so daß die Anzahl der insgesamt zu lösenden Gleichungen für eine angestrebte Simulationszeit minimiert wird.

Bei expliziten Lösungsverfahren darf die Zeitschrittweite dabei nicht zu groß gewählt werden, da ansonsten die Lösungsverfahren instabil werden. Die maximale Zeitschrittweite Δt

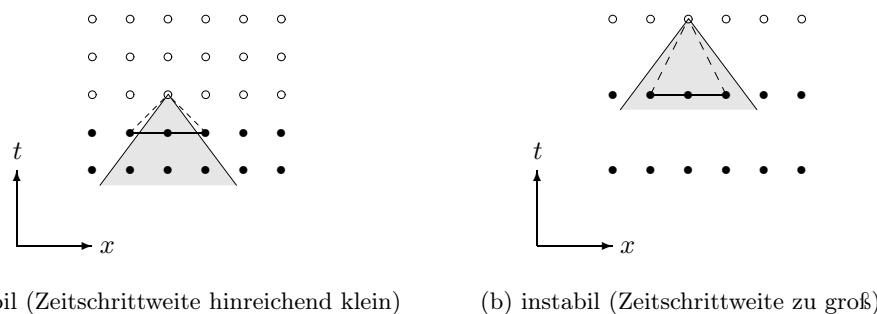


Abbildung 3.6: Erläuterung des Stabilitätskriteriums: Die partiellen Differentialgleichungen eines Anfangswertproblems implizieren, daß der Wert eines Punktes von der Information innerhalb eines räumlichen Fensters zur Vergangenheit abhängt, das schattiert dargestellt ist. Das dem Diskretisierungsschema entsprechende Abhängigkeitsgebiet wird durch die Wahl der Punkte eines Zeitschrittes bestimmt, die durch verbundene ausgefüllte Kreise symbolisiert werden. Deren Werte dienen zur Bestimmung des Wertes eines Punkte im nächsten Zeitschritt (angedeutet durch die gestrichelten Linien). Ein Differenzenschema ist dann COURANT-stabil, wenn das Abhängigkeitsgebiet der Differenzen größer als jenes der partiellen Differentialgleichungen ist, und instabil im umgekehrten Fall (nach [Press et al. 1995]).

wird durch das Prozeßgeschehen selbst vorgegeben, da kein Partikel des Fluids während dieser Zeit eine größere Strecke als die Gitterdiskretisierungsweite zurücklegen darf, damit das Lösungsverfahren COURANT-stabil ist [Griebel et al. 1995]. Abbildung 3.6 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

Damit ist die maximale Zeitschrittweite durch den Betrag der größten lokalen Fließgeschwindigkeit des Fluids begrenzt. Diese als *Stabilitätskriterium von COURANT-FRIEDRICHS-LEWY* bezeichnete Bedingung kann daher zur Bestimmung einer jeweils optimalen Zeitschrittweite herangezogen werden. Im Falle einer äquidistanten Gitterdiskretisierung wird damit die Bedingung

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\left(2 \frac{v_{\max}}{h} + \frac{4}{h^2 \cdot Le}\right)}$$

zur Bestimmung der Zeitschrittweite benutzt. Dabei bezeichnet v_{\max} den Betrag der maximalen lokalen Fluidgeschwindigkeit. Der erste Summand im Nenner berücksichtigt die Steuerung der Zeitschrittweite durch die Advektion, der zweite jene durch die Diffusion. $\frac{1}{2}$ ist ein zusätzlich Sicherheitsfaktor, der gewährleisten soll, daß die Schrittweite stets unter der durch das Stabilitätskriterium vorgegebenen Schranke liegt.

3.5.2 Parabolische Gleichungen

Die parabolischen Gleichungen für die Temperatur und die Konzentration werden, bei gegebenen Anfangs- und Randwertbedingungen, mittels einschritt-expliziter Zeitdiskretisierung und der sogenannten *fractional-step-Methode* gelöst [Oran/Boris 1987]. Im Falle der Temperaturgleichung bedeutet dieses, daß alle Terme außer der Zeitableitung zum alten Zeitschritt t^n ausgewertet werden und die Anteile der verschiedenen Transportmechanismen (Advektion $\nabla \cdot T\mathbf{v}$ und Diffusion $-\nabla \cdot D\nabla T$) auf die Änderung der Temperatur getrennt berechnet werden:

$$T^{n+1} = T^n - dt [\nabla \cdot T\mathbf{v}]^n + dt [\nabla \cdot D\nabla T]^n$$

mit $[\nabla \cdot f]^n$ als numerische Darstellung des Flusses zum alten Zeitschritt n .

Voraussetzung für die Anwendbarkeit dieser Methode ist, daß sich die Variablen nicht zu schnell von einem Zeitschritt n zum nächsten $n + 1$ ändern [Oran/Boris 1987]. Um dieses zu gewährleisten, bietet es sich an, einen geeigneten Mechanismus zur automatischen und adaptiven Schrittweitensteuerung zu implementieren (siehe Abschnitt 3.5.1).

Die Diskretisierung der analytischen Gleichungen ist eine Voraussetzung für ihre numerische Lösung. Die dabei in Kauf genommenen Ungenauigkeiten können jedoch zu künstlich erzeugten Effekten führen, die ihre Ursache in der Art der Diskretisierung haben. Um die als *numerische Diffusion* bezeichneten Artefakte zu reduzieren, werden die Advektions-Terme in den Gleichungen (2.22) und (2.23) nach der Flux-Corrected-Transport-Methode berechnet [Zalesak 1979]. Die Diffusionsterme selbst werden unter Anwendung einer Control-Volume-Diskretisierung ermittelt. Eine Splitting-Technik dient dazu, all diese Methoden zu kombinieren.

3.5.2.1 Upwind-Schema

Bei der Betrachtung von Stromgrößen können infolge der Diskretisierung im Laufe der Simulation als *numerische Diffusion* bezeichnete Artefakte auftreten. Ebenso kann es zur Fortpflanzung real nicht existierender negativer Materieströme kommen. Um diesen numerischen Ungenauigkeiten entgegenzuwirken, bietet es sich an sicherzustellen, daß stets nur dann Ströme auftreten können, wenn dadurch keine negativen Temperaturen oder Konzentrationen entstehen.

Der Transport einer Stromgröße u durch reine Advektion läßt sich durch eine quasilineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung beschreiben. Aus der Charakteristiken-Theorie für partielle Differentialgleichungen erster Ordnung ist bekannt [Courant/Hilbert 1968], daß bei hinreichenden Glattheitsvoraussetzungen an die Anfangsdaten u_0 eine Lösung des Anfangswertproblems

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + \nabla \cdot F(u(t, x)) = 0 \quad \text{für } t \geq 0 \text{ und } -\infty \leq x \leq \infty \text{ mit } u(0, x) = u_0(x)$$

existiert und stetig differenzierbar ist, wenn die Anfangswerte stetig differenzierbar sind [Michlin 1980]. Bei einem linearen Fluß bleibt die Lösung für alle Zeiten stetig differenzierbar, bei nichtlinearen Flüssen treten in fast allen Fällen nach einer gewissen Zeit Unstetigkeiten auf (sogenannte *Schocks*) [Nauheimer 1993].

Die naheliegende Diskretisierung des Terms $\nabla \cdot F(u(t, x))$ durch einen Zentrale-Differenzen-Ansatz führt zu einem absolut instabilen algorithmischen Verfahren [Roach 1982]. Von der Diskretisierung müssen also weitere Eigenschaften als nur die Konvergenz bei schrumpfenden Zeitschrittweiten Δt oder Gitterweiten Δx gefordert werden. NAUHEIMER [1993] führte dafür beispielhaft die Eigenschaften der Monotonie sowie des total variation diminishing an.

Daher wird vielfach zur Diskretisierung des advektiven Terms ein sogenanntes *Upwind-Schema* erster Ordnung verwendet [Griebel et al. 1995]. Im eindimensionalen Fall (i nummeriert die Knoten in aufsteigender Reihenfolge durch) läßt sich das Upwind-Schema wie folgt definieren:

$$f(i) := \begin{cases} v(i) \cdot u(i-1) & \text{für } v(i) > 0 \\ 0 & \text{für } v(i) = 0 \\ v(i) \cdot u(i) & \text{für } v(i) < 0 \end{cases} .$$

Darin bezeichnet u die Stromgröße, v die Geschwindigkeit und f den tatsächlichen Fluß.

Dieses Verfahren liefert ein stabiles Verhalten der diskretisierten Differentialgleichung, ist jedoch nur in erster Ordnung genau. Die Approximation dieser Flüsse in höherer Ordnung läßt sich aber nur mit einem Auftreten nachteiliger numerischer Oszillationen erreichen.

Deshalb implementierte und testete NAUHEIMER [1993] die numerische Behandlung der parabolischen Gleichungen für den Temperatur- und Konzentrationstransport mittels der Methode des Flux-Corrected-Transports. Diese soll als Weiterentwicklung eines Upwind-Schemas dessen Nachteile umgehen, indem sie die numerische Dämpfung des Upwind-Verfahrens unterdrückt, ohne jedoch zusätzliche numerische Instabilitäten (Oszillationen) einzuführen, wie dieses bei einfachen Verfahren höherer Approximationsordnung der Fall ist.

3.5.2.2 Flux-Corrected-Transport

Die Methode des *Flux-Corrected-Transport* (FCT), welche von BORIS und BOOK [1973] vorgestellt wurde, ist eine Weiterentwicklung des Upwind-Schemas für die numerische Umsetzung parabolischer Gleichungen. Sie fällt nach ZALESK [1979] in die Kategorie der Hybrid-Algorithmien. Bei diesen werden zwei Flüsse, ein monotoner Fluß niedriger Genauigkeit und ein Fluß hoher Genauigkeit, miteinander verglichen.

Der Grundgedanke des FCT-Algorithmus besteht darin, durch korrigierte Flüsse das Auftreten der numerischen Oszillationen des Upwind-Schemas zu verhindern, d. h., dessen stark dissipative Eigenschaft zu dämpfen. Der Einfluß der numerischen Diffusion wird dabei durch die geschickte Koppelung eines Verfahrens höherer Ordnung mit dem Upwind-Schema, welches ein Verfahren erster Ordnung ist, reduziert. Mittels eines sogenannten *Flußlimiters* wird die

Kontinuitätsgleichung sichergestellt und verhindert, daß durch die korrigierten Flüsse Oszillationen erzeugt werden, die weder in der alten Lösung noch in der mit dem monotonen Fluß berechneten Flußdichte vorhanden sind [Nauheimer 1993].

Im folgenden soll nun kurz der FCT-Algorithmus skizziert werden. Eine ausführlichere Darstellung findet sich beispielsweise in [Nauheimer 1993].

1. Berechne mit einem monotonen Schema die Flüsse auf den Zellwänden.
2. Berechne mit einem Schema höherer Genauigkeit einen zweiten Fluß bezüglich der auf die Zellwände interpolierten Stromgrößen.
3. Berechne mit dem Fluß niedriger Ordnung eine Approximation des Flusses für den neuen Zeitschritt, die frei von numerisch erzeugten Über- und Unterschwingungen ist.
4. Definiere die antidiffusiven Flüsse als Differenzen zwischen den mit höherer Genauigkeit und jenen mit niedrigerer Genauigkeit ermittelten Flüssen.
5. Berechne die Korrekturfaktoren nach [Zalesak 1979], mit der die antidiffusiven Flüsse in die Bestimmung des Stromgrößen zum neuen Zeitschritt eingehen.
6. Bestimme die oszillationsgedämpften Flüsse des nächsten Zeitschrittes aus den bereits ermittelten Approximationen unter Anwendung der Korrekturfaktoren auf die antidiffusiven Flüsse.

Die auf Werte zwischen 0 und 1 normierten Korrekturfaktoren gewichten dabei den Einfluß, den das Schema höherer Ordnung auf den letztendlich berechneten Fluß zum nächsten Zeitschritt nimmt.

NAUHEIMER [1993] untersuchte anhand numerischer Tests eines analytischen Problems die Effektivität der FCT-Methode hinsichtlich der Lösungseigenschaften üblicher Diskretisierungsschemata für advective Flüsse. Es zeigte sich, daß die beim FCT-Schema entstandenen Abweichungen zur analytischen Lösung sowohl unter der Supremumsnorm als auch unter der quadratischen Norm geringer als jene des einfachen Upwind-Schemas, des MACCORMACK- und des LAX-WENDROFF-Schemas waren. Die mit dem FCT-Schema ermittelten Lösungen erwiesen sich dabei jedoch nicht nur hinsichtlich der numerischen Genauigkeit, sondern auch bezüglich der Stabilität der Lösung als überlegen. Bemerkenswert ist jedoch, daß das FCT-Verfahren nicht monoton auf dem vorgegebenen Gitter zu sein scheint, was auf eine Schrittweitenrestriktion bei Flußlimiterverfahren hindeuten könnte [Nauheimer 1993].

3.5.2.3 Charakteristiken-Verfahren

Die Partikelgrößenklassen sind durch eine jeweilige Verdopplung des Partikelvolumens für zwei aufeinanderfolgende Klassen gekennzeichnet. Da die Sinkgeschwindigkeit nach STOKES (2.24) quadratisch vom Partikelvolumen abhängt, variiert die Sedimentationsgeschwindigkeit für die einzelnen Partikelklassen recht stark, so daß die größeren Partikelklassen aufgrund des Stabilitätskriteriums von COURANT-FRIEDRICHS-LEWY einen erheblichen Einfluß auf die Zeitschrittweite gewinnen. Diese wird infolge der großen Spreizung der Sinkgeschwindigkeiten für die meisten Partikelklassen unnötig gesenkt, wodurch das Gesamtprogramm durch die explizit zu lösenden Konzentrationsgleichungen unangemessen verlangsamt wird.

Deswegen wurde mittels Operator-Splitting der sedimentäre Anteil der Konzentrationsgleichungen abgetrennt und separat gelöst. Dazu kam das sogenannte *Charakteristiken-Verfahren* zum Einsatz, bei dem die Konzentration um die dem Sinkstrom entsprechende Anzahl von Gitterzellen nach unten verschoben wird. Die Verteilung auf die beteiligten Gitterzellen erfolgt dabei gewichtet.

3.5.3 Elliptische Gleichungen

Die beiden kontinuierlichen POISSON-Gleichungen für die Wirbeligkeit ω (2.20) und die Stromfunktion ψ (2.21) führen in den im letzten Kapitel beschriebenen Diskretisierungen auf algebraische Systeme, deren Größe so beachtlich ist, daß besondere Anstrengungen zu ihrer Lösung unternommen werden müssen.

Bei Verwendung eines direkten Lösungsverfahrens müßte zur eindeutigen Bestimmung aller Unbekannten ein lineares Gleichungssystem aufgestellt werden. Die Anzahl der Elemente der entsprechenden Matrix wächst dabei quadratisch mit der Zahl der Diskretisierungspunkte. Für ein Gitter mit 128 Stützstellen in beiden Raumrichtungen ergäben sich somit bereits $128^4 \approx 268$ Millionen Matrixelemente.

Unter den möglichen Techniken zur Lösung solcher Systeme haben sich Mehrgitter-Methoden etabliert, die sich dadurch auszeichnen, daß der zur Lösung benötigte Aufwand lediglich proportional zur Anzahl der Unbekannten steigt [Briggs 1986] und damit für diese Problemklasse eine optimale Effizienz aufweist [Fulton et al. 1986]; bei allen anderen bekannten Methoden wächst der Aufwand dagegen überproportional [Umlauf 1998].

3.5.3.1 Konventionelle Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme

Um (nichtlineare) Differentialgleichungen numerisch lösen zu können, müssen diese diskretisiert werden, indem die Differentiale durch Differenzenquotienten approximiert werden. Durch die Diskretisierung mit gegebenenfalls anschließender Linearisierung ergibt sich dann ein lineares Gleichungssystem, das sich in Form einer Matrix-Gleichung schreiben läßt:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \text{mit } A \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ und } \mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n.$$

Die numerischen Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme lassen sich in zwei Klassen einteilen [Stoer/Bulirsch 1990]: während die sogenannten *direkten Verfahren* bei rundungsfehlerfreier Rechnung die gesuchte Lösung $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ in endlich vielen Schritten bestimmen, liefern die sogenannten *iterativen Verfahren* (zu denen auch die *Relaxationsmethoden* zählen) im allgemeinen nur eine Näherung der exakten Lösung. Da iterative Verfahren vielfach eine geringere Aufwandskomplexität aufweisen, werden sie heute insbesondere für größere Gleichungssysteme verwendet.

Neben der Gittergröße ist jedoch auch die Besetzung der Matrix A ein Auswahlkriterium für den Algorithmus zur numerischen Lösung des Gleichungssystems. Numerische Problemstellungen führen oft zu der Aufgabe, sehr große lineare Gleichungssysteme zu lösen, bei denen jedoch aufgrund der Art der Differentialgleichung die aus der Diskretisierung hervorgegangene Matrix A nur schwach besetzt ist [Hackbusch 1991], d. h. viele ihrer Elemente Null sind. Diese dünn besetzten Matrizen lassen sich platzsparend mit einer als *kompakte Speicherung* bezeichneten Technik vorhalten. Direkte Löser können jedoch aus dieser Eigenschaft keine Vorteile ziehen. So lassen sie sich nicht ohne weiteres zur Lösung großer Gleichungssysteme verwenden, da der erforderliche Speicherplatz zumeist die Kapazität heutiger Rechner überschreitet und die Anzahl benötigter Rechenoperationen so groß ist, daß die Berechnung inakzeptabel lange dauern würde.

Iterative Lösungsverfahren dagegen bestimmen ausgehend von einer Ausgangslösung sukzessive weitere Approximationen, die gegen die exakte Lösung konvergieren. Da iterative Verfahren an die Technik der kompakten Speicherung angepaßt werden können, ermöglicht ihr Einsatz, Vorteile aus dem geringen Besetzungsgrad von Matrizen zu ziehen. Damit gestatten

sie es, mit vertretbarem Aufwand relativ viele Iterationsschritte auszuführen. Die Iterationsfolge läßt sich zudem bei Erreichen der gewünschten Genauigkeit abbrechen.³

In einer geophysikalischen Simulation, wie diesem Konvektionsmodell, müssen zwischen 10 000 und 100 000 komplette Zeitschrittzyklen aufeinanderfolgend gerechnet werden, um den zeitlichen Ablauf der Prozesse zu simulieren. Daher gilt es, aus Gründen der numerischen Stabilität sowohl die Rechengenauigkeit als auch die Rechenzeit im Auge zu behalten. Um eine hinreichende Zuverlässigkeit der Ergebnisse zu erreichen, rechnen wir ausschließlich mit doppelter Genauigkeit und nutzen diese auch aus.

Bei kontinuierlichen, stetig ablaufenden Prozessen kann in einer sukzessiven Folge von Zeitschritten die Lösung des jeweils vorherigen Zeitschritts als Startlösung des folgenden verwendet werden. Ist der Zeitschritt hinreichend klein gewählt, so werden sich die Lösungen zweier aufeinanderfolgender Zeitschritte nicht wesentlich ändern (stetige Abhängigkeit der Lösung von den Anfangswerten in der Theorie der Differentialgleichungen [Werner/Arndt 1986]), so daß bereits zu Beginn des Iterationsverfahrens des neuen Zeitschritts eine gute Approximation der zu ermittelnden Lösung vorliegt. Diese Eigenschaft besitzen nur iterative Löser, so daß sich auf diesem Wege ein guter Kompromiß zwischen Aufwand und Rechengenauigkeit finden läßt.

Im folgenden sollen nun einige hinsichtlich ihrer Eignung zur Lösung der elliptischen Gleichungen getestete numerische Verfahren skizziert werden.

Gaußsches Eliminationsverfahren

Das GAUSSsche *Eliminationsverfahren*, welches als Prototyp eines direkten Lösungsverfahrens betrachtet werden kann, greift unmittelbar auf die aus der Linearen Algebra bekannten Eigenschaften der nichtsingulären Matrix A zurück. Durch geeignete Spalten- und Zeilenvertauschungen (Pivotsuche zur Erhaltung der numerischen Stabilität des Algorithmus) sowie Linearkombinationen zwischen diesen läßt sich die Matrix in eine obere Dreiecksmatrix transformieren. Das so entstandene äquivalente Gleichungssystem $A'\mathbf{x} = \mathbf{b}'$ läßt sich dann schrittweise nach den einzelnen Komponenten des Lösungsvektors \mathbf{x} auflösen.

Das GAUSSsche Eliminationsverfahren bestimmt als direkte Lösungsmethode die exakte Lösung mit einer endlichen Anzahl von Operationen.⁴ Da der zur Lösung benötigte Rechenaufwand dieser Methode jedoch für ein Gitter mit N Diskretisierungspunkten in jeder der beiden Dimensionen sich wie $\mathcal{O}(N^4)$ verhält sowie der Speicheraufwand $\mathcal{O}(N^3)$ beträgt, eignet sich dieses Verfahren in der Praxis nur für sehr kleine Gitter [Fulton et al. 1986].

Cholesky-Verfahren

Das CHOLESKY-*Verfahren* zerlegt positiv definite Matrizen A (nach Hauptachsentransformation sind alle Elemente der Hauptdiagonalen größer Null) eindeutig in eine untere Dreiecksmatrix L und der zu dieser adjungierten Matrix L^H , wobei L für reelles A stets selbst reell ist [Stoer/Bulirsch 1990]. Das somit konstruierte lösungsgleiche Gleichungssystem

$$LL^H\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

kann dann sukzessive nach den Komponenten von \mathbf{x} aufgelöst werden.

³Neben den erwähnten Beurteilungskriterien für numerische Lösungsverfahren gibt es noch eine ganze Reihe weiterer Anforderungen, die die Auswahl beeinflussen können. So sollten die Methoden beispielsweise relativ robust gegen numerische Störungen sein, möglichst vielseitig einsetzbar (d. h. auf eine große Klasse von Problemen anwendbar) oder speziell bei dreidimensionalen Modellansätzen parallelisierbar sein.

⁴Diese Aussage gilt in ihrer Strenge natürlich nur unter der Voraussetzung einer rundungsfehlerfreien Arithmetik.

Verfahren der Konjugierten Gradienten

Das *Verfahren der Konjugierten Gradienten* (auch *CG-Verfahren*, nach engl. *conjugate gradient*) wurde Anfang der fünfziger Jahre von HESTENES und STIEFEL [1952] entwickelt, um lineare Gleichungssysteme mit positiv definiten Matrix A zu lösen. Es greift zur Konstruktion einer Folge von Lösungsvektoren $\mathbf{x}^{(0)} \rightarrow \mathbf{x}^{(1)} \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{x}^{(n)}$ die der allgemeinen Methode der Gradientenverfahren zugrundeliegende Idee der Minimierung $0 = \min_{\mathbf{z}} F(\mathbf{z}) = F(\mathbf{x})$ eines Funktionals

$$F(\mathbf{z}) := \frac{1}{2} (\mathbf{Az} - \mathbf{b})^T A^{-1} (\mathbf{Az} - \mathbf{b}) = \frac{1}{2} \mathbf{z}^T \mathbf{Az} - \mathbf{b}^T \mathbf{z} + \frac{1}{2} \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{b}$$

auf, führt jedoch anstatt einer eindimensionalen Minimierung im Schritt $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \mathbf{x}^{(k+1)}$ eine $(k+1)$ -dimensionale Minimierung durch:

$$F(\mathbf{x}^{(k+1)}) = \min_{\lambda_0, \dots, \lambda_k} F(\mathbf{x}^{(k)} + \lambda_0 \mathbf{r}^{(0)} + \dots + \lambda_k \mathbf{r}^{(k)}).$$

Dabei kann $\mathbf{x}^{(k+1)}$ effizient berechnet werden, da die anfallenden Residuen $\mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^{(i)}$ für $i \leq k$ zueinander orthogonal sind, solange $\mathbf{r}^{(k)} \neq 0$ ist. Bei rundungsfehlerfreier Rechnung gibt es somit ein erstes $k \leq n$ mit $\mathbf{r}^{(k)} = 0$, da im \mathbb{R}^n höchstens n Vektoren linear unabhängig sein können. Das zugehörige $\mathbf{x}^{(k)}$ ist dann die gesuchte Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. In der rundungsfehlerbehafteten Praxis führt man das Verfahren solange fort, bis ein hinreichend kleines Residuum erreicht ist.

Die Aufwandskomplexität des CG-Verfahrens für ein quadratische Gitter der Seitenlänge N beträgt $\mathcal{O}(N^3)$.

Gauß-Seidel-Verfahren

Im Gegensatz zu den direkten Methoden bestimmen die indirekten bzw. iterativen Verfahren nicht die exakte diskrete Lösung selbst, sondern erzeugen eine Folge von Approximationen, die gegen diese konvergieren [Fulton et al. 1986].

Ein allgemeiner Ansatz für (lineare) iterative Verfahren läßt sich unmittelbar aus der Matrix-Gleichung des zu lösenden linearen Gleichungssystems gewinnen:

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} = \mathbf{b} & \iff \mathbf{Bx} + (\mathbf{A} - \mathbf{B})\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ & \implies \mathbf{Bx}^{(j+1)} + (\mathbf{A} - \mathbf{B})\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{b} \\ & \implies \mathbf{x}^{(j+1)} = \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{Ax}^{(j)} - \mathbf{b}) \\ & \iff \mathbf{x}^{(j+1)} = (\mathbf{I} - \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}) \mathbf{x}^{(j)} - \mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}. \end{aligned}$$

Darin bezeichnet \mathbf{I} die Matrix, die das neutrale Element hinsichtlich der Multiplikation im Vektorraum der $\mathbb{R}^{n \times n}$ -Matrizen darstellt, die sogenannte *Identität*. Jede Wahl einer nichtsingulären Matrix \mathbf{B} führt damit zu einem möglichen Iterationsverfahren.

Beim iterativen *GAUSS-SEIDEL-Verfahren* wird die Matrix \mathbf{B} aus einer Diagonalmatrix \mathbf{D} mit den Diagonalelementen a_{ii} und einer unteren Dreiecksmatrix \mathbf{E} mit den Elementen a_{ij} zusammengesetzt:

$$\mathbf{B} = \mathbf{D} + \mathbf{E}.$$

Der GAUSS-SEIDEL-Algorithmus liefert für ein lineares Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ dann eine eindeutig bestimmte Lösung \mathbf{x} , wenn \mathbf{A} entweder symmetrisch und positiv definit oder

diagonaldominant ist. In der Iterationsvorschrift

$$x_i^{(j+1)} = \frac{1}{a_{ij}} \left(b_i - \sum_{k<i} a_{ik} x_k^{(j+1)} - \sum_{k>i} a_{ik} x_k^{(j)} \right)$$

bezeichnet j die Anzahl der Iterationen. Das Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ wird also jeweils nach den x_i aufgelöst; in der Summe über die Diagonalelemente werden, sobald vorhanden, die neuen Iterierten eingesetzt.

Das GAUSS-SEIDEL-Verfahren weist jedoch hinsichtlich der Konvergenz mehrere Nachteile auf. Zum einen lassen sich hinreichend gute Konvergenzraten nur bei entsprechend hoher Diagonaldominanz erreichen, was wiederum die Wahl der Zeitschrittweite beschränkt und damit die rechenbare Zeitskala begrenzt. Zum anderen fällt die Konvergenzrate sehr stark mit zunehmender Gittergröße [Fulton et al. 1986]. Durch Verwendung der sogenannten *Schwarz-Weiß-Ordnung* anstatt der üblichen lexikographischen Anordnung läßt sich der sogenannte *Glättungsfaktor*, der die Dämpfungsrates des Fehlers pro Relaxationszyklus angibt, bei punktwiser Relaxation für isotrope Probleme jedoch von $\frac{1}{2}$ auf $\frac{1}{4}$ erheblich verbessern [Fulton et al. 1986].

Obwohl der Speicherbedarf der einfachsten Iterationsverfahren mit $\mathcal{O}(N^2)$ geringer als jener der direkten Verfahren ist und sie weniger sensibel gegenüber Rundungsfehlern sind, da diese durch die Iteration automatisch reduziert werden, erfordern sie mit $\mathcal{O}(N^4)$ Operationen einen weiterhin vergleichbaren Rechenaufwand [Trottenberg et al. 2001].

Relaxationsverfahren

Ziel der *Relaxationsverfahren* ist es, die Konvergenzeigenschaften der bereits vorgestellten Matrixzerlegung

$$B = D + E$$

zu optimieren. Dazu wird eine Klasse von Matrizen $B(\omega)$ untersucht,

$$B(\omega) = \frac{1}{\omega} D(I - \omega L) \quad \text{mit } L := -D^{-1}E$$

die von einem geeignet zu wählenden Parameter ω abhängt, so daß eine möglichst schnelle Konvergenz erreicht werden kann. Für positiv definite Matrizen gewährleistet der *Satz von OSTROWSKI und REICH*, daß alle sogenannten *Relaxationsparameter* ω mit $0 < \omega < 2$ zu konvergenten Verfahren führen [Stoer/Bulirsch 1990].⁵

Beispielsweise verhält sich das SOR-Verfahren (successive over-relaxation, d. h. $\omega > 1$) mit $\mathcal{O}(N^2)$ bei der Speicherplatzanforderung und $\mathcal{O}(N^3)$ bei der Rechenzeitkomplexität bereits erheblich günstiger als das GAUSSsche Eliminationsverfahren [Fulton et al. 1986]. Nach STOER und BULIRSCH [1990] hängt die zur Lösung benötigte Rechenzeit beim Relaxationsverfahren eher linear von der Konditionierungszahl (Verhältnis von größtem zu kleinstem Eigenwert), beim CG-Verfahren dagegen nahezu quadratisch von dieser ab.

Werden nicht nur einzelne Gitterpunkte relaxiert, sondern ganze Blöcke (Gruppen von Gitterpunkten) simultan, so läßt sich die Effizienz weiter steigern. Das darauf basierende ADI-Verfahren (alternating direction implicit), bei dem die Blöcke aus ganzen Zeilen oder Spalten des Gitters bestehen, weist eine Aufwandskomplexität von $\mathcal{O}(N^2 \log N)$ Operationen auf [Fulton et al. 1986].

⁵Wird der Relaxationsparameter ω gleich 1 gewählt, so ergibt sich das iterative GAUSS-SEIDEL-Verfahren.

3.5.3.2 Mehrgitter-Verfahren

Weder die direkten noch die iterativen Verfahren genügen jedoch unseren Anforderungen. Entweder sind sie zu speicherintensiv und können nicht von einer Näherungslösung profitieren oder ihre Konvergenzeigenschaften vermögen vor allem für niederfrequente Fehlerkomponenten nicht zu überzeugen.

Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Mehrgitter-Verfahren zur Lösung der beiden elliptischen Gleichungen implementiert, dessen konzeptionelle Grundlagen im folgenden skizziert werden sollen.

Grundzüge des Mehrgitter-Verfahrens

Die Basisidee der Mehrgitter-Methodik beruht darauf, dasselbe kontinuierliche Problem auf einer Menge einander überdeckender uniformer Gitter stark variierender Gitterweiten zu approximieren [Fulton et al. 1986]. Obwohl vielfach von *der* Mehrgitter-Methode gesprochen wird, gilt es zu betonen, daß unter Mehrgitter nicht eine einzige Methode oder selbst eine ganze Familie von Methoden zu verstehen ist. Es ist viel eher ein eigenständiger Ansatz zum Lösen von Berechnungsproblemen, eine Sammlung von Ideen und Einstellungen, welche von ACHI BRANDT, einem Ihrer Entwickler, als „multilevel methods“ bezeichnet werden [Brandt 1973]. Ursprünglich wurden Mehrgitter-Verfahren zur Lösung von Randwert-Problemen auf räumlichen Gebieten entwickelt, haben jedoch heute einen viel breiteren Anwendungsbereich gefunden, wobei viele Problemstellungen kaum mehr eine Assoziation mit irgendeiner Art von physikalischem Gitter mitsichbringen, da diese durch generellere Organisationsebenen ersetzt wurden [Briggs 1986].

Während die direkten Lösungsmethoden, als deren Prototyp die GAUSS-Elimination aufgefaßt werden kann, eine Lösung bis auf Maschinengenauigkeit innerhalb einer endlichen Anzahl von Rechenschritten bestimmen, starten iterative Methoden mit einer Startlösung und versuchen diese Approximation sukzessive zu verbessern. Die Folge so generierter Lösungsapproximationen konvergiert idealerweise gegen die exakte Lösung. Im allgemeinen sind die klassischen iterativen Relaxationsmethoden relativ einfach zu implementieren und können erfolgreich auf eine größere Klasse von Gleichungssystemen als die vielfach hochspezialisierten direkten Lösungsmethoden angewendet werden [Briggs 1986].

Viele Relaxationsschemata weisen die Eigenschaft auf, daß oszillierende Fehlerkomponenten relativ schnell eliminiert, die glatten jedoch nur sehr langsam gedämpft werden. Standard-Iterationsverfahren konvergieren somit sehr schnell, solange der Fehler (die Differenz zwischen der gewonnenen Approximation und der exakten Lösung des diskreten Problems) hochfrequente Komponenten beinhaltet. Niederfrequente Fehlerkomponenten werden dagegen erheblich langsamer geglättet [Briggs 1986]. Infolgedessen vermögen diese Verfahren innerhalb der ersten Iterationszyklen das Residuum, das ein Maß für die Güte der numerischen Approximation ist, recht stark zu reduzieren, brauchen dann aber vergleichsweise lange, um eine insgesamt befriedigende Approximation der exakten Lösung zu liefern.

Aufgrund dieser Glättungseigenschaften stellt sich unmittelbar die Frage, ob und in welcher Weise diese Verfahren so verändert werden können, daß sie möglichst *alle* Fehleranteile effektiv reduzieren. Ausgangspunkt für die Überlegung kann dabei sein, daß es sich anbietet, auf einem gröberen Gitter einige vorläufige Iterationen durchzuführen, um eine möglichst gute Startlösung für die eigentliche Relaxation zu erhalten. Dabei macht man sich zunutze, daß die Relaxation auf einem gröberen Gitter erheblich weniger aufwendig ist, da ja weniger Unbekannte zu aktualisieren sind. Zudem verhält sich der Konvergenzfaktor wie $1 - \mathcal{O}(h^2)$, so daß ein gröberes Gitter (d. h. ein Gitter mit einer größeren Diskretisierungsweite h) eine bessere

Konvergenzrate aufweist [Briggs 1986]. Die Idee, sukzessive gröbere Gitter zur Verbesserung einer Startlösung zu verwenden, wird als *nested iteration* bezeichnet [Briggs 1986].

Geht man umgekehrt vor, indem man zuerst auf einem feineren Gitter einige Iterationen ausführt, die im wesentlichen die oszillierenden Fehleranteile eliminieren und die eher glatten beinahe ungedämpft bestehen lassen, und transferiert diese dann auf ein gröberes Gitter, so erscheinen die vormals niederfrequenten Fehleranteile dort hochfrequent (siehe Abbildung 3.7), da der Fehler-Mode im allgemeinen nur unzureichend dargestellt werden kann. Damit können diese niederfrequenten Fehleranteile auf dem gröberen Gitter erneut sehr effektiv geglättet werden.

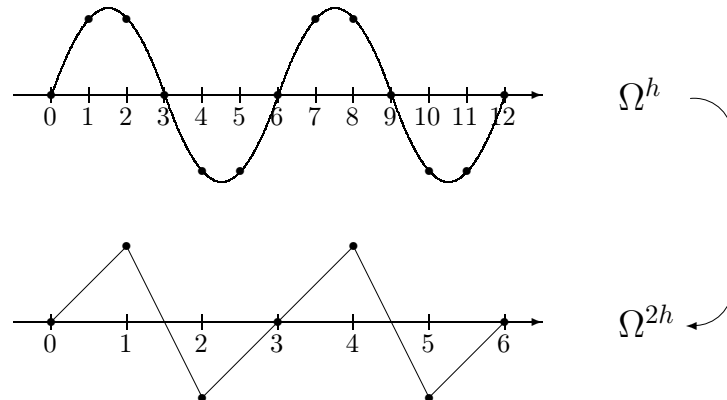


Abbildung 3.7: Gittervergrößerung: Eine Welle mit der Wellenzahl 4 auf Ω^h wird auf Ω^{2h} projiziert. Auf dem gröberen Gitter scheint diese stärker oszillierend zu sein als auf dem feineren (nach [Briggs 1986]), da ihre Approximation durch weniger Stützstellen nicht so glatt ist.

Die Mehrgitter-Methodik verwendet daher eine Hierarchie von Gittern, um ein iteratives Verfahren zu beschleunigen. Dabei wird die Erkenntnis genutzt, daß klassische iterative Methoden den Fehler effektiv glätten. Wird dieser nun auf ein gröberes Gitter transferiert, dann erscheinen vorher glatte Komponenten auf dieser Skala oszillierend und können wiederum geglättet werden (siehe Abbildung 3.7). Auf dem größten Gitter wird schließlich die Gleichung des Problems gelöst und mit dieser eine Korrektur für die Lösung bestimmt. Mittels Interpolation wird diese Korrektur schließlich sukzessive auf das feinste Gitter transferiert.

Der Glättungsfaktor, der im Falle des Mehrgitter-Verfahrens die Dämpfungsrate des Fehlers für die oszillierenden Fehlerkomponenten pro Relaxationszyklus angibt, ist nicht nur klein ($< \frac{1}{3}$), sondern auch unabhängig von der Gitterdiskretisierungsweite h [Briggs 1986].

Der Mehrgitter-Ansatz, welcher unabhängig voneinander von BRANDT [1973] und HACKBUSCH [1978] entwickelt wurde, entstand also aus Versuchen, die Beschränkungen der iterativen Methoden aufzuheben. Werden diese im Rahmen eines Mehrgitter-Verfahrens verwendet, so können sie durchaus mit den schnellen direkten Methoden konkurrieren, behalten aber ihre größere Generalität bei und sind damit auf ein breiteres Spektrum von Problemen anwendbar.

Die Effizienz und Robustheit eines Mehrgitter-Verfahrens wird wesentlich durch die Wahl seiner Komponenten bestimmt. Die Relaxation (in diesem Kontext oft als *Glätter* bezeichnet) spielt dabei eine zentrale Rolle, da sie der effizienten Reduzierung hochfrequenter Fehlerkomponenten auf dem jeweils feineren Gitter dient. Das Relaxationsschema ist zudem derjenige Teil des Mehrgitter-Verfahrens, der am stärksten vom zu lösenden Problem abhängt. Es hat daher den größten Einfluß auf die Gesamteffizienz des Lösungsverfahrens [Fulton et al. 1986]. Die Grobgitterkorrektur hingegen zielt auf die Auslöschung niederfrequenter Fehlerkomponenten [Fulton et al. 1986]. Aber auch die Gittertransfer-Operatoren müs-

sen, insbesondere bei Problemen mit springenden Koeffizienten, sorgfältig ausgewählt werden [Wesseling 1992, Hackbusch 1985, Brandt 1984, Joppich/Mijalković 1993]. Da die Randwertbedingungen die grundlegenden Eigenschaften und die Effizienz einer Mehrgitter-Methode nicht stark beeinflussen [Fulton et al. 1986], brauchen sie in die Betrachtung der prinzipiellen Eigenschaften nicht einbezogen zu werden.

Gittertransfer-Operationen: Prolongation und Restriktion

Zum besseren Verständnis der im folgenden verwendeten Notation soll diese nun kurz vorgestellt werden. Wir werden mit \mathbf{u} stets die exakte Lösung eines Gleichungssystems und mit \mathbf{v} eine Approximation der exakten Lösung bezeichnen. Fettgeschriebene Symbole, wie \mathbf{u} und \mathbf{v} , repräsentieren Vektoren. Ihre i -te Komponente wird durch u_i bzw. v_i bezeichnet. Sollte es notwendig sein, die Vektoren \mathbf{u} und \mathbf{v} mit einer Diskretisierung auf einem speziellen Gitter Ω^h zu assoziieren, so werden wir die Notationen \mathbf{u}^h und \mathbf{v}^h verwenden. Um die Notation so einfach wie möglich zu halten, wird die aktuelle Approximation mit $\mathbf{v}^{(j)}$ und die aus dieser neu berechnete als $\mathbf{v}^{(j+1)}$ bezeichnet.

Wenn \mathbf{u} die exakte Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

und $\mathbf{v}^{(j)}$ eine Näherungslösung ist, so sei $\mathbf{e} := \mathbf{u} - \mathbf{v}^{(j)}$ der (im allgemeinen unbekannte) Iterationsfehler. Dieser Fehler erfüllt die sogenannte *Residuumsgleichung*

$$A\mathbf{e} = \mathbf{r}^{(j)},$$

wobei $\mathbf{r}^{(j)} := \mathbf{f} - A\mathbf{v}^{(j)}$ das Residuum zur j -ten Iterierten ist. Indem nun aus dem Residuum $\mathbf{r} = \mathbf{f} - A\mathbf{v}^{2h}$ auf dem größeren Gitter Ω^{2h} eine Approximation des Fehlers \mathbf{e}^{2h} bestimmt und diese dann auf dem feineren Gitter Ω^h zur Fehlerkorrektur nach

$$\mathbf{v}^h \Leftarrow \mathbf{v}^h + \mathbf{e}^{2h}$$

genutzt wird, läßt sich eine Verbesserung des Lösungsvektors erhalten. Dieses Vorgehen bildet die Basis eines als *Grobgitterkorrektur* (engl. *coarse grid correction*) bezeichneten Verfahrens.

Damit hat man eine bessere Näherungslösung für \mathbf{u} gefunden. Diese Grobgitterkorrektur kann jedoch sehr rechenzeitaufwendig sein, da das Gleichungssystem auf dem Gitter der Weite $2h$ exakt gelöst werden muß. Die zur Fehlerkorrektur benötigte Gitterverfeinerung wird in nahezu allen Fällen durch Halbierung der Gitterweite erreicht, da andere Verhältnisse im allgemeinen keine wesentlichen Vorteile bieten [Briggs 1986]. Die dazu verwendete Gittertransfer-Operation wird *Interpolation* oder *Prolongation* genannt (siehe Abbildung 3.8).

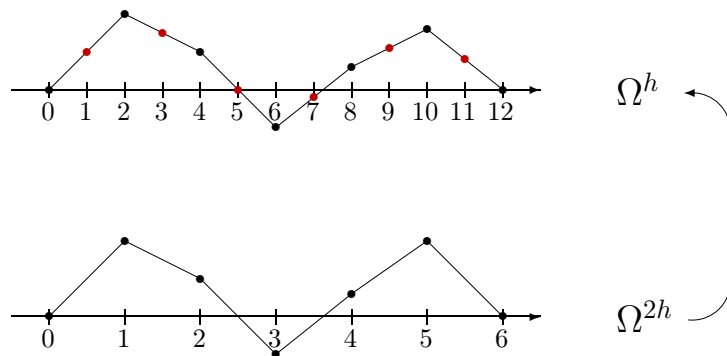


Abbildung 3.8: Prolongation eines Vektors vom gröberen Gitter Ω^{2h} auf das feinere Gitter Ω^h durch Einfügung linear interpolierter Stützstellen (nach [Briggs 1986])

Wenn der Grobgitterkorrektur-Operator ohne Relaxation auf glatte oder oszillierende Fehler-Moden angewendet wird, so erzeugt er zwar sowohl glatte als auch oszillierende Moden als Lösung, jedoch unterscheiden sich die Amplituden dieser beiden Anteile sehr stark. Angewendet auf glatte Moden werden glatte und oszillierende Moden mit sehr geringer Amplitude erzeugt, weswegen das Grobgitterkorrektur-Schema effektiv bei der Eliminierung der glatten Komponenten des Fehlers ist [Briggs 1986]. Wirkt der Grobgitterkorrektur-Operator dagegen auf stark oszillierende Moden, so produziert er glatte und oszillierende Moden mit Amplituden der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$, weswegen er oszillierende Moden nicht zu dämpfen vermag.

Die Glättungseigenschaft der Relaxation hat also den größten Einfluß auf oszillierende Moden, während die Grobgitterkorrektur ohne Relaxation die glatten Moden am besten eliminiert (sogenanntes *spectral picture of multigrid* [Briggs 1986]). Wie wir gesehen haben, kümmert sich die Grobgitterkorrektur um die glatten Fehlerkomponenten des aktuell feinen Gitters. Hinzunahme der Relaxation auf allen Ebenen führt dann dazu, daß alle Fehlerkomponenten zügig reduziert werden.

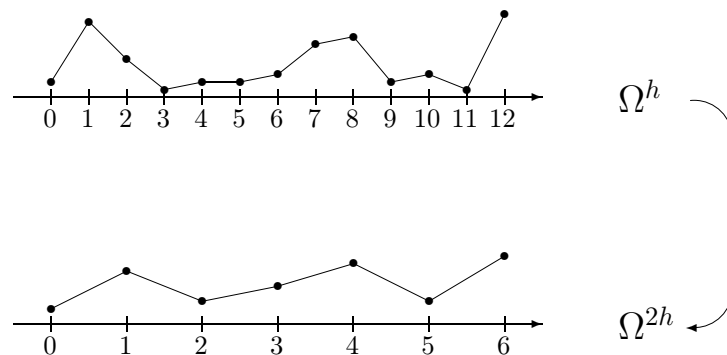


Abbildung 3.9: Restriktion eines Vektors vom feineren Gitter Ω^h auf das gröbere Gitter Ω^{2h} unter full weighting (nach [Briggs 1986])

Als *Restriktion* werden die Gittertransfer-Operatoren bezeichnet, die Vektoren von einem feinen auf ein gröberes Gitter transferieren. Die gröberen Gitter können auf verschiedene Arten konstruiert werden. Während *straight injection* beispielsweise nur die Gitterstellen mit geraden Indizes übernimmt, bezieht *full weighting* auch die anliegenden Stellen des feineren Gitters gewichtet mit ein (siehe Abbildung 3.9).

Im Rahmen dieser Arbeit wird ausschließlich die sogenannte *Standard-Vergrößerung* verwendet, bei der der Gitterabstand in jeder Koordinatenrichtung verdoppelt wird [Fulton et al. 1986]. Die alternative Methode der *Semi-Vergrößerung* wird in [Washio/Oosterlee 1996, Brandt 1984] diskutiert. Da die Wahl der Gittertransfer-Operationen entscheidend für die Konvergenzeigenschaften des Mehrgitter-Verfahrens ist, wird die Restriktion mittels full weighting durchgeführt

$$r^{2h} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} r^h,$$

während die Grobgitterkorrektur über lineare Interpolation auf das feinere Gitter prolongiert wird. Letztere eignet sich für die meisten Probleme zweiter Ordnung, deren Ortsabhängigkeit nicht zu stark asymmetrisch ist [Fulton et al. 1986].

Mehrgitter-Zyklen zur Konvergenzbeschleunigung

Die Effizienz eines Zwei-Gitter-Schemas läßt sich durch die Erweiterung des Verfahrens auf eine Abfolge größerer Gitter steigern. Abhängig von der Art, wie oft und in welcher Reihenfolge

die Gitter durchlaufen werden, unterscheidet man verschiedene Zyklus-Typen, deren wichtigste die sogenannten *V-* und *W-Zyklen* sind.

Zur Verdeutlichung sind in Abbildung 3.10 verschiedene Mehrgitter-Zyklen schematisch dargestellt. Das feinste Gitter weist in diesen Beispielen die Gitterweite h , das grösste die Gitterweite $32h$ auf. Auf den absteigenden Zweigen wird eine Gittervergrößerung (Restriktion), auf den aufsteigenden eine Gitterverfeinerung (Prolongation) vorgenommen. Eine exakte Lösung des Problems findet nur auf dem grössten Gitter Ω^{32h} statt, während auf allen feineren Gittern eine Glättung durchgeführt wird.

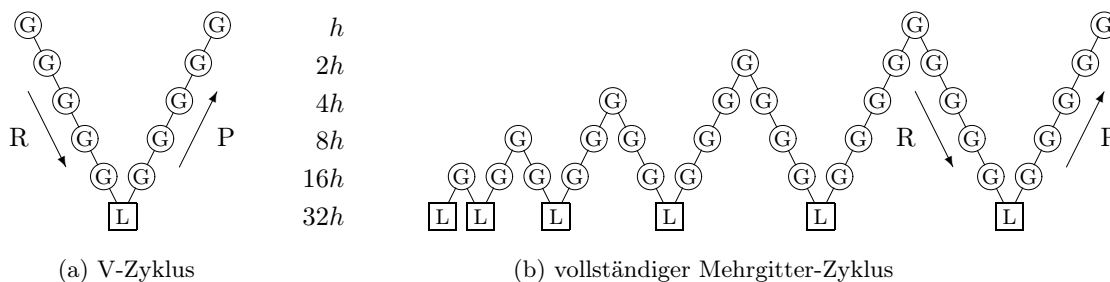


Abbildung 3.10: Mehrgitter-Zyklen: auf den absteigenden Zweigen findet eine Gittervergrößerung, auf den aufsteigenden eine Gitterverfeinerung statt (G bezeichnet die Glättung, L die exakte Lösung, R die Restriktion und P die Prolongation)

Der Gesamtzyklus vom feinsten zum grössten Gitter und zurück wird als *Mehrgitter-V-Zyklus* (siehe Abbildung 3.10(a)) bezeichnet [Fulton et al. 1986]. Beim Mehrgitter-W-Zyklus werden prolongierte Vektoren in regelmässiger Weise einer erneuten Restriktion unterworfen, um damit die Güte der Approximation zu verbessern.

Der vollständige Mehrgitter-V-Zyklus (engl. *full multigrid V-cycle*) benutzt aufeinanderfolgende V-Zyklen, um auf einem gröberen Gitter eine möglichst exakte Startlösung für jedes feinere Gitter zu bestimmen (siehe Abbildung 3.10(b)). Dieses Vorgehen ermöglicht es, daß ein spezielles Grobgitter-Problem stets bis zum Diskretisierungsfehler gelöst ist, bevor die aufwendigere Relaxation auf dem feineren Gitter in Angriff genommen wird. Die auf diesem Wege verbesserte Konvergenz rechtfertigt in vielen Fällen den bei der Verwendung eines vollständigen Mehrgitter-V-Zyklus benötigten zusätzlichen Aufwand [Briggs 1986].

Nach BRIGGS [1986] läßt sich folgende Aufwandsabschätzung für ein d -dimensionales Problem, das mittels N^d Stützstellen diskretisiert wurde, durchführen: Unter festen Zyklus-Parametern (ν_1, ν_2) ist die Konvergenzrate γ des V-Zyklus unabhängig von der Diskretisierungsweite h . Da der Berechnungsaufwand eines einzelnen V-Zyklus von der Ordnung $\mathcal{O}(N^d)$ ist, beträgt der Aufwand, um mittels eines V-Zyklus bis zur Rechengenauigkeit eines Gitters der Gitterweite h zu gelangen, $\mathcal{O}(N^d \log N)$. Unter Einsatz eines vollständigen Mehrgitter-V-Zyklus läßt sich dieser auf $\mathcal{O}(N^d)$ drücken, so daß er vergleichbar mit jenen der besten schnellen direkten Löser ist. Diese müssen jedoch stets ausschließlich auf das jeweilige Modellproblem abgestimmt werden [Trottenberg et al. 2001].

Dynamische Steuerung der Iterationszyklenanzahl

Die Güte der numerischen Approximation einer Lösung steigt mit abnehmender Diskretisierungsweite. Da die Größe des Residuums eines iterativen Verfahrens neben der Startlösung auch von der Anzahl der durchgeführten Iterationsschritte abhängt, läßt sich mit deren Hilfe die gewünschte Güte der Approximation regulieren. Im Gegensatz zu dem aus Einfachkeitsgründen weit verbreiteten Ansatz, eine feste Anzahl von V-Zyklen für das Mehrgitter-Verfahren vorzugeben, wurde im Rahmen dieser Arbeit eine automatische Steuerung implementiert.

Aus der Theorie der numerischen Mathematik ist bekannt, daß die Residuen konvergenter Relaxationsverfahren bei korrekter Implementierung des Lösungsalgorithmus bis zur Maschinengenauigkeit monoton fallen [Hämmerlin/Hoffmann 1991]. Diese Eigenschaft bietet sich damit als Abbruchkriterium für das Iterationsverfahren an, d. h., die Iteration wird beendet, sobald das ermittelte Residuum nicht mehr kleiner als jenes des vorherigen Schrittes ist.⁶ Ein derartiges Vorgehen weist gegenüber der statischen Festlegung der durchzuführenden Anzahl von Iterationszyklen einige Vorteile auf. Neben der impliziten Adaption an die jeweilige Rechengenauigkeit der verwendeten Computerplattform (aus Compiler, Betriebssystem, Prozessor) nutzt dieser Ansatz auch die Tatsache aus, daß bei langsam fließenden Strömungen das als Startlösung herangezogene Fließfeld des vorhergehenden Zeitschrittes bereits eine gute Näherung der Lösung darstellt.

Dieses Vorgehen erweist sich damit vor allem bei quasistationären Systemzuständen als höchsteffizient, da dann vielfach nur ein oder zwei V-Zyklen zur Lösung der POISSON-Gleichungen aufzuwenden sind, diese dabei jedoch bis auf Maschinengenauigkeit gelöst werden.

Der so realisierte adaptive Ansatz zur Iterationsbegrenzung soll sicherstellen, daß jeweils die höchstmögliche numerische Genauigkeit der Plattform ausgenutzt wird. Da das Residuum laut seiner Definition $\|\mathbf{r}\| = \|\mathbf{A}\mathbf{e}\| = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ von der zu lösenden Matrix \mathbf{A} abhängt (sogenannte *Konditionierung* des Problems), ist es nur bedingt möglich, von der Norm des Residuums $\|\mathbf{r}\|$ auf die Norm $\|\mathbf{e}\|$ des Fehlers zwischen numerischer und analytischer Lösung zu schließen.

Der benutzte Mehrgitter-Algorithmus

Nachdem bislang die Arbeitsweise des Mehrgitter-Verfahrens erläutert wurde, soll im folgenden das zur Lösung der Gleichung verwendete Verfahren skizziert werden. Mit dem GAUSS-SEIDEL-Verfahren wird sowohl für den eigentlichen Löser als auch den Glätter ein iteratives Lösungsverfahren eingesetzt.

Durch den Einsatz im Rahmen eines Mehrgitter-Verfahrens können die Nachteile des GAUSS-SEIDEL-Verfahrens größtenteils kompensiert werden. Bei Verwendung des Mehrgitter-V-Zyklus beträgt die Anzahl der zur Konvergenz benötigten GAUSS-SEIDEL-Iterationen in „Hin“-Richtung ungefähr zwei, in „Rück“-Richtung im allgemeinen eine Iteration. Zur Ausschöpfung der doppelten Rechengenauigkeit aller Variablen reichen dann zumeist 10 bis 12 V-Zyklen aus, um eine ausreichende Konvergenz zu erreichen.

Im Idealfall ist die Konvergenz zudem unabhängig von der Gittergröße; das Residuum, das ein Maß für die Güte der numerischen Approximation darstellt, wird pro V-Zyklus um eine Größenordnung kleiner [Joppich/Mijalković 1993]. Diese Werte konnten in der Praxis auch erreicht werden.

3.5.4 Koagulationsgleichung

Sowohl der Koagulations- als auch der Breakup-Prozeß sind gesondert zu implementieren, da sich die Art ihrer Formulierung erheblich von jener der Gleichungen des TDSC-Modells unterscheidet.

Die Koagulationsgleichung (2.27) ist keine reine partielle Differentialgleichung, sondern eine Integro-Differentialgleichung. Sie beinhaltet also nicht nur Differentiale der betrachteten veränderlichen Größen, sondern auch Integrale.

⁶Zur Sicherheit wird zudem ein zusätzliches Abbruchkriterium implementiert, das über eine einstellbare Schranke die maximale Anzahl auszuführender Iteration begrenzt, um im Falle eines nicht hinreichend schnell konvergierenden Verfahrens der Gefahr von Endlosschleifen vorzubeugen.

Ihre numerische Auswertung gestaltet sich unter anderem deswegen schwierig, weil in ihr eine Integration über einen unbeschränkten Integrationsbereich enthalten ist. Zudem muß diese Integration in jedem Zeitschritt für jede einzelne Zelle durchgeführt werden, so daß der dazu benötigte Rechenaufwand merklichen Einfluß auf den Gesamtrechenaufwand nimmt.

Üblicherweise wird die Integration daher entweder durch Transformation der zu integrierenden Funktion (z. B. Logarithmierung) oder durch Beschränkung des Integrationsbereiches in ihrem Aufwand begrenzt. Da die Logarithmierung des Funktional numerisch nicht immer stabil ist, bietet sich alternativ die Einteilung des Integrationsgebietes in Volumenklassen an.

Zur Auswertung der Koagulationsgleichung wird in der Meteorologie — dort dient sie unter anderem zur Beschreibung des Tröpfchenwachstums — am häufigsten das Verfahren von BERRY und REINHARDT [1974] verwendet. Untersuchungen (unter anderem von SHINO [1983]) zeigten jedoch, daß bei einer ungünstigen Auswahl von Tropfenklassen sehr große Fehler (bis zu 10 %) hinsichtlich der Massenerhaltung auftreten können. Ursache dafür ist vor allem das von BERRY und REINHARDT vorgeschlagene spezielle Interpolationsverfahren.

Die von ISSIG [1997] vorgestellte Diskretisierung ermöglicht es, die Koagulationsgleichung unter sehr guter Massenerhaltung auszuwerten, auch wenn in ihr eine inhärente Interpolation enthalten ist. Das Verfahren beruht auf einem sogenannten *Stellvertreter-Ansatz*, bei dem das Integrationsgebiet in eine endliche Anzahl von Klassen zerlegt wird. Diesen Klassen werden Eigenschaften zugewiesen, die charakteristisch für den jeweils durch sie abgedeckten Integrationsbereich sind. Durch die Wahl eines Repräsentanten für jede Klasse läßt sich die Auswertung auf die Behandlung einer endlichen Anzahl von Repräsentanten zurückführen.

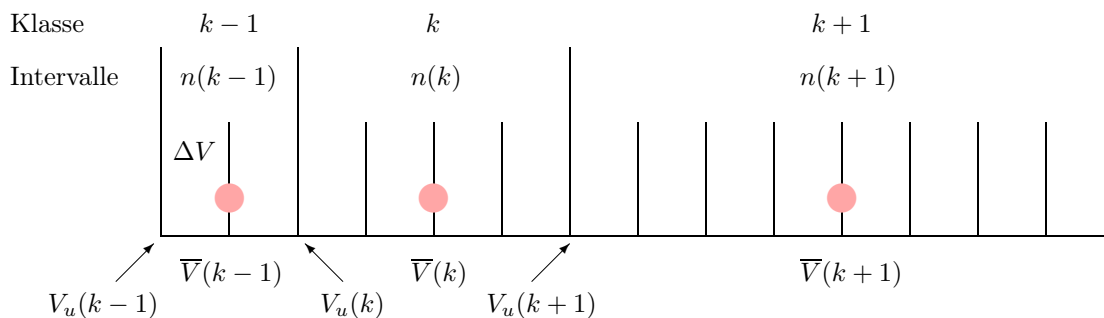


Abbildung 3.11: Klasseneinteilung zur Volumendiskretisierung. Die Repräsentanten der jeweiligen Klassen sind durch Punkte markiert. Sie weisen das mittlere Volumen $\bar{V}(k)$ der jeweiligen Klasse k auf, die aus der Zusammenfassung von $n(k)$ äquidistanten Volumenintervallen ΔV entsteht.

Die von uns gewählte Klassenbildung für Partikelgrößen beruht also auf dem zur numerischen Auswertung verwendeten Prinzip. Die diesem Ansatz zugrundeliegende Beschränkung des insgesamt betrachteten Integrationsbereiches ist modelltheoretisch durch die endliche Konzentration innerhalb des betrachteten Systems und dem daraus resultierenden maximalen Koagulationsvolumen gegeben.

Die Überdeckung des abzudeckenden Volumenbereiches kann auf vielfältige Weise erfolgen. Eine äquidistante Überdeckung ermöglicht über den gesamten Integrationsbereich gleichbleibende Eigenschaften, wobei die Anzahl benötigter Klassen direkt von der angestrebten Volumenauflösung abhängt. Nicht-äquidistante Verteilungen basieren auf der Spezifikation sogenannter *regions of interest*, also Bereiche innerhalb des Integrationsbereiches, die von besonderer Bedeutung sind und deshalb besser aufgelöst werden sollen.

Da im Rahmen dieser Arbeit vor allem die Anfangsphase des Koagulationsprozesses von

Bedeutung ist, wurde die Klasseneinteilung so vorgenommen, daß die kleineren Volumina besser aufgelöst werden. Daher bietet es sich an, die Klassenbreite und damit die Länge des jeweils von ihnen repräsentierten Integrationsbereiches nicht konstant zu wählen, sondern für zunehmende Volumina zu vergrößern. Dieses läßt sich beispielsweise durch eine exponentielle Vergrößerung der Klassenbreiten erreichen. Aus algorithmischen Gründen ist es in unserem Fall ratsam, mit der Basis 2 eine Verdopplung des Integrationsbereiches für jeweils zwei aufeinanderfolgende Klassen vorzunehmen, da dieses die Anzahl der bei einer Koagulation zu betrachtenden Klassen hinreichend stark reduziert.

Die Methode der Volumendiskretisierung besteht damit darin, Volumenbereiche bestimmter, gleichgroßer Volumina ΔV zu bilden, die in ihrer Gesamtheit das Spektrum aller zu berücksichtigenden Partikelgrößen überdecken. Diese Volumenbereiche werden sodann auf κ Größenklassen abgebildet (siehe Abbildung 3.11).

Die Stellvertreter repräsentieren mit ihren Eigenschaften (z. B. Volumen, Radius, Sinkgeschwindigkeit, Diffusivität) dann den gesamten Volumenbereich einer Klasse. Die Klassen selbst lassen sich durch die Anzahl ihrer Klassensegmente n , ihre Klassenmitte \bar{V} und ihre Klassenuntergrenze V_u charakterisieren.

Die Bestimmung der *Klassenuntergrenze* V_u basiert auf einem exponentiellen Ansatz:

$$V_u(k) = 2^k \Delta V.$$

Damit beträgt die *Anzahl* $n(k)$ *der Volumenbereiche* in der k -ten Klasse

$$n(k) = \frac{V_u(k+1) - V_u(k)}{\Delta V} = 2^k,$$

wobei die *Klassenmitte* $\bar{V}(k)$ gegeben ist durch:

$$\bar{V}(k) = \frac{V_u(k) + V_u(k-1)}{2}.$$

Zur Diskretisierung des Verlustintegrals läßt sich ausgehend von der auf die Klassenmitte bezogenen Konzentration $c_{\bar{V}}(k)$ der Partikel die *Gesamtanzahldichte* ermitteln:

$$c(k) = c_{\bar{V}}(k) \cdot n(k).$$

Der Verlust an Volumen in der Klasse k durch Koagulation mit Partikeln aller anderer Klassen ist demnach

$$\mathcal{D}^{(\kappa)}(k) = c(k) \sum_{i=1}^{\kappa} c(i) \bar{p}\bar{v}(V_k, V_i) \Delta V.$$

Aufgrund der Massenerhaltung läßt sich der Gewinnterm direkt aus dem Verlustterm ableiten.

Bei einer linearen Einteilung des diskretisierten Volumens würde sich die Zuordnung des Volumengewinns einer Klasse unmittelbar aus der Addition der beiden Volumina ergeben. Durch die gewählte logarithmische Klasseneinteilung ist diese einfache Zuordnung nicht mehr möglich, da die Addition der beiden Referenzvolumina der beteiligten Klassen nicht unbedingt jener der Ergebnisklasse entspricht. Durch die Wahl sich verdoppelnder Volumenbereiche ist jedoch sichergestellt, daß das koagulierte Volumen immer in der des größeren Volumens bzw. der nächsthöheren Klasse liegt. Damit kann das aus der Koagulation resultierende Volumen anteilmäßig auf diese beiden Klassen verteilt werden, indem deren beide Referenzvolumina zueinander ins Verhältnis gesetzt werden.

Die Zuordnung des koagulierten Volumens geht von dem Volumenverlust der Klasse i aus:

$$\mathcal{D}^{(2)}(k) = c(k)c(i) \bar{p}\bar{v}(V_k, V_i) \Delta V.$$

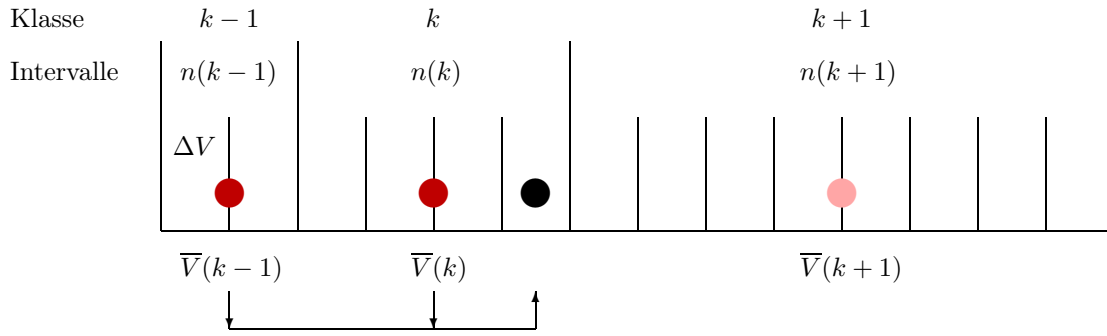


Abbildung 3.12: Zuordnung des Volumens zweier koagulierter Partikel anhand der Repräsentanten der beteiligten Klassen $k-1$ und k . Die logarithmische Klasseneinteilung gewährleistet dabei, daß das koagulierte Volumen immer zwischen den Klassen k und $k+1$ liegt.

Das Volumen der koagulierten Partikel läßt sich nicht direkt einer Klasse wie im Falle einer linearen Klasseneinteilung zuordnen. Infolge der gewählten logarithmischen Klasseneinteilung ist jedoch gewährleistet, daß das koagulierte Volumen für Partikel der Klassen k und i (mit $i < k$) immer zwischen den Klassen k und $k+1$ liegt (siehe Abbildung 3.12). Dabei wird das entstehende Koagulationsvolumen prozentual auf die Klassen k und $k+1$ verteilt:

$$\mathcal{G}_{ki}^{(2)}(k) = \mathcal{D}^{(2)}(k) \frac{\bar{V}(k+1) - (\bar{V}(k) + \bar{V}(i))}{\bar{V}(k+1) - \bar{V}(k)}$$

$$\mathcal{G}_{ki}^{(2)}(k+1) = \mathcal{D}^{(2)}(k) \left(1 - \frac{\bar{V}(k+1) - (\bar{V}(k) + \bar{V}(i))}{\bar{V}(k+1) - \bar{V}(k)} \right).$$

Um den Anteil für jedes Volumenintervall zu bestimmen, müssen diese Zuwächse noch mit der Anzahl von Volumenintervallen in den jeweiligen Klassen gewichtet werden:

$$\frac{n(k) + n(i)}{n(k)} \quad \text{als Gewichtungsfaktor für Klasse } k \text{ und}$$

$$\frac{n(k) + n(i)}{n(k+1)} \quad \text{als Gewichtungsfaktor für Klasse } k+1.$$

Damit ergeben sich für die Koagulation von Partikeln der Klasse k und i mit $i < k$ folgende Gewinnterme für die Volumenklassen k und $k+1$:

$$G(k) = \left(\mathcal{D}^{(2)}(k) + \mathcal{D}^{(2)}(i) \right) \frac{\bar{V}(k+1) - (\bar{V}(k) + \bar{V}(i))}{\bar{V}(k+1) - \bar{V}(k)} \cdot \frac{n(k) + n(i)}{n(k)}$$

$$G(k+1) = \left(\mathcal{D}^{(2)}(k) + \mathcal{D}^{(2)}(i) \right) \left(1 - \frac{\bar{V}(k+1) - (\bar{V}(k) + \bar{V}(i))}{\bar{V}(k+1) - \bar{V}(k)} \right) \frac{n(k) + n(i)}{n(k+1)}.$$

Zur Lösung der Koagulationsgleichung (2.27) wird somit ein explizites Lösungsverfahren verwendet, das die Integration der Koagulationsgleichung auf eine volumenerhaltende Summation über die Gewinnterme zurückführt. Da die Gewichtungsfaktoren für die Anzahl der Volumenebereiche und die Verhältnisse der Klassenmitten während der Simulation unveränderlich sind, lassen sie sich vor Beginn bestimmen und als Konstanten in Feldern ablegen. Dieses beschleunigt die für jeden Zeitschritt und jede Gebietszelle durchzuführende Koagulationssimulation

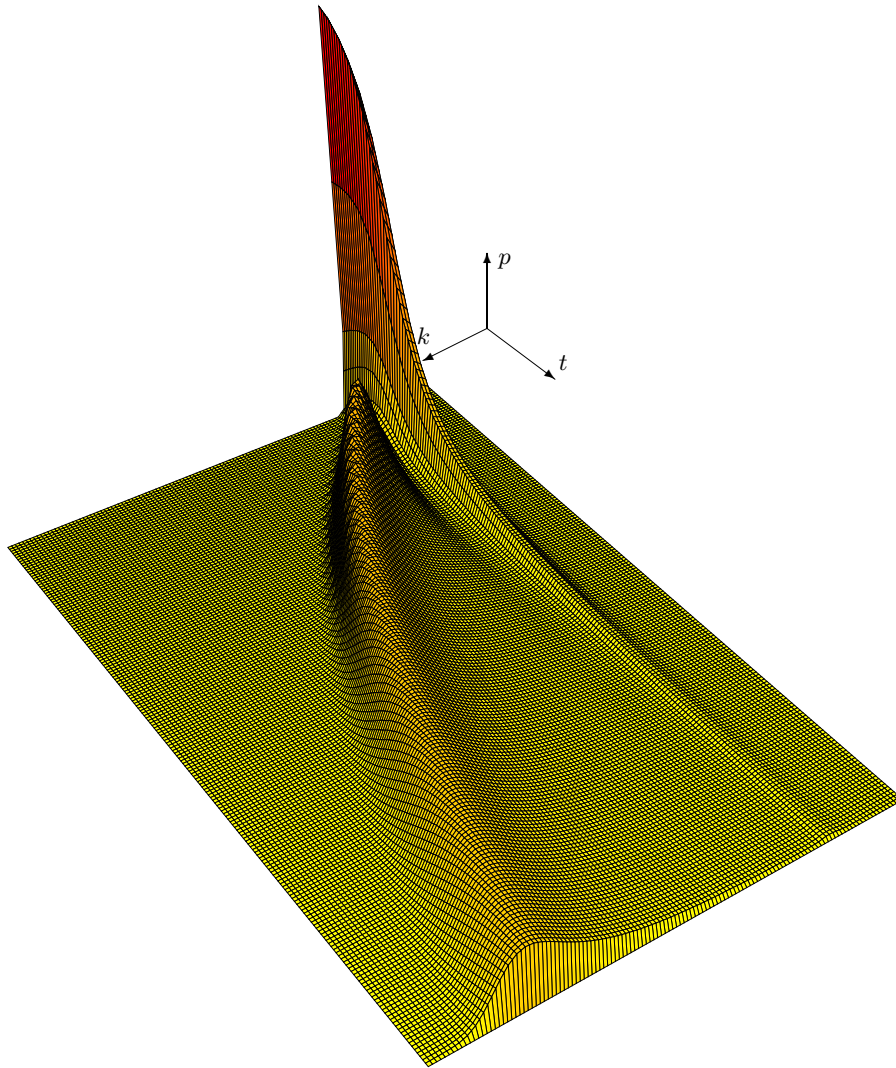


Abbildung 3.13: Anwendung der Koagulationsgleichung auf eine GAUSS-Verteilung. Der jeweilige Volumenanteil ist auf der p -Achse aufgetragen. Auf der k -Achse sind die einzelnen Partikelgrößenklassen aufgeführt, während entlang der t -Achse die Simulationszeit voranschreitet.

erheblich, da die relativ aufwendigen Divisionsoperationen nur ein einziges Mal auszuführen sind.

Abbildung 3.13 zeigt beispielhaft die Anwendung der Koagulationsgleichung auf ein normalverteiltes Partikelspektrum. Dargestellt ist die zeitliche Veränderung der Ausgangsverteilung. Der jeweilig Volumenanteil ist auf der p -Achse aufgetragen. Auf der k -Achse sind die einzelnen Partikelgrößenklassen aufgeführt, während entlang der t -Achse die Simulationszeit voranschreitet.⁷

Im Laufe der Simulation verschiebt sich der Schwerpunkt dieser Modellverteilung hin zu den Partikeln mit größeren Volumina. Die Wachstumsgeschwindigkeit des Verteilungsmaximums

⁷Aufgrund des diskreten Charakters der Partikelgrößenklassen wäre es eigentlich geboten, Balkenhistogramme zu verwenden. Da die Einteilung in Klassen jedoch nur eine technische Vereinfachung darstellt, wobei die Repräsentanten stellvertretend für einen kontinuierlichen Volumenbereich sind, werden zur Erhöhung der Übersichtlichkeit sogenannte *surface plots* verwendet.

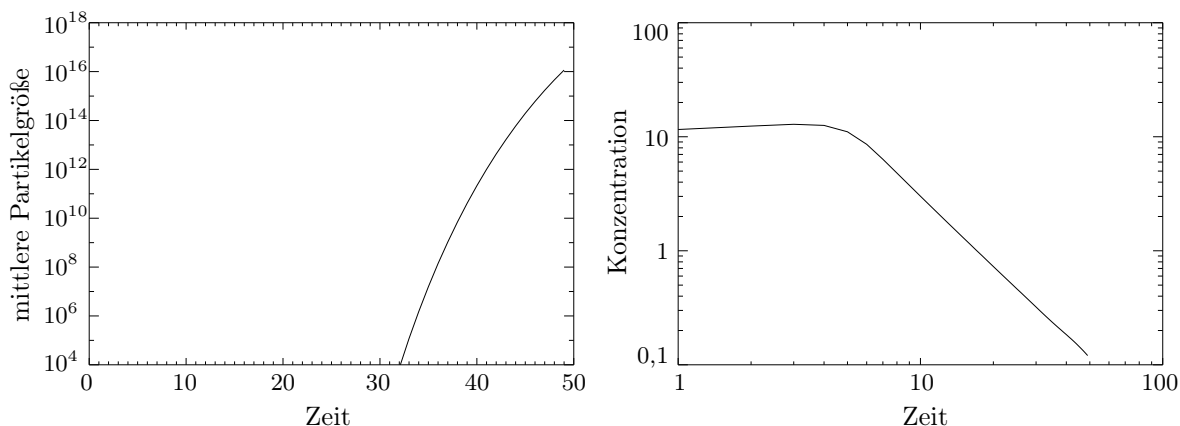


Abbildung 3.14: Das linke Diagramm zeigt das Wachstum der mittleren Partikelgröße mit der Zeit in willkürlichen Einheiten, das rechte die Ausdünnung einer Klasse währenddessen.

nimmt ab, während sich die Halbwertsbreite der Verteilung stark erhöht. Unter Beachtung der logarithmischen Skala für die Partikelgröße läßt sich zudem festhalten, daß die mittlere Größe der Partikel schwächer als exponentiell wächst und die Besetzung der Ausgangsverteilung nahezu hyperbolisch verschwindet (siehe Abbildung 3.14).

3.5.5 Breakup-Gleichung

In unserem Konvektionsmodell unterscheiden sich die Repräsentanten zweier aufeinander folgender Partikelgrößenklasse im Volumen jeweils um den Faktor zwei. Naheliegenderweise gehen wir davon aus, daß das Zerfallsprodukt stets aus zwei Partikeln der nächstkleineren Klasse besteht. Diese müssen nicht notwendigerweise gleichgroß sein, sollen aber jeweils durch denselben Repräsentanten vertreten werden (siehe Abschnitt 3.5.4). Da der Zerfallsprozeß selbst als instantan betrachtet wird, können die sich ergebenden Partikel ohne zeitliche Verzögerung weiter zerfallen und damit innerhalb eines simulierten Zeitschrittes durchaus zu einer Schar sehr unterschiedlich großer Zerfallsprodukte führen.

Der in Abschnitt 2.7.3.2 spezifizierte Breakup-Prozeß bedarf zur Implementierung noch eines Modells für die Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit p_{bre} von der Partikelgröße $V_k := \bar{V}(k)$. Dazu ist die für eine lineare Volumendiskretisierung formulierte Breakup-Rate $\left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots)\right]_{\text{bre}}$ in die logarithmisch diskretisierte Volumeneinteilung der Partikelgrößenklassen zu überführen.

3.5.5.1 Anpassung an die logarithmisch diskretisierte Volumeneinteilung

Die Anzahl der zum Zeitpunkt t in der Größenklasse k befindlichen Partikel $N_k(t)$ läßt sich aus der Partikelanzahldichte $N(V, \dots)$ durch Integration über das der Klasse zugrundeliegende Volumenintervall $[2^k \Delta V, 2^{k+1} \Delta V]$ bestimmen:

$$N_k(t) := \int_{2^k \Delta V}^{2^{k+1} \Delta V} N(V, \dots) dV. \tag{3.5}$$

Die durch den Breakup-Prozeß bedingte zeitliche Änderungsrate $\left[\frac{\partial}{\partial t} N_k(t)\right]_{\text{bre}}$ der Partikel in der Größenklasse k ist demnach

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N_k(t) \right]_{\text{bre}} = \int_{2^k \Delta V}^{2^{k+1} \Delta V} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) \right]_{\text{bre}} dV.$$

Unter Verwendung der in Gleichung (2.29) für eine lineare Volumendiskretisierung bestimmten Breakup-Rate

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N(V, \dots) \right]_{\text{bre}} = 4 \cdot N(2V, \dots) p_{\text{bre}}(2V) - N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V)$$

läßt sich nun die Transformation in die logarithmisch diskretisierte Volumeneinteilung der Partikelgrößenklassen vornehmen:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N_k(t) \right]_{\text{bre}} = 4 \int_{2^k \Delta V}^{2^{k+1} \Delta V} N(2V, \dots) p_{\text{bre}}(2V) dV - \int_{2^k \Delta V}^{2^{k+1} \Delta V} N(V, \dots) p_{\text{bre}}(V) dV.$$

Nach Substitution der Integrationsvariablen $dV' = 2 dV$ und Einführung der klassenabhängigen mittleren Breakup-Wahrscheinlichkeit p_{bre}^k ergibt sich

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N_k(t) \right]_{\text{bre}} = 4 \int_{2 \cdot 2^k \Delta V}^{2 \cdot 2^{k+1} \Delta V} N(V', \dots) p_{\text{bre}}(V') \frac{1}{2} dV' - N_k(t) p_{\text{bre}}^k.$$

Mittels der Definition (3.5) der klassenabhängigen Partikelanzahl läßt sich deren zeitliche Änderung schreiben als

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N_k(t) \right]_{\text{bre}} = 2 N_{k+1}(t) p_{\text{bre}}^{k+1} - N_k(t) p_{\text{bre}}^k.$$

Dieses entspricht der von uns gewählten Realisierung: In Abhängigkeit zur Zerfallsrate der Partikel des Volumens V_{k+1} entstehen zwei Partikel des halben Volumens V_k .

3.5.5.2 Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit von der Partikelgröße

Nachdem nun der in Abschnitt 2.7.3.2 spezifizierte Breakup-Prozeß an die verwendete Partikelklasseneinteilung angepaßt worden ist, gilt es noch, ein Modell für die Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit von der Partikelgröße zu entwickeln.

Physikalisch gesehen ist die Breakup-Wahrscheinlichkeit eine von vielen Einflußgrößen abhängige Eigenschaft der suspendierten Partikel. Neben Material, Größe und Gestalt sind dies beispielweise Temperatur, Relativgeschwindigkeit der Partikel zum Fluid oder auch innere Kräfte (z. B. Oberflächenspannung bei Flüssigkeiten). Im Rahmen dieses Konvektionsmodells werden nur homogene, kugelförmige Partikel mit identischen physikalischen Eigenschaften, aber unterschiedlichem Volumen betrachtet. Die variierenden Partikelvolumina sind daher auch Grundlage unseres Ansatzes der Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit von der Partikelklasse.

Ausgehend von der anschaulichen Überlegung, daß die Wahrscheinlichkeit eines Partikels zu zerfallen mit der Größe des Partikels wächst (motiviert beispielsweise durch einen größeren Wirkungsquerschnitt und eine abnehmende Stabilität aufgrund eines ungünstigeren Verhältnisses zwischen Oberflächenspannung und Volumen), werden wir vorrangig den Fall betrachtet, daß die Wahrscheinlichkeit des Zerfalls pro Volumen konstant ist. Es wird damit vorausgesetzt,

daß die Wahrscheinlichkeit des Aufbrechens eines Partikels proportional zu seinem Volumen ist, so daß für die Zerfallswahrscheinlichkeit p_{bre}^k von Partikeln der Größenklasse k bezogen auf jene der Referenzklasse k_{ref} gilt:

$$p_{\text{bre}}^k = p_{\text{bre}}^{k_{\text{ref}}} \cdot 2^{k-k_{\text{ref}}}.$$

Dieses bedeutet, daß die Wahrscheinlichkeit des Zerfalls für jede Klasse oberhalb der Referenzklasse jeweils um den Faktor 2 zunimmt, während sie für jede Klasse unterhalb der Referenzklasse um denselben Faktor abnimmt. Dadurch läßt sich dann der Breakup-Prozeß mittels eines externen Parameters steuern, der die Breakup-Wahrscheinlichkeit für die Partikel der Referenzklasse festlegt.

Die Wirkung des Breakup-Prozesses besteht somit nicht nur in einer Begrenzung des Größenwachstums der Partikel, sondern ermöglicht es dem System auch, zu kleineren als in der Ausgangsverteilung vorhandenen Partikeln zu gelangen. In störungstheoretischer Hinsicht strebt dieser Breakup-Prozeß damit einer stabilen Gleichgewichtslage entgegen.

Bei der Implementierung des semi-impliziten Lösungsverfahrens der Breakup-Gleichung ist darauf zu achten, daß der Anforderung der Instantanität des Zerfalls Genüge getan wird. Dazu müssen die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Partikelklassen mit der größten beginnend bestimmt und die Änderungen unmittelbar in die kleineren Klassen einfließen gelassen werden. Kehrt man die Auswertungsreihenfolge um, so ergäbe sich eine retardierte Zerfallskaskade, in der der simulierte Zeitschritt des Gesamtsystems zur Zerfallskonstante würde.

3.6 Validierung des numerischen Codes der Implementierung

Zur Erlangung wissenschaftlich fundierter Ergebnisse müssen die ihnen zugrundeliegenden Untersuchungsverfahren sorgfältigen Überprüfungen unterzogen werden. In Anbetracht der Komplexität der Aufgabenstellung trifft dieses insbesondere für die erforderliche numerische Realisierung zu. Das aus der Implementierung resultierende Simulationsprogramm ist mit einer Quelltext-Länge von gut 6 800 Zeilen so umfangreich, daß die einzelnen Routinen sowohl getrennt als auch in ihrem Zusammenspiel verschiedenen Tests unterworfen werden müssen.

Bei der Validierung eines numerischen Simulationsprogramms treten zahlreiche technische Probleme auf, die in üblicher Anwendungssoftware zumeist nicht anzutreffen sind. So handelt es sich bei einer Software, die ein komplexes mathematisches Problem zu lösen hat, beispielsweise nicht um einen Zustandsautomaten, für den sich in deterministischer Weise Zuverlässigkeitstests aufstellen und durchführen lassen. Zudem führt die Notwendigkeit der effizienten Ausnutzung der verfügbaren Ressourcen dazu, daß plattformabhängige Einflüsse nicht gänzlich zu vermeiden sind. Die bei numerischer Behandlung auftretenden prinzipbedingten Rechenungenauigkeiten müssen bereits bei der Wahl der verwendeten Lösungsverfahren berücksichtigt werden (siehe Abschnitte 3.5.2.1 und 3.5.2.2).

Für wissenschaftlich zuverlässige Aussagen ist es zudem nicht ausreichend, sich lediglich auf Plausibilitätsüberprüfungen zu beschränken, sondern es sollten sowohl qualitativ als auch quantitativ nachprüfbar Evaluierungsmethoden dazu herangezogen werden. Da die im Rahmen unserer Problemstellung zu lösenden Differentialgleichungen nur in relativ speziellen Fällen analytische Lösungen haben, können die Löser durch Vergleich mit analytischen Lösungen nur exemplarisch getestet werden.

Weil sich dieses Problem allen im Felde der Konvektionsforschung tätigen Wissenschaftlern stellt, werden international koordinierte Vergleiche, sogenannte *Benchmarks*, erstellt, anhand deren sie die Gültigkeit, Genauigkeit und Effizienz ihrer Codes untereinander zu vergleichen versuchen. Leider scheint es für das TDSC-Modell bislang keinen derartigen Standard zu geben, so daß das Programm anhand eines Benchmarks für rein thermische Konvektion

[Blankenbach et al. 1989] getestet werden mußte. Ein Vergleich mit den dabei erzielten Ergebnissen soll sicherstellen, daß die einzelnen Teile des umfangreichen Algorithmus sinnvoll zusammenarbeiten.

Die zur Validierung der Implementierung vorgenommenen Überprüfungen lassen sich in Tests einzelner Teile des Simulationsprogrammes

- analytische Tests des Mehrgitter-Verfahrens
- vergleichender Test des Mehrgitter-Verfahrens mit einem GAUSS-SEIDEL-Verfahren
- vergleichender Test des Mehrgitter-Verfahrens mit einer Spektral-Methode
- Test der Massenerhaltung für die Koagulations- und Breakup-Gleichung

und Tests des Gesamtprogrammes

- Unabhängigkeit der Lösung von der Zeitschrittweite, d. h., das Ergebnis der Simulation ist für abnehmende Zeitschrittweiten stabil
- Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Gitterauflösung, d. h., die Lösungsapproximationen der diskretisierten Gleichungen konvergieren für abnehmende Zeitschrittweiten gegen die Lösungen der kontinuierlichen Gleichungen
- Unabhängigkeit der Ergebnisse von den Startbedingungen
- Vergleichbarkeit der Ergebnisse mit jenen eines internationalen Benchmarks

unterteilen. Diese haben stets die Zuverlässigkeit des erstellten Codes ergeben. Ihre Ergebnisse können im folgenden nur exemplarisch vorgestellt werden.

3.6.1 Analytische Tests

Die Diskretisierung und numerische Lösung der elliptischen Differentialgleichungen soll anhand eines analytisch lösbaren Beispielles überprüft werden. An diesem läßt sich dann einerseits die Implementierung des Lösungsalgorithmus verifizieren und andererseits die Güte der numerischen Approximation der Lösung hinsichtlich der Genauigkeit untersuchen. Zudem bietet dieses Testproblem die Möglichkeit, verschiedene Lösungsverfahren bezüglich deren Genauigkeit und der von ihnen benötigten Rechenzeit miteinander zu vergleichen, mithin also die Effizienz der Verfahren zu überprüfen.

Für die analytischen Tests dient die in x - und z -Richtung periodische und glatte Funktion

$$\psi(z, x) := \sin(k_x x) \cdot \sin(k_z z)$$

als Lösung der Stromfunktion auf dem Modellgebiet. Die Wellenzahlen k_x und k_z gilt es dabei so zu wählen, daß die Stromfunktion auf den Rändern den Wert Null annimmt

$$\psi|_{\text{Rand}} = 0$$

(DIRICHLETSche Randwertbedingung), da dieses den Randwertbedingungen der späteren Anwendung entspricht. Bei Gittern mit von Eins verschiedenem Seitenverhältnis, die m Spalten und n Zeilen aufweisen, ergibt sich für $k_x = \frac{2\pi}{m-1}$ und $k_z = \frac{2\pi}{n-1}$

$$\nabla^2 \psi(z, x) = (-k_x^2 - k_z^2) \cdot \psi(z, x)$$

als zu lösendes Problem. Im Falle quadratischer, äquidistanter Gitter mit $m = n$ Zeilen bzw. Spalten sowie $k := k_x = k_z$ als Wellenzahl vereinfacht sich dieses dann zu

$$\nabla^2 \psi(z, x) = -2k^2 \cdot \psi(z, x).$$

Der Test besteht also darin, die rechte Seite des Gleichungssystems mit $\nabla^2\psi(z, x)$ zu initialisieren und dieses dann mit dem jeweiligen POISSON-Löser zu lösen.

Die Güte der Approximation der analytischen Lösung durch die numerische soll dabei sowohl anhand des relativen Fehlers E_r^2 über der \mathcal{L}^2 -Norm als auch anhand des relativen Fehlers E_r^∞ über der Maximumsnorm beurteilt werden:

$$E_r^2 := \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m (\psi_{ij}^{\text{analytisch}} - \psi_{ij}^{\text{numerisch}})^2}{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m (\psi_{ij}^{\text{analytisch}})^2}}$$

$$E_r^\infty := \frac{\max_{i \in \{0, \dots, n\}, j \in \{0, \dots, m\}} \|\psi_{ij}^{\text{analytisch}} - \psi_{ij}^{\text{numerisch}}\|}{\max_{i \in \{0, \dots, n\}, j \in \{0, \dots, m\}} \|\psi_{ij}^{\text{analytisch}}\|}.$$

Diese analytischen Tests wurden für das Mehrgitter-, das GAUSS-SEIDEL- und ein Spektralverfahren durchgeführt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind in Tabelle 3.3 nur die Ergebnisse für das Mehrgitter-Verfahren zusammengefaßt. Dieses liegt mit dem hochspezialisierten Spektralverfahren (siehe [Nauheimer 1993]) für quadratische Geometrien in etwa gleichauf, vermag aber im Gegensatz zu diesem auch unsymmetrische Diskretisierungen, d. h. jene Gitter mit den Seitenverhältnissen 2:1 bis 32:1, stabil zu lösen. Beide Verfahren sind dem GAUSS-SEIDEL-Verfahren hinsichtlich der Rechenzeitanforderung bei den feineren Gittern um Größenordnungen überlegen. Die Angabe der dimensionslosen, normierten CPU-Zeiten dient dabei lediglich dem Vergleich innerhalb dieser Meßreihe und spiegelt die mit der Anzahl der Knoten wachsende Rechenzeitkomplexität wider.

| Gittergröße $m \times n$ | Mehrgitter | | |
|-----------------------------|----------------------|----------------------|----------|
| | E_r^2 | E_r^∞ | CPU-Zeit |
| 17×17 | $3,22 \cdot 10^{-3}$ | $3,22 \cdot 10^{-3}$ | 1,98 |
| 33×33 | $8,04 \cdot 10^{-4}$ | $8,04 \cdot 10^{-4}$ | 4,42 |
| 65×65 | $2,01 \cdot 10^{-4}$ | $2,01 \cdot 10^{-4}$ | 18,36 |
| 129×129 | $5,02 \cdot 10^{-5}$ | $5,02 \cdot 10^{-5}$ | 82,93 |
| 257×257 | $1,26 \cdot 10^{-5}$ | $1,25 \cdot 10^{-5}$ | 347,20 |
| 513×513 | $3,14 \cdot 10^{-6}$ | $3,14 \cdot 10^{-6}$ | 1 332,83 |
| 65×33 | $1,99 \cdot 10^{-1}$ | $1,99 \cdot 10^{-1}$ | 8,99 |
| 129×33 | $5,81 \cdot 10^{-2}$ | $5,81 \cdot 10^{-2}$ | 17,97 |
| 257×33 | $1,46 \cdot 10^{-2}$ | $1,46 \cdot 10^{-2}$ | 36,49 |
| 513×33 | $3,09 \cdot 10^{-3}$ | $3,09 \cdot 10^{-3}$ | 79,47 |
| 1025×33 | $1,73 \cdot 10^{-4}$ | $1,74 \cdot 10^{-4}$ | 167,21 |

Tabelle 3.3: Analytische Tests für unterschiedliche Diskretisierungen (Gittergröße bezeichnet die Anzahl der Diskretisierungspunkte des zweidimensionalen Gebietes in horizontaler und in vertikaler Richtung)

Die in Tabelle 3.3 aufgeführten relativen Fehlerwerte zeigen, daß mit zunehmender Verfeinerung der Diskretisierung (d. h. wachsender Gittergröße) die analytische Lösung besser durch die numerische approximiert wird. Die Lösungsverfahren konvergieren also bei Erhöhung der Ortsauflösung mit der Anzahl der Diskretisierungspunkte.

Die analytischen Tests wurden für unterschiedliche Gittergrößen durchgeführt, um einerseits die Abhängigkeit des bei der Lösung verbleibenden Fehlers von der Diskretisierung und andererseits

rerseits die des Rechenaufwandes von der Anzahl der Gitterknoten aufzuzeigen. Während die relativen Fehler mit zunehmender Gittergröße konvergieren, wächst der zur Lösung benötigte Aufwand ungefähr linear mit der Anzahl der Gitterpunkte⁸. Für das größte Gitter scheint der durch die Modularisierung des Algorithmus bedingte Overhead (Aufruf von Prozeduren) nicht vernachlässigbar zu sein.

Dieses zeigt eine Problematik auf, mit der sich nahezu alle numerischen Untersuchungen konfrontiert sehen. Zur Erhöhung der Genauigkeit der Ergebnisse ist es ratsam, die Diskretisierung möglichst fein zu wählen, was jedoch zumeist den Ressourcenverbrauch drastisch steigert, so daß letztlich ein Kompromiß zwischen Aufwand und Nutzen gefunden werden muß.

Zusätzlich wurden die Lösungseigenschaften für unterschiedliche Diskretisierungsweiten in x - und y -Richtung untersucht, um Erkenntnisse über die Lösungsgüte bei Simulationen mit unsymmetrischen Seitenverhältnissen (sogenannte *aspect ratios*) zu gewinnen. Diese simulieren die natürliche Dimensionierung der Konvektionsgebiete, die in Mantelnähe mehrere Konvektionszellen umfassen können.

3.6.2 Benchmark-Tests

Computergestützte Konvektionsforschung ist ein seit langem etabliertes Betätigungsfeld innerhalb der Geodynamik. Daher existiert eine große Anzahl numerischer Codes verschiedener an diesen Problemen arbeitender Forschungsgruppen. Um die diversen numerischen Methoden einander gegenüberzustellen, um Effizienz und Genauigkeit der verwendeten Algorithmen zu vergleichen und um Vor- und Nachteile der einzelnen Implementierungen zu erkennen, sind Benchmark-Tests ein probates Mittel in der theoretischen Physik. Zu diesem Zweck werden verschiedene Aufgaben gestellt, die von den einzelnen Probanden bearbeitet werden sollen.

Dieses Verfahren bietet sich immer dann an, wenn die Komplexität der zu testenden Fragestellung keine einfacheren Vergleichsverfahren zuläßt. Beispielsweise ist die effektiv von einem Computer erbrachte Rechenleistung sehr stark abhängig von der Aufgabenstellung und der zu ihrer Realisierung gewählten Verfahren.

Um zu demonstrieren, daß die einzelnen Teile des Algorithmus sinnvoll zusammenarbeiten, wurde die Implementierung des Konvektionsmodells an einem Benchmark für rein thermische Konvektion [Blankenbach et al. 1989] getestet. Dieser Test wurde in der sogenannten RAYLEIGH-Skalierung durchgeführt, d. h. die Normierungsgeschwindigkeit ist $v_0 = \frac{\kappa}{L}$ (Quotient aus thermischer Diffusivität und Längenmaßstab).

Die numerischen Codes werden für $Ra_T = 10^4$ und $Ra_T = 10^5$ auf verschiedenen äquidistanten Gittern miteinander verglichen. Als Vergleichskriterien dienen dabei die NUSSELT-Zahl

$$Nu_T := \frac{\int_0^L \frac{\partial}{\partial z} T(x, z = H) dx}{\int_0^L T(x, z = 0) dx},$$

die als Quotient aus dem Grenzschichttemperaturgradienten und der Bodentemperatur das Verhältnis von Wärmeübertrag durch reine Diffusion zu Wärmeübertrag durch Diffusion und Advektion beschreibt und damit ein Maß für die Effizienz des Energietransportes ist, und die

⁸Beim erweiterten TDSC-Modell hat zudem die Anzahl der betrachteten Partikelklassen einen erheblichen Einfluß auf die benötigte Rechenleistung, da der Aufwand zur Integration der Koagulationsgleichung nahezu quadratisch von der Anzahl der Größenklassen abhängt.

mittlere Fluid-Geschwindigkeit:

$$v_{\text{rms}} := \frac{1}{HL} \int_0^H \int_0^L \sqrt{v_x^2 + v_z^2} dx dz.$$

Die in Tabelle 3.4 einander gegenübergestellten Kennzahlen der unterschiedlichen Codes zeigen eine gute Übereinstimmung, d. h., unser Konvektionsmodell kann die im Benchmark von BLANKENBACH et al. [1989] festgehaltenen Ergebnisse reproduzieren. Sie stimmen zudem sehr gut mit denen eines am Lehrstuhl für Geodynamik von NAUHEIMER [1993] realisierten Modells überein, das auf numerischen Arbeiten von FRADKOV [1984] aufbaut. Dieser hatte die elliptischen POISSON-Gleichungen für die Wirbeligkeit ω und die Stromfunktion ψ durch direkte FOURIER-Zerlegung mit dem PRAGONKA-Verfahren gelöst [Nauheimer 1997].

| Gittergröße $m \times n$ | BLANKENBACH et al. | | | | PULLMANN | | | |
|-----------------------------|--------------------|------------------|---------------|------------------|---------------|------------------|---------------|------------------|
| | $Ra_T = 10^4$ | | $Ra_T = 10^5$ | | $Ra_T = 10^4$ | | $Ra_T = 10^5$ | |
| | Nu_T | v_{rms} | Nu_T | v_{rms} | Nu_T | v_{rms} | Nu_T | v_{rms} |
| 16×16 | 4,85 | 42,46 | 10,21 | 187,89 | 4,76 | 42,23 | 9,35 | 180,92 |
| 32×32 | 4,88 | 42,77 | 10,45 | 191,86 | 4,85 | 42,71 | 10,25 | 190,25 |
| 64×64 | 4,88 | 42,84 | 10,52 | 192,95 | 4,88 | 42,83 | 10,46 | 192,48 |
| 128×128 | 4,88 | 42,86 | 10,53 | 193,21 | 4,88 | 42,85 | 10,52 | 193,03 |

Tabelle 3.4: Benchmark-Ergebnisse.⁹ Die Gegenüberstellung der Kennzahlen unseres Programmes mit jenen des Benchmarks zeigt, daß unser Konvektionsmodell die Ergebnisse des rein thermischen Benchmarks gut reproduzieren kann.

Die größeren Unterschiede im Falle der höheren RAYLEIGH-Zahl sind eine Folge der relativ schlechten Auflösung der Grenzschicht, deren Dicke mit wachsender RAYLEIGH-Zahl abnimmt [Nauheimer 1993]. Da äquidistante Gitter in allen Diskretisierungspunkten dasselbe absolute Auflösungsvermögen besitzen, führt die mit wachsender RAYLEIGH-Zahl zunehmende Lokalisierung der Temperaturverteilung in dünnen Grenzschichten zu einem sinkenden relativen Auflösungsvermögen des Temperaturfeldes, während die relative Geschwindigkeitsauflösung homogen bleibt. Deswegen werden bei Konvektionssimulationen mit hohen RAYLEIGH-Zahlen auf äquidistanten Gittern die Geschwindigkeitsfelder relativ erheblich besser als jene der Temperaturfelder aufgelöst [Travis et al. 1990]. Um eine gleichmäßige Fehlerverteilung zu erreichen, müßten daher die Grenzschichten feiner aufgelöst werden.¹⁰ Die bei Finite-Differenzen-Methoden auftretenden Fehler neigen dazu, sich auf das gesamte Gitter zu erstrecken, während die Finite-Elemente-Methoden stärker lokalisiert sind [Travis et al. 1990].

Bei hinreichend hoher Auflösung läßt sich erwarten, daß das generelle Verhalten dasselbe für alle korrekten Implementierungen ist. Die exakten Details sind jedoch weiterhin stark abhängig von den Anfangswertbedingungen und Quellen kleinskaliger Fluktuation in der Lösung [Travis et al. 1990]. Bei unzureichend aufgelösten Simulationen kann hingegen ein gänzlich anderes Systemverhalten entstehen, da beispielsweise die Grenzschichtinstabilitäten so stark gedämpft werden, daß sie nicht zum Auslöser eines Umbaus des Fließfeldes werden können [Travis et al. 1990].

⁹Werte von BLANKENBACH et al. [1989] für 64×64 und 128×128 mangels Verfügbarkeit aus den benachbarten Gittergrößen interpoliert.

¹⁰Obwohl unser Programm sowohl in vertikaler als auch in horizontaler Richtung Gitterverfeinerungen ermöglicht, wurde zur Wahrung der Vergleichbarkeit stets mit äquidistanten Gittern gearbeitet.

4 Ergebnisse

In diesem Kapitel wird das um einen Koagulations- und einen Breakup-Prozeß erweiterte Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion untersucht. Das Augenmerk richtet sich dabei vor allem auf die sich einstellenden Systemzustände und deren Abhängigkeit von den externen Parametern.

Es ließ sich eine bislang unbekannte Form episodischen Systemverhaltens beobachten, die sich von den pulsatorischen Zuständen durch das zwischenzeitlich vollständige Absterben der Konvektion unterscheidet. Diese episodischen Zustände sind dabei durch das abwechselnde Auftreten von relativ kurzen konvektiven und erheblich länger dauernden nicht-konvektiven Phasen gekennzeichnet. In letzteren ändert sich die Partikelgrößenverteilung durch die Koagulations- und Breakup-Prozesse derart, daß ein Einsetzen der Konvektion getriggert wird.

Die beobachteten episodischen Systemzustände können als Folge unterschiedlicher Zeitskalen der lokalen Koagulations- und Breakup-Prozesse sowie des Fließprozesses verstanden werden. Sie sind nicht nur für verschiedene Breakup-Mechanismen, sondern auch für eine um mehrere Größenordnungen variierte Koagulationswahrscheinlichkeit nachweisbar.

4.1 Untersuchungsmethode

Die Untersuchung des in Kapitel 2 aufgestellten mathematischen anhand des im letzten Kapitel daraus abgeleiteten numerischen Modells erforderte eine Vielzahl einzelner Simulationsreihen, in denen die jeweils relevanten Parameter in systematischer Weise variiert wurden. Dazu mußte die Hilfe zahlreicher Computer in Anspruch genommen werden.

Während dieser Arbeit wurden weit mehr als eine halbe Million Simulationsläufe durchgeführt, deren Handhabung sich nur unter Einsatz einiger eigens dazu entwickelten Programme zur Erzeugung, Kontrolle, Verwaltung und Auswertung der Simulationen realisieren ließ. Diese gestatten es, in automatisierter Form eine Vielzahl von einzelnen Simulationen parallel auf einem Workstation-Cluster auszuführen und zu überwachen.

Während der einzelnen Simulationsläufe werden die Feldgrößen und die daraus berechneten Kenngrößen zu geeigneten Zeitpunkten (bei einer Analyse zeitlicher Phänomene beispielsweise mit hinreichend großer Zeitauflösung) für die spätere Untersuchungen in Datensätzen gesichert. Für die Datenanalyse müssen diese getrennt gewonnenen Datensätze dann zusammengeführt und gemeinsam ausgewertet werden.

4.2 Erklärung der Beobachtungsgrößen

Zur Untersuchung des Systemverhaltens des um Koagulation und Breakup erweiterten Konvektionssystems wird von den räumlich und zeitlich variablen Feldgrößen Temperatur T , Konzentration C , Fließgeschwindigkeit \mathbf{v} und Stromfunktion ψ sowie den daraus berechneten gemittelten Größen (z. B. mittlere quadratische Geschwindigkeit des Fluids v_{rms}) ausgegangen. Für diejenigen Größen, welche mit der Partikelgröße variieren, können durch Gewichtung mit den jeweiligen Konzentrationsanteilen der einzelnen Partikelgrößenklassen sogenannte „effektive Größen“ bestimmt werden (z. B. effektive Diffusivität¹ D^{eff} , effektive Sinkgeschwindigkeit

¹Die effektive Diffusivität D_{eff} wird im folgenden zumeist in Form einer „effektiven LEWIS-Zahl“ Le_{eff} angegeben, welche jedoch nicht mit der als Eingangsparameter Verwendung findenden LEWIS-Zahl Le verwechselt

v_s^{eff}). Zur Charakterisierung des Systemverhaltens lassen sich zudem einige in der Konvektionsforschung gebräuchliche Kenngrößen (z. B. NUSSELT-Zahl) heranziehen.

Die Stromfunktion ψ bildet ein Maß für den Fluid-Fluß. Ein Wechsel ihres Vorzeichens bedeutet, daß sich der Drehsinn des entstandenen Wirbels umkehrt. In der von uns gewählten Diskretisierung mit Hilfe staggered grids (siehe Abschnitt 3.2) läßt sich die Fluidgeschwindigkeit direkt aus dem Gradienten der Stromfunktion bestimmen. Die Fließgeschwindigkeit des Fluids ist also umso höher, je stärker die Stromfunktion räumlich variiert.

4.3 Definition der Kenngrößen

In den folgenden Untersuchungen läßt sich die räumliche Transporteffektivität für Wärme durch eine integrale Definition der thermischen NUSSELT-Zahl charakterisieren:

$$Nu_T := \frac{\int_0^L \frac{\partial}{\partial z} T(x, z = H) dx}{\int_0^L T(x, z = 0) dx}.$$

Die NUSSELT-Zahl wird dabei als Quotient aus dem mittleren Temperaturgradienten am oberen und der mittleren Temperatur am unteren Gebietsrand definiert. Sie mißt die Effizienz des Wärmetransportprozesses, definiert als das Verhältnis der Wärme-Flußrate bei Konvektion zu Wärmeleitung im Falle fehlender Konvektion. Die NUSSELT-Zahl stellt somit ein Maß für das Einsetzen der Konvektion dar.

Im Falle quadratischer Modellgebiete bedeutet eine NUSSELT-Zahl von 1, daß der Wärmetransport durch Konvektion jenem durch Wärmeleitung ohne Vorliegen von Konvektion entspricht. Konvektive Zustände lassen sich dann durch NUSSELT-Zahlen größer als 1 charakte-

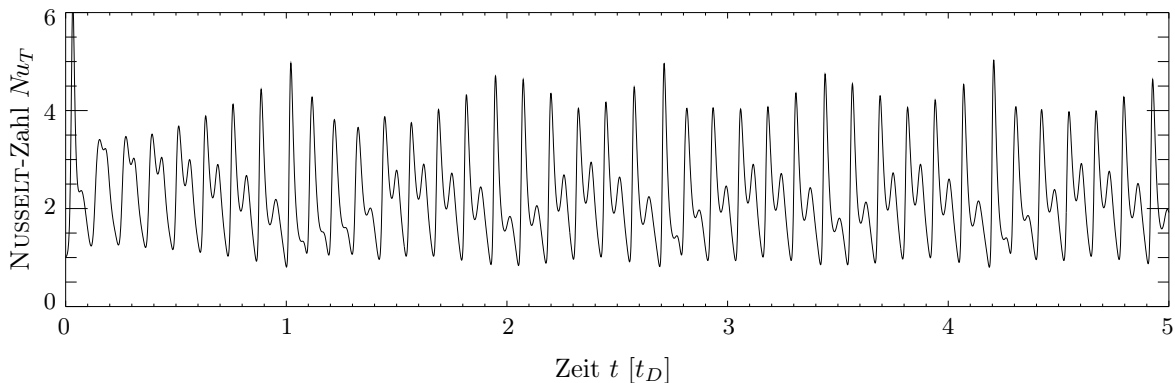


Abbildung 4.1: Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 10\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0,4$. Anhand der NUSSELT-Zahl, als Maß für die Transporteffektivität des Konvektionsprozesses für Wärme, kann in diesem Falle erkannt werden, daß das System ein zeit-periodisches Konvektionsverhalten hat. Hier wie in allen folgenden Diagrammen wird die Zeit stets als dimensionslose Größe in Einheiten der Diffusionszeit aufgetragen (siehe Abschnitt 2.5.1.1).

werden sollte. Die „effektive LEWIS-Zahl“ dient als Maß für die Diffusivität und entspricht dem reziproken Wert der effektiven thermischen Diffusivität, d. h. $Le_{\text{eff}} = \frac{1}{D_{\text{eff}}}$.

risieren. NUSSELT-Zahlen kleiner als 1 bedeuten, daß Wärme durch Konvektion von oben nach unten transportiert wird, obwohl das System von unten geheizt wird (siehe Abbildung 4.1).

Da für die NUSSELT-Zahl Temperaturgradienten über die gesamte Breite des nicht notwendigerweise quadratischen Gebietes zu betrachten sind, gilt für Simulationen in zweidimensionalen Modellgebieten mit anderen Seitenverhältnissen allgemein, daß das Verhältnis der horizontalen zur vertikalen Gebietslänge dem Wert der NUSSELT-Zahl entspricht, ab dem vom Einsetzen von Konvektion gesprochen wird. So überwiegt beispielsweise in einem doppelt so breiten wie hohen Konvektionsgebiet (aspect ratio 2:1) die per Konvektion transportierte Wärmeenergie jene durch Wärmeleitung erst, wenn die NUSSELT-Zahl den Wert 2 übersteigt.

4.4 Vorausgehende Untersuchungen

Die folgenden Untersuchungen stehen in der Tradition der Systemanalysen, die am Bonner Lehrstuhl für Geodynamik bereits zuvor durchgeführt wurden. NAUHEIMER [1993] nahm eine numerische Stabilitätsanalyse des thermo-diffusiv-sedimentären Konvektionssystem für den schwach nichtlinearen Bereich vor und bestimmte dabei diejenigen Parameter, welche das Einsetzen der Konvektion steuern. Die Arbeit von LEU [1997] zeigte unter anderem auf, daß der Typ der sich einstellenden Systemzustände des TDSC-Modells stark von der Größe der sedimentierenden Partikel abhängt.

Kernpunkt der folgenden Untersuchungen ist es, diese Abhängigkeit durch die Erweiterung des Modells auf verschiedene Partikelgrößen sowie die Möglichkeit einer systemimmanenten Präferenz für eine bestimmte Partikelgrößenverteilung eingehender zu untersuchen. Dabei zeigte sich, daß die untere Randwertbedingung für die Konzentration der Partikel, welche im TDSC-Modell die Ankopplung des Modellgebiets an ein unerschöpfliches Konzentrationsreservoir realisiert, entscheidenden Einfluß auf den durch die verschiedenen Partikelgrößenklassen hinzugefügten Freiheitsgrad des Systems nimmt.

4.5 Modifikation der horizontalen Konzentrationsrandwertbedingungen

Im TDSC-Modell wird standardmäßig für die Konzentration am unteren Gebietsrand eine DIRICHLET-Randwertbedingung verwendet [Nauheimer 1993]. Diese ist so eingerichtet, daß über sie die Konzentration auf dem Gebietsrand (in dimensionslosen, normierten Größen) beständig auf 1 gehalten wird. Auf dem oberen Gebietsrand sorgt ebenfalls eine DIRICHLET-Randwertbedingung dafür, daß die Konzentration stets den Wert 0 hat.

Die sich in der Natur ausbildenden Konvektionsgebiete sind zumeist nicht so statisch begrenzt, wie dieses in einem abstrakten Modell der Fall sein kann. Sie stehen vielmehr in permanentem Kontakt mit ihrem Umfeld und tauschen mit diesem sowohl Wärmeenergie als auch Materie aus. Im TDSC-Modell wird daher mittels der unteren Konzentrationsrandwertbedingung der Versuch unternommen, einigen derjenigen physikalischen Prozessen Rechnung zu tragen, die für diese Interaktionen verantwortlich sind. So führt die gravitative Sedimentation am unteren Gebietsrand zu einem Massentransport aus dem Konvektionsgebiet heraus, während hoch erhitztes Suspensat aufgrund seiner geringeren Dichte in das Gebiet von unten einströmt. Diffusionsprozesse verlaufen in alle Richtungen, je nach Ausprägung der entsprechenden Feldgradienten. All dieses Prozesse führen dazu, daß unter normalen Umständen die Konzentration am unteren Gebietsrand den höchsten Wert innerhalb des Gebietes aufweist, während sie am oberen Gebietsrand am niedrigsten ist.

Im Falle mehrerer Partikelgrößenklassen muß die im TDSC-Modell sehr einfache Randwertbedingung verallgemeinert werden, so daß sie nun für jede einzelne Klasse den bidirektionalen

Austausch von Konzentration mit der Umgebung vorschreibt und damit das betrachtete Modellgebiet an dessen Umfeld ankoppelt. Dabei gilt es, die TDSC-Randwertbedingung so zu modifizieren, daß sie als Ganzes eingehalten wird und zugleich für jede einzelne Größenklasse einer sinnvollen Modellvorstellung entspricht.

Im folgenden sollen nun einige der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Konzentrationsrandwertbedingungen für die untere Gebietsgrenze kurz erläutert werden. Die stichpunktartigen Skizzen werden dabei nur einzelne der zahlreichen Möglichkeiten, Modelle für den Konzentrationsverlust und -gewinn zu konzipieren, wiedergeben. Zu beachten ist in allen Fällen, daß eine solche Umverteilung stets eine instantane Veränderung der sich durch das System dynamisch einstellenden Partikelgrößenverteilung darstellt.

Zuerst werden wir einige mögliche Ansätze des Konzentrationsverlustes, d. h. des Transportes von Konzentration aus dem Modellgebiet über den Rand in das angrenzende Umfeld, aufführen:

- Bestimmte Klassen fallen komplett heraus: Indem angenommen wird, daß für Partikel ab einer bestimmten Größe die STOKES-Geschwindigkeit so groß ist, daß diese das Gebiet über den unteren Rand verlassen, läßt sich das Größenwachstum der Partikel begrenzen. Unter Ankopplung eines Breakup-Prozesse ließe sich diese Filterung physikalisch auch durch die mit der Größe wachsenden Instabilität der Partikel motivieren.
- Ein prozentual gleicher Anteil der Partikel aller Klassen fällt heraus: Dieser Ansatz ermöglicht es, das Partikelgrößenspektrum hinsichtlich des Verhältnisses der einzelnen Klassen zueinander zu erhalten. Physikalische Grundlage könnte das Aufschmelzen eines bestimmten Anteils der sedimentierten Partikel sein, die dann massenerhaltend in Form kleiner Partikel wieder in das System hineingelangen.
- Ein prozentualer Anteil, der nicht für alle Klassen gleich sein muß, wird entnommen: Modellvorstellung wäre hier eine Gesteinsmatrix, die auf das Fluid und die in ihm mitgeführten Konzentrationspartikel wie eine semipermeable Membran wirkt.

Die ersten beiden der vorgestellten Ansätze lassen sich als Spezialfälle des letzten auffassen. Aufgrund ihres anschaulichen Charakters wurden sie jedoch gesondert aufgeführt.

Zur Realisierung eines Konzentrationsgewinnes über den unteren Rand, d. h. des Transportes von Konzentration aus dem Reservoir unterhalb des Modellgebietes in dieses hinein, können beispielsweise folgende untere Randwertbedingungen verwendet werden, die allesamt implementiert und hinsichtlich ihrer Wirkung erprobt wurden:

- Naheliegenderweise läßt sich beim Übergang vom Einklassen- zum Mehrklassenmodell die DIRICHLET-Randwertbedingung dahingehend modifizieren, daß die einströmende Konzentration gleichmäßig auf alle Größenklassen verteilt wird. Dieses hat die umgehende Besetzung auch der größeren Partikelklassen zur Folge. Da für diese die Koagulationswahrscheinlichkeit recht stark ansteigt, liegt bereits nach kurzer Zeit eine nicht mehr vernachlässigbare Besetzung der größten Klasse vor. Folge ist eine Verzerrung des Partikelgrößenspektrums mit starkem Einfluß auf das Fluidfeld, da dieses hinsichtlich der gravitativen Sedimentation wesentlich von den größten besetzten Partikelklassen bestimmt wird. Das Konvektionssystem verhält sich dann nach einer relativ kurzen Einschwingphase wie ein Einklassenmodell.
- Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die Konzentration gemäß der Ausgangsverteilung nachzuführen. Physikalisch entspricht diese Situation dem Vorliegen eines unerschöpflichen Reservoirs mit statistisch konstanter Partikelgrößenverteilung.

- Auch können alle Partikel größer der als zentral festgelegten Vergleichsklasse am unteren Rand herausgenommen und durch eine gleichmäßig verteilte Partikelkonzentration der kleineren Klassen ersetzt werden.
- Ein anderer Ansatz beruht darauf, Partikel bestimmter Größenklassen gezielt durch die anderer zu ersetzen. Dazu werden beispielsweise die Partikel aller Klassen bis auf die der kleinsten am unteren Gebietsrand „abgesaugt“ und nur letztere nachgefüllt. Anschaulich könnte dieses einem Szenario entsprechen, bei dem die Partikel am unteren Gebietsrand aufgeschmolzen werden und dann in der kleinstmöglichen Form wieder in das Gebiet gelangen.
- Desweiteren kann ein Modell betrachtet werden, in dem das gravitative Absinken der Partikel beispielsweise durch einen Gebietsverschluß verhindert wird. Partikel können somit nur aufgrund von Advektion und Diffusion das Gebiet nach unten verlassen. Die dadurch verlorene Konzentration läßt sich dann in der letzten Gebietszeile klassen- und spaltenabhängig nachfüllen.
- Schließlich können auch verschiedene Randwertbedingungen implementiert werden, die eine Art Membran realisieren. So läßt sich beispielsweise in der kleinsten Größenklasse die Partikelkonzentration anhand einer konventionellen DIRICHLET-Randwertbedingung einstellen.

Das Studiums des Einflusses der unteren Randwertbedingung hat ergeben:

Alle Versuche, die untere DIRICHLET-Randwertbedingung für die Konzentration des erweiterten TDSC-Modells so zu modifizieren, daß sie die Entwicklungsmöglichkeiten des Systems nicht über Gebühr einschränkt, haben sich als erfolglos erwiesen.

Stets wurde durch ihre Realisierung nicht nur unmittelbar Einfluß auf die Partikelgrößenverteilung genommen, sondern auch deren langfristige Entwicklung vorgezeichnet. In nahezu allen Fällen ergaben sich Systeme, die sich nach relativ kurzer Zeit im wesentlichen als Einklassenmodelle darstellten, da der überwiegende Anteil der Konzentration auf eine oder wenige benachbarte Klassen verteilt war. Diese Degeneration des Mehrklassenmodells aufgrund des dominierenden Einflusses der unteren Randwertbedingung führte dazu, daß der in den unterschiedlichen Partikelgrößenklassen liegende Freiheitsgrad für die Systementwicklung nicht genutzt wurde.

Vielmehr ergab sich ein gegenüber dem TDSC-Modell stark gedämpftes Systemverhalten, das aufgrund der bezüglich der Referenzklasse zumeist höheren effektiven Sinkgeschwindigkeit und dem damit verbundenen beschleunigten Sedimentationsprozeß stark zu quasistationärem Verhalten neigte.

Deswegen wurden im folgenden NEUMANN-Randwertbedingungen als obere und untere Konzentrationsrandwertbedingungen verwendet. Die mit diesen realisierten No-flow-Randwertbedingungen führen dazu, daß sich bezüglich der Konzentration ein Closed-box-Szenario ergibt. Damit ist das Modellgebiet hinsichtlich der Konzentration isoliert und Veränderungen der Partikelgrößenverteilung können somit ausschließlich über Prozesse innerhalb des Gebietes erfolgen, da dieses weder Quellen noch Senken enthält.

Die Randwertbedingungen für das Temperatur-, das Vortizitäts- und Stromfunktionsfeld wurden unverändert vom TDSC-Modell übernommen. Somit kann das erweiterte Konvektionsmodell weiterhin beispielsweise zur Beschreibung von Magmenzellen dienen, die sich, stofflich isoliert, zwischen einer heizenden unteren Gebietsbegrenzung und einer kühlenden oberen Gebietsbegrenzung ausbilden.

Daran läßt sich exemplarisch erkennen, daß das Ziel, das TDSC-Modell als Spezialfall eines allgemeineren Ansatzes aufzufassen, mit erheblichen technisch-methodischen Problemen verbunden ist, sofern auch die zur Simulation benutzten Randwertbedingungen weiterverwendet werden sollen, um die Vergleichbarkeit zu verbessern.

4.6 Koagulations- und Breakup-Wahrscheinlichkeit

4.6.1 Notwendigkeit und Ziele einer Parameterstudie

Da die Abhängigkeit der Zustände eines nichtlinearen Systems von seinen (externen) Parametern in ihrem Umfang und ihrer Stärke zumeist nicht offensichtlich ist, soll diese im folgenden eingehender untersucht werden. Die Analyse kann dann darüber Aufschluß geben, welche Parameter für die sich einstellenden Systemzustände entscheidend sind. Neben einem vertieften Verständnis des Gesamtsystems sollte sich dabei auch eine Einschätzung der Sensitivität des Systems gegenüber der Variation einzelner Parameter ergeben.

Zumeist ist die Abhängigkeit der Systemzustände von den einzelnen Parametern unterschiedlich, so daß diese in systematischer Weise getrennt zu untersuchen sind. Das von uns untersuchte Modell stellt eine Erweiterung des herkömmlichen TDSC-Modells um einen Koagulations- und einen Breakup-Prozeß dar. Wollen wir dieses mit seinem Ausgangsmodell vergleichen, so bietet es sich an, zuerst einmal die Abhängigkeit des Gesamtsystems von den den beiden zusätzlichen Prozessen zugrundeliegenden Reaktionsmechanismen zu untersuchen. Anschließend kann dann ein Parameterbereich ausgewählt werden, der ein sinnvolles Studium der neuen Freiheitsgrade ermöglicht und somit einen Vergleich mit dem Grundmodell rechtfertigen kann.

Schließlich erscheint vor dem Hintergrund der dieser Arbeit zugrundeliegenden Fragestellung nur für diejenigen Bereiche ein Vergleich mit dem TDSC-Modell sinnvoll, in denen der Endzustand des Systems nicht durch die Dominanz einer der beiden von außen vorgegebenen Wahrscheinlichkeiten vorgezeichnet ist. Überwiegt nämlich der Einfluß der Koagulationswahrscheinlichkeit zu stark, so sorgt diese dafür, daß im Laufe der Zeit der Schwerpunkt der Partikelgrößenverteilung zur größten Klasse wandert. Beherrscht hingegen die Breakup-Wahrscheinlichkeit die Simulation, so werden nahezu alle Partikel soweit wie möglich zerfallen, so daß sich die Partikelverteilung auf die kleinste Größenklasse zusammenzieht. In beiden Fällen liegt dann an sich wieder ein Einklassensystem vor, das sich vom TDSC-Modell prinzipiell nur durch eine andere Bezugsgröße für die Partikelgröße und die modifizierten Randwertbedingungen unterscheidet.

4.6.2 Klassenabhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit

Zur Absicherung der Analysen wurden neben dem in Abschnitt 3.5.5.2 vorgestellten Modell zur Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit von der Partikelgröße noch einige weitere Ansätze untersucht. Sie führten nicht zu prinzipiell anderen Resultaten, sondern wirkten sich vorrangig auf den Parameterbereich aus, in dem das Konvektionssystem den durch die Erweiterungen gewonnenen Freiheitsgrad ausschöpfen kann.

Deswegen sollen an dieser Stelle nur zwei Ansätze für eine schwächer bzw. stärker als proportional zum Volumen wachsende Breakup-Wahrscheinlichkeit aufgezeigt werden. Während sich für letztere beispielsweise eine Exponentialfunktionsabhängigkeit

$$p_{\text{bre}}^k = p_{\text{bre}}^{k_{\text{ref}}} \cdot e^{k-k_{\text{ref}}}$$

mit der EULERSchen Zahl e als Basis wählen läßt, kann für erstere die Breakup-Wahrscheinlichkeit mit

$$p_{\text{bre}}^k = p_{\text{bre}}^{k_{\text{ref}}}$$

als unabhängig vom Volumen der einzelnen Partikel angenommen werden.

Es ergeben sich damit die folgenden drei bewußt einfach gehaltenen Ansätze:

- Die Breakup-Wahrscheinlichkeit ist unabhängig von der Partikelgröße, d. h. Partikel aller Klassen haben dieselbe Zerfallswahrscheinlichkeit. Damit fällt die volumenbezogene Breakup-Wahrscheinlichkeit für größere Klassen ab, so daß große Partikel relativ gesehen „bevorzugt“ werden.
- Die Breakup-Wahrscheinlichkeit pro Volumen ist konstant, d. h. die Wahrscheinlichkeit wird mit dem Volumen skaliert. Ein Partikel doppelten Volumens (d. h. der nächstgrößeren Partikelgrößenklasse) hat somit auch eine doppelt so große Breakup-Wahrscheinlichkeit.
- Die Breakup-Wahrscheinlichkeit wächst stärker als das Volumen, da eine Volumenverdoppelung zu einer e -fach größeren Zerfallswahrscheinlichkeit führt. In diesem Ansatz werden also die kleineren Klassen relativ gesehen „bevorzugt“.

Die Auswahl der flankierenden Ansätze dient lediglich zur Untersuchung des tendenziellen Verhaltens hinsichtlich einer volumenskalierten Breakup-Wahrscheinlichkeit.

4.6.3 Untersuchung der Parameterbereiche

Da die grundsätzliche Erforschung eines Parameterbereiches in einem numerischen Modell mit mehreren Parametern einen enormen Rechenaufwand erfordert, selbst dann, wenn sich dieser aufgrund analytischer Betrachtungen einschränken läßt, sollten die dazu präsentierten Ergebnisse mit Bedacht interpretiert werden.

Das Ziel der folgenden Abgrenzung von Parameterbereichen liegt in der Ausweisung derjenigen Bereiche, die durch eine der beiden als externe Parameter vorgegebenen Wahrscheinlichkeiten dominiert werden. Dieses konnte jedoch nur stichpunktartig erfolgen, da für jede der beiden Wahrscheinlichkeiten jeweils etwa 10 Größenordnungen zu untersuchen sind.

Da das gesamte Modell in einer dimensionslosen Formulierung vorliegt, bedürfen die im folgenden verwendeten Wahrscheinlichkeitsbegriffe einiger Erläuterungen. Die Breakup-Wahrscheinlichkeit beschreibt den Erwartungswert für die Anzahl der Zerfälle eines Partikels innerhalb einer Simulationszeiteinheit (Diffusionszeit). Sie ist damit ein Grundmaß für die durchschnittliche Lebensdauer eines Partikels, die in unserem ersten Ansatz mit dem Volumen der Partikel skaliert wird. Die Koagulationswahrscheinlichkeit hingegen weist den Anteil der Partikel, der nach einem durch die geometrische Stoßwahrscheinlichkeit bedingten Zusammentreffen zweier Partikel miteinander verbunden bleibt, aus. Sie entspricht somit einer Art Anheftwahrscheinlichkeit.

Die Abbildungen 4.2 bis 4.4 zeigen Diagramme, in denen die Parameterbereiche für verschiedene Volumenabhängigkeiten der Breakup-Wahrscheinlichkeit ausgewiesen werden, die durch Koagulations- oder Breakup-Wahrscheinlichkeit dominiert werden. In den mit \times markierten Bereiche sind die Lösungsverfahren trotz durchgängig doppelt-genauer Rechnung numerisch instabil, was bei den vorliegenden Größenordnungsunterschieden nicht weiter verwundert.

Obwohl für jeden einzelnen Eintrag in den Diagrammen mehr als einhundert Simulationen unter systematisch geänderten Parametern durchgeführt und ausgewertet worden sind, kann die vorgenommene Kategorisierung nur als Anhaltspunkt verstanden werden, da ja eine Aussage über einen gesamten Parameterbereich zu treffen ist.

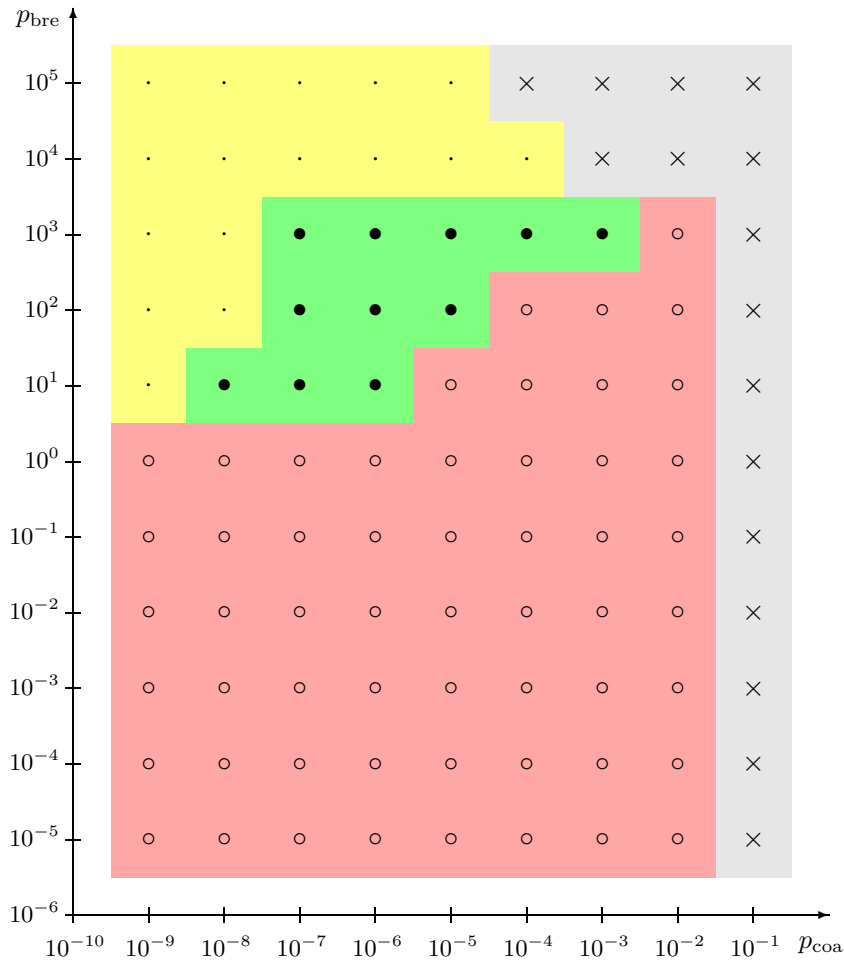


Abbildung 4.2: Parameterbereiche für die Koagulations- und die Breakup-Wahrscheinlichkeit bei partikelgrößenklassen-unabhängiger Breakup-Wahrscheinlichkeit: Mit \circ markierte Bereiche werden durch die Koagulationswahrscheinlichkeit p_{coa} dominiert, jene mit \cdot gekennzeichneten durch die Breakup-Wahrscheinlichkeit p_{bre} . In den durch \bullet ausgewiesenen Bereichen herrscht keine der beiden Wahrscheinlichkeiten vor, während in jenen mit \times bezeichneten numerische Instabilitäten auftreten.

Den schematischen Darstellungen der Abbildungen 4.2 bis 4.4 läßt sich entnehmen, daß die drei interessierenden Bereiche (dominiert durch die Breakup-Wahrscheinlichkeit, dominiert durch die Koagulationswahrscheinlichkeit und keine dominierende Wahrscheinlichkeit) bis auf eine Ausnahme zusammenhängend zu sein scheinen. Sie sind verschieden groß und zeigen eine unterschiedliche Sensibilität des Systems gegenüber der Variation einer der beiden Wahrscheinlichkeiten. Die grundlegende Aufteilung der Bereiche ist jedoch stets gleich:

- für hohe Breakup- und eher niedrigere Koagulationswahrscheinlichkeiten ist das System breakup-dominiert;
- für größere Koagulations- und eher geringere Breakup-Wahrscheinlichkeiten ist das System koagulationsdominiert;
- für Breakup-Wahrscheinlichkeiten in der Größenordnung von 10^1 bis 10^3 und Koagulationswahrscheinlichkeiten zwischen 10^{-7} und 10^{-3} wird das System über mehrere Größenordnungen durch keine der beiden Wahrscheinlichkeiten beherrscht.

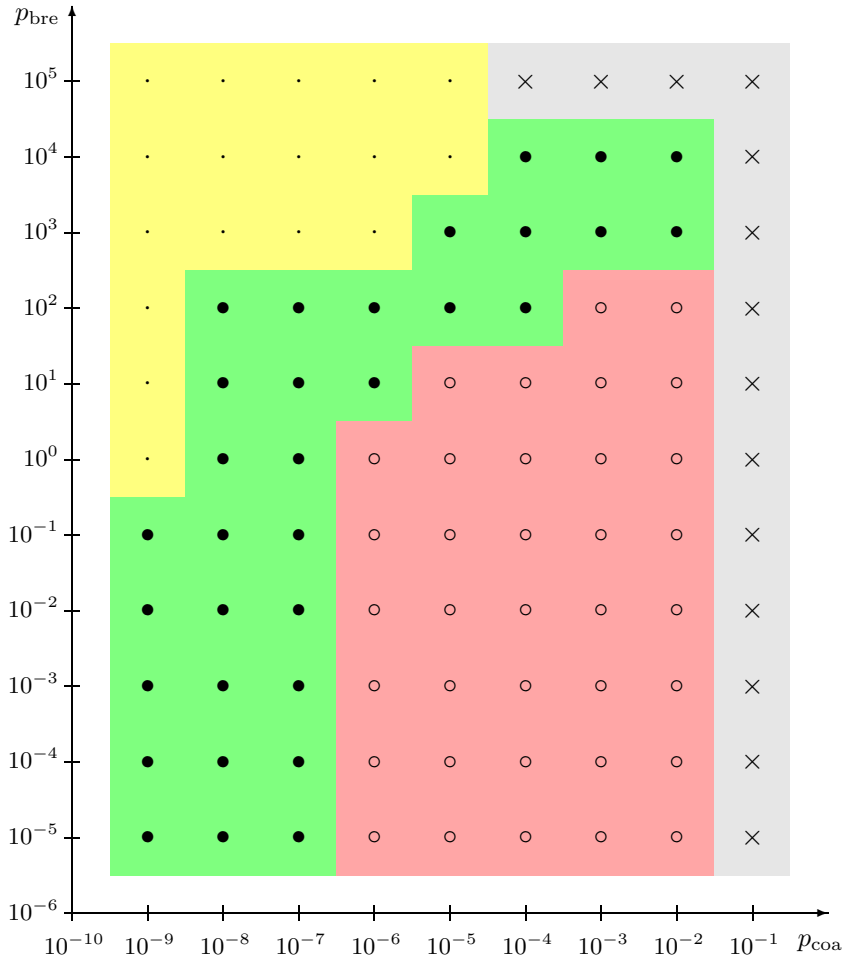


Abbildung 4.3: Parameterbereiche für die Koagulations- und die Breakup-Wahrscheinlichkeit bei Skalierung der Breakup-Wahrscheinlichkeit mit dem Volumen: Mit \circ markierte Bereiche werden durch die Koagulationswahrscheinlichkeit p_{coa} dominiert, jene mit \cdot gekennzeichneten durch die Breakup-Wahrscheinlichkeit p_{bre} . In den durch \bullet ausgewiesenen Bereichen herrscht keine der beiden Wahrscheinlichkeiten vor, während in jenen mit \times bezeichneten numerische Instabilitäten auftreten.

Dabei scheint der Anteil des durch keine Wahrscheinlichkeit dominierten Parameterbereiches mit der Stärke der Volumen-Skalierung zu wachsen. In nahezu gleichem Maße sinkt dann vor allem der koagulationsdominierte Anteil des Parameterraumes.

In dem durch die Breakup-Wahrscheinlichkeit dominierten Bereich fällt die effektive LEWIS-Zahl Le_{eff} infolge der sinkenden mittleren Partikelgröße sehr schnell auf Werte unterhalb von 2 ab. Die thermische NUSSELT-Zahl Nu_T beträgt ungefähr 4,8 und verringert sich leicht mit steigender Sinkgeschwindigkeit v_s . Sie entspricht damit ziemlich genau dem Wert, der für ein TDSC-System zu erwarten ist [Leu 1997].

Durch die Erhöhung der Sedimentationsgeschwindigkeit verbessert sich die Möglichkeit des Konvektionssystems, Wärmeenergie effizient zu transportieren. So wächst die zeitgemittelte thermische NUSSELT-Zahl ebenfalls fortschreitend an und muß gegen die theoretische Grenze tendieren, die durch die rein thermische Konvektion definiert ist [Nauheimer 1997]. Für die thermische RAYLEIGH-Zahl $Ra_T = 10\,000$ beträgt dieser Wert ungefähr 4,8. Die mittlere Fluidgeschwindigkeit v_{rms} liegt in der Größenordnung von 70, d. h., das Fluid rotiert mit einer

halten, wonach die thermische NUSSELT-Zahl Nu_T tendenziell mit der Sinkgeschwindigkeit v_s steigt. Die mittlere Fluidgeschwindigkeit v_{rms} ist ebenfalls positiv mit der Sinkgeschwindigkeit korreliert. In Tabelle 4.1 sind die ermittelten Eigenschaften der Dominanzbereiche noch einmal übersichtlich aufgeführt.

| Dominanz | Merkmale |
|-----------------------|---|
| breakup-dominiert | Le_{eff} sinkt sehr schnell unterhalb von 2, $Nu_T \approx 4,8$ und fällt mit steigender Sinkgeschwindigkeit v_s , $v_{\text{rms}} > 70$ |
| koagulationsdominiert | $Le_{\text{eff}} > 40$, $Nu_T \approx 2,9$, Einschwingphase länger als eine Diffusionszeit |
| keine Dominanz | Nu_T wächst mit v_s , v_{rms} steigt mit v_s |

Tabelle 4.1: Eigenschaften der Dominanzbereiche

Die Untersuchung der Dominanzbereiche hinsichtlich der Koagulations- bzw. Breakup-Wahrscheinlichkeit hat gezeigt, daß die Art der Abhängigkeit weniger entscheidend für die sich ausbildenden Systemzustände als die zugrundeliegende Breakup-Wahrscheinlichkeit der Referenzklasse ist, da die prinzipielle Aufteilung des Parameterraumes bei allen drei vorgestellten Ansätze ähnlich ist.

Unter den Annahmen für die Abhängigkeit der Zerfallswahrscheinlichkeit von der Partikelgröße hat sich jene mit steigender Zerfallswahrscheinlichkeit pro Volumen als am wenigsten restriktiv hinsichtlich der Entwicklung des Gesamtsystems erwiesen.

Physikalisch erscheint dieses sinnvoll, da größere Partikel, die sich in einer kriechenden Strömung wie Flüssigkeitströpfchen verhalten, aufgrund eines ungünstigeren Verhältnisses zwischen Oberflächenspannung und Volumen eine geringere Stabilität besitzen.

4.7 Die sich einstellenden Systemzustände

Zahlreiche Prozesse und Phänomene der Natur werden nach unserem heutigen Kenntnisstand durch Konvektionssysteme hervorgebracht. Im Bereich der Geophysik sind dieses neben der Plattentektonik beispielsweise Basaltsäulen mit regelmäßigem, geschichtetem Aufbau. Konvektionsmodelle können dabei dazu beitragen, die Entstehung dieser geschichteten Strukturen zu verstehen.

Beispielsweise läßt sich aus der jeweiligen Schichtmächtigkeit auf die Zeitdauer der Ablagerung schließen, wenn die durchschnittliche Sedimentationsrate abgeschätzt werden kann. Die Abfolge der Schichten selbst gibt Aufschluß über die Prozesse, die in dem abscheidenden System stattgefunden haben könnten. Die Zusammensetzung der einzelnen Schichten ermöglicht schließlich Rückschlüsse auf die physikalischen Bedingungen, unter denen diese Prozesse abliefen.

Konvektionssysteme sind in mathematischer Hinsicht relativ komplexe Gebilde. Sie werden durch Systeme aus gekoppelten, nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen beschrieben und sind im allgemeinen nicht analytisch lösbar. Ihr Parameterraum ist zudem hochdimensional, so daß ihr Lösungsverhalten kaum zu überschauen ist.

In dieser Arbeit soll das Augenmerk vor allem auf die möglichen Verhaltensweisen des Konvektionssystems gelegt werden, was wir anhand des sogenannten *Systemzustandes* zu erfassen versuchen. Dieser charakterisiert die zeitlich-räumlich ablaufenden Prozesse anhand geeignet gewählter Kenngrößen und erleichtert dadurch die Klassifikation des Systemverhaltens.

Im folgenden wird der Zustand eines Konvektionssystems zumeist anhand der zeitlichen Entwicklung der (thermischen) NUSSELT-Zahl charakterisiert. Dazu wird deren Verlauf nach Abschluß der Einschwingphase betrachtet und das Verhalten vor allem mittels des Kriteriums Periodizität eingestuft.

Nachfolgend werden alle beobachteten Systemzustände exemplarisch aufgeführt und anhand der Kenngrößen erläutert. Da die dargestellten Beispiele zwar typisch, aber in ihrer Art auch charakteristisch für eine ganze Schar von konkreten Simulationsverläufen sind, wurde aus didaktischen Gründen ein Zustand zumeist mittels zweier unterschiedlicher Simulationen veranschaulicht.

4.7.1 Keine Konvektion

Die Anfangsstörung klingt ab, ohne daß das System eine Konvektionszelle ausbilden konnte, d. h. es ist kein geschlossenes Wirbelsystem entstanden. Die NUSSELT-Zahl weicht allenfalls infolge der Anfangsstörung von 1 ab, d. h., es findet kein großräumiger, materiegebundener Energietransfer statt. Die mittlere quadratische Fluidgeschwindigkeit tendiert gegen 0. Wärmeleitung ermöglicht jedoch weiterhin den Transport von Energie.

Das System befindet sich in einem stabilen Zustand, in dem langfristig keine Konvektion auftritt. Ursache dafür können ungeeignete (z. B. eine zu hohe Viskosität) oder ungünstige Rahmenbedingungen sein. Ein Beispiel für letztere ist eine zu geringe oder zu große Sinkgeschwindigkeit, die entweder noch nicht zur Ausbildung gravitativer Instabilitäten führt oder aber so stark ist, daß beinahe das gesamte Suspensat aus dem Fluid ausfällt und nicht mehr in ausreichendem Maße in dieses zurückdiffundieren kann.

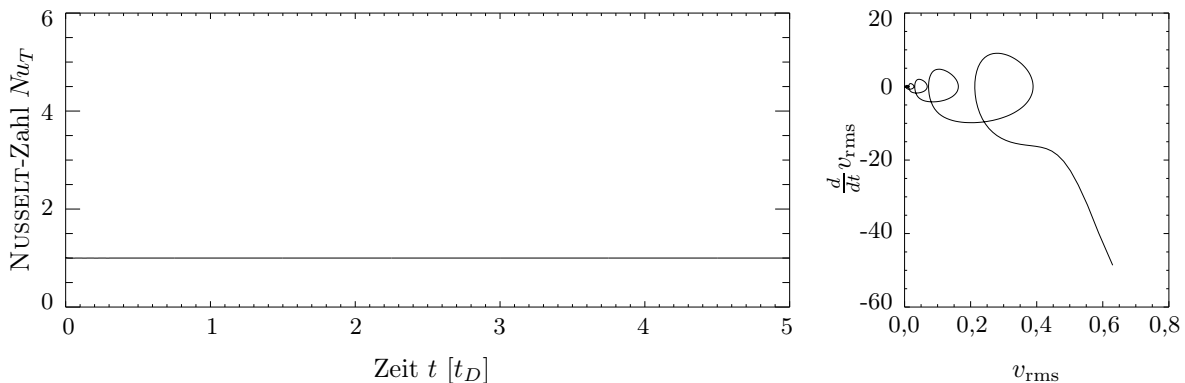


Abbildung 4.5: Keine Konvektion. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0,4$.

Nach dem Abklingen der initialen Störung treten innerhalb des Gebietes keine Strömungen auf. Die mittlere Fluidgeschwindigkeit fällt daher stark gegen Null und das System läßt sich durch den Nullpunkt im Phasenraum der mittleren quadratischen Geschwindigkeit und ihrer Ableitung charakterisieren (siehe Abbildung 4.5, rechtes Diagramm). Jene Schleifen auf dem Wege zum Ursprung des Phasenraumdiagrammes sind Folge des recht rapiden Abbaus der stark gedämpften initialen Störung, die aufgrund ihrer geringen Größe in dem obigen NUSSELT-Zahl-Diagramm nicht aufgelöst werden kann.²

²Während die NUSSELT-Zahl-Diagramme stets vollständig für die ersten fünf Diffusionszeiten angegeben werden, wird bei den Phasenraumdiagrammen im allgemeinen die durch den Abbau der Anfangsstörung gekennzeichnete Einschwingphase unterdrückt, um die Übersichtlichkeit der Darstellung zu erhöhen.

4.7.2 Quasistationäre Konvektion

Nach dem Überwinden der Anfangsstörung stellt sich langfristig ein quasistationärer Konvektionszustand ein, bei dem die räumlich gemittelte NUSSELT-Zahl größer als 1 und zeitlich konstant ist.

Das Konvektionssystem hat ein stabiles Wirbelsystem ausgebildet, das bei unveränderten Randwertbedingungen quasistationär ist. Temperatur- und Konzentrationsverteilung sind räumlich und zeitlich konstant.

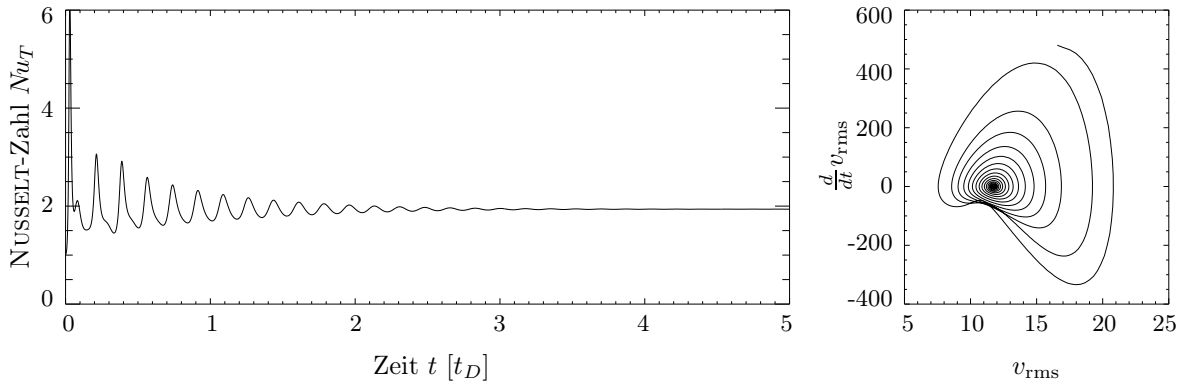


Abbildung 4.6: Quasistationäre Konvektion. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 1,2$.

Der durch die mittlere quadratische Fluidgeschwindigkeit und ihre zeitliche Ableitung aufgespannte Phasenraum eines quasistationären Konvektionssystems zieht sich auf einen Punkt zusammen [Nauheimer 1993]. Dieser liegt aber nicht im Ursprung des Phasenraumes, wie dieses bei Abwesenheit jeglicher Konvektion der Fall ist, sondern befindet sich lediglich hinsichtlich der Geschwindigkeitsableitung mit dem Wert 0 auf der Koordinatenachse (siehe Abbildung 4.6, rechtes Diagramm). Das Fluid weist also weiterhin eine konstante mittlere Geschwindigkeit auf. Im Vergleich mit dem konvektionslosen System ist zudem ersichtlich, wieviel größer die Geschwindigkeitsänderungen sind, schließlich zeigen die Koordinatenachsen einen in beiden Dimensionen um mehr als eine Größenordnung größeren Ausschnitt des Phasenraumes.

Ausgehend von einer auf die Referenzklasse eingeschränkten GAUSS-Verteilung als Initialdistribution wird im folgenden deren zeitliche Entwicklung für verschiedene Systemzustände dargestellt. Abbildung 4.7 zeigt das erweiterte TDSC-Modell im Falle einer quasistationären Konvektion. Diese Graphik spiegelt die sich im Laufe der Simulation verändernde Verteilung des Gesamtvolumens aller Partikel auf die Größenklassen wider. In dem zur Visualisierung verwendeten Diagramm ist der jeweilige Volumenanteil auf der p -Achse aufgetragen. Auf der k -Achse sind die einzelnen Partikelgrößenklassen aufgeführt, während entlang der t -Achse die Simulationszeit voranschreitet. Diese beträgt in allen im folgenden gezeigten Ausschnitten stets 5 Diffusionszeiten.

Aufgrund der geringen Sinkgeschwindigkeit und des stehenden Fließfeldes überwiegt der Breakup-Prozess anfänglich den der Koagulation, so daß die Partikel zerfallen. Letztlich erhöht sich dadurch die Diffusivität, sedimentierte Partikel können leichter ins Fluid zurückkehren, die Fluidgeschwindigkeit steigt und die Koagulationsrate wächst. Langfristig bildet sich eine global konstante Partikelverteilung heraus, in der sich die Prozesse des Breakups und der Koagulation im Gleichgewicht befinden. Koagulation und Breakup laufen beständig ab, halten sich jedoch stets die Waage, so daß keiner der beiden Prozesse die Partikelgrößenverteilung

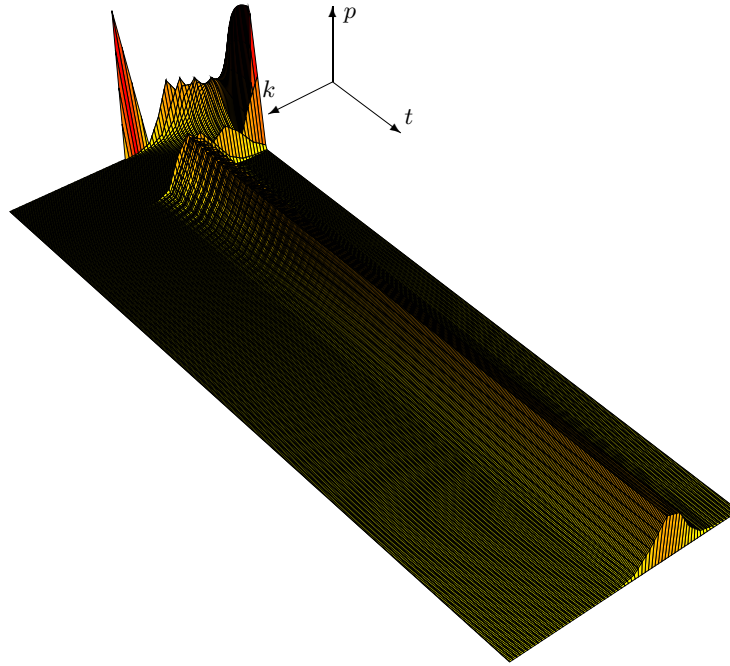


Abbildung 4.7: Quasistationäre Partikelgrößenverteilung. Zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0,4$ bei $p_{coa} = 10^{-3}$ und $p_{bre} = 10^3$.

zu verändern vermag. Aufgrund der relativ geringen mittleren Fluidgeschwindigkeit ist die Koagulationsrate insgesamt eher niedrig.

4.7.3 Periodische Konvektion

Das Konvektionssystem ändert sich in zeitlich wiederkehrender Reihenfolge. Die NUSSELT-Zahl nimmt dabei in regelmäßigen Abständen dieselben Werte (fast immer größer 1) an. Der Energietransfer variiert in periodischem Maße (siehe Abbildung 4.8, linkes Diagramm). Das Phasenraumdiagramm der periodischen Konvektion zeigt eine geschlossene Kurve, die für jede überlagerte Frequenz eine eigene Schleife aufweist.

Regelmäßige Oszillationen (oder *Grenzyklen*) sind in zweidimensionalen Konvektionsszena-

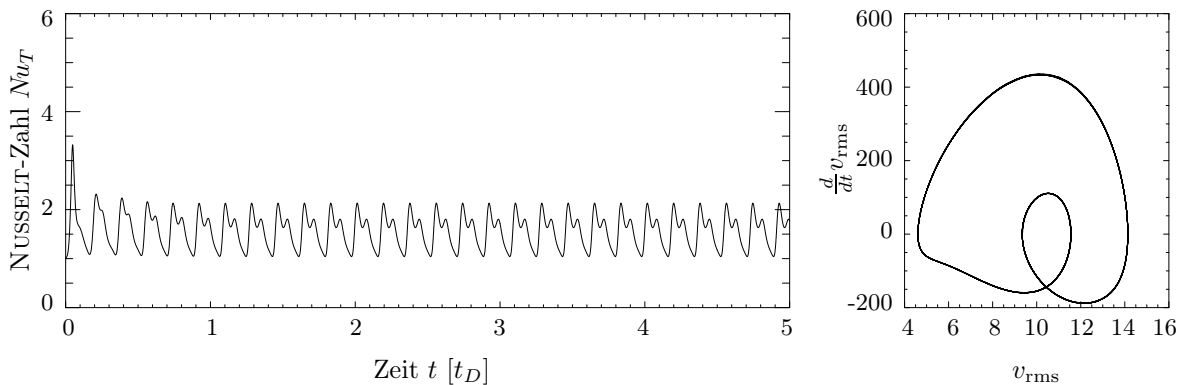


Abbildung 4.8: Periodische Konvektion. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0,8$.

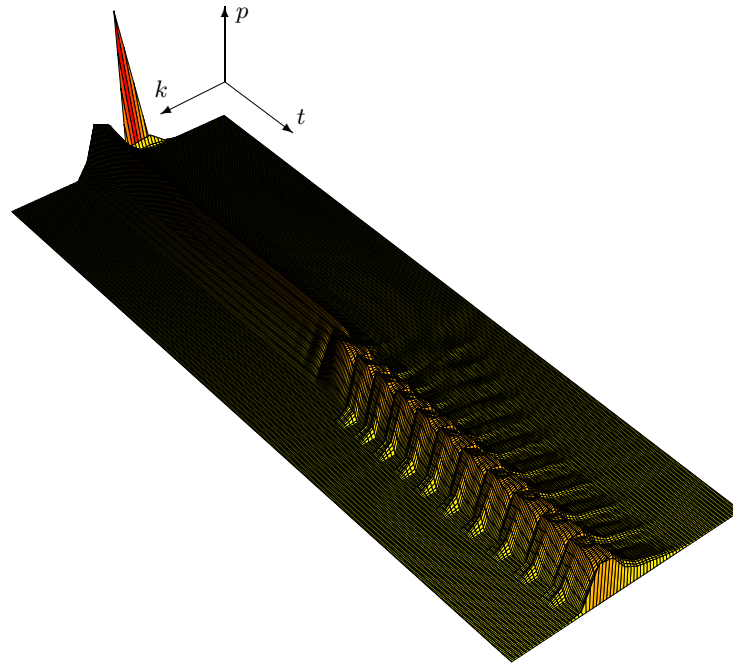


Abbildung 4.9: Periodische Partikelgrößenverteilung. Zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0,2$ bei $p_{coa} = 10^{-3}$ und $p_{bre} = 10^2$.

rien charakteristisch für perioden-verdoppelnde Bifurkationen [Lennie et al. 1988]. Die erste Bifurkation nach einem quasistationären Zustand, eine sogenannte *HOPF-Bifurkation*, führt oft zu einem oszillierenden Zustand mit einer einzelnen Periodizität [Travis et al. 1990].

Ein periodischer Systemzustand zeigt sich auch in der Partikelgrößenverteilung. Die Ausgangsverteilung verbreitert sich auf einige Klassen und verhält sich nach dem Abklingen der Einschwingphase nahezu stationär (siehe Abbildung 4.9). Erst nach etwa 2,5 Diffusionszeiten ist das System durch Diffusion, Advektion und Sedimentation intern so umgebaut worden, daß sich ein periodisches Systemverhalten und damit eine sich in zeitlich regelmäßigem Maße verändernde Partikelgrößenverteilung einstellt. Diese weitet sich in Phasen steigender Konvektivität, die mit höheren Fluidgeschwindigkeiten einhergehen, leicht zu größeren Partikeln aus. In jenen sinkender NUSSELT-Zahl verschiebt sich die Verteilung dann etwas stärker in Richtung kleinerer Partikelgrößen. Beide Effekte sind vor allem auf die Koppelung der Koagulationswahrscheinlichkeit an die lokale Geschwindigkeit des Fluids zurückzuführen, so daß der Koagulationsprozeß dann den in seiner Wirkung relativ konstanten Breakup-Prozeß nur noch im zeitlichen Mittel über eine Periodendauer zu kompensieren vermag.

4.7.4 Pulsatorische Konvektion

Nach dem Abklingen der Anfangsstörung stellt sich ein periodischer Zyklus ein, der durch eine relativ kurze Phase starker und eine anschließende längere Phase quasistationärer Konvektion gekennzeichnet ist.

LEU [1997] wies darauf hin, daß dieser Systemzustand mit einem regelrechten Umbau vom Einwirbel- zum Mehrwirbelsystem und zurück zum Einwirbelsystem einhergeht. Durch Sedimentation und Schichtbildung wird die an Konzentration verarmende Konvektionszelle solange in ihren ursprünglich nahezu symmetrischen Abmessungen vertikal eingengt, daß ein einzelner Wirbel instabil wird. Es entsteht vorübergehend ein Mehrwirbelsystem (zumeist ein

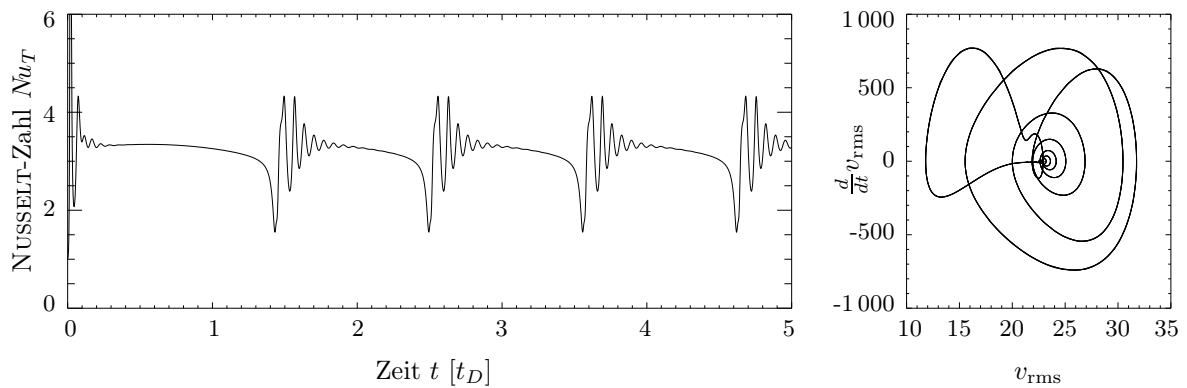


Abbildung 4.10: Pulsatorische Konvektion. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 4,0$.

Zweiwirbelsystem), das große Teile der Schichtung zerstört und damit die anfänglichen Seitenverhältnisse wieder herzustellen vermag. Unter diesen Bedingungen bildet sich dann aus dem Mehrwirbel- ein Einwirbelsystem aus, das über Ausfällung der schwereren Komponente mit anschließender Schichtbildung erneut einen Pulsationszyklus durchlaufen kann.

Pulsatorische Systemzustände zeigen im Phasenraum quasi eine Überlagerung der Phasenraumdiagramme der quasistationären und periodischen Konvektion. In Schleifen zieht sich die Bahn der Systemzustände um eine Art Ruhepunkt zusammen, bricht dann aber mit dem Umbau des Systems auf und durchläuft einen neuen Zyklus (siehe Abbildung 4.10, rechtes Diagramm). Der Umbau des Konvektionssystems geschieht dabei so abrupt, daß die auftretenden Geschwindigkeitsveränderungen im allgemeinen größer als jene bei periodischen Systemverhalten sind.

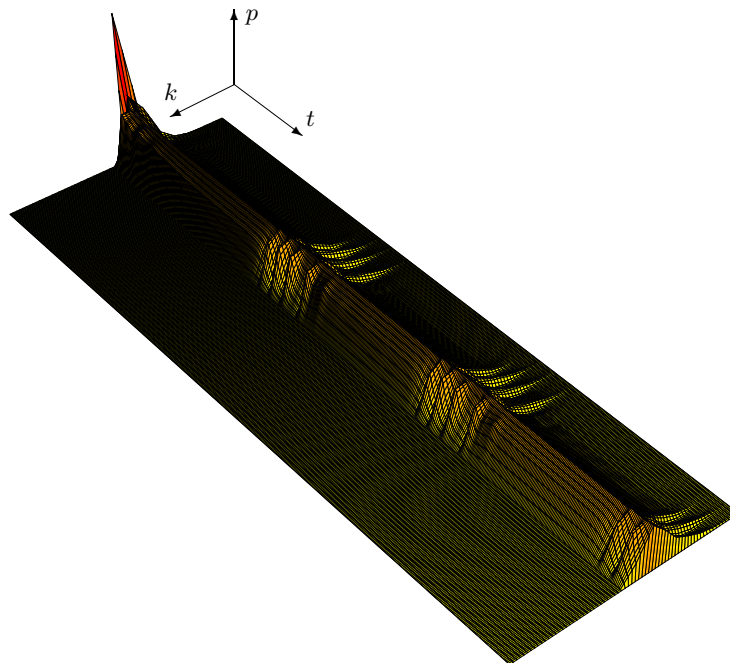


Abbildung 4.11: Pulsatorische Partikelgrößenverteilung. Zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 2,0$ bei $p_{coa} = 10^{-2}$ und $p_{bre} = 10^3$.

Die Partikelgrößenverteilung eines pulsatorischen Systemzustands spiegelt den mit den Pulsationen einhergehenden Umbau des Konvektionssystems wider (siehe Abbildung 4.11). Erwartungsgemäß ändert sich die Verteilung der Partikelgrößen nur sehr kurzzeitig durch die mit der Instabilität des Mehrwirbelsystems stark variierende mittlere Fließgeschwindigkeit. Die Phasen quasistationären Systemzustands sind durch ein nahezu stabiles Partikelgrößenspektrum gekennzeichnet. Wie auch im Falle des periodischen Systemzustandes (siehe Abbildung 4.9) weitet sich die Verteilung in Phasen geänderter Aktivität vor allem in Richtung kleinerer Partikel vorübergehend aus.

4.7.5 Chaotisches Systemverhalten

Chaotisches Systemverhalten läßt sich dann in einem Konvektionssystem beobachten, wenn der aktuelle Zustand scheinbar nicht mit den jeweils vorherigen Zuständen korreliert ist, also die Vorhersagbarkeit des Systemverhaltens nur noch quasistatistisch ist. Das System verhält sich jedoch, im Gegensatz beispielsweise zu quantenmechanischen Systemen, weiterhin deterministisch.

Das Fließmuster wird permanent und unregelmäßig umgebaut, beeinflusst durch kleinste Störungen und in einer aus dem jeweiligen Systemzustand nicht vorhersagbaren Weise. Im Falle einer nicht-diskreten Auswertung des Systems, welche sich jedoch bei numerischen Simulationen prinzipiell nicht umgehen läßt, sollte das NUSSELT-Zahl-Diagramm für ein rein chaotisches Verhalten keinerlei Strukturierung mehr aufweisen. Es wäre gänzlich geschwärzt.

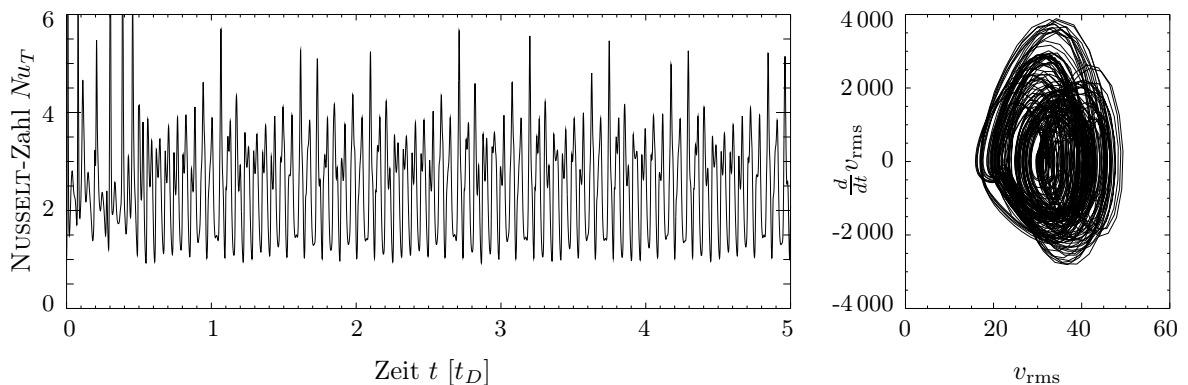


Abbildung 4.12: Chaotisches Systemverhalten. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 40\,000$, $Ra_C = 80\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 1,0$.

Im Phasenraum zeigt sich das chaotische Systemverhalten in dem Auftreten nahezu beliebig eng nebeneinander liegender Bahnen, die um einen gemeinsamen Attraktor zu kreisen scheinen (siehe Abbildung 4.12, rechtes Diagramm). Die zeitliche Änderung der mittleren Fließgeschwindigkeit des Fluids ist erheblich heftiger, was sich an der um eine Größenordnung im Vergleich zum periodischen Systemverhalten gestauchten Ordinatenachse erkennen läßt. Das Konvektionssystem befindet sich im ständigen Umbau, wobei dieser so schnell verläuft, daß sich keine großräumigen Fließmuster ausprägen können.

Chaotisches Systemverhalten ist auf der Ebene der Partikelgrößenverteilung nicht mehr eindeutig auszumachen (siehe Abbildung 4.13). Als Indiz kann jedoch die sich fortlaufend kurzzeitig verschiebende Partikelgrößenverteilung dienen. Die relative Verteilung der Partikelgrößen zueinander bleibt dabei erhalten, verschiebt sich jedoch nahezu sprunghaft.

Ursache dieses diskontinuierlichen Verhaltens sind die sich unentwegt ändernden Fließeigen-

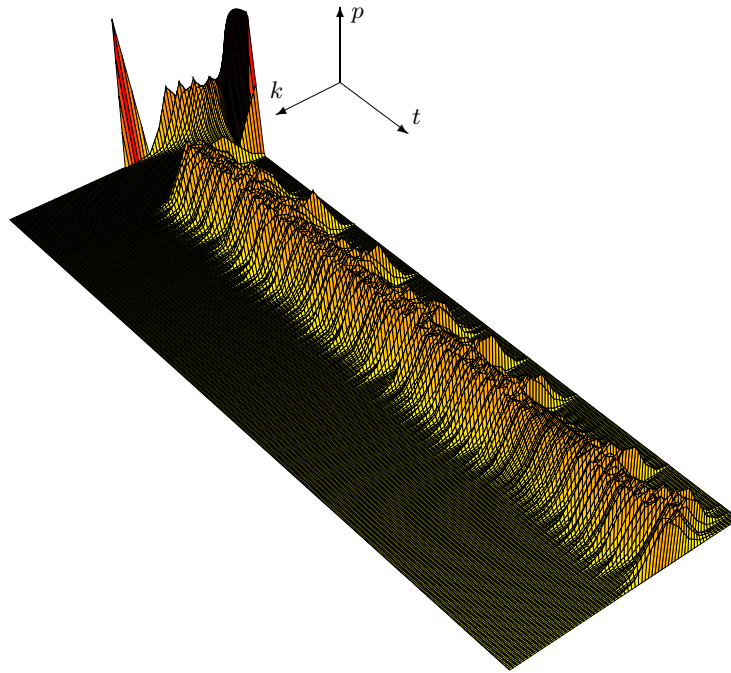


Abbildung 4.13: Chaotische Partikelgrößenverteilung. Zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 40\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0,4$ bei $p_{coa} = 10^{-3}$ und $p_{bre} = 10^3$.

schaften des Systems. Das Fließfeld kann an diese nicht mehr hinreichend schnell angepaßt werden, so daß die sich ansonsten ausbildenden Zyklen unvollständig werden und damit die Periodizität und Gleichmäßigkeit des Wärmetransports verloren geht.

4.7.6 Episodische Konvektion

Zusätzlich zu den in den vorherigen Abschnitten aufgeführten bekannten Zuständen des TDSC-Modells konnte im Mehrklassenmodell ein weiterer Zustand beobachtet werden. Bei ihm wird die Konvektion durch die Wechselwirkungen von Koagulation und Breakup getriggert.

Im konvektiven Zustand ist im allgemeinen die mittlere Fließgeschwindigkeit des Fluids höher als im nicht konvektiven. In unserem Ansatz wächst die Koagulationswahrscheinlichkeit mit der lokalen Fluidgeschwindigkeit. Dadurch beschleunigt sich das Wachstum der Partikel. Größere Partikel weisen nun aufgrund der STOKES-Geschwindigkeit eine höhere Sinkgeschwindigkeit auf, so daß sie sich verstärkt am unteren Gebietsrand ansammeln. Da die Diffusivität mit wachsender Partikelgröße abnimmt, neigen die Partikel zudem dazu, nicht mehr in das Fluid aufgenommen zu werden und dadurch den Prozeß der Sedimentation zu verstärken. Durch den beständigen Ausfall der Konzentration aus dem Fluid sinkt die gravitative Antriebskraft der Konvektion, bis diese schließlich zum Stillstand kommt ($Nu_T = 1$). Die damit einhergehende Absenkung der mittleren Fluidgeschwindigkeit verringert so auch die Koagulationsrate.

Der Breakup-Prozeß verläuft hingegen ungestört weiter und bestimmt zusehends die Entwicklung des Partikelgrößenspektrums. Infolge des voranschreitenden Zerfalls eines Teils der Partikel, sinken diese im Mittel langsamer zu Boden. Von dort können die kleineren Partikel aufgrund ihrer größeren Diffusivität einfacher wieder in das Fluid eintreten (engl. *reentrainment*). Dadurch nimmt die Fähigkeit des Systems, Energie mittels Konvektion zu übertragen, zu und die thermische NUSSELT-Zahl steigt an.

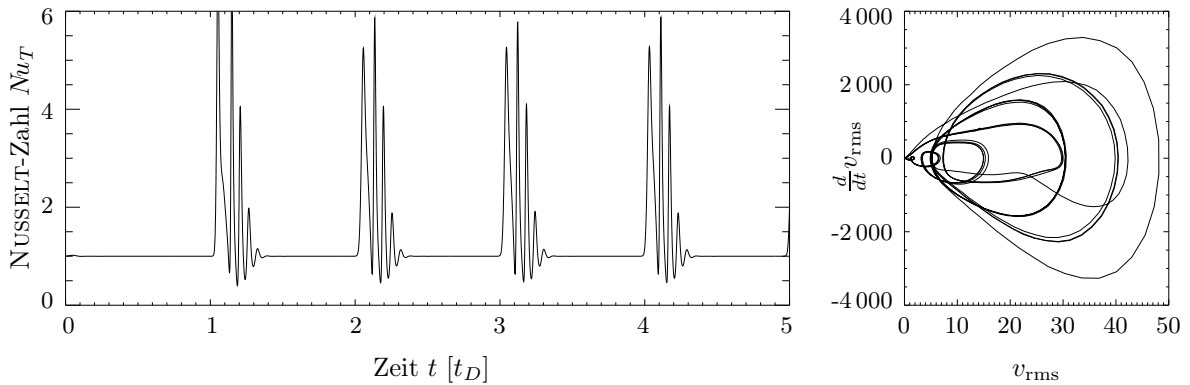


Abbildung 4.14: Episodisches Systemverhalten. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 9,0$ bei $p_{coa} = 10^{-3}$ und $p_{bre} = 10^3$. Die in Form von „Überschwängern“ kurzfristig unter den Wert 1 abfallende NUSSELT-Zahl bedeutet, daß trotz Zufuhr von Energie von unten ein Energietransport von oben nach unten stattfindet. Ursache dessen ist die sich selbst verstärkende Konzentrationsausfällung infolge Koagulation.

Von den pulsatorischen Zuständen im TDSC-Modell unterscheidet sich dieses *episodische Systemverhalten* vor allem darin, daß in den „Ruhephasen“ zwischen den Ausbrüchen die NUSSELT-Zahl den Wert 1 annimmt, d. h., das System „friert“ bzw. „schläft“ ein (siehe Abbildung 4.14, linkes Diagramm).

Per definitionem pendelt das System also zwischen zwei verschiedenen Zuständen. Es weist daher nicht nur ein quantitativ unterschiedliches Verhalten auf, wie dieses bei den aus dem TDSC-Modell bekannten Pulsationen der Fall ist (periodisch bzw. quasi-stationär), sondern es bewegt sich zwischen zwei *qualitativ unterschiedlichen* Zuständen (konvektiv bzw. nicht-konvektiv).

Im Phasenraum zeigt sich dieses Verhalten darin, daß das System vorübergehend zu dessen Ursprung zurückkehrt. Es entsteht ein Diagramm mit einer periodisch durchlaufenen Trajektorie, die aus wenigen, sich bis auf einen Punkt zusammenziehenden, Schleifen besteht (siehe Abbildung 4.14, rechtes Diagramm).

Damit unterscheidet sich dieser erstmals beobachtete episodische Systemzustand von dem pulsatorischen dadurch, daß auch die mittlere quadratische Geschwindigkeit des Fluids verschwindet und nicht nur deren Ableitung (vergleiche Abbildung 4.10, rechtes Diagramm).

Somit kommt der Fließprozeß des Fluids an sich zum Stillstand, so daß als Energie- und Materietransportprozeß nur noch Diffusion verbleibt.

In den konvektiven Phasen sind die auftretenden Beträge der Geschwindigkeitsableitung jedoch um zwei Größenordnungen größer als jene der Geschwindigkeit selbst und spiegeln damit das bereits bei der chaotischen Konvektion beobachtete Verhältnis wider.

Im Partikelgrößenspektrum (siehe Abbildung 4.15) läßt sich die zeitliche Korrelation zwischen dem episodischen Verhalten in der NUSSELT-Zahl und dem Wachstum der mittleren Partikelgröße unmittelbar erkennen. Auffällig ist dabei, daß Koagulation und Breakup über zeitlich recht unterschiedlich lange Zeitspannen die Entwicklung des Partikelgrößenspektrums dominieren. Während die Partikel innerhalb einer relativ kurzen Zeit ihre mittlere Partikelgröße um einige Größenordnungen erhöhen, bedarf es einer sehr viel längeren Zeit, um diese

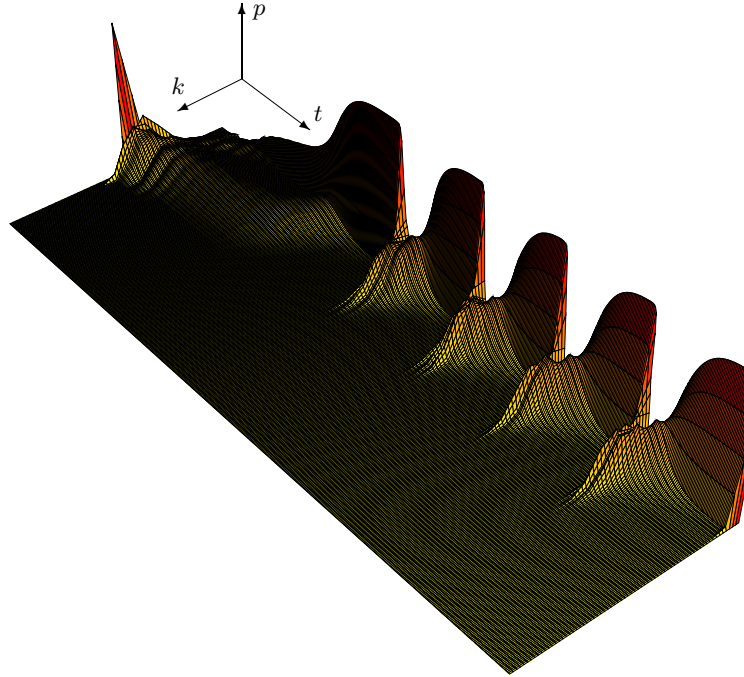


Abbildung 4.15: Episodische Partikelgrößenverteilung. Zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 9,0$ bei $p_{coa} = 10^{-3}$ und $p_{bre} = 10^3$.

wieder soweit herabzusetzen, daß der Zyklus erneut beginnen kann.

Ursache dafür ist die recht hohe Variabilität der Koagulationsgeschwindigkeit aufgrund ihrer lokalen Ankopplung an das Fließfeld. Die beobachteten episodischen Systemzustände können daher als Folge unterschiedlicher Zeitskalen der Koagulations- und Breakup-Prozesse sowie des Fließprozesses verstanden werden.

Im Gegensatz zu den quasistationären Phasen des episodischen Systemzustandes, die durch eine NUSSELT-Zahl von 1 und damit verschwindender Konvektion gekennzeichnet sind (siehe Abbildung 4.14, linkes Diagramm), stabilisiert sich die Partikelverteilung in den quasistationären Phasen des pulsatorischen Systemzustands jedoch nicht an einem Ende des Größenspektrums, da der Koagulations- und der Breakup-Prozess einem Gleichgewichtszustand ausbilden können.

Um den Einfluß der Startbedingungen auf die Art der Konvektion zu überprüfen (siehe Abschnitt 3.6.2), wurden einige Simulationen mit geänderten Anfangswertbedingungen durchgeführt.

Es zeigte sich dabei, daß die neu entdeckten Eigenschaften des verallgemeinerten TDSC-Modells nicht durch die Anfangswertbedingungen bedingt sind. Die Art der Volumendiskretisierung, insbesondere die Anzahl der Klassen, hat ebenfalls keinen Einfluß auf die Ausbildung dieses neu entdeckten Zustands.

Lediglich der Abstand zwischen dem Schwerpunkt der Ausgangsverteilung und der kleinsten Klassen scheint sich auf die Dauer der breakup-dominierten Phasen auszuwirken.

Episodische Systemzustände lassen sich dabei sowohl für relativ geringe ($p_{coa} \approx 10^{-8}$) als auch für relativ hohe Koagulationswahrscheinlichkeiten ($p_{coa} \approx 10^{-3}$) beobachten. In diesen Bereichen treten periodische und pulsatorische Zustände nur noch vereinzelt bei den üblichen Sinkgeschwindigkeiten auf.

4.8 Einfluß der Partikelgrößenverteilung auf das Systemverhalten

4.8.1 Quasistationäre Konvektion nach nicht-konvektivem Systemverhalten

Die Erweiterung des Konvektionsmodells auf veränderliche Partikelgrößen kann jedoch nicht nur zu einem im TDSC-Modell unbekanntem Systemzustand führen (siehe Abschnitt 4.7.6), sondern kann auch Einfluß auf die Art der Ausbildung der bereits in diesem beobachteten Systemzustände nehmen.

Als Beispiel dafür soll hier ein (vor allem bei geringen Sinkgeschwindigkeiten zu beobachtendes) Phänomen angeführt werden, bei dem ein nach dem Abklingen der Anfangsstörung über einen langen Zeitraum von mehr als anderthalb Diffusionszeiten konvektionsloses System durch den internen Systemumbau dennoch eine quasistationäre Konvektion ausbilden kann.

Anhand der im linken Diagramm der Abbildung 4.16 wiedergegebenen zeitlichen Entwicklung der thermischen NUSSELT-Zahl Nu_T läßt sich erkennen, daß das Konvektionssystem nach einer relativ langen Zeit der Ruhe über eine schwach gedämpfte Phase der Oszillation einen quasistationären Systemzustand ausbildet. Auffällig dabei ist vor allem die für Konvektionssysteme ungemein lang dauernde Übergangsphase zwischen zwei Zuständen, welche Kennzeichen einer durch Koagulation und Breakup bedingten Einflußnahme ist. In Abkehr von der Praxis der vorhergehenden NUSSELT-Zahl-Diagramme wurde in dieser Graphik ein Zeitraum von 10 anstatt 5 Diffusionszeiten t_D wiedergegeben. Selbst nach dieser langen Zeit oszilliert das System noch schwach, jedoch mit weiterhin abnehmender Amplitude.

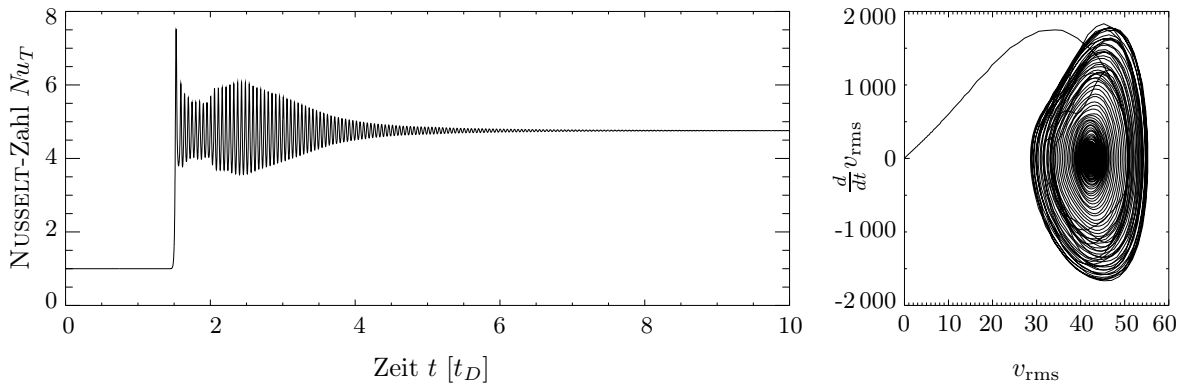


Abbildung 4.16: Quasistationäre Konvektion nach Oszillation. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl und Phasenraumdiagramm der Geschwindigkeit für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und $v_s = 0$ bei $p_{coa} = 10^{-5}$ und $p_{bre} = 10^{-5}$.

Das rechte Diagramm in Abbildung 4.16 zeigt den durch die mittlere Fluidgeschwindigkeit und deren Ableitung aufgespannten Phasenraum. Dieser zieht sich, wie für den quasistationären Konvektionszustand zu erwarten (siehe Abschnitt 4.7.2), auf einen Punkt zusammen. Die sich dabei langfristig einstellende mittlere Fluidgeschwindigkeit entspricht wie auch die dann vorliegende NUSSELT-Zahl den im Rahmen der thermo-diffusiven Konvektion ermittelten Benchmark-Ergebnissen (siehe Abschnitt 3.6.2). Das betrachtete Konvektionssystem verhält sich somit in diesem Falle wie ein Modell mit nur einer Partikelgröße.

Die vorgegebene Partikelverteilung ist unter den gewählten Rahmenbedingungen nicht stationär. Ihre Anpassung über Koagulation und Breakup führt dabei langfristig zu einem quasistationären System.

Abbildung 4.17 zeigt für das betrachtete Konvektionssystem den zeitlichen Verlauf der mittleren Fluidgeschwindigkeit v_{rms} (linkes Diagramm) und der effektiven LEWIS-Zahl Le_{eff} (rech-

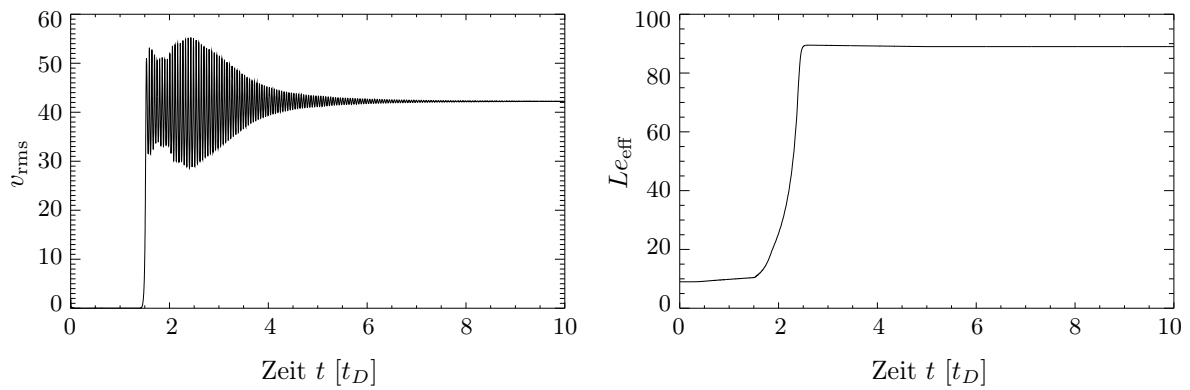


Abbildung 4.17: Zeitliche Entwicklung der mittleren Fluidgeschwindigkeit (linkes Diagramm) und der effektiven LEWIS-Zahl (rechtes Diagramm).

tes Diagramm). Während das Fluid im gesamten Modellgebiet für eine Zeitspanne von nahezu $1,75 t_D$ ruht, wächst die effektive LEWIS-Zahl zunächst nahezu linear, dann aber nach Einsetzen der Konvektion exponentiell an. In physikalischer Hinsicht bedeutet dies, daß die Diffusivität der Partikel rapide abnimmt, was auf ein immenses Größenwachstum hindeutet.

Die Ursache der sehr schnell verlaufenden Zunahme der durchschnittlichen Partikelgröße liegt in der Wechselwirkung zwischen Fluidfluß und Koagulation begründet. Solange das Fluid ruht, verbreitert sich die anfängliche Partikelverteilung nur langsam, die Wirkung des Koagulationsprozesses überwiegt jene des Breakup-Prozesses nur leicht. Ist dann eine hinreichende

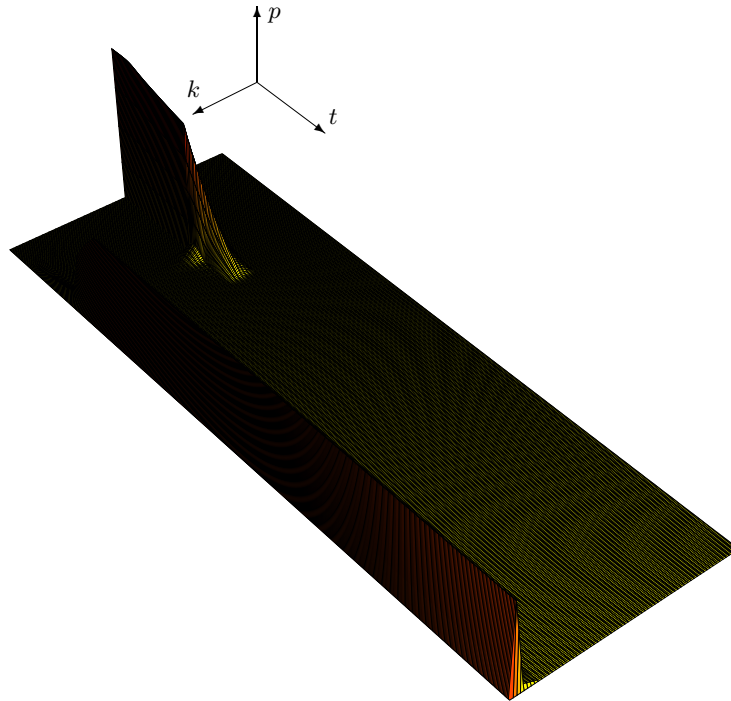


Abbildung 4.18: Solange das Fluid ruht, verbreitert sich die anfängliche Partikelverteilung nur langsam. Ist eine hinreichende Besetzung der oberen Partikelklassen erreicht, koagulieren vermehrt große Partikel miteinander, da der Wirkungsquerschnitt mit der Größe wächst. Die verstärkte Ausfällung größerer Partikel setzt das Fluid in Bewegung, wodurch wiederum lokal die Koagulationswahrscheinlichkeit steigt. Damit ist ein sich selbst beschleunigender Prozeß in Gang gesetzt.

Besetzung der oberen Partikelklassen erreicht, koagulieren vermehrt große Partikel miteinander, da ihr Wirkungsquerschnitt größer als jener kleinerer Partikel ist. Mit dem Volumen wächst jedoch nach STOKES auch die Sinkgeschwindigkeit der Partikel (siehe Abschnitt 2.10), so daß deren verstärkte Ausfällung das Fluid in Bewegung setzt. Dieses läßt wiederum lokal die Koagulationswahrscheinlichkeit steigen (siehe Abschnitt 2.9), wodurch ein sich in gewissem Maße selbst beschleunigender Prozeß in Gang gesetzt ist.

Genau dieses läßt sich anhand des zugehörigen Partikelgrößenspektrums in Abbildung 4.18 nachvollziehen. Durch Koagulation nimmt die Größe der Partikel innerhalb einer sehr kurzen Zeitspanne so stark zu, daß sich die gesamte Partikelverteilung nahezu vollständig auf die Klassen der größten Volumina konzentriert. Die beiden größten Klassen vereinen dabei mehr als 99,999 % der Konzentration auf sich, wobei auf die größte Klasse fast 93 % entfallen. Dadurch entledigt sich das Konvektionssystem selbst des Freiheitsgrads der Größenvariation und verhält sich genauso wie ein analoges TDSC-Modell. Da Sinkgeschwindigkeit und Konzentrationsdiffusivität für die als kugelförmig angenommenen Partikel bezüglich des Volumens der Referenzklasse konsistent skaliert werden (siehe Abschnitt 2.7.2), vermag das erweiterte Modell sogar in diesem Fall die Ergebnisse des TDSC-Modells zu reproduzieren.

Abschließend soll noch ein sowohl Abbildung 4.16 als auch Abbildung 4.17 zu entnehmender Umstand beleuchtet werden, ohne diesen jedoch klären zu können. Alle Simulationen, die ein Konvektionssystem mit der in diesem Abschnitt geschilderten Signatur hervorbringen, offenbaren eine bemerkenswert hohe Stabilität in der Periodizität der Oszillationen des Systemverhaltens. Obwohl die Heftigkeit der Veränderung und damit die Amplitude der NUSSELT-Zahl recht stark abnimmt, bleibt die Frequenz des Signals ungemein stabil (siehe Abbildung 4.19).

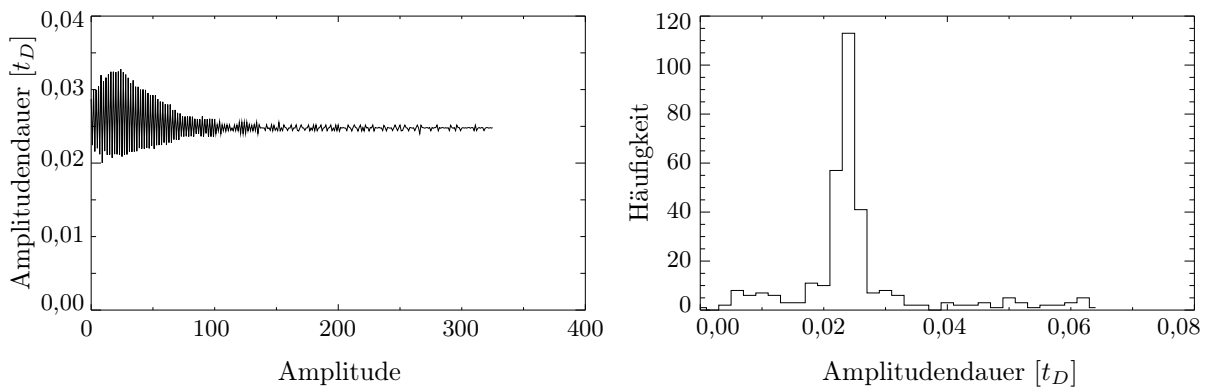


Abbildung 4.19: Stabilität der Oszillationsperiodizität. Im linken Diagramm sind für die 337 ausgewerteten Amplituden der Oszillation für t zwischen $1,8 t_D$ und $10 t_D$ die Amplitudendauern aufgetragen. Das Histogramm rechts zeigt die Häufigkeitsverteilung der Amplitudendauern für ein Binning von $0,002 t_D$.

Im linken Diagramm sind für die 337 ausgewerteten Amplituden der Oszillation für t zwischen $1,8 t_D$ und $10 t_D$ die Amplitudendauern aufgetragen. Das Histogramm rechts zeigt die Häufigkeitsverteilung der Amplitudendauern, die einen signifikanten Schwerpunkt aufweist. Bei einer durchschnittlichen Amplitudendauer von $0,0251 t_D$ beträgt die Standardabweichung nur $0,0022 t_D$. Dies ist angesichts der nicht ganz unproblematischen Bestimmung³ eine relativ geringe Streuung. Damit ist die Amplitudendauer des Signals über einen Zeitraum von mehr als 300 Schwingungen auffallend konstant.

Da die NUSSELT-Zahl (siehe Abbildung 4.16, linkes Diagramm) offensichtlich stark mit der

³Da die NUSSELT-Zahl nur zu diskreten Zeitpunkten vorliegt, mußten die Zeitpunkte des Über- bzw. Unterschreitens des langfristigen Grenzwertes durch Interpolation bestimmt werden.

mittleren Fluidgeschwindigkeit (siehe Abbildung 4.17, linkes Diagramm) korreliert ist, welche ja die Stärke des materiegeleiteten Energietransportes (Konvektion) maßgeblich bestimmt, dürfte die Ursache für die hohe Stabilität in den Fließstrukturen selbst liegen. Bei einer mittleren Fluidgeschwindigkeit v_{rms} von ungefähr 42,21 könnte ein Flüssigkeitsvolumenelement während einer Oszillationsperiode, also der doppelten Amplitudendauer, auf einer mittleren Bahn mit einem Durchmesser von ungefähr 67 % der Konvektionszelle diese einmal durchlaufen.

4.8.2 Auftreten bimodaler Partikelgrößenverteilungen

Während im TDSC-Modell alle Partikel dieselbe Größe aufweisen, kann das erweiterte Modell Partikel mit stark unterschiedlicher Größe beschreiben. Ausgehend von einer Startverteilung verschmiert diese und verschiebt sich in vielen Fällen, bleibt aber in der weitüberwiegenden Anzahl der Fälle als solche erhalten, d. h. das System entwickelt eine bevorzugte Partikelgröße.

Unter bestimmten Umständen können sich aus der (unimodal) vorgegebenen Ausgangsverteilung (z. B. GAUSS-Verteilung) jedoch auch zeitlich stabile bimodale Partikelgrößenverteilungen entwickeln. In diesen Fällen weist das Konvektionssystem dann zwei bevorzugte Partikelgrößen auf. Im Falle $Ra_T = 10\,000$ und $Ra_C = 20\,000$ konnte dieser für $p_{\text{coa}} = 10^{-4}$ und $p_{\text{brea}} = 10^2$ nahezu unabhängig von der Diffusivität (d. h. LEWIS-Zahl Le) beobachtet werden. Dieser Prozeß setzt für abnehmende Diffusivität früher ein, d. h. je höher die LEWIS-Zahl Le , desto geringer die Sinkgeschwindigkeit, ab der eine bimodale Verteilung auftritt.

Die in Abbildung 4.20 wiedergegebene Sequenz von Diagrammen zeigt exemplarisch, wie sich die Partikelgrößenverteilung für denselben Parametersatz, aber verschiedene von außen vorgegebene Sinkgeschwindigkeiten verändern kann. Das System geht von einem quasistationären in einen episodischen und von diesem wieder in einem quasistationären Zustand über, wobei letzterer durch eine bimodale Verteilung der Partikelgrößenklassen gekennzeichnet ist. Diese verschiebt sich mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit v_s und daher wachsender Koagulationsrate zu größeren Partikelklassen hin.

Im Falle einer Dichtezahl von 4, d. h. $Ra_T = 10\,000$ und $Ra_C = 40\,000$, ist der bimodale Zustand nach 5 Diffusionszeiten sehr viel schwächer ausgeprägt und verschwindet mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit nahezu vollständig. Auch dieses geschieht umso schneller, je geringer die Diffusivität der Partikel ist.

Das Konvektionssystem zeigt damit insofern ein bemerkenswertes Verhalten, als daß sich aus einer unimodalen Ausgangsverteilung innerhalb eines bestimmten Parameterfensters eine stabile, bimodale Partikelgrößenverteilung entwickelt. Dieses bedeutet, daß es nicht nur Partikel recht unterschiedlicher Größe innerhalb des Systems geben kann, sondern auch zwei Klassen von Partikeln recht verschiedener Größe zugleich bevorzugt auftreten können. Im Falle des in Abbildung 4.20 angeführten Beispiels beträgt das mittlere Volumen der größeren Partikel für $v_s = 4,0$ ungefähr das 64-fache des mittleren Volumens der kleineren Partikel.

Der Schwerpunkt verlagert sich dabei mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit in Richtung größerer Partikel, da diese verstärkt ausfallen und aufgrund ihrer niedrigeren Diffusivität nur in geringerem Maße in das Fluid zurückkehren können. Infolgedessen sinkt die mittlere Fluidgeschwindigkeit, wodurch unmittelbar die Effektivität des Energietransportes nachläßt (d. h. die NUSSELT-Zahl nimmt ab).

Die bimodale Partikelgrößenverteilung ist relativ stabil gegenüber dem Sinkparameter v_s . Während der Systemzustand für v_s -Werte zwischen 2,8 und 3,2 von quasistationärer zu episodischer und wieder zu quasistationärer Konvektion wechselt, läßt sich die bimodale Verteilung über einen recht großen Parameterbereich von ungefähr $v_s = 3,2$ bis ungefähr $v_s = 8$ beobachten.

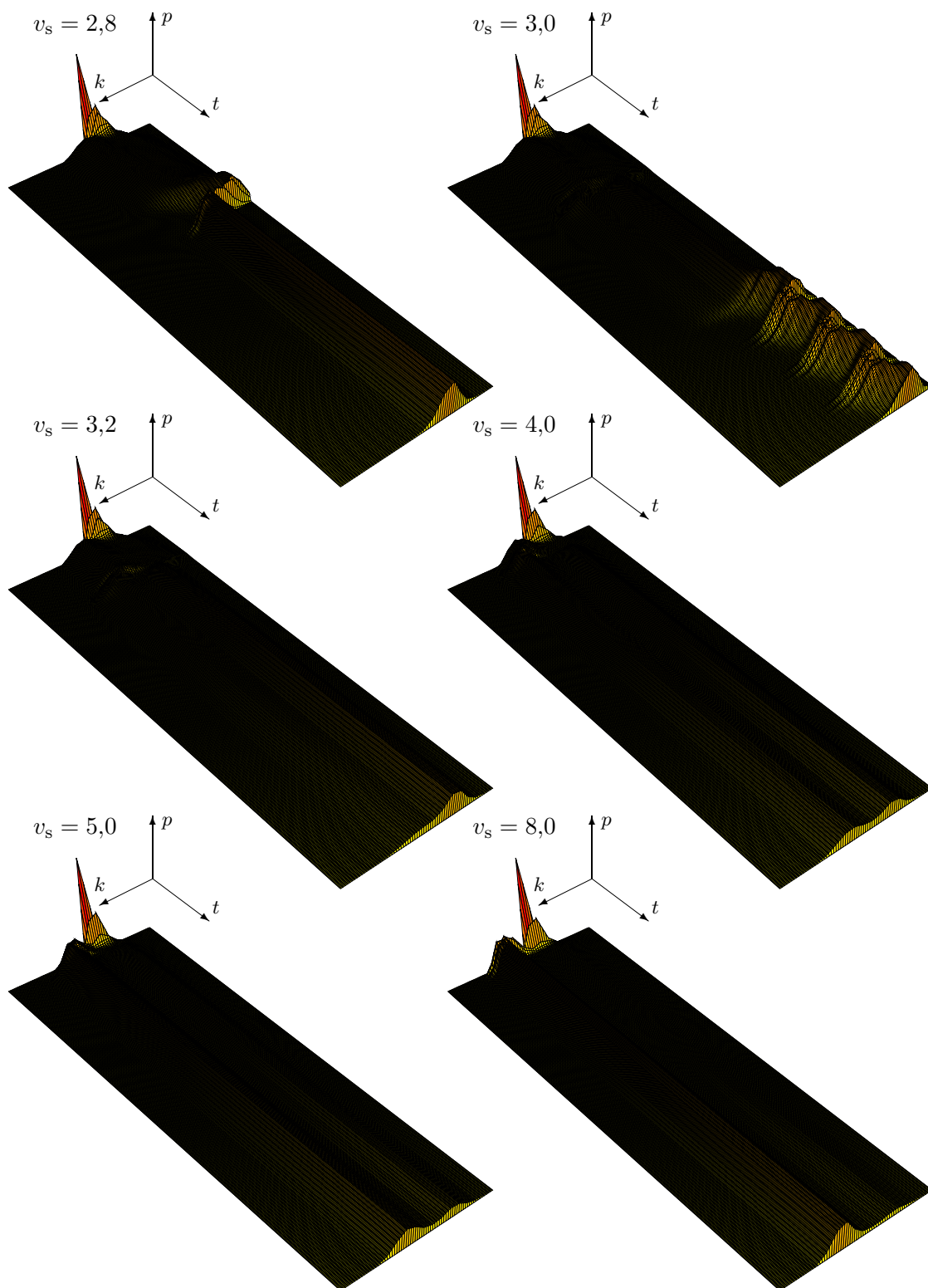


Abbildung 4.20: Bimodale Partikelgrößenverteilung. Zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$ und $Le = 3$. Mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit v_s verlagert sich der Schwerpunkt zu größeren Partikelklassen. Für Sinkgeschwindigkeiten um 4 läßt sich von einer bimodalen Partikelgrößenverteilung sprechen.

4.9 Systematik der Systemzustände

Die systematische Untersuchung eines gegenüber des konventionellen TDSC-Modells erheblich erweiterten Ansatzes zur Beschreibung von multidiffusiven Konvektionsprozessen stellt eine überaus große Herausforderung dar, weil ein vielparametriges physikalisches Modell unter Beachtung komplexer Abhängigkeiten zu analysieren ist.

Das Vorgehen dabei besteht darin, für einen Satz festgelegter externer Parameter aus Breakup-Modell, Koagulations- und Breakup-Wahrscheinlichkeit, Temperatur- und Konzentrations-RAYLEIGH-Zahl sowie LEWIS-Zahl die Sedimentationsgeschwindigkeit zu variieren. Dadurch kann die Reaktion des Systems auf die Veränderung des im TDSC-Modell maßgeblichen Parameters zur Ausbildung von Systemzuständen untersucht werden. Diese gilt es dann mit jener der anderen Parametersätze zu vergleichen und hinsichtlich der Modifikation einzelner Parameter zu analysieren.

Trotz des dazu notwendigen erheblichen Aufwandes ist es gelungen, eine Systematik in der Abfolge der von dem Konvektionssystem ausgebildeten Systemzustände zu erkennen. Unter Erhöhung der Sedimentationsgeschwindigkeit v_s lassen sich folgende Phasen mit regelmäßiger Wiederkehr ausmachen (siehe Abbildung 4.21):

1. *quasistationäre* Konvektion: Nach einer nicht-konvektiven Phase wird durch Koagulation und Breakup (siehe Abschnitt 4.8) die Partikelgrößenverteilung so geändert, daß sich eine quasistationäre Konvektion mit $Nu_T \approx 4,8$ ausbilden kann (Abbildung 4.21, $v_s = 0,0$). Die Zeitdauer bis zum Einsetzen nimmt mit der Sinkgeschwindigkeit v_s zu, die NUSSELT-Zahl währenddessen langsam ab (Abbildung 4.21, $v_s = 1,1$).
2. *episodische* Konvektion: Der Abstand zwischen den Episoden wächst mit der Sinkgeschwindigkeit v_s . Dies gilt auch für die Dauer bis zum Einsetzen. Die Amplitude des Wärmetransportes nimmt hingegen mit der Sedimentationsgeschwindigkeit ab, so daß die episodischen Signale seltener und schwächer werden (Abbildung 4.21, $v_s = 1,3$). Mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit kann somit nur ein abnehmender Anteil der sedimentierten Schichten durch den Systemumbau während der episodischen Ereignisse aufgewirbelt und wieder in die Konvektionsströmung aufgenommen werden.
3. *keine* Konvektion: Dieser Übergangsbereich weist mit hoher Wahrscheinlichkeit größtenteils ein episodisches bzw. periodisches Systemverhalten auf, zeigt aber während der betrachteten Zeitskala nur eine NUSSELT-Zahl von 1 (Abbildung 4.21, $v_s = 3,5$). Da die Signalabstände der beiden benachbarten Bereiche an den Rändern weit stärker als linear anwachsen bzw. abnehmen, läßt sich leider keine eindeutigen Einordnung vornehmen.
4. *periodische* Konvektion: Der Wärmetransport infolge der Anfangsstörung wächst mit zunehmender Sedimentationsgeschwindigkeit langsam an. Der Abbau des Wärmetransportes erfolgt über eine stark gedämpfte Schwingung, deren Dämpfung jedoch mit wachsender Sedimentationsgeschwindigkeit nachläßt (Abbildung 4.21, $v_s = 3,9$), so daß diese letztlich die Schwingung nicht mehr zu eliminieren vermag. Eine weitere Erhöhung der Sinkgeschwindigkeit läßt Amplitude und Periodendauer der Schwingung anschwellen (Abbildung 4.21, $v_s = 4,6$).
5. *pulsatorische* Konvektion: Ab einer gewissen Sinkgeschwindigkeit läßt sich die Wärmeenergie effizienter über ein Mehrwirbelsystem transportieren, so daß der periodische Systemzustand in einen pulsatorischen übergeht (Abbildung 4.21, $v_s = 4,8$). Der Zeitabstand zwischen den Pulsationen nimmt für weiter wachsende Sinkgeschwindigkeit zuerst ab, d. h., der Umbau von einem Mehrwirbel- zu einem Einwirbelsystem, der durch die

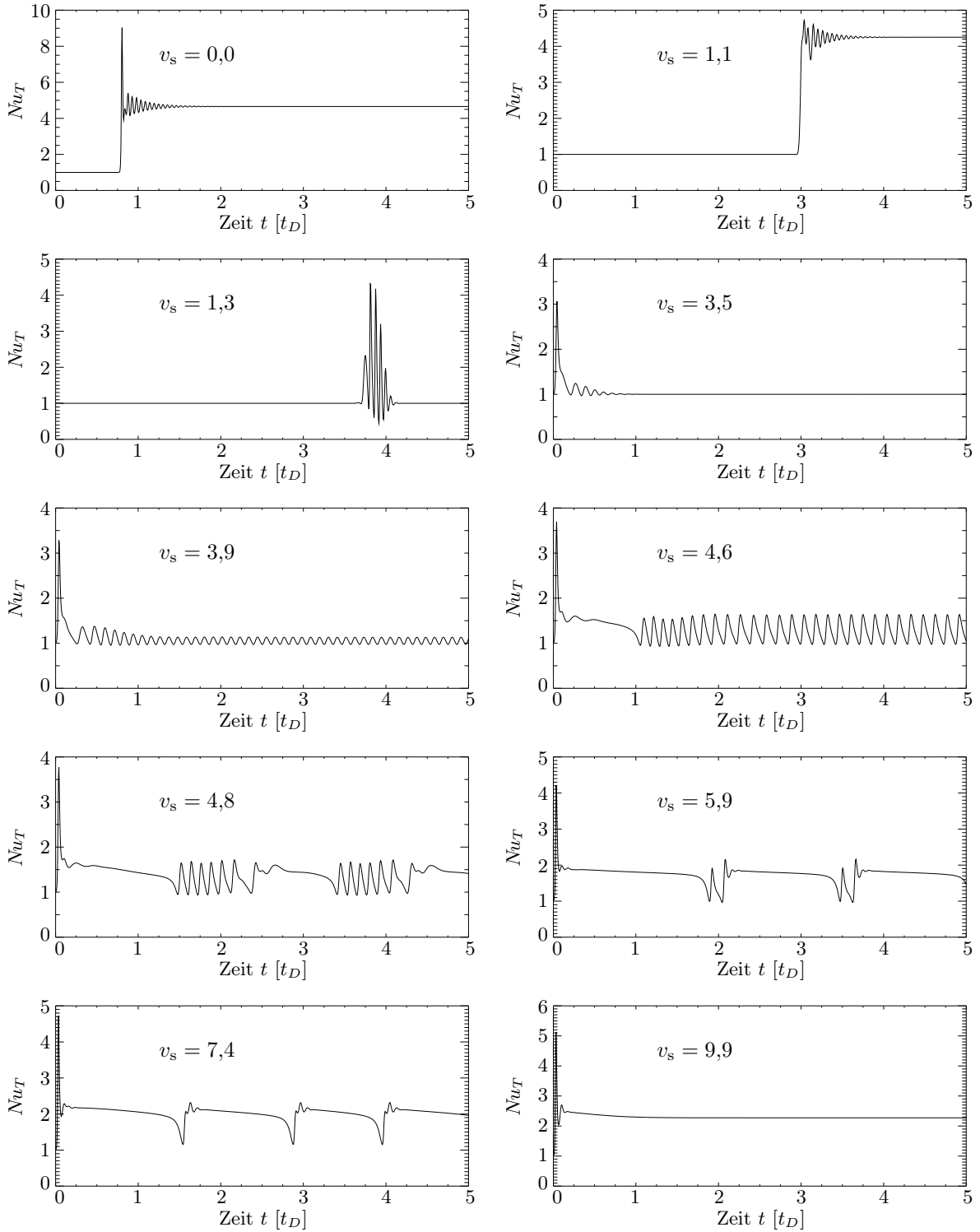


Abbildung 4.21: Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl für $Ra_T = 10000$, $Ra_C = 20000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ und verschiedene Sinkgeschwindigkeiten v_s bei $p_{coa} = 10^{-4}$ und $p_{bre} = 10^2$.

Instabilität des ersteren bedingt wird, erfolgt häufiger (Abbildung 4.21, $v_s = 5,9$). Steigt die Sedimentationsgeschwindigkeit weiter an, so vergrößert sich die Periodendauer der Pulsationen schließlich wieder sehr schnell (Abbildung 4.21, $v_s = 7,4$).

6. *quasistationäre* Konvektion: Die NUSSELT-Zahl wächst mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit v_s immer langsam und strebt einem Sättigungswert von ungefähr 2,9 entgegen (Abbildung 4.21, $v_s = 9,9$).

Die in Abbildung 4.21 zusammengefaßten Diagramme zeigen die zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl für verschiedene Sinkgeschwindigkeiten v_s . Dargestellt wird jeweils eine Simulationsdauer von 5 Diffusionszeiten. Nacheinander durchläuft das Konvektionssystem alle zuvor

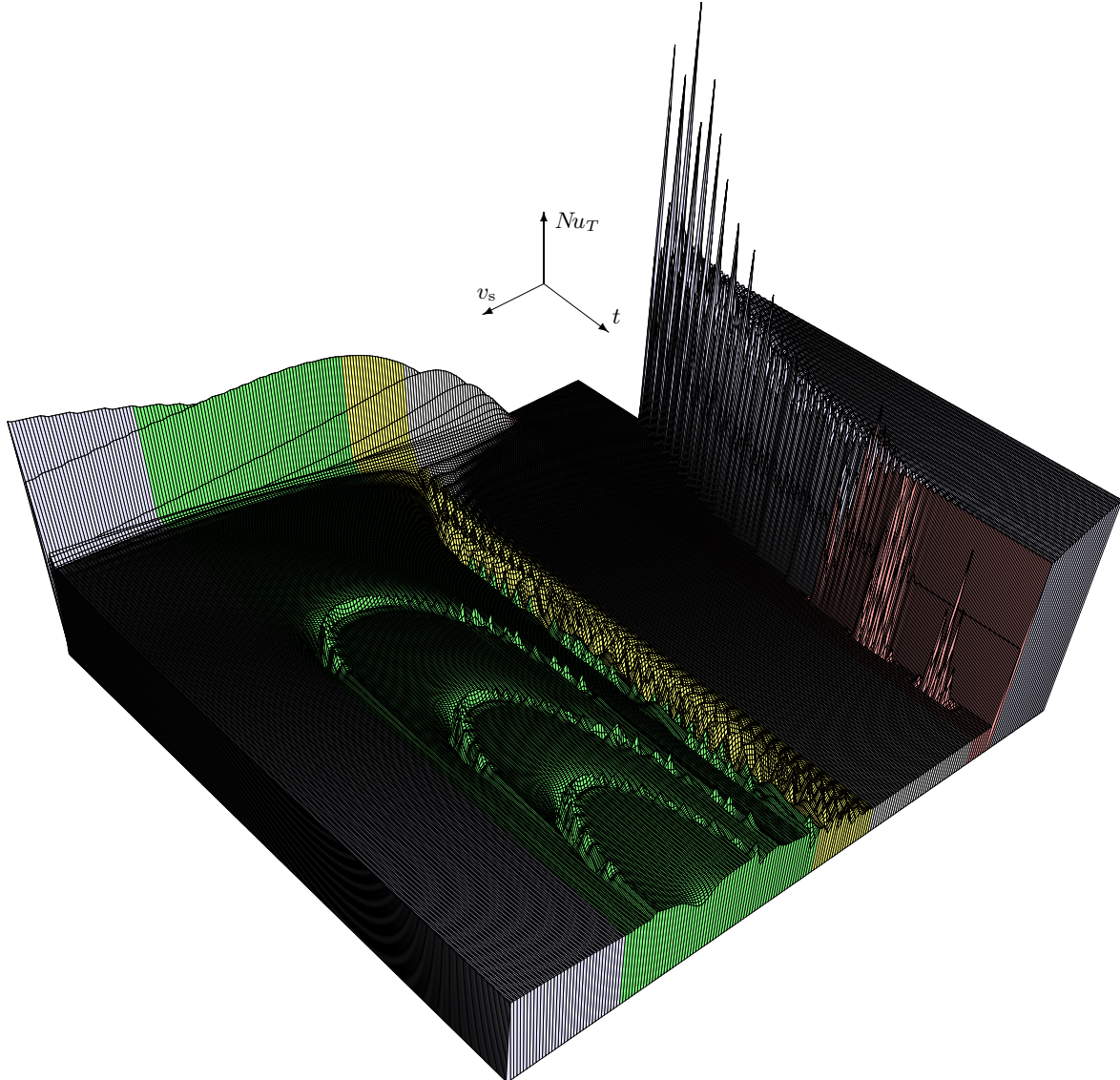


Abbildung 4.22: Abhängigkeit der zeitlichen Entwicklung des Wärmetransportes von der Sinkgeschwindigkeit. Das Konvektionssystem verhält sich zuerst quasistationär (hellblau) und geht dann über einige episodische Zustände (rot) in eine relativ lange Phase scheinbar konvektionslosen (grau) Verhaltens über. Mit dem Eintreten in die periodische (gelb) Phase wächst sodann die NUSSELT-Zahl wieder an. Nach einem relativ breiten Pulsationsfenster (grün), in dem der zeitliche Abstand der Pulsationen zuerst abnimmt, um dann mit weiter wachsender Sinkgeschwindigkeit wieder anzusteigen, zeigt das System erneut einen quasistationären Zustand (hellblau).

beschriebenen Phasen. Der Übergang zwischen episodischer und periodischer Konvektion ist nicht klar abzugrenzen, da zwischen diesen Phasen ein scheinbar nicht-konvektiver Bereich liegt, der jedoch auch durch eine mit äußerster Verzögerung einsetzende episodische bzw. periodische Konvektion gekennzeichnet sein könnte.

Einen groben Überblick über die Abhängigkeit der zeitlichen Entwicklung des Wärmetransportes von der Sinkgeschwindigkeit läßt sich durch die Kombination der NUSSELT-Zahl-Diagramme zu einer dreidimensionalen Graphik gewinnen. In Abbildung 4.22 ist die NUSSELT-Zahl Nu_T in der Höhe aufgetragen, während entlang der t -Achse die Simulationszeit voranschreitet. Auf der v_s -Achse wächst die Sinkgeschwindigkeit von 0 bis 10.

Beginnend mit kleinen Sinkgeschwindigkeiten, können in dieser Graphik alle zuvor beschriebenen Phasen erkannt werden. Das Konvektionssystem verhält sich zuerst quasistationär und geht dann über einige episodische Zustände in eine relativ lange Phase scheinbar konvektionslosen Verhaltens über. Mit dem Eintreten in die periodische Phase wächst sodann die NUSSELT-Zahl wieder an. Nach einem relativ breiten Pulsationsfenster, in dem der zeitliche Abstand der Pulsationen zuerst abnimmt, um dann mit weiter wachsender Sinkgeschwindigkeit wieder anzusteigen, zeigt das System erneut einen quasistationären Zustand. Der dabei erbrachte Wärmetransport strebt relativ langsam einer Sättigung bei $Nu_T \approx 2,9$ entgegen.

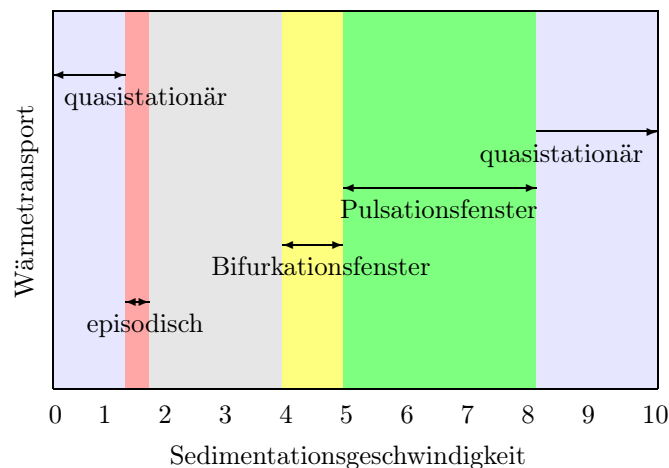


Abbildung 4.23: Diagramm des prinzipiellen Verhaltens eines auf veränderliche Partikelgrößen erweiterten Konvektionssystems unter Erhöhung der (dimensionslosen) Sedimentationsgeschwindigkeit. Zwischen dem anfänglichen quasistationären Zustand und dem Bifurkationsfenster vermag sich der neuentdeckte episodische Systemzustand auszubilden. Die farbliche Hinterlegung der einzelnen Bereiche dient der besseren Vergleichbarkeit mit Abbildung 4.22.

Abbildung 4.23 faßt das prinzipielle Verhalten eines um Koagulation und Breakup ergänzten Konvektionssystems in Analogie zu dem von LEU [1997] angegebenen schematischen Diagramm (siehe Abbildung 1.5) zusammen. Bei der Ausweisung der Bereiche wurde bewußt defensiv vorgegangen. Der zwischen dem episodischen und dem periodischen Systemverhalten (Bifurkationsfenster) liegende Bereich läßt sich aufgrund der sehr weichen Begrenzungen der beiden anliegenden Bereiche leider nicht eindeutig zuordnen (siehe Abbildung 4.24). Äußerst zeitaufwendigen Rechnungen, in denen das Konvektionssystem über mehrere hunderte bis tausende Diffusionszeiten simuliert wurde, zeigten in der Nähe der Ränder jeweils das Systemverhalten der angrenzenden Bereiche. Da dazu jedoch das gekoppelte Differentialgleichungssystem jeweils über Millionen von Zeitschritten zu integrieren ist, können durch numerische Diffusion entstandene Artefakte nicht gänzlich ausgeschlossen werden.

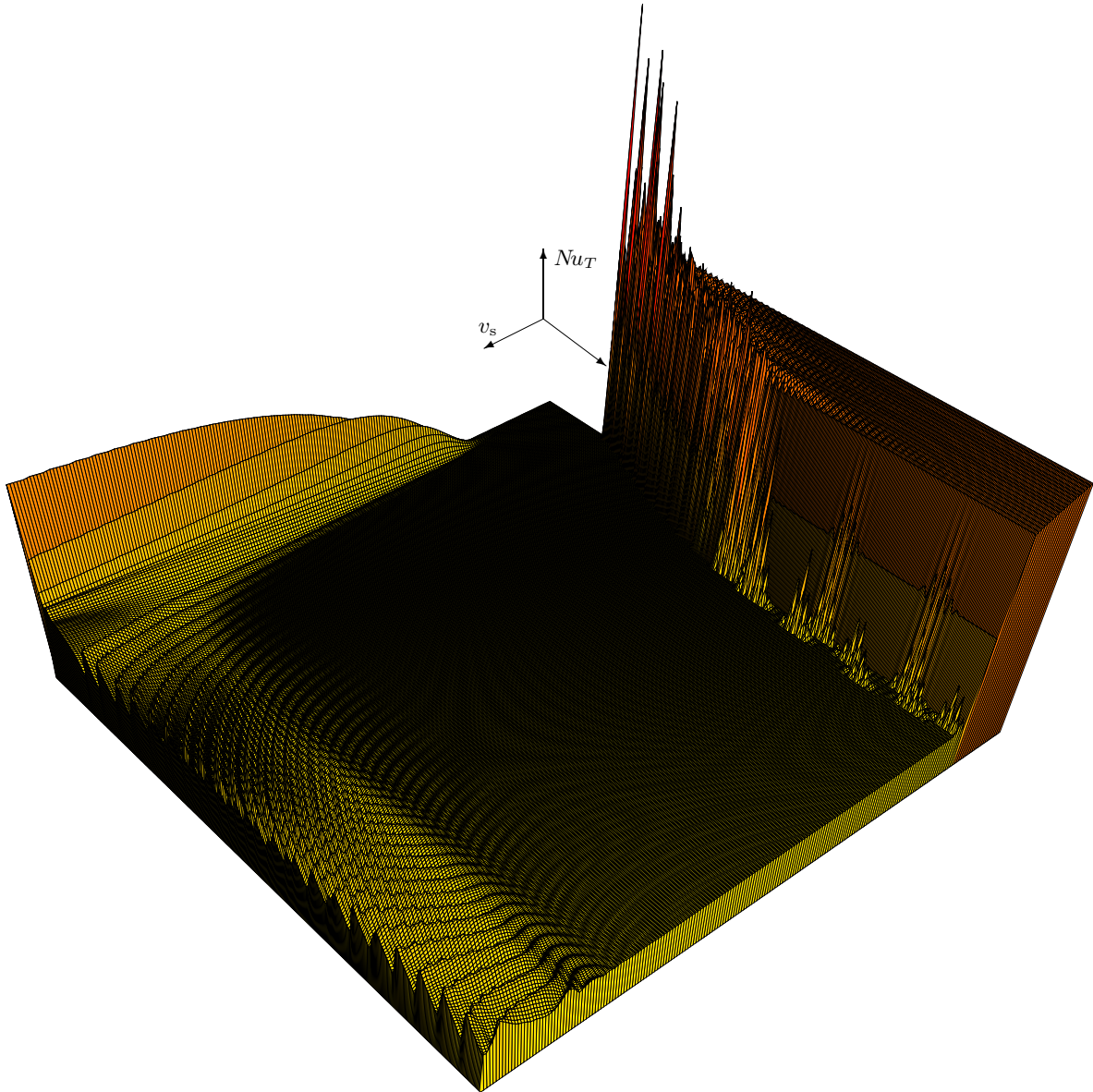


Abbildung 4.24: Nicht-konvektiver Bereich zwischen episodischen und periodischen Systemzuständen. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ bei $p_{coa} = 10^{-3}$ und $p_{bre} = 10^3$ für Sinkgeschwindigkeiten v_s zwischen 0 und 10.

Ein Vergleich unseres schematischen Diagramms mit jenem von LEU [1997] für das TDSC-Modell angegebenen (siehe Abbildung 1.5) zeigt, daß die Reihenfolge der aus dem TDSC-Modell bekannten Systemzustände erhalten bleibt, sich jedoch zwischen dem anfänglichen quasistationären Zustand und dem Bifurkationsfenster der neuentdeckte episodische Zustand auszubilden vermag. Der konvektionslose Bereich zwischen beiden, welcher durch eine NUSSELT-Zahl von 1 und ein ruhendes Fluid gekennzeichnet ist, kann nicht scharf begrenzt werden.

Die Wärmetransportleistung der anfänglichen quasistationären Konvektion wird in keiner der nachfolgenden Phasen mehr erreicht. Dieses ist ein wesentlicher Unterschied zum TDSC-Modell, in dem die höchste Wärmetransporteffizienz innerhalb des Pulsationsfensters vorliegt.

Da die Sedimentationsgeschwindigkeiten des Einsetzens der einzelnen Phasen stark von den konkreten Wahrscheinlichkeitswerten für Koagulation und Breakup abhängen (siehe die folgenden Abschnitte 4.10.1 und 4.10.2), stellt die für die Sedimentationsgeschwindigkeit hinsichtlich des TDSC-Modells ausgewiesene unterschiedliche Skala keine Einschränkung dar. Dieses eher modelltheoretische Argument wird zudem noch durch ein physikalisches untermauert: gerade die Sedimentationsgeschwindigkeit ist ja im TDSC-Modell ein Maß für die Partikelgröße, so daß sich durch eine gezielte Wahl der Referenzklasse, die lediglich der Vergleichbarkeit zum TDSC-Modell dient, dieser Unterschied aufheben läßt.

4.10 Untersuchungen zur Parameterabhängigkeit der Systemzustände

Bei den Untersuchungen zur Parameterabhängigkeit der Systemzustände werden vorrangig diejenigen in Abschnitt 4.6.3 ausgewiesenen Parameterbereiche zugrunde gelegt, in denen das Systemverhalten weder durch die Koagulations- noch durch die Breakup-Wahrscheinlichkeit dominiert wird. Als Bezugsgröße dient dabei ein Konvektionssystem mit $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$ und $Le = 9$ bei stärker als proportional zum Volumen wachsender Breakup-Wahrscheinlichkeit. Die gewählten Parameter entsprechen jenen, die in der Literatur bevorzugt für Systemanalysen verwendet werden.

Alle im folgenden aufgeführten Beobachtungen und Erkenntnisse sind als Aussagen in erster Linie hinsichtlich ihrer Tendenz zu verstehen. Natürlich schränken sie sich in extremum gegenseitig ein. Aufgrund der vielfältigen und komplexen Zusammenhänge scheint es nur in Einzelfällen sinnvoll zu sein, eine Visualisierung der Erkenntnisgrundlage vorzunehmen.

4.10.1 Abhängigkeit von der Koagulationswahrscheinlichkeit

Aufgrund der lokalen Ankopplung der Koagulationswahrscheinlichkeit p_{coa} an das Fließfeld (siehe Abschnitt 2.9), das zu nicht unerheblichen Teilen durch die gravitative Ausfällung großer Partikel angetrieben wird, wirkt sich ihre Variation vor allem auf die Abhängigkeit des Systemverhaltens von der Sedimentationsgeschwindigkeit aus.

Die zur Abhängigkeit des Systemverhaltens von der Koagulationswahrscheinlichkeit durchgeführten numerischen Experimente haben gezeigt, daß mit wachsender Koagulationswahrscheinlichkeit

- die Amplitude episodischer Ereignisse bei gleicher Sinkgeschwindigkeit geringer ausfällt und zeitlich stärker abfällt,
- die Frequenz episodischer Ereignisse bei gleicher Sinkgeschwindigkeit steigt und
- sich der Bereich der Sedimentationsgeschwindigkeit vergrößert, in dem periodisches bzw. pulsatorisches Verhalten auftritt.

Die Koagulationswahrscheinlichkeit scheint also eine Wirkung zu entfalten, die mit einer Spreizung des Bereiches der Sedimentationsgeschwindigkeit vergleichbar ist.

Dies läßt sich anhand der in den Abbildungen 4.22 und 4.24 dargestellten Abhängigkeiten der zeitlichen Entwicklung der NUSSELT-Zahl Nu_T von der Sinkgeschwindigkeit v_s unmittelbar erkennen. In beiden Graphiken ist der Geschwindigkeitsbereich zwischen 0 und 10 abgebildet, wobei Abbildung 4.24 ein Konvektionssystem mit einer um eine Größenordnung erhöhten Koagulationswahrscheinlichkeit p_{coa} zeigt.

Umgekehrt gilt, daß je geringer die Koagulationswahrscheinlichkeit ist, desto

- besser kann sich das Konvektionssystem ausdifferenzieren, da Partikelgrößenverteilung und Fließfeld nicht einzig durch sehr große Partikel bestimmt werden,
- niedriger ist die Sinkgeschwindigkeit, ab der die in Abschnitt 4.9 vorgestellten Phasen durchlaufen werden,
- schwächer ist der Bereich der Sinkgeschwindigkeit gespreizt, in dem episodisches Systemverhalten zu beobachten ist und
- größer ist der Bereich der Breakup-Wahrscheinlichkeit, in dem episodisches Verhalten auftritt.

Anschaulich lassen sich diese Ergebnisse mit Hilfe der Überlegung nachvollziehen, daß bei fallender Koagulationswahrscheinlichkeit eine vergleichbar starke Rückkopplung des Fließfeldes auf den Koagulationsprozeß erst bei höheren Sinkgeschwindigkeiten gegeben ist.

4.10.2 Abhängigkeit von der Breakup-Wahrscheinlichkeit

Der Breakup-Prozeß übt bei der Veränderung des Partikelgrößenspektrums eine hinsichtlich des Koagulationsprozesses kompensatorische Wirkung aus. Der Einfluß der Breakup-Wahrscheinlichkeit ist daher stets im Zusammenhang mit der jeweils gültigen Koagulationswahrscheinlichkeit zu sehen.

Grundsätzlich läßt sich festhalten, daß mit wachsender Breakup-Wahrscheinlichkeit

- der Sinkgeschwindigkeitsbereich sich vergrößert, in dem das System die anfängliche quasistationäre Konvektion zeigt,
- episodische Zustände erst bei höheren Sedimentationsgeschwindigkeiten auftreten, da es einer größeren Sinkgeschwindigkeit v_s bei konstanter Koagulationswahrscheinlichkeit bedarf, um den Breakup-Prozeß zu kompensieren,
- die effektive LEWIS-Zahl Le_{eff} sinkt und damit die durchschnittliche Diffusivität der Partikel wächst.

Andererseits gilt, daß je geringer die Breakup-Wahrscheinlichkeit ist, desto

- kleiner ist das Sinkgeschwindigkeitsintervall, in dem periodische bzw. pulsatorische Konvektion auftreten kann,
- kürzer ist die Dauer der episodischen Zustände,
- länger dauert die nicht-konvektive Phase vor dem Übergang zur quasistationären Konvektion (siehe Abschnitt 4.9) und
- stärker ist der Bereich der Sinkgeschwindigkeit gestaucht, in dem episodisches Systemverhalten zu beobachten ist.

4.10.3 Abhängigkeit von der Sedimentationsgeschwindigkeit

Durch die Einführung veränderlicher Partikelgrößen liegt die Bedeutung der Sedimentationsgeschwindigkeit v_s nicht mehr in der Auswahl einer Größe der suspendierten Partikel, sondern sie spezifiziert eher deren Neigung zur Ausfällung. Daher soll im folgenden noch einmal die physikalische Bedeutung der Sinkgeschwindigkeit für das Konvektionsmodell skizziert werden:

- Mit zunehmender Sinkgeschwindigkeit steigt die mittlere Fluidgeschwindigkeit.
- Eine höhere durchschnittliche Fließgeschwindigkeit beschleunigt das Partikelwachstums. Aufgrund des für den Koagulationsprozeß gewählten geometrische Ansatzes, der sich anschaulich an die Vorstellung der Stoßwirkungsquerschnitte in der Kern- und Elementarteilchenphysik anlehnt, vergrößert sich der von einem Partikel pro Zeit durchstrichene Raum, wodurch sich die Wahrscheinlichkeit eine Zusammenstoßens mit einem anderen Partikel erhöht.
- Die Wachstumsrate größere Partikel steigt aufgrund ihres höheren Wirkungsquerschnittes für Stoßprozesse.

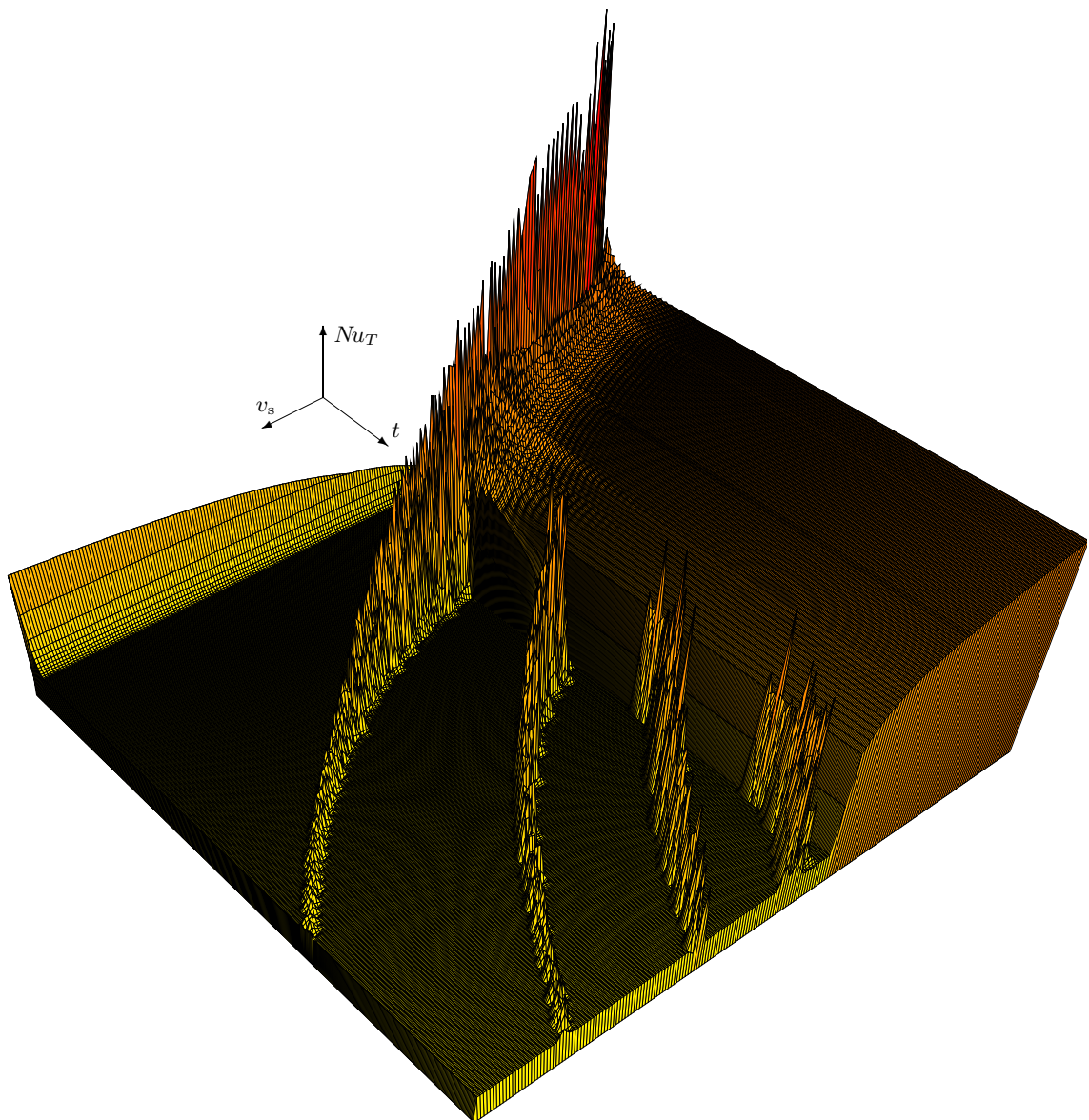


Abbildung 4.25: Vergrößerung des zeitlichen Abstandes und Abnahme der Amplitude bei episodischen Ereignissen. Zeitliche Entwicklung der NUSSELT-Zahl für $Ra_T = 10\,000$, $Ra_C = 20\,000$, $Pr = 1$, $Le = 9$ bei $p_{coa} = 10^{-4}$ und $p_{bre} = 10^3$ für Sinkgeschwindigkeiten v_s zwischen 0 und 10.

- Mit zunehmender Partikelgröße sinken die Partikel schneller zu Boden und können aufgrund abnehmender Diffusivität schwerer wieder in die Fluidströmung aufgenommen werden. Es entsteht eine Schichtbildung, die den Konvektionsraum einschränkt und erst durch einen Umbau des Systems aufgehoben wird.
- Für größere Sinkgeschwindigkeiten ist die Ausprägung der Konzentrationsschichtung stärker. Die Sedimente lagern sich in einem schmalen Streifen oberhalb des unteren Gebietsrandes ab.
- Ein pulsatorisch oder episodisch auftretender, kurzfristiger Umbau des Systems verliert unter höheren Sinkgeschwindigkeiten an Heftigkeit, was sich in der sinkenden Amplitude der NUSSELT-Zahl äußert, da das gesamte Systemverhalten durch die starke Sedimentation gedämpft ist.
- Der wachsende zeitliche Abstand zwischen den episodischen Konvektionsereignissen ist auf die mit der Sinkgeschwindigkeit steigende Koagulationsrate zurückzuführen (siehe Abbildung 4.25). Dadurch benötigt der Breakup-Prozess eine längere Zeitspanne, um die Partikel zu zersetzen und über die steigende effektive Partikeldiffusivität die Schichtbildung aufzulösen.

4.10.4 Abhängigkeit von der Lewis-Zahl

Die LEWIS-Zahl ist ein Maß für die Diffusivität der Partikel. Mit steigender LEWIS-Zahl nimmt diese ab. Nach Gleichung 2.26 nimmt die Diffusivität mit der Partikelgröße ab, d. h. für wachsende Partikel sinkt die effektive Diffusivität.

Mit wachsender LEWIS-Zahl

- nimmt der Wertebereich der Koagulationswahrscheinlichkeit p_{coa} zu, in dem das System nicht rein quasistationär ist,
- vergrößert sich der Bereich der Sinkgeschwindigkeit, in dem das System nicht quasistationär ist und
- steigt die effektive LEWIS-Zahl, d. h. die effektive Diffusivität der Partikel nimmt ab.

4.10.5 Abhängigkeit von der Dichtezahl

Mit wachsender Dichtezahl Rp , also dem Verhältnis zwischen Konzentrations- und Temperatur-RAYLEIGH-Zahl,

- verringert sich der Bereich der Sinkgeschwindigkeit, in dem das System quasistationär ist,
- vergrößert sich der Bereich der Sinkgeschwindigkeit, in dem das System ein episodisches Systemverhalten zeigen kann, sowie
- dehnen sich die Bereiche der Koagulations- und Breakup-Wahrscheinlichkeiten aus, in denen das System ein chaotisches Systemverhalten zeigen kann.

5 Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Arbeit zusammengefaßt, geophysikalische Anwendungsmöglichkeiten erläutert, die Schwierigkeiten ihrer Verbindung mit einer systemtheoretischen Untersuchung aufgezeigt sowie ein Ausblick auf sinnvoll erscheinende Ansätze zur Fortführung dieser Thematik gegeben.

5.1 Zusammenfassung

Ausgangspunkt dieser Arbeit war die Beobachtung, daß im Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion die langfristig ausgebildeten Systemzustände maßgeblich durch die gravitative Sinkgeschwindigkeit der suspendierten Partikel bestimmt werden. Da diese nach STOKES ein direktes Maß für die mittlere Größe der Partikel ist, erweist sich die betrachtete Partikelgröße als kritischer Parameter des TDSC-Modells in Hinblick auf die Ausbildung der Systemzustände.

Das vorrangige Ziel dieser Arbeit bestand daher darin, den Einfluß der Partikelgröße auf die Ausbildung der Systemzustände im Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion eingehender zu untersuchen. Die dazu verwendete vereinfachte mathematische Beschreibung des hydrodynamischen Problems wurde auf mehrere Partikelgrößenklassen erweitert und um Koagulations- und Breakup-Prozesse ergänzt. Damit war es möglich, nicht nur verschiedene Partikelgrößen, sondern auch die Veränderung ihrer Verteilung als dynamische Komponente in dieses Modell zu integrieren (siehe Seiten 25–31).

Die im TDSC-Modell üblicherweise für die oberen und unteren Gebietsränder verwendeten DIRICHLET-Randwertbedingungen entsprechen einem Temperatur- und Konzentrationsfluß durch das Modellierungsgebiet (siehe Seiten 22–25). Leichte Partikel steigen in dieses auf, schwere Partikel verlassen es über den unteren Rand. Geophysikalische Vorstellungen hinter dieser Annahme sind einerseits der Wärmeenergie-transport vom Erdkern zur Erdkruste und andererseits die Ankopplung der Konvektionszelle an ein unter ihr liegendes Magmenreservoir.

Der zuerst verfolgte Ansatz, das TDSC-Modell unter Beibehaltung dieser Randwertbedingungen lediglich um einen Koagulationsprozeß zu erweitern, erwies sich als nicht zielführend. Es scheint nicht möglich zu sein, ohne einen zur Koagulation antagonistischen Prozeß, nur durch konsistente Verallgemeinerung der Konzentrationsrandwertbedingungen, den gewonnenen Freiheitsgrad zu erhalten (siehe Seite 31 f.). Da der Koagulationsprozeß nur zu einem Wachstum der Partikel führen kann, Konzentrationsquellen und -senken im Modellierungsgebiet jedoch auszuschließen sind, hätte über die Konzentrationsrandwertbedingungen ein Prozeß realisiert werden müssen, der in dem Modellierungsgebiet zu einer Erhöhung der Anzahl kleinerer Partikel führt. Alle versuchsweise vorgenommenen Modifikationen der Konzentrationsrandwertbedingungen zur Berücksichtigung der verschiedenen Partikelgrößenklassen zogen jedoch eine so starke Einschränkung der Entwicklungsmöglichkeiten des Gesamtsystems nach sich, daß das Modell langfristig in einen Ein-Klassen-Fall überführt wurde (siehe Seiten 71–74).

Ursache dieser Systemreaktion ist, daß entweder die durch Koagulation gewachsenen Partikel nicht in dem erforderlichen Maße das Gebiet über die untere Randwertbedingung verlassen können oder die Koagulationsrate so gering gewählt werden muß, daß kaum größere Partikel entstehen können. In beiden Fällen dominiert dann letztlich eine Partikelgrößenklasse das

Konvektionssystem. Deswegen wurde das Modellierungsgebiet gegenüber der Umgebung hinsichtlich aller Materieströme abgeschottet und über einen Breakup-Prozess die Möglichkeit des Zerfalls größerer Partikel integriert. Für verschiedene Breakup-Mechanismen (siehe Seite 74f.) konnten dann in Parameterstudien diejenigen Bereiche der Koagulations- und Breakup-Wahrscheinlichkeiten umrissen werden, in denen das Verhalten des Gesamtsystems nicht durch eine der beiden Wahrscheinlichkeiten dominiert wird. Dabei zeigte sich, daß die Annahme einer exponentiellen Abhängigkeit der Breakup-Wahrscheinlichkeit von der Partikelgröße dem Konvektionssystem die größten Freiräume zur Ausbildung komplexer Systemzustände bietet (siehe Seiten 75–79).

In den dominanzfreien Parameterbereichen wurde dann, aufbauend auf Studien, die die Sedimentationsgeschwindigkeit als kritischen Parameter für das Einsetzen von Konvektion in Fluiden herausgearbeitet haben, systematisch der Einfluß von LEWIS-Zahl, Dichtezahl und Absinkgeschwindigkeit auf die Konvektion untersucht. Die Ergebnisse der numerischen Simulationsexperimente zeigen die Möglichkeit des Auftretens eines bislang unbekanntes Systemzustandes in dem um Koagulations- und Breakup-Prozesse erweiterten Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion. Im Gegensatz zu den bereits aus dem TDSC-Modell bekannten pulsatorischen Zuständen, bei denen eine fortwährende Konvektion vorliegt, deren Intensität jedoch kurzfristig stark ansteigt, sind die neuentdeckten episodischen Zustände durch das zwischenzeitlich vollständige Absterben der Konvektion gekennzeichnet (siehe Seite 86 ff.).

Neben dem Auftreten eines neuen Zustands ließ sich auch der Einfluß der Koagulations- und Breakup-Prozesse auf die Entstehung bereits bekannter beobachten. So ermöglichen diese beispielsweise durch den internen Systemumbau die Ausbildung eines quasistationären Systemzustandes nach einer langen konvektionslosen Phase (siehe Seite 89 ff.).

Während im TDSC-Modell alle Partikel dieselbe Größe aufweisen, kann das erweiterte Modell Partikel mit stark unterschiedlicher Größe beschreiben. Ausgehend von einer Ausgangsverteilung verschmiert diese und verschiebt sich in vielen Fällen, bleibt aber in der weitüberwiegenden Anzahl der Fälle als solche erhalten, d. h. das System entwickelt eine bevorzugte Partikelgröße. Unter bestimmten Umständen können sich aus der (unimodal) vorgegebenen Ausgangsverteilung jedoch auch zeitlich stabile bimodale Partikelgrößenverteilungen entwickeln. In diesen Fällen weist das Konvektionssystem dann zwei bevorzugte Partikelgrößen auf (siehe Seite 92 ff.).

Der in dem erweiterten Modell beobachtete episodische Systemzustand läßt sich in ein Schema der prinzipiellen Abhängigkeit des Systemzustandes von der Sedimentationsgeschwindigkeit eingliedern, das in seiner Struktur als Verfeinerung desjenigen der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion aufgefaßt werden kann (siehe Seiten 94–99).

5.2 Geophysikalische Anwendungsmöglichkeiten

Das Modell der thermo-diffusiv-sedimentären Konvektion beschreibt die kriechende Strömung eines Suspensats aus einem Fluid mit festen Partikeln. Nach RITTMANN [1981] lassen sich Magmen als Gesteinsschmelzen, die aus leichtflüchtigen Elementen (wie Wasser, Gase, Fluoride) und bereits gebildeten Kristallen bestehen, auffassen. Angewendet auf eine an ein Magmenreservoir angrenzende Konvektionszelle, die von Konzentrations- und Wärmeenergieströmen durchzogen wird, läßt sich das TDSC-Modell zur Simulation von Magmenkammern verwenden. Vorrangiges Ziel dabei ist es, neben einem Verständnis der Strömungs- und Schichtungsmuster Einblicke in die für die Erdentwicklung wichtigen Prozesse der gravitativen Ausdifferenzierung und Auskühlung zu gewinnen.

Gängige Erweiterungen des Modells der thermo-diffusiven Konvektion versuchen beispiels-

weise die Temperaturabhängigkeit der Viskosität zu berücksichtigen. Unsere Arbeit bietet hingegen selbst einen eigenständigen Ansatz zur Beschreibung der Viskosität, indem diese als Maß für den Grad der Aufschmelzung größerer Konglomerate aus festen Partikeln aufgefaßt werden kann. Damit ist eine natürliche Brücke zwischen der thermischen und einer eher mineralogisch-chemischen Beschreibung aufgezeigt.

Selbstverständlich bleibt die Anwendbarkeit theoretischer Modelle auf geophysikalische Systeme, wie sie beispielsweise Magmenkammern oder Mantelkonvektionsprozesse darstellen, sehr begrenzt, da diese Modelle jeweils nur einen Bruchteil der vielfältigen Abhängigkeiten berücksichtigen können. Gerade in ihrer relativen Einfachheit liegt aber auch der Nutzen dieser Modelle bei der Untersuchung geophysikalischer Fragestellungen begründet.

Als eine solche darf die Frage nach der Bevorzugung einer bestimmten Partikelgröße innerhalb von Konvektionssystemen aufgefaßt werden. Unsere Untersuchungen haben gezeigt, daß die Partikelgrößenverteilung auf das Konvektionsgeschehen nur in begrenztem Maße einwirkt. In den Grenzfällen einseitig kleiner oder großer Partikel verhält sich das Konvektionssystem stets quasistationär, d. h. es stellt sich relativ schnell ein Gleichgewicht zwischen Koagulations- und Breakup-Prozessen ein. Gemessen am gesamten Parameterraum, konnte nur in einem relativ schmalen Fenster ein neuartiges Verhalten beobachtet werden, das ursächlich auf die Möglichkeit des Konvektionssystems, die Partikelgröße an die physikalischen Rahmenbedingungen anzupassen, zurückzuführen ist. Bimodale Partikelgrößenspektren ließen sich nachweisen, verhielten sich jedoch nicht auffällig.

Eine weitere geophysikalische Anwendungsmöglichkeit liegt in der Betrachtung und Auswertung der Strukturbildungsprozesse. Der nachgewiesene episodische Zustand ermöglicht es, dem bisherigen Verständnis des Schichtbildungsprozesses in erstarrten Magmenkammern eine weitere Facette hinzuzufügen. Selbst in konvektiv lange Zeit nicht auffälligen Systemen kann demnach durch Kristallisations- und Aufschmelzungsprozesse ein Umbau des gesamten Konvektionssystems eingeleitet werden. Dabei werden große Teile der zuvor sedimentativ abgelagerten Materieschichten aufgewirbelt und erneut vermischt. Die Abnahme der Wärmetransporteffektivität episodischer Ereignisse mit der Zeit zeigt somit auf, daß nur ein Teil der sedimentierten Schichten erneut in die Konvektionszelle eintritt.

Beispielsweise läßt sich aus der jeweiligen Schichtmächtigkeit auf die Zeitdauer der Ablagerung schließen, wenn die durchschnittliche Sedimentationsrate abgeschätzt werden kann. Die Abfolge der Schichten selbst gibt Aufschluß über die Prozesse, die in dem abscheidenden System stattgefunden haben könnten. Die Zusammensetzung der einzelnen Schichten ermöglicht schließlich Rückschlüsse auf die physikalischen Bedingungen, unter denen diese Prozesse abliefen.

5.3 Ausblick

Wie nahezu alle Arbeiten, so hinterläßt auch diese einige offene Fragen, die im Rahmen dieser Untersuchungen nicht hinreichend beantwortet werden konnten. So wäre es beispielsweise interessant zu klären, welcher Zustand des Konvektionssystems zwischen der als episodisch und jener als periodisch charakterisierten Phase vorliegt. Oder welche Bedeutung der als langfristigen Grenzwert beobachteten NUSSELT-Zahl von ungefähr 2,9 zukommt, die unabhängig von allen Parametern zu sein scheint.

Gilt es jedoch, den Blick zu weiten, so sollte festgehalten werden, daß im Rahmen dieser Arbeit die Wechselwirkungen zwischen der Partikelgrößenverteilung und den Feldgrößen des Konvektionssystems nur unvollständig erfaßt werden konnten. So wurde weder beim Koagulations- noch beim Breakup-Prozeß dessen direkte Rückwirkung über die Viskosität auf das Fluid be-

rücksichtigt. Auch übt das Fließfeld bisher keinen Einfluß auf die Geschwindigkeit und Charakteristik des Breakup-Prozesses aus. Die höhere kinetische Energie schneller fließender Partikel könnte so zwar einerseits die Bildung von Konglomeraten begünstigen, andererseits diese, sofern sie nicht eine stabile Bindung eingegangen sind, auch wieder aufbrechen.

Dieses ließe sich auf verschiedenen Wegen ausgehend von unterschiedlichen physikalischen Herangehensweisen realisieren. Beispielsweise könnte anhand der Energiebilanz die Veränderung der lokalen Partikelgrößenverteilung Einfluß auf die Temperatur des Fluids innerhalb der betrachteten Gitterzelle nehmen. Die zum Aufbrechen der Partikel benötigte oder bei deren Verschmelzung freigesetzte Energie könnte dem Temperaturfeld entnommen oder an dieses zurückgegeben werden. Auch wäre eine Ankopplung anhand der Materialeigenschaften möglich, indem die Fließeigenschaften des Fluids in Abhängigkeit zur Zusammensetzung der Konzentration (d. h. Partikelgrößenverteilung) betrachtet werden.

Als physikalischer Mechanismus böte sich in all diesen Fällen die Rückkopplung über die Viskosität η an, die dazu lokal variabel und temperatur- bzw. partikelgrößenabhängig gemacht werden müßte. Ersteres wurde beispielsweise bereits von LEU [1997] für das reine TDSC-Modell untersucht.

Eine Verbesserung des Systemverständnisses ließe sich möglicherweise auch dadurch erreichen, daß die Wirkungsweisen von Breakup und Koagulation räumlich untersucht werden. So ist gerade unter Beachtung der größenabhängigen Diffusivitäten und Sedimentationsgeschwindigkeiten der Partikel nicht auszuschließen, daß Koagulation und Breakup räumlich getrennt ablaufende Prozesse sind. Die daraus resultierenden lokalen Änderungen der Partikelgrößenzusammensetzung konnten zwar beobachtet, aber nur auf der Basis von Mittelwerten erfaßt werden. Sie zeigten keine signifikanten Abweichungen gegenüber den Partikelströmen. Zur eingehenderen Untersuchung wären dann jedoch auch geeignete Visualisierungstechniken, die es dem Untersuchenden gestatten, die Partikelgrößenverteilung jeder einzelnen Zelle des zweidimensionalen Simulationsgebietes in geeigneter Weise zu analysieren, zu entwickeln.

Gelänge es, neben der detaillierteren Modellierung physikalischer Prozesse auch die Betrachtung chemischer Prozesse zu integrieren, wie dies beispielsweise von WALZER und HENDEL [1997] unternommen wurde, so ließe sich das Verständnis der Strukturbildungsprozesse weiter vertiefen.

Literaturverzeichnis

- [Bastian 1996] BASTIAN, PETER (1996): *Parallele adaptive Mehrgitterverfahren*, Stuttgart: B. G. Teubner (Teubner Skripten zur Numerik).
- [Batchelor/van Rensburg 1986] BATCHELOR, G. K. und R. W. JANSE VAN RENSBURG (1986): „Structure formation in bidisperse sedimentation“, *Journal of Fluid Mechanics*, 166, S. 379–407.
- [Berckhemer 1990] BERCKHEMER, H. (1990): *Grundlagen der Geophysik*, Darmstadt: Wissenschaftliche Buchgesellschaft.
- [Berry/Reinhardt 1974] BERRY, E. X. und R. C. REINHARDT (1974): „An analysis of cloud drop growth by collection“, Teile 1 bis 4, *Journal of Atmosphere Science*, 31, S. 1814–1834 und 2118–2135.
- [Blankenbach et al. 1989] BLANKENBACH, B. und F. BUSSE, U. CHRISTENSEN, L. CSEREPES, U. HANSEN, H. HARDER, G. JARVIS, M. KOCH, G. MARQUARDT, D. MOORE, P. L. OLSON, H. SCHMELING, T. SCHNAUBELT (1989): „A benchmark comparison for mantle convection codes“, *Geophysical Journal International*, Volume 98, No. 1, S. 23–38.
- [Bogdassarov/Fradkov 1993] BOGDASSAROV, N. SH. und ANATOLY S. FRADKOV (1993): „Evolution of double diffusive convection in a felsic magma chamber“, *Journal of Petrology and Geothermal Research*, 54, S. 291–308.
- [Boris/Book 1973] BORIS, J. P. und D. L. BOOK (1973): „Flux-Corrected-Transport I. SHASTA. A Fluid Transport Algorithm that works“, *Journal of Computational Physics*, 11, S. 38–69.
- [Brandt 1973] BRANDT, ACHI (1973): „Multi-level adaptive technique (MLAT) for fast numerical solution to boundary value problems“, *Lecture Notes in Physics*, 18, S. 82–89.
- [Brandt 1984] BRANDT, ACHI (1984): *Multigrid Techniques*, St. Augustin: GMD (Arbeitspapiere der GMD; 85).
- [Briggs 1986] BRIGGS, WILLIAM L. (1986): *A Multigrid Tutorial*.
- [Bronstein/Semendjajew 1991] BRONSTEIN, I. N. und K. A. SEMENDJAJEW (1991): *Taschenbuch der Mathematik. Ergänzende Kapitel*, herausgegeben von G. Grosche, V. Ziegler und D. Ziegler, 6. Auflage, Thun und Frankfurt am Main: Verlag Harri Deutsch.

- [Christensen 1984] CHRISTENSEN, U. (1984): „Convection with pressure and temperature dependent Non-Newtonian Rheology“, *Geophysical Journal of Radio Astronomical Society*, 77, S. 343–384.
- [Courant/Hilbert 1968] COURANT, R. und D. HILBERT (1968): *Methoden der mathematischen Physik*, Band 2, Heidelberg u. a.: Springer (Heidelberger Taschenbücher; 31).
- [Davis/Acrivos 1985] DAVIS, ROBERT J. und ANDREAS ACRIVOS (1985): „Sedimentation of noncolloidal particles at low Reynolds number“, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 17, S. 91–118.
- [Dingwell et al. 1993] DINGWELL, D. B. und N. S. BAGDASSAVOR, G. Y. BUSSOD, S. L. WEBB (1993): „Magma Rheology“, in: *Mineral. Assoc. Canada Short Course Handbook on Experiments at high Pressure and Applications to the Earth's Mantle*, herausgegeben von R. W. Luth, 21, S. 131–196.
- [Einstein 1906] EINSTEIN, ALBERT (1906): „Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen“, *Annalen der Physik*, 19, S. 289.
- [Fradkov et al. 1993a] FRADKOV, ANATOLY S. und GÜNTER NAUHEIMER, HORST J. NEUGEBAUER (1993): „Some Results of Numerical Simulations of Two-Phase Convection“, *Annales Geophysicae*, Supplement 1 to Volume 11.
- [Fradkov 1984] FRADKOV, ANATOLY S. (1984): „On the influence of a sinking lithosphere on the convection in the upper mantle“, maschinenschriftlich, VINITI, Spalten 7606–84.
- [Fradkov et al. 1993b] FRADKOV, ANATOLY S. und GÜNTER NAUHEIMER, HORST J. NEUGEBAUER (1993): *A weak non-linear thermo-diffusive-sedimentary convection system* [unveröffentlicht].
- [Fradkov et al. 1995] FRADKOV, ANATOLY S. und GÜNTER NAUHEIMER, HORST J. NEUGEBAUER (1995): „Volume Separation in Double Diffusive Convection Systems“, in: Brandt, A. (Herausgeber), *Double Diffusive Convection*, American Geophysical Union, 1995.
- [Fulton et al. 1986] FULTON, SCOTT R. und PAUL E. CIESIELSKI, WAYNE H. SCHUBERT (1986): „Multigrid methods for elliptic problems: a review“, *Monthly Weather Review*, Volume 114, No. 5 (May 1986), S. 943–959.
- [Gebhart et al. 1988] GEBHART, BENJAMIN und YOGESH JALURIA, ROOP L. MAHAJAN, BAHGAT SAMMAKIA (1988): *Buoyancy-induced flows and transport*, Reference Edition, Washington/New York/London: Hemisphere Publishing Corporation.
- [Griebel et al. 1995] GRIEBEL, MICHAEL und TH. DORNSEIFER, T. NEUNHOEFFER (1995): *Numerische Simulationen in der Strömungsmechanik*, Vieweg.
- [Hackbusch 1978] HACKBUSCH, W. (1978): „On the mutigrid method applied to difference equations“, *Computing*, 20.

-
- [Hackbusch 1985] HACKBUSCH, W. (1985): *Multi-Grid Methods and Applications*, Heidelberg u. a.: Springer.
- [Hackbusch 1991] HACKBUSCH, W. (1991): *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*, Stuttgart: B. G. Teubner (Teubner Studienbücher Mathematik).
- [Hämmerlin/Hoffmann 1991] HÄMMERLIN, GÜNTHER und KARL-HEINZ HOFFMANN (1991): „Numerische Mathematik“, 2. Auflage, Heidelberg u. a.: Springer.
- [Hansen/Yuen 1987] HANSEN, U. und D. A. YUEN (1987): „Evolutionary structures in double-diffusive convection in magma chambers“, *Geophysical Research Letters*, 14, S. 1099–1102.
- [Hestenes/Stiefel 1952] HESTENES, M. R. und E. STIEFEL (1952): „Methods of conjugate gradients for solving linear systems“, *National Bur. Standards, Journal of Research*, 49.
- [Ishii 1975] ISHII, M. (1975): *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*, Paris: Eyrolles.
- [Issig 1997] ISSIG, CHRISTIAN (1997): *Ein spektrales Wolkenmodell mit integriertem Strahlungsübertragungsmodell zur Unterstützung von Niederschlagsalgorithmen aus Fernerkundungsdaten*, Bonn: Meteorologisches Institut der Rheinischen Friedrich-Wilhelms Universität Bonn [Dissertation].
- [Joppich/Mijalković 1993] JOPPICH, G. T. und S. MIJALKOVIĆ (1993): *Multigrid Methods for Process Simulation*, Computational Microelectronics, Heidelberg u. a.: Springer.
- [Köhler 1998] KÖHLER, JENS (1998): *Numerische Simulation des Einflusses einer orts- und druckabhängigen Permeabilität auf thermische Konvektion in der Erdkruste*, Bonn: Lehrstuhl für Geodynamik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms Universität Bonn [Dissertation].
- [Koyagushi et al. 1990] KOYAGUSHI, T. und M. A. HALLWORTH, H. E. HUPPERT, R. S. I. SPARKS (1990): „Sedimentation of particles in convecting fluids“, *Nature*, 343, S. 447–450.
- [Koyagushi et al. 1993] KOYAGUSHI, T. und M. A. HALLWORTH, H. E. HUPPERT (1993): „An experimental study on the effects of phenocrysts on convection in magmas“, *Journal of Volcanology and Geothermal Research*, 55, S. 15–32.
- [Krieger 1972] KRIEGER, I. M. (1972), *Advances in Colloid Interface Science*, 3, S. 111.
- [Kuchling 1989] KUCHLING, HORST (1989): *Taschenbuch der Physik*, 12. Auflage, Thun, Frankfurt am Main: Verlag Harri Deutsch.

- [Landau/Lifschitz 1991] LANDAU, L. D. und E. M. LIFSCHITZ (1991): *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Band VI: *Hydrodynamik*, 5., überarbeitete Auflage, Akademie Verlag.
- [Lebedev/Khitarov 1979] LEBEDEV, E. B. und N. I. KHITAROV (1979): *Physical Properties of Magmatic Melts*, Moskau: Nauka.
- [Lemke 1996] LEMKE, MAX (1996): *Multilevelverfahren mit selbstadaptiven Gitterverfeinerungen für Parallelrechner mit verteiltem Speicher*, St. Augustin: GMD (GMD-Bericht; 227).
- [Lennie et al. 1988] LENNIE, T. B. und D. P. MCKENZIE, D. R. MOORE, N. O. WEISS (1988): „The breakdown of steady convection“, *Journal of Fluid Mechanics*, 188, S. 47–85.
- [Leu 1994] LEU, MARC (1994): *Numerische Simulation thermodiffusiver sedimentärer Konvektion unter variabler Viskositätsverteilung und mögliche Anwendungen auf geophysikalisch relevante Systeme*, Bonn: Lehrstuhl für Geodynamik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms Universität Bonn [Diplomarbeit].
- [Leu 1997] LEU, MARC (1997): *Spatio-temporal pattern formation in nonlinear geophysical systems induced by sedimentary convection*, Bonner Geowissenschaftliche Schriften, Band 23, Wiehl: Martina Galunder-Verlag [Dissertation].
- [McKenzie et al. 1974] MCKENZIE, D. P. und J. M. ROBERTS, N. O. WEISS (1974): „Convection in the earth’s mantle: towards a numerical simulation“, *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 62, Part 3, S. 465–538.
- [Melosh 1990] MELOSH, H. J. (1990): „Giant impacts and the thermal state of the early earth“, in: *Origin of the Earth*, Oxford/New York, S. 69–83.
- [Michlin 1980] MICHLIN, S. G. (1990): *Partielle Differentialgleichungen in der mathematischen Physik*, Thun, Frankfurt am Main: Verlag Harri Deutsch.
- [Nauheimer 1993] NAUHEIMER, GÜNTER (1993): *Untersuchungen des Modelles der Thermo-Diffusiven-Sedimentären-Konvektion im schwach nichtlinearen Bereich und mögliche Anwendungen auf Konvektion in Magmakammern*, Bonn: Lehrstuhl für Geodynamik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms Universität Bonn [Diplomarbeit].
- [Nauheimer 1997] NAUHEIMER, GÜNTER (1997): *Erdmantelkonvektion unter Berücksichtigung eines Stofftransportes vom Erdmantel in den Erdkern*, Bonner Geowissenschaftliche Schriften, Band 26, Wiehl: Martina Galunder-Verlag [Dissertation].
- [Oran/Boris 1987] ORAN, ELAINE S. und J. P. BORIS (1987): *Numerical Solution of Reactive Flow*, Elsevier.
- [Oertel/Delfs 1996] OERTEL JR., HERBERT und JAN DELFS (1996): *Strömungsmechanische Instabilitäten*, Berlin u. a.: Springer.

- [Press et al. 1995] PRESS, WILLIAM H. und SAUL A. TEUKOLSKY, WILLIAM T. VETTERLING, BRAIN P. FLANNERY (1995): *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, 2. Auflage, Cambridge u. a.: Cambridge University Press.
- [Roach 1982] ROACH, P. J. (1982): *Computational Fluid Dynamics*, Albuquerque (New Mexico): Hermosa.
- [Samarsky/Nikolaev 1978] SAMARSKY, A. N. und N. A. NIKOLAEV (1978): *Methods of Grid equation solution*, Moskau: Nauka [in Russisch].
- [Schwarz 1991] SCHWARZ, HANS RUDOLF (1991): *Methode der finiten Elemente. Eine Einführung unter besonderer Berücksichtigung der Rechenpraxis*, 3., neubearbeitete Auflage, Stuttgart: B. G. Teubner (Teubner Studienbücher).
- [Schwarz 1997] SCHWARZ, HANS RUDOLF (1997): *Numerische Mathematik*, 4., überarbeitete und erweiterte Auflage, Stuttgart: B. G. Teubner.
- [Shiino 1983] SHIINO, J. (1983): „Evolution of raindrops in an axisymmetric cumulus model, Part 1: Comparison of the parameterized with non-parameterized microphysics“, *Journal of the Meteorology Society of Japan*, 61, S. 629–655.
- [Stoer/Bulirsch 1990] STOER, JOSEF und ROLAND BULIRSCH (1990): *Numerische Mathematik*, 3., verbesserte Auflage, Berlin u. a.: Springer-Verlag.
- [Stüben/Trottenberg 1984] STÜBEN, KLAUS und ULRICH TROTTEBERG (1984): *Multigrid Methods: Fundamental Algorithms, Model Problem Analysis and Applications*, St. Augustin: GMD (Arbeitspapiere der GMD; 96).
- [Travis et al. 1990] TRAVIS, B. J. und C. ANDERSON, J. BAUMGARDNER, C. W. GABLE, B. H. HAGER, R. J. O’CONNELL, P. OLSON, A. RAEFSKY, G. SCHUBERT (1990): „A benchmark comparison of numerical methods for infinite Prandtl number thermal convection in two-dimensional Cartesian geometry“, *Geophys. Astrophys. Fluid Dynamics*, 55, S. 137–160.
- [Trottenberg/Oosterlee 1996] TROTTEBERG, ULRICH und KEES OOSTERLEE (1996): *Parallel Adaptive Multigrid — An Elementary Introduction*, St. Augustin: GMD (Arbeitspapiere der GMD; 1026).
- [Trottenberg et al. 2001] TROTTEBERG, ULRICH und CORNELIS W. OOSTERLEE, ANTON SCHÜLLER (2001): *Multigrid*, London u. a.: Academic Press.
- [Trubitsyn/Kharybin 1987] TRUBITSYN, V. P. und E. V. KHARYBIN (1987): „Convective instability of the sedimentation state in the mantle“, *Physics on the solid earth (Fizika zemli)*, 8 (1987), S. 21–30 [in Russisch].

- [Trubitsyn/Kharybin 1988] TRUBITSYN, V. P. und E. V. KHARYBIN (1988): „Hydrodynamical model of the differentiation process in the Earth’s interior“, *Physics on the solid earth (Fizika zemli)*, 4 (1988), S. 83–86 [in Russisch].
- [Trubitsyn/Kharybin 1991] TRUBITSYN, V. P. und E. V. KHARYBIN (1991): „Thermoconvective instability of the two components viscous fluid“, *Physics on the solid earth (Fizika zemli)*, 2 (1991), S. 3–17 [in Russisch].
- [Turcotte/Schubert 1982] TURCOTTE, DONALD L. und GERALD SCHUBERT (1982): *Geodynamics. Applications of Continuum Physics to Geological Problems*, 12. Auflage, New York: John Wiley & Sons.
- [Umlauf 1998] UMLAUF, GÜNTER (1998): *Numerische Simulation der dreidimensionalen thermodiffusiven-sedimentären Konvektion mit einem parallelen Mehrgitteralgorithmus*, Bonn: Lehrstuhl für Geodynamik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms Universität Bonn [Dissertation].
- [Velarde/Normand 1980] VELARDE, MANUEL G. und CHRISTIANE NORMAND (1980): „Konvektion“, *Spektrum der Wissenschaft*, September 1980.
- [Washio/Oosterlee 1996] WASHIO, T. und CORNELIS W. OOSTERLEE (1996): *An evaluation of parallel multigrid as a solver and as a preconditioner for singularly perturbed problems, Part II: Flexible 2D and 3D multiple semicoarsening*, St. Augustin: GMD (Arbeitspapiere der GMD; 1012).
- [Walzer/Hendel 1997] WALZER, UWE und ROLAND HENDEL (1997): „Time-dependent thermal convection, mantle differentiation and continental-crust growth“, *Geophysical Journal International*, 130 S. 303–325.
- [Wendt 1992] WENDT, J. F. (1992): *Computational Fluid Dynamics*, New York u. a.: Springer Verlag.
- [Werner/Arndt 1986] WERNER, HELMUT und HERBERT ARNDT (1986): *Gewöhnliche Differentialgleichungen: eine Einführung in Theorie und Praxis*, Berlin u. a.: Springer (Hochschultext).
- [Wesseling 1992] WESSELING, P. (1992): *An Introduction to Multigrid Methods*, Chichester: John Wiley & Sons.
- [Zalesak 1979] ZALESKAK, S. T. (1979): „Fully multidimensional Flux-Corrected Transport Algorithms for Fluids“, *Journal of Computational Physics*, 31, S. 335–362.

Danksagung

Diese Schrift soll nicht beendet werden, ohne daß ich einige Worte des Dankes an alle diejenigen richte, die mir ihre Anfertigung erst ermöglichten.

Vor allem möchte ich meinen Eltern danken, die mich auf meinem bisherigen Lebensweg, stets Unterstützung gewährend und Verständnis zeigend, begleitet haben. Ihrer Ermunterung ist es zu verdanken, daß ich einen Weg gehen konnte, den zu beschreiten nicht selbstverständlich ist.

Diese Arbeit entstand auf Anregung und unter der Leitung von Prof. Dr. Horst J. Neugebauer. Bei Ihm möchte ich mich an dieser Stelle für die ausdauernde Unterstützung, große Gesprächsbereitschaft und wohlwollende Motivation herzlich bedanken. Dr. Stefan Hergarten gebührt großer Dank für seine von umfangreicher Kompetenz zeugende Betreuung und das freundschaftliche persönliche Verhältnis.

Herrn Prof. Dr. Ewald Paul gilt mein besonderer Dank für seine Bereitschaft, diese Arbeit als Korreferent zu betreuen und für die Unterstützung, die er mir durch seine zeitliche Flexibilität gewährte.

Darüber hinaus richtet sich mein Dank an diejenigen Mitglieder der Arbeitsgruppe des Lehrstuhls für Geodynamik, deren kameradschaftlicher Umgang eine Atmosphäre entspannter Kreativität hervorbrachte. Besondere Erwähnung sollen dabei diejenigen finden, mit denen ich intensiver zusammengearbeitet habe: Dr. Markus Mendel, der mir ein geduldiger persönlicher Ratgeber und wahrer Freund geworden ist; Dr. Elke Himmerkus, deren Lebendigkeit und Durchsetzungskraft mir zum Vorbilde gereichen sollten; Dr. Marc Leu, der mich in meine Arbeit einwies, bei dieser unterstützte und durch seine Hilfsbereitschaft erfreute.

Die Zeit, in der diese Arbeit entstanden ist, war nicht immer einfach. Meinem langjährigen Kameraden Dr. Jörg Sanner danke ich nicht nur für sein Engagement bei der Korrektur der Dissertation, sondern auch für die stete Bereitschaft, mir in für mich wichtigen Situationen zuzuhören. Zuversicht, Freude und Wärme brachte Liliya Netskar in mein Leben, der ich dafür in großer Dankbarkeit verbunden bin.

Abschließend danke ich allen, die mir während meines bisherigen Lebens durch Rat und Tat geholfen haben, Schutz boten und wegweisend waren. Dabei denke ich ganz besonders an diejenigen, die sich viel Zeit zum persönlichen Gespräch mit mir nahmen und keine Diskussion scheuten, um mich in meinem Reifungsprozeß durch eine Erweiterung meines Horizontes weiterzubringen.

Bonn, im Juli 2003

Michael Pullmann