

KfK 5228
November 1994

Direkte Simulation turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium

M. Wörner
Institut für Reaktorsicherheit
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Reaktorsicherheit

Projekt Nukleare Sicherheitsforschung

KfK 5228

**DIREKTE SIMULATION TURBULENTER
RAYLEIGH-BÉNARD-KONVEKTION
IN FLÜSSIGEM NATRIUM**

Martin Wörner

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

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die direkte numerische Simulation turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium. Ziel der Untersuchungen ist es, sowohl einen Beitrag zur Aufklärung der Strukturen und Mechanismen der Konvektion zu leisten als auch statistische Eigenschaften der Turbulenz in Naturkonvektion von flüssigen Metallen aufzuzeigen.

Den Ausgangspunkt der Untersuchungen bildet das auf einem Finite Volumen-Verfahren basierende Rechenprogramm TURBIT. Dieses wird methodisch um ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung erweitert. Durch die implizite Behandlung der thermischen Diffusion gelingt es, die Rechenzeit des Programms im Vergleich zur expliziten Ausgangsversion für Naturkonvektion in flüssigen Metallen um mehr als eine Größenordnung zu verringern. Dadurch werden die beabsichtigten Simulationen erst ermöglicht.

Die numerischen Ergebnisse für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium mit der Prandtl-Zahl $Pr = 0.006$ umfassen die Rayleigh-Zahlen $Ra = 3\,000$, $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$.

Die vorherrschende Konvektionsform bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ ist die Trägheitskonvektion. Diese äußert sich in Form von großräumigen zweidimensionalen Rollen, die wie ein Starrkörper rotieren. Entsprechende Strukturen sind über kürzere Zeiträume und in bestimmten räumlichen Bereichen auch in den Simulationen für $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ zu beobachten. Das Auftreten dieser zweidimensionalen Konvektionsform in dreidimensionaler, zeitabhängiger und turbulenter Konvektion wird durch die unterschiedliche Bedeutung der nichtlinearen Terme in der Impuls- und der Energiegleichung und deren Kopplung über den Auftriebs- und den konvektiven Term erklärt.

Mit dem Ziel statistische Turbulenzmodelle für Naturkonvektion in Flüssigmetallen weiterzuentwickeln und zu validieren, werden aus der numerischen Datenbasis Bilanzen für die kinetische Turbulenzenergie, den turbulenten Wärmestrom und die Temperaturschwankungsquadrate ausgewertet. Für verschiedene Terme in diesen Gleichungen werden übliche Schließungsansätze analysiert und Modellkoeffizienten bestimmt. Ergebnisse für Natrium werden solchen für Luft gegenübergestellt, und der Einfluß der Prandtl-Zahl wird diskutiert. Die Analysen zeigen, daß der diffusive Transport turbulenter Erhaltungsgrößen für Naturkonvektion von großer Bedeutung ist. Wesentlich ist insbesondere die Wirkung turbulenter Druckfluktuationen, die in existierenden Modellen nicht oder nur unzureichend berücksichtigt wird.

Direct simulation of turbulent Rayleigh-Bénard convection in liquid sodium

Abstract

The topic of the present thesis is the direct numerical simulation of turbulent Rayleigh-Bénard convection in liquid sodium. The numerical results are analysed to investigate both the structures and mechanisms of convection and the statistical features of turbulence in natural convection of liquid metals.

The simulations are performed with the finite volume code TURBIT which is extended by a semi-implicit time integration scheme for the energy equation. Due to the implicit treatment of thermal diffusion the computational time for simulation of natural convection in liquid metals is reduced by about one order of magnitude, as compared to the original fully explicit code version. It is only by this extension of the code capabilities that the simulations, presented in this report, could be performed.

Results for Rayleigh-Bénard convection in liquid sodium with Prandtl number $Pr = 0.006$ are given for four different Rayleigh numbers: $Ra = 3\,000$, $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$, and $Ra = 24\,000$.

At the Rayleigh number $Ra = 3\,000$ the inertial convection is identified. It is characterized by large two-dimensional vortices, which rotate like a solid body. These vortices are also observed in the simulations for $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$ and $Ra = 24\,000$, but, they only exist in certain regions and for short time intervals. The appearance of these two-dimensional structures in three-dimensional, time-dependent and turbulent convection is explained by the relative importance of the non-linear terms in the momentum and energy equation, which is totally different in both equations, and by the coupling of these equations by the buoyancy and the convective term.

In order to improve and validate statistical turbulence models for application to natural convection in liquid metals, budgets of turbulence kinetic energy, turbulent heat flux and temperature variance are calculated from the numerical results. For several unknown correlations closure assumptions used in standard turbulence models are analyzed and model coefficients are determined. Results for sodium are compared to those for air, and the influence of the Prandtl number is discussed. The analyses show that in natural convection, diffusive transport of turbulent quantities is of great importance. Especially, turbulent pressure fluctuations are found to be essential. This result is in contrast to common assumptions used in statistical turbulence models.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Zusammenfassung	
Inhaltsverzeichnis	I
Nomenklatur	V
1. Einleitung	1
1.1 Definition und Bedeutung der Naturkonvektion	1
1.2 Problemstellung	1
1.3 Zielsetzung und Vorgehensweise	5
2. Rayleigh-Bénard-Konvektion	6
2.1 Kennzahlen	6
2.2 Stand des Wissens	7
2.3 Anforderungen an die numerische Simulation	16
3. Mathematische Beschreibung	20
3.1 Grundgleichungen	20
3.2 Rand- und Anfangsbedingungen	22
3.3 Diskretisierung des Rechengebietes	23
3.4 Simulationsmethode	28
3.5 Zeitintegrationsverfahren	29
3.5.1 Gegenüberstellung expliziter und impliziter Verfahren	29
3.5.2 Euler-Verfahren und Projektionsmethode von Chorin	30
3.5.3 Euler-Leapfrog-Verfahren	31
4. Methodische Erweiterung von TURBIT um ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren	35
4.1 Analyse des Stabilitätskriteriums des Euler-Leapfrog-Verfahrens	35
4.2 Literaturstand zu halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren	38
4.3 Auswahlkriterien für TURBIT	40
4.4 Analytische Untersuchung der halbimpliziten Verfahren	41

	Seite	
4.4.1	Bemerkungen zu Konsistenz, Stabilität und Konvergenz	41
4.4.2	Nachweis der Konsistenz mit der Methode der modifizierten Gleichung	43
4.4.3	Stabilitätsuntersuchung mit der Von Neumann-Methode	46
4.4.4	Spektralanalyse des numerischen Fehlers	50
4.5	Numerische Untersuchungen	54
4.6	Schlußfolgerungen für die Anwendung in TURBIT	62
4.7	Lösung der Bestimmungsgleichung für das Temperaturfeld	64
4.8	Realisierung der Verfahren in TURBIT	69
4.9	Verifikation der neuen Simulationsmethode	70
4.9.1	Erfahrungen mit den halbimpliziten Verfahren	70
4.9.2	Nachrechnung eines Benchmark-Problems	72
4.9.3	Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft	75
5.	Anwendungen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium	80
5.1	Numerische Vorstudien	80
5.1.1	Der Einfluß der Größe des Rechengebietes	80
5.1.2	Der Einfluß der Größe der Maschenweiten	83
5.1.3	Abschätzung für die Dicke der viskosen Grenzschicht	88
5.2	Simulationsführung und Auswerteverfahren	92
5.2.1	Simulationsstrategie	92
5.2.2	Auswerteverfahren	94
5.2.3	Spezifikation der durchgeführten Simulationen	95

	Seite
5.3 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	97
5.3.1 Vergleich von Nusselt-Zahlen	98
5.3.2 Vergleich von RMS-Werten von Temperaturfluktuationen	100
5.4 Statistische Analyse der Simulationsergebnisse	101
5.4.1 Ergebnisse zum Temperaturfeld	101
5.4.2 Ergebnisse zum Geschwindigkeitsfeld	106
5.4.3 Eindimensionale Energiespektren	110
5.4.4 Grashof-Analogie des Geschwindigkeitsfeldes	112
5.4.5 Zeitsignale	113
5.5 Phänomenologische Analyse	117
5.5.1 Strukturen der Konvektion	117
5.5.2 Mechanismen der Konvektion	130
5.5.3 Diskussion der Ergebnisse zur Trägheitskonvektion	139
5.6 Analyse von Turbulenzmodellansätzen	145
5.6.1 Zu statistischen Turbulenzmodellen	145
5.6.2 Zur Überprüfung von Schließungshypothesen	149
5.6.3 Transportgleichung für die kinetische Turbulenzenergie	150
5.6.4 Transportgleichung für den turbulenten Wärmestrom	159
5.6.5 Transportgleichung für die Temperaturschwankungen	168
6. Schlußbetrachtung	175
6.1 Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse	175
6.1.1 Numerisches Verfahren	175
6.1.2 Phänomenologie der Konvektion	176
6.1.3 Statistische Beschreibung der Turbulenz	177
6.2 Ausblick	179

	Seite
Literaturverzeichnis	181
Anhang	
Anhang A	194
Quantitative Analyse der numerischen Diffusion von LFCN- und ABCN-Verfahren	
Anhang B	196
Von Neumann-Stabilitätsanalyse von LFCN- und ABCN-Verfahren	
Anhang C	200
Erweiterung des Poisson-Lösungs-Paketes	
Anhang D	206
Untersuchungen zur Genauigkeit von LFCN- und ABCN-Verfahren	
Anhang E	208
Abschätzung für einen zur räumlichen Mittelung äquivalenten Mittelungszeitraum	

Nomenklatur

Lateinische Buchstaben

A_I	Auftriebsterm in der Impulsgleichung
C	Courant-Zahl
C_H	Modellkoeffizient (5.43)
C_T	Modellkoeffizient (5.36)
$C_{T'}$	Modellkoeffizient (5.37)
C_{TT}	Modellkoeffizient (5.41)
C_μ	Koeffizient des k - ϵ Turbulenzmodells (5.27)
D	Diffusionszahl
\hat{D}	Plattenabstand bzw. Kanalhöhe
D_g	Diffusionsterm in der $\overline{T'^2/2}$ -Gleichung
D_I	Diffusionsterm in der Impulsgleichung
D_k	Diffusionsterm in der k -Gleichung
D_q	Diffusionsterm in der $\overline{u_3'T'}$ -Gleichung
D_T	Diffusionsterm in der Energiegleichung
E	eindimensionales Energiespektrum
F	Flachheit (5.21)
\hat{g}	Erdbeschleunigung
G	Verstärkungsfaktor bzw. -matrix (Kapitel 4)
G	Produktion/Vernichtung von k durch Auftriebskräfte
Gr	Grashof-Zahl (2.3)
h	Maschenweite
\hat{h}	Schichthöhe im Experiment von Kek (1989)
I	Einheitsmatrix
I	imaginäre Einheit $I = \sqrt{-1}$ (Abschnitt 4.4)

IM, JM, KM	Anzahl der Maschen in x_1 -, x_2 - bzw. x_3 -Richtung
k	kinetische Turbulenzenergie
k	Wellenzahl (Kapitel 4)
K_I	konvektiver Term in der Impulsgleichung
K_T	konvektiver Term in der Energiegleichung
\hat{L}	charakteristische Länge
M	Maschenanzahl (Kapitel 4)
MV	molekularer Vernichtungsterm in der $\overline{u_3'T'}$ - Gleichung
n	Zeitschrittzähler
N	Anzahl der Zeitschritte eines Integrationszyklusses
Nu	Nusselt-Zahl (2.4)
p	Druck
P_g	Produktionsterm in der $\overline{T'^2/2}$ - Gleichung
P_I	Druckterm in der Impulsgleichung
P_k	Produktionsterm durch Schubspannungen in der k -Gleichung
P_q	Produktionsterm in der $\overline{u_3'T'}$ - Gleichung
$Pe_{\Delta x}$	Maschen-Peclet-Zahl (4.27)
Pr	Prandtl-Zahl (2.2)
Pr_t	turbulente Prandtl-Zahl (5.29)
PS	Druck-Temperaturgradienten-Korrelation in der $\overline{u_3'T'}$ - Gleichung
\hat{q}	Wärmestromdichte
R	Zeitskalenverhältnis (5.42)
Ra	Rayleigh-Zahl (2.1)
Ra_c	kritische Rayleigh-Zahl
Ra_{cII}	zweite kritische Rayleigh-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
S	Schiefe (5.20)
SF	Sicherheitsfaktor für die Zeitschrittweite (3.25)

t	Zeit
t_{sim}	simulierte Problemzeit
Δt	Zeitschrittweite
Δt_{max}	maximal zulässige Zeitschrittweite
T	Temperatur
T_{ref}	Referenztemperatur
T_{W1}	Temperatur der unteren Wand
T_{W2}	Temperatur der oberen Wand
ΔT_W	Differenz der Wandtemperaturen
u_o	charakteristische Geschwindigkeit (Kapitel 4)
\hat{u}_o	Bezugsgeschwindigkeit (3.1)
u_1, u_2, u_3	Geschwindigkeitskomponenten
u_i^*	Näherung für das Geschwindigkeitsfeld (3.18)
x_1, x_2, x_3	Koordinatenrichtungen (kartesisch)
Δx	Maschenweite (Kapitel 4)
$\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$	Maschenweiten in x_1 -, x_2 - bzw. x_3 -Richtung
X_1, X_2	Periodenlänge in x_1 - bzw. x_2 -Richtung
z	Wandabstand (5.17)

Griechische Buchstaben

$\hat{\beta}$	Volumenausdehnungskoeffizient
δ_i	Differenzenoperator (3.11)
δ_{ij}	Kroneckersymbol ($= 1$ für $i=j$, $= 0$ für $i \neq j$)
$\hat{\delta}_{th}$	Dicke der thermischen Grenzschicht
ε	Abbruchfehler (Kapitel 4 und Anhang A)
ε	Dissipation der kinetischen Turbulenzenergie (Kapitel 5)

ε_g	Vernichtungsterm in der $\overline{T'^2/2}$ -Gleichung
η	Kolmogoroff-Länge
η_T	”Kolmogoroff-Länge” für das Temperaturfeld
θ_D	Faktor in Gl. (3.21)
θ_K	Faktor in Gl. (3.21)
κ	Temperaturleitfähigkeit
κ_t	Wirbeldiffusivität (5.34)
λ	Wellenlänge
λ	Eigenwert (Kapitel 4 und Anhang B)
$\hat{\lambda}$	Wärmeleitfähigkeit
μ	Faktor im Zeitschrittkriterium (3.22)
$\hat{\nu}$	kinematische Zähigkeit
ν_t	Wirbelviskosität (5.27)
ξ	Faktor in Gl. (3.21)
π	Kreiszahl
$\hat{\rho}$	Dichte
σ_k	Prandtl-Zahl für k (5.32)
τ	charakteristische Zeitskala
ϕ	Platzhalter für Strömungsgröße
ϕ	Phasenwinkel (Kapitel 4)
ϕ_D	Faktor in Gl. (3.21)
ϕ_K	Faktor in Gl. (3.21)
ψ	Phase (Kapitel 4)
ω	Wirbelstärke

Indizes

tiefgestellt

c	kritischer Wert
DNS	direkte numerische Simulation
ex	exakt
FM	Flüssigmetall
FS	Feinstrukturanteil
g	Term in der $\overline{T'^2/2}$ - Gleichung
ges	gesamt
i,j,k	Maschenindex in x_1 -, x_2 - bzw. x_3 -Richtung
I	Term in der Impulsgleichung
k	Term in der k -Gleichung
max	Maximalwert
q	Term in der $\overline{u_3'T'}$ -Gleichung
rms	"root-mean-square"
t	turbulent
T	Term in der Energiegleichung
W	Wand

hochgestellt

n	Zeitindex
T	transponiert

Symbole

$\hat{\phi}$	dimensionsbehaftete Größe
ϕ'	Fluktuationsanteil der Größe ϕ
$\overline{\phi}$	Mittelwert der Größe ϕ
\underline{u}	Vektor $\underline{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$

$\partial/\partial x$	partielle Ortsableitung
$\partial/\partial t$	partielle Zeitableitung
∇	Nabla-Operator $\nabla = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)^T$
Δ	Differenz

Abkürzungen

ABCN	Adams-Bashforth-Crank-Nicolson-Verfahren
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium
LFCN	Leapfrog-Crank-Nicolson-Verfahren
RMS	"Root-Mean-Square"-Wert

1. Einleitung

1.1 Definition und Bedeutung der Naturkonvektion

Strömungsvorgänge, die auf schwerkraftbedingte Auf- und Abtriebskräfte zurückzuführen sind, werden als Naturkonvektion oder freie Konvektion bezeichnet. Ursache dieser Auf- und Abtriebskräfte sind Dichteunterschiede in einem Fluid im Schwerfeld. In realen Fluiden mit im allgemeinen temperaturabhängigen Stoffwerten sind solche Dichteunterschiede auf Temperaturunterschiede zurückzuführen. In diesen Fällen ist Naturkonvektion stets mit einem Wärmetransport verbunden.

Naturkonvektion ist eine in der Natur häufig anzutreffende Strömungsform. Insbesondere beeinflusst freie Konvektion den Wärmetransport in der Erdatmosphäre und bestimmt dadurch das Wetter. Auch für das lokale Klima ist z.B. die Wärmeabfuhr von erwärmten Landflächen durch freie Konvektion von großer Bedeutung. In der Geophysik wird die Kontinentaldrift durch Konvektion im Magma Kern der Erde erklärt [Lugt (1979)]. In der Astrophysik führt man die Granulation auf der Sonnenoberfläche auf das Vorhandensein großräumiger Konvektionstrukturen zurück [Kippenhahn (1990)].

Zu den technischen Bereichen, in denen Naturkonvektion eine entscheidende Rolle spielt, gehören z.B. die Heizungs- und Klimatechnik in Gebäuden, die Ausbreitung von Abluft aus Kaminen und von Kühl- und Abwässern in Gewässern. In der Gießereitechnik und bei der Züchtung von Kristallen kann Naturkonvektion einen unerwünschten Einfluß auf Erstarrungsvorgänge haben. Ein Anwendungsbeispiel im Bereich der Energietechnik sind Naturzug-Kühltürme bei Kraftwerken.

1.2 Problemstellung

Von besonderem Interesse im Rahmen dieser Arbeit ist die Bedeutung der Naturkonvektion für Reaktoren, bei denen flüssiges Natrium als Kühlmittel verwendet wird. Bei der Entwicklung solcher Reaktoren wird verstärkt Wert gelegt auf selbsttätig wirksam werdende Sicherheitseigenschaften. So soll z.B. gewährleistet sein, daß beim Ausfall der externen Stromversorgung des Kraftwerks die bei der Abschaltung des Reaktors freiwerdende Nachwärme ohne aktive Komponenten (wie z.B. Pumpen) allein durch Naturkonvektion abgeführt werden kann. Für die

Entwicklung und Auslegung solcher Reaktoren ist damit die Kenntnis der strömungsmechanischen Vorgänge von großer Bedeutung. Experimente in verkleinerten Reaktormodellen werden aus Kostengründen und zur Reduzierung des experimentellen Aufwands nicht mit flüssigem Natrium, sondern mit Wasser als Modellfluid durchgeführt [Sato & Miyakoshi (1989), Hoffmann et al. (1991)]. In diesen Experimenten liegt zudem überwiegend laminare Strömung vor. Zur Übertragung der Ergebnisse auf die realen Gegebenheiten im Reaktor, d.h. auf turbulente Strömung in flüssigem Natrium, sollen Rechenprogramme herangezogen werden [Ninokata (1990), Borgwaldt (1990)]. Solche anwendungsorientierte Rechenprogramme für turbulente Strömungen in komplexen Geometrien basieren auf statistischen Turbulenzmodellen. Diese enthalten eine Reihe von Modellannahmen und Modellkoeffizienten, die im allgemeinen empirisch über Grundlagenexperimente festgelegt werden.

Für Flüssigmetalle liegen lediglich für Zwangskonvektion - bei der die Temperatur wie eine passive skalare Erhaltungsgröße betrachtet werden kann - Erfahrungen mit statistischen Turbulenzmodellen vor [de Lemos & Sesonke (1985)]. Die Naturkonvektion in Flüssigmetallen stellt jedoch einen Anwendungsfall dar, auf den diese Erfahrungen nur bedingt zu übertragen sind. Hier wird die treibende Kraft für die Strömung über das Temperaturfeld eingebracht, so daß in Naturkonvektion ganz andere physikalische Mechanismen eine Rolle spielen. Diesen ist bei der statistischen Modellierung entsprechend Rechnung zu tragen [Lawrence (1989)]. Flüssigmetalle unterscheiden sich zudem wegen ihrer sehr hohen Wärmeleitfähigkeit in ihren physikalischen Eigenschaften deutlich von denen konventioneller Fluide. Turbulenzmodelle, die sich für Wasser oder Luft bewährt haben, können daher für Flüssigmetalle nicht ohne weiteres übernommen werden, da bei diesen insbesondere diffusive Transportvorgänge im Temperaturfeld von wesentlicher Bedeutung sind. Die Ausführungen verdeutlichen, daß für die Berechnung von technischen Strömungen in Flüssigmetallen, die durch Auftriebskräfte dominiert werden, eine Validierung sowie gegebenenfalls eine Weiterentwicklung der statistischen Turbulenzmodelle unumgänglich ist.

Notwendig für eine Validierung existierender Turbulenzmodelle für diesen Anwendungsfall ist die Kenntnis der statistischen Eigenschaften von turbulenter Naturkonvektion in Flüssigmetallen. Voraussetzung für die Weiterentwicklung der statistischen Modelle ist das Verständnis der grundlegenden physikalischen Vorgänge in solchen Strömungen. Zur Untersuchung dieser Phänomene ist es sinnvoll, auf Grundlagenexperimente in einfachen Geometrien überzugehen, da hier die interessierenden Effekte isoliert beobachtet und studiert werden können.

In der Literatur sind allerdings wegen großer experimenteller Schwierigkeiten bei der Handhabung von Flüssigmetallen nur wenige entsprechende Studien verfügbar [Kek (1989), Knebel (1993)]. Zudem können bewährte Strömungsmeßtechniken wie die Hitzdrahtanemometrie oder die Laser-Doppler-Anemometrie in Flüssigmetallen nicht eingesetzt werden. Damit sind Experimente in Flüssigmetallen häufig auf die Erfassung von Temperatursignalen durch Thermolemente beschränkt, und es liegen kaum Daten für das turbulente Geschwindigkeitsfeld vor.

Ein einfaches physikalisches Modell für Wärmeübertragungsvorgänge durch Naturkonvektion ist die Rayleigh-Bénard-Konvektion. Die Geometrie ist gegeben durch eine (theoretisch) unendlich ausgedehnte ebene Fluidschicht, die durch zwei horizontale isotherme Wände begrenzt ist. Die untere Wand ist beheizt, die obere Wand ist gekühlt. Aus theoretischen und experimentellen Untersuchungen ist bekannt, daß der reine Wärmeleitungszustand bei Überschreiten einer kritischen Temperaturdifferenz instabil wird [Chandrasekhar (1981)]. Es setzt Konvektion in Form von zweidimensionalen stationären Rollen ein. Mit weiterer Erhöhung der Temperaturdifferenz zwischen den Platten werden periodische Bewegungen beobachtet. Schließlich wird die Bewegung ungeordnet, und es erfolgt der Übergang von laminarer zu turbulenter Konvektion. Während die auftretenden Konvektionsformen für Fluide wie Luft, Wasser oder zähe Öle intensiv experimentell untersucht wurden, ist hierüber für Flüssigmetalle nur wenig bekannt [vergl. z.B. Krishnamurti (1973)]. Von theoretischen Untersuchungen wird für Flüssigmetalle das Auftreten einer zweidimensionalen stationären Konvektionsform vorhergesagt, die durch ein Gleichgewicht zwischen Trägheits- und Auftriebskräften bestimmt ist [Busse & Clever (1981), Clever & Busse (1981)]. Charakteristisch für diese Trägheitskonvektion ("inertial convection") ist ein Geschwindigkeitsfeld, bei dem das Fluid um ein Wirbelzentrum wie ein Starrkörper rotiert. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von einer Schwungradkonvektion ("flywheel convection"). Diese Konvektionsform ist durch Experimente allerdings nicht eindeutig bestätigt.

Die Schwierigkeiten auf der experimentellen Seite legen es nahe, zu versuchen, auf rein numerischem Wege eine Datenbasis für turbulente Naturkonvektion in flüssigem Natrium bereitzustellen und durch deren Analyse auch einen Beitrag zum Verständnis der grundlegenden physikalischen Vorgänge in diesen Strömungen zu leisten. Dazu herangezogen werden kann die Methode der direkten numerischen Simulation. Dabei wird die räumliche Diskretisierung so gewählt, daß alle physikalisch relevanten Längenmaßstäbe durch das Maschennetz aufgelöst

werden. Dadurch sind zur Abbildung der realen Physik keinerlei empirische Turbulenzannahmen notwendig. Die direkte numerische Simulation stellt hohe Anforderungen bezüglich Speicherplatz und CPU-Zeit und ist bei der derzeitigen Rechnergeneration auf kleine Turbulenzgrade und einfache Geometrien beschränkt. Höhere Turbulenzgrade können mit der Methode der Grobstruktursimulation ("large-eddy-simulation") erreicht werden, bei der nur die großräumigen Wirbel durch das Maschennetz aufgelöst werden. Die Wirkung der nicht durch das Maschennetz erfaßbaren kleinen Wirbel wird durch das sogenannte Feinstrukturmodell ("subgrid-scale-model") modelliert.

Das am Institut für Reaktorsicherheit verfügbare Rechenprogramm TURBIT basiert auf einem Finite Volumen-Verfahren, und erlaubt die direkte numerische Simulation und die Grobstruktursimulation turbulenter Strömungen in einfachen Kanalgeometrien [Schumann (1973), Grötzbach (1977)]. Das Programm wurde für eine Reihe verschiedener Anwendungen verifiziert [Grötzbach (1987)], darunter auch blinde Vorhersagen für ein Benchmark von Naturkonvektion in einem mit einem flüssigen Metall gefüllten rechteckigen Behälter [Grötzbach (1990b)]. Bei diesen Simulationen zeigte sich, daß numerische Simulationen von Naturkonvektion in Flüssigmetallen mit TURBIT zwar prinzipiell möglich, aber sehr ineffizient sind. Zurückzuführen ist dies auf das vollexplizite Zeitintegrationsverfahren in TURBIT, das aus Gründen der numerischen Stabilität die Verwendung sehr kleiner Zeitschrittweiten erfordert. Zeitschrittbestimmend ist dabei die thermische Diffusion. Aufgrund der hohen Wärmeleitfähigkeit der Flüssigmetalle laufen molekulare Temperatúrausgleichvorgänge sehr rasch ab. Bei einem expliziten Zeitintegrationsverfahren muß diese sehr kleine Zeitskala durch eine entsprechend kleine Zeitschrittweite aufgelöst werden. Wesentlich effizienter ist deshalb für Flüssigmetalle ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung, bei dem die diffusiven Terme implizit behandelt werden. Dadurch ist die Verwendung wesentlich größerer Zeitschrittweiten möglich, die zwar nicht mehr die sehr kleine Zeitskala der thermischen Diffusion auflösen, aber weiterhin die, die für die Turbulenz maßgeblichen konvektiven Transportprozesses. Implizite Zeitintegrationsverfahren erfordern im Gegensatz zu expliziten Verfahren für jeden Zeitpunkt die Lösung eines Gleichungssystems und beinhalten so einen zusätzlichen numerischen Aufwand. Einem expliziten Verfahren bezüglich der Effizienz überlegen ist das implizite Verfahren nur, wenn es gelingt, diesen zusätzlichen Aufwand möglichst gering zu halten.

1.3 Zielsetzung und Vorgehensweise

Für die Untersuchung von Naturkonvektion in Flüssigmetallen ergibt sich aus obiger Diskussion die folgende Zielsetzung und Vorgehensweise:

- Das Rechenprogramm TURBIT ist methodisch so zu erweitern, daß damit effiziente numerische Simulationen turbulenter Naturkonvektion in Flüssigmetallen möglich werden. Als geeignete Methode erscheint ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung mit impliziter Behandlung der diffusiven Terme. Wert zu legen ist auf eine effiziente Lösung des resultierenden Gleichungssystems.
- Nach der Verifikation des neuen Verfahrens soll für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium für kleine Turbulenzgrade mittels direkter numerischer Simulation eine Datenbasis bereitgestellt werden.
- Die Simulationsergebnisse sollen herangezogen werden, um Aufschluß über die Mechanismen sowie die räumlichen und zeitlichen Strukturen, die in diesen Strömungen eine Rolle spielen, zu erhalten. Insbesondere sollen die numerischen Ergebnisse daraufhin untersucht werden, inwieweit die von stationären zweidimensionalen Methoden vorhergesagte Trägheitskonvektion (bzw. ein ähnlicher Mechanismus) auch in dreidimensionaler zeitabhängiger Konvektion existiert.
- Aus der Analyse der numerischen Daten sollen existierende Turbulenzmodellansätze auf ihre Gültigkeit und Anwendbarkeit auf die Naturkonvektion in Flüssigmetallen überprüft werden. Schwächen solcher Ansätze sollen aufgedeckt und Verbesserungsmöglichkeiten aufgezeigt werden. Anhand eines Vergleichs der Ergebnisse dieser statistischen Analysen mit denen für turbulente Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft soll überprüft werden, inwieweit Aussagen auf Naturkonvektion beliebiger Fluide erweitert werden können, bzw. auf Flüssigmetalle beschränkt bleiben müssen.

2. Rayleigh-Bénard-Konvektion

Betrachtet man eine ebene Fluidschicht, die zwischen zwei horizontalen isothermen und idealerweise unendlich ausgedehnten Platten eingeschlossen ist, wobei die untere beheizt und die obere gekühlt ist, so stellt man fest, daß bei Überschreiten einer bestimmten Temperaturdifferenz der bis dahin vorliegende reine Wärmeleitungszustand instabil wird und sich eine Konvektionsbewegung einstellt. Dieses physikalische Phänomen bezeichnet man als Rayleigh-Bénard-Konvektion.

2.1 Kennzahlen

Charakterisiert wird das Rayleigh-Bénard-Problem durch zwei dimensionslose Kennzahlen. Dies ist zum einen die Rayleigh-Zahl

$$Ra = \frac{\hat{g} \hat{\beta} \Delta \hat{T}_w \hat{D}^3}{\hat{\nu} \hat{\kappa}} . \quad (2.1)$$

Hier ist \hat{g} die Erdbeschleunigung, $\hat{\beta}$ der Volumenausdehnungskoeffizient, $\Delta \hat{T}_w$ die Differenz der Temperatur der beiden Wände, \hat{D} die Schichthöhe, $\hat{\nu}$ die kinematische Viskosität und $\hat{\kappa}$ die Temperaturleitzahl. $\hat{}$ kennzeichnet, daß es sich um dimensionsbehaftete Größen handelt. In der Rayleigh-Zahl spiegeln sich die wesentlichen physikalischen Mechanismen wider, die die Konvektion bestimmen. Dies ist zum einen der Auftrieb, der als treibende Kraft im Zähler auftritt. In seiner Bewegung gehemmt wird ein Fluidballen, der sich gegenüber seiner Umgebung auf einem anderen Temperaturniveau befindet, durch Reibungseffekte. Aber auch Wärmeausgleichvorgänge zwischen dem Fluidballen und seiner Umgebung wirken sich hemmend auf die Konvektionsbewegung aus, da hierdurch die Auftriebskraft vermindert wird. Die diese beiden molekularen Vorgänge charakterisierenden Stoffgrößen $\hat{\nu}$ und $\hat{\kappa}$ treten daher in der Rayleigh-Zahl im Nenner auf.

Die zweite dimensionslose Kennzahl des Rayleigh-Bénard-Problems ist die Prandtl-Zahl

$$Pr = \frac{\hat{\nu}}{\hat{\kappa}} . \quad (2.2)$$

Sie kennzeichnet als Verhältnis der molekularen Transportkoeffizienten von Impuls und Energie die Stoffeigenschaften des Fluides. Aus Rayleigh- und Prandtl-Zahl kann eine weitere dimensionslose Kennzahl abgeleitet werden. Dies ist die Grashof-Zahl

$$Gr = \frac{Ra}{Pr} = \frac{\hat{g}\hat{\beta}\Delta\hat{T}_w\hat{D}^3}{\hat{\nu}^2} . \quad (2.3)$$

Sie kann als Produkt der beiden Kraftverhältnisse Auftrieb zu Reibung und Trägheit zu Reibung interpretiert werden.

Der Wärmeübergang durch die Fluidschicht setzt sich aus Beiträgen durch Wärmeleitung und durch Konvektion zusammen. Zur Charakterisierung des letzteren Anteils dient eine weitere dimensionslose Kennzahl, die Nusselt-Zahl. Sie setzt die Gesamtwärmestromdichte zur Wärmestromdichte durch Wärmeleitung ins Verhältnis

$$Nu = \frac{\hat{q}_{gesamt}}{\hat{q}_{Wärmeleitung}} = 1 + \frac{\hat{q}_{Konvektion}}{\hat{q}_{Wärmeleitung}} . \quad (2.4)$$

Für den Fall fest vorgegebener Wandtemperaturen ist die Nusselt-Zahl eine Funktion der übrigen Kenngrößen des Rayleigh-Bénard-Problems

$$Nu = f(Ra, Pr) . \quad (2.5)$$

2.2 Stand des Wissens

Den Wert der Rayleigh-Zahl, bei dem die Konvektion einsetzt, bezeichnet man als kritische Rayleigh-Zahl Ra_c . Für den Fall fester, ideal wärmeleitender Wände führt eine lineare Stabilitätsanalyse auf das Ergebnis $Ra_c = 1\,708$ [z.B. Chandrasekhar (1981)]. Dieser Wert ist unabhängig von der Prandtl-Zahl. Wird Ra_c überschritten, so bildet sich ein regelmäßiges zweidimensionales Konvektionsmuster in Form stationärer Rollen aus. Die zu diesem Muster bei Ra_c gehörende Wellenlänge ist $\hat{\lambda}_c \approx 2.016 \cdot \hat{D}$. Abb. 2.1 zeigt ein Interferogramm aus einem Experiment von Jahn (1975) für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft bei $Ra = 4\,270$. Sicht-

bar sind Linien gleicher Dichte. Da in diesem Experiment die Dichte der Luft nur von der Temperatur abhängt, stellen die Linien in Abb. 2.1 gleichzeitig Isothermen dar. Deutlich ist das regelmäßige Konvektionsmuster mit den abwechselnd auf- und abwärts gerichteten Strömungsbereichen erkennbar.

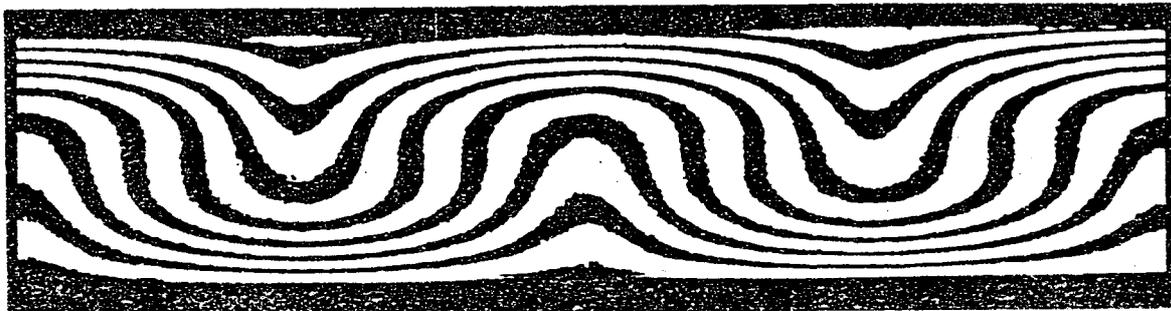


Abb. 2.1: Temperaturverteilung in einer Vertikalebene bei laminarer Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft, $Ra = 4\,270$ (Interferogramm aus Jahn (1975))

Mit zunehmender Rayleigh-Zahl erfolgt der Übergang von stationärer zweidimensionaler zu dreidimensionaler zeitabhängiger und schließlich turbulenter Konvektion. Dieser Übergang und die dabei auftretenden Konvektionsmuster hängen in starker Weise von der Prandtl-Zahl ab. Dies verdeutlicht Abb. 2.2, die der Arbeit von Krishnamurti (1973) entnommen ist. Dabei handelt es sich um eine Art Zustandsdiagramm, in dem die in Experimenten für Rayleigh-Bénard-Konvektion beobachteten Strömungsformen in doppelt-logarithmischem Maßstab als Funktion von Rayleigh- und Prandtl-Zahl aufgetragen sind. Man erkennt, daß sich der Übergang vom reinen Wärmeleitungszustand zu zeitabhängiger und schließlich zu turbulenter Konvektion für Fluide hoher Prandtl-Zahl ($Pr > 100$) über mehrere Größenordnungen in der Rayleigh-Zahl erstreckt. Demgegenüber beobachtet Krishnamurti (1973) in ihren Experimenten für Quecksilber ($Pr = 0.025$), die sich bis zu Rayleigh-Zahlen $Ra \approx 4\,000$ erstrecken, stationäre Konvektion nur für Rayleigh-Zahlen $Ra \leq 2\,400$.

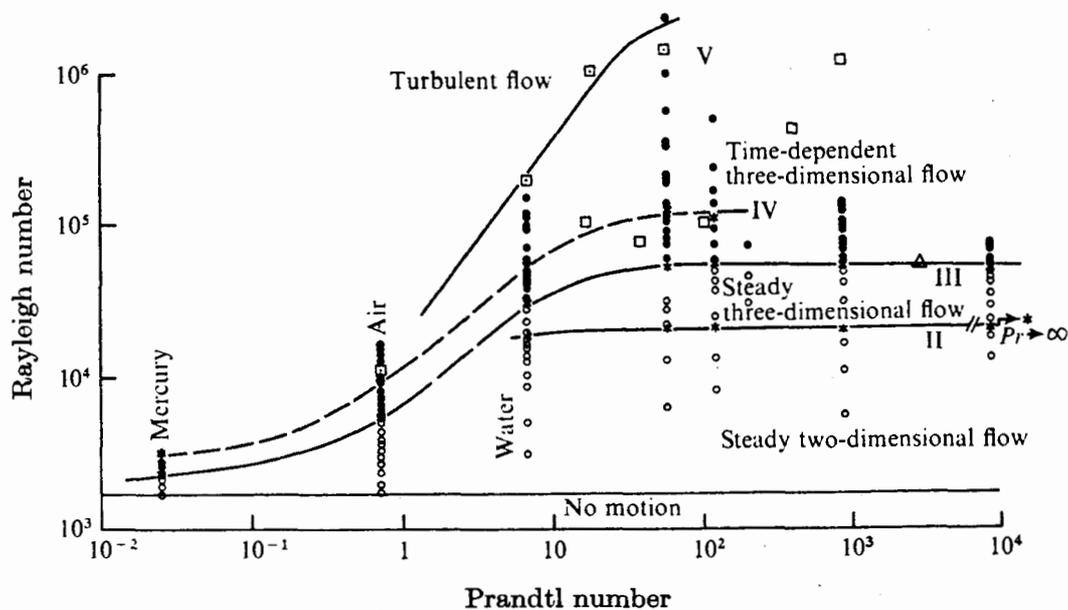


Abb. 2.2: Verschiedene Strömungszustände in Rayleigh-Bénard-Konvektion in Abhängigkeit von Rayleigh- und Prandtl-Zahl (nach Krishnamurti (1973))

Rosby (1969) führt Messungen in einer Quecksilberschicht ($Pr = 0.025$) für Rayleigh-Zahlen im Bereich $10^3 < Ra < 5 \cdot 10^5$ durch. Er folgert, daß die Konvektion stets turbulent ist, und begründet dies mit der relativ großen Streuung der Temperaturmeßwerte beim Einsetzen der Konvektion im Vergleich zu Messungen in Fluiden höherer Prandtl-Zahl. Seine Ergebnisse faßt er in der Korrelation

$$Nu = 0.147 \cdot Ra^{0.257} \quad (2.6)$$

zusammen.

Sehr genaue Experimente in Quecksilber wurden von Fauve & Libchaber (1981) durchgeführt. Allerdings hat ihr Behälter nur eine Größe von $1.6 \cdot 0.8 \cdot 0.8 \text{ cm}^3$, so daß die Strömung ganz wesentlich durch die Seitenwände beeinflusst ist. Dieser Sachverhalt spiegelt sich auch darin wider, daß sie als kritische Rayleigh-Zahl für ihr Experiment den Wert $Ra_c = 4\,950$ angeben. Aus theoretischen und experimentellen Untersuchungen ist bekannt, daß die kritische Rayleigh-Zahl in starker Weise vom Verhältnis der Schichthöhe zu den horizontalen Abmessungen des

Behälters abhängt, und, wenn dieses steigt, Ra_c ebenfalls anwächst [Davis (1967), Stork & Müller (1972)].

Experimente für Rayleigh-Bénard-Konvektion bei höheren Rayleigh-Zahlen stammen von Globe & Dropkin (1959). Unter anderem führen sie auch Messungen in einer Quecksilberschicht für den Bereich $2 \cdot 10^5 < Ra < 2 \cdot 10^7$ durch. Ihre Ergebnisse für die Wärmeübertragung fassen sie in der empirischen Beziehung

$$Nu = 0.069 \cdot Ra^{0.33} \cdot Pr^{0.074} \quad (2.7)$$

zusammen, wobei diese nicht nur für Quecksilber, sondern auch für Fluide mit höherer Prandtl-Zahl im Bereich $0.02 < Pr < 8750$ gültig ist.

Auch bei Experimenten zur Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium beschränken sich die Ergebnisse häufig auf Nusselt-Zahl-Korrelationen und damit lediglich auf die Erfassung integraler Strömungseigenschaften. Messungen des Wärmeübergangs an der Unterseite einer kalten Platte, die ein heißes Natriumbad bestimmter Tiefe abdeckt, wurden von McDonald & Connolly (1960) durchgeführt. Die Autoren geben die Beziehung

$$Nu = 0.0785 \cdot Ra^{0.32} \quad (2.8)$$

an, mit dem Gültigkeitsbereich $4.8 \cdot 10^6 < Ra < 4 \cdot 10^7$. Experimente von Kudryavtsev et al. (1967) in einem zylindrischen Behälter mit einem Höhen- zu Durchmesser-Verhältnis von etwa eins führten auf die Beziehung

$$Nu = 0.38 \cdot (Ra \cdot Pr)^{0.33} \quad (2.9)$$

mit dem Gültigkeitsbereich $2 \cdot 10^3 < Ra \cdot Pr < 8 \cdot 10^3$. Neuere Experimente zur Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium ($Pr = 0.006$) wurden von Kek (1989) in einem zylindrischen Behälter von 500 mm Durchmesser und 15.5 mm bzw. 46.5 mm Höhe vorgenommen [siehe auch Kek et al. (1990), Kek & Müller (1993)]. Er deckt damit den Rayleigh-Zahlen-Bereich $1.5 \cdot 10^3 < Ra < 2.5 \cdot 10^5$ ab. Aus seinen Experimenten leitet er die folgenden empirischen Beziehungen ab:

$$Nu = 0.59 \cdot Ra^{0.072}, \quad 1.5 \cdot 10^3 < Ra < 8 \cdot 10^3; \quad (2.10a)$$

$$Nu = 0.059 \cdot Ra^{0.32}, \quad 1.2 \cdot 10^4 < Ra < 2.5 \cdot 10^4; \quad (2.10b)$$

$$Nu = 0.117 \cdot Ra^{0.25}, \quad 4 \cdot 10^4 < Ra < 2.5 \cdot 10^5. \quad (2.10c)$$

Vergleicht man die empirischen Korrelationen der verschiedenen Autoren, so wird deutlich, daß bezüglich des Wärmeübergangs bei Rayleigh-Bénard-Konvektion in Fluiden kleiner Prandtl-Zahl eine erhebliche Unsicherheit besteht. Korrelationen, die für die Abhängigkeit der Nusselt-Zahl von der Rayleigh-Zahl ein 1/3-Potenzgesetz angeben, und damit auf einen turbulenten Charakter der Konvektion hindeuten, stehen solchen mit dem Exponent 1/4 gegenüber, die auf einen eher laminaren Charakter der Konvektion schließen lassen [vergl. Kutateladze et al. (1958)].

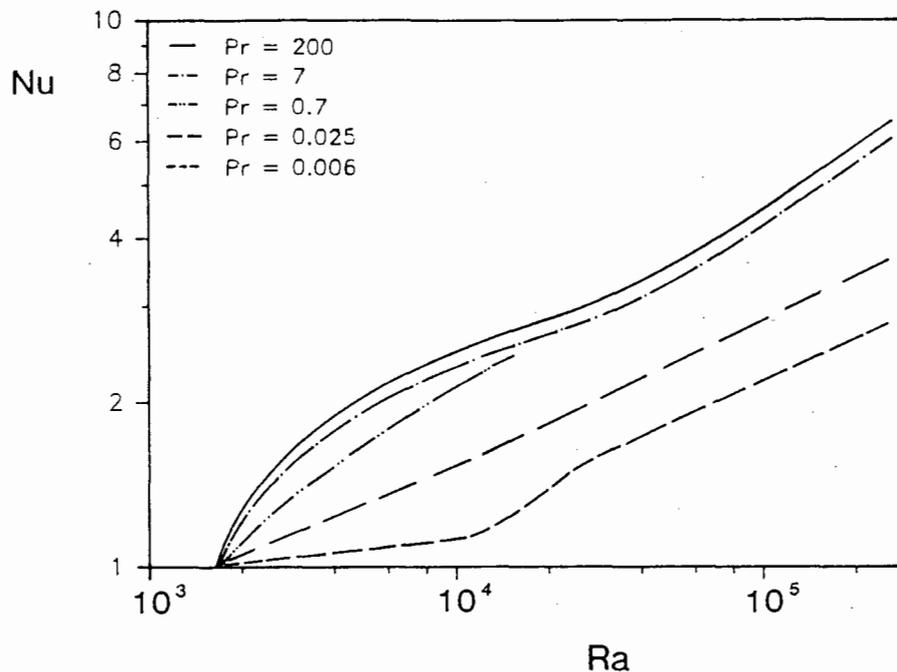


Abb. 2.3: Abhängigkeit der Nusselt-Zahl von der Rayleigh-Zahl für verschiedene Prandtl-Zahlen: $Pr = 0.006$ nach Kek (1989), $Pr = 0.025, 7, 200$ nach Rossby (1969), $Pr = 0.7$ nach Threlfall (1975); nach Kek (1989).

Die empirischen Korrelationen (2.10a-c) von Kek (1989) für den Wärmeübergang in Natrium sind zusammen mit Ergebnissen anderer Autoren für Fluide höherer Prandtl-Zahl in Abb. 2.3 dargestellt. Danach erfolgt für den Fall mittlerer und hoher Prandtl-Zahl sofort nach Überschreiten der kritischen Rayleigh-Zahl eine

starke Zunahme des konvektiven Wärmeübergangs. Demgegenüber ist für Fluide sehr kleiner Prandtl-Zahl zunächst nur ein sehr schwacher Anstieg der Nusselt-Zahl mit der Rayleigh-Zahl zu beobachten. Dieser Sachverhalt stimmt qualitativ überein mit dem Ergebnis einer analytischen Studie von Schlüter et al. (1965). Die Autoren ermitteln mit Hilfe einer Störungsrechnung für Fluide sehr kleiner Prandtl-Zahl und für nur schwach überkritische Rayleigh-Zahlen die Abhängigkeit

$$Nu - 1 \sim (Ra - Ra_c) \cdot Pr^2 . \quad (2.11)$$

Der nur sehr geringe konvektive Beitrag zum gesamten Wärmetransport im schwach überkritischen Rayleigh-Zahlen-Bereich wirft die Frage auf, ob für Fluide kleiner Prandtl-Zahl ein weiterer Schwellwert der Rayleigh-Zahl existiert, ab dem dann ein maßgeblicher konvektiver Wärmetransport auftritt. Dieser Fragestellung haben sich einige Autoren mit analytischen und numerischen Untersuchungen gewidmet. Zum Teil befassen sie sich aber mit Geometrien und Randbedingungen, die eine Übertragbarkeit der Ergebnisse auf Rayleigh-Bénard-Konvektion fragwürdig erscheinen lassen. So untersuchen Jones et al. (1976) unter der Voraussetzung stationärer rotationssymmetrischer Strömung den Wärmetransport torusförmiger Konvektionszellen in einem vertikalen Zylinder für den Fall isothermer freier Randbedingungen. Sie zeigen, daß für den Grenzfall verschwindender Prandtl-Zahl eine zweite kritische Rayleigh-Zahl existiert, ab der die Konvektion wesentlich zum Wärmetransport beiträgt. Die physikalische Argumentation ist, daß die Intensität der Strömung zunächst durch den starken nichtlinearen Einfluß der konvektiven Terme in der Impulsgleichung beschränkt bleibt. Bei höheren Rayleigh-Zahlen kann sich dann eine Strömungsform einstellen, bei der die nichtlineare Kopplung des Impulstransportes wegfällt, so daß eine Intensivierung der Strömung und damit auch des konvektiven Wärmetransportes einsetzen kann. Die Autoren zeigen, daß dies der Fall ist, wenn das Fluid wie ein Starrkörper rotiert. Dann bilden Stromlinien und Linien gleicher Wirbelstärke konzentrische Kreise und die Nichtlinearität verschwindet. Man spricht in diesem Zusammenhang von Trägheitskonvektion ("inertial convection"), oder auch von Schwungradkonvektion ("flywheel convection").

In Fortsetzung der Arbeit von Jones et al. (1976) untersucht Proctor (1977) die Wärmeübertragung in Fluiden kleiner Prandtl-Zahl in einem horizontalen Zylinder. Er betrachtet den Fall fester Randbedingungen und beschränkt sich auf stationäre zweidimensionale Konvektion. Als Randbedingung für die Temperatur gibt er eine beheizte untere und gekühlte obere Zylinderhalbschale vor. Auch

Proctor (1977) findet für den Grenzfall $Pr \rightarrow 0$ eine zweite kritische Rayleigh-Zahl, ab der ein starker Anstieg des konvektiven Wärmetransportes festzustellen ist. Wie bei Jones et al. (1976) ist auch hier die Konvektion gekennzeichnet durch eine reibungsfreie Kernströmung.

Clever & Busse (1981) und Busse & Clever (1981) betrachten die Geometrie der Rayleigh-Bénard-Konvektion und untersuchen, ob hier ein zur Trägheitskonvektion äquivalenter Mechanismus existiert. Dabei beschränken auch sie sich auf stationäre zweidimensionale Konvektionsformen und führen mit Hilfe eines Spektralverfahrens numerische Simulationen für den Parameterbereich $0.001 \leq Pr \leq 0.71$ und $Ra \leq 20\,000$ durch. Die Ergebnisse für $Pr \ll 1$ und $Ra \approx 10^4$ liefern nahezu kreisförmige Stromlinien und Linien gleicher Wirbelstärke und deuten damit auf die Trägheitskonvektion hin. Desweiteren stellen die Autoren fest, daß für Rayleigh-Zahlen $Ra < 10^4$ der Wärmeübergang sehr stark von der Prandtl-Zahl abhängt (vergl. hierzu Schlüter et al. (1965)), während er für $Ra > 10^4$ praktisch unabhängig von der Prandtl-Zahl ist. Als Wert für die zweite kritische Rayleigh-Zahl für den Grenzfall $Pr \rightarrow 0$ geben die Autoren $Ra_{cII} \approx 7\,373$ an.

Bei der Bewertung dieser Studien ist in Betracht zu ziehen, daß sie sämtlich von der Voraussetzung stationärer zweidimensionaler Strömung ausgehen. Aus Experimenten [Rossby (1969), Krishnamurti (1973)] ist bekannt, daß in Flüssigmetallen bereits weit unterhalb von $Ra \approx 7\,400$ dreidimensionale zeitabhängige Konvektionsformen auftreten. Auch frühere Stabilitätsuntersuchungen von Clever & Busse (1974) ergaben, daß in Quecksilber ($Pr = 0.025$) die zweidimensionalen Konvektionsrollen bereits bei Rayleigh-Zahlen von $Ra \approx 1\,900$ instabil werden. Es tritt eine dreidimensional-oszillatorische Instabilität auf, siehe Skizze in Abb. 2.4, die zu zeitlich periodischen Lösungen führt. Die Gültigkeit der oben aufgeführten Voraussetzungen ist in der Realität damit nicht gegeben, so daß die in diesen Studien gewonnenen Ergebnisse zur Trägheitskonvektion hinsichtlich ihrer physikalischen Relevanz prinzipiell eher vorsichtig zu bewerten sind.

Dennoch werden die wesentlichen Aussagen der analytischen und numerischen Untersuchungen durch ein Experiment von Chiffaudel et al. (1987) qualitativ bestätigt. Die Autoren untersuchen Rayleigh-Bénard-Konvektion von Quecksilber in einem rechteckigen Behälter der Höhe 8 mm und der Grundfläche $50 \times 34 \text{ mm}^2$ in der Umgebung der kritischen Rayleigh-Zahl. Dabei gelingt es ihnen, durch Variation der mittleren Temperatur des Quecksilbers, den Prandtl-Zahlen-Bereich $0.02 \leq Pr \leq 0.04$ abzudecken. Die Autoren identifizieren zwei verschiedene stationäre Konvektionsformen, die sich durch unterschiedliche Steigung dNu/dRa

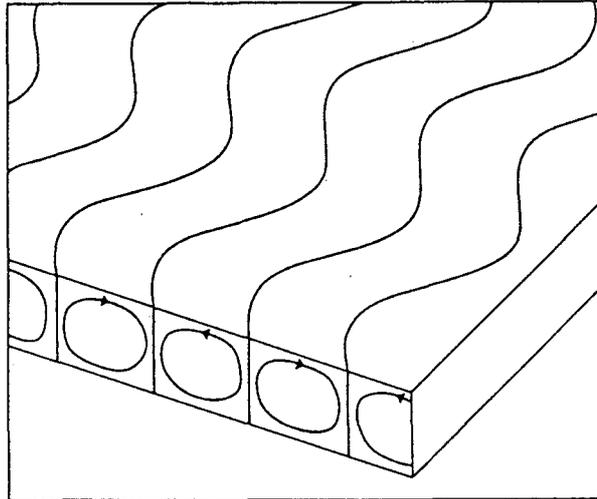


Abb. 2.4: Qualitative Skizze der oszillierenden Konvektionsrollen in Quecksilber nach Clever & Busse (1974). Die Ausbreitungsrichtung der Wellen ist entlang der Rollachsen.

auszeichnen: Die viskose Konvektion für $1 \leq Ra/Ra_c < 1.06$ und die Trägheitskonvektion für $1.06 < Ra/Ra_c < 1.4$. Für $Ra > 1.4 Ra_c$ beobachten Chiffaudel et al. (1987) das Einsetzen zeitabhängiger Konvektion. Charakteristisch für den viskosen Bereich ist die Abhängigkeit der Steigung dNu/dRa von der Prandtl-Zahl; ein Ergebnis, das in Übereinstimmung ist mit der Vorhersage von Schlüter et al. (1965). Im Gegensatz hierzu erweist sich die im Vergleich zur viskosen Konvektion höhere Anstiegsrate dNu/dRa der Trägheitskonvektion in ihrem Experiment als unabhängig von der Prandtl-Zahl. Diese Eigenschaften beider Konvektionsformen diskutieren die Autoren anschaulich anhand der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen. So skaliert für den Fall kleiner Prandtl-Zahl das Geschwindigkeitsfeld \underline{u} mit der Prandtl-Zahl, weshalb der konvektive Wärmetransport klein bleibt und stark von Pr abhängt. Dies entspricht dem viskosen Bereich. Nur für den Fall, daß sich Trägheitsterm und Druckgradient aufheben, hängt \underline{u} nicht von der Prandtl-Zahl ab, und es können sich in diesem Trägheitsbereich größere Geschwindigkeiten und ein verstärkter konvektiver Wärmetransport einstellen.

In einer neueren Studie erweitern Clever & Busse (1987) ihre Untersuchungen auf dreidimensionale Strömungen. Für ihre numerischen Simulationen verwenden sie ein Spektralverfahren. Dabei nutzen sie Symmetrieeigenschaften der gesuchten Lösungen aus und reduzieren so die Anzahl der unbekanntenen Koeffizienten. Neben anderen Fluiden betrachten sie auch Rayleigh-Bénard-Konvektion in Quecksilber für Rayleigh-Zahlen im Bereich $2\,000 \leq Ra \leq 2\,500$. Als Konvektionsmuster ergeben sich die in Abb. 2.5 für $Ra = 2\,000$ und $Ra = 2\,500$ wiederge-

gebenen Wanderwellen. Die Autoren finden, daß mit dem Übergang von zwei- zu dreidimensionaler Konvektion eine Reduktion des Wärmeübergangs (und damit der Nusselt-Zahl) verbunden ist. In Fortführung dieser Arbeit betrachten Clever & Busse (1990) den Fall $Pr = 0.01$. Den Übergang von zweidimensionalen stationären Konvektionsrollen zur Wanderwellenkonvektion ermitteln sie für den Fall sehr kleiner Prandtl-Zahl bei $Ra = 1\ 854$. Eine dritte, mit einem Anstieg der Nusselt-Zahl verbundene Verzweigung manifestiert sich im Übergang von symmetrischer zu asymmetrischer Wanderwellenkonvektion. Clever & Busse (1990) betonen, daß sie keine Indizien für das Phänomen einer Trägheitskonvektion finden und die Existenz einer dreidimensionalen Form der Schwungradkonvektion weiterhin unsicher bleibt.

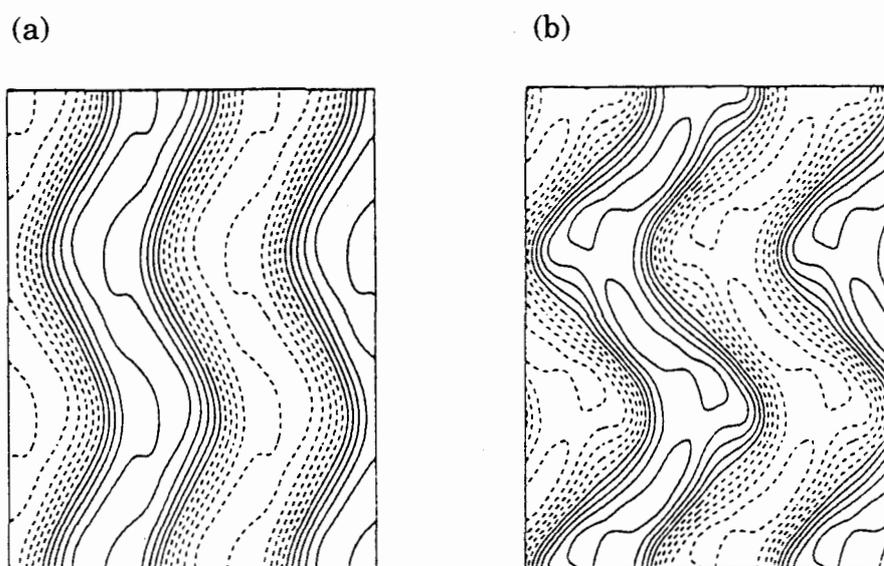


Abb. 2.5: Wanderwellenkonvektion für $Pr = 0.025$. Dargestellt sind Linien gleicher Vertikalgeschwindigkeit in der Mittelebene der Fluidschicht. (a) $Ra = 2\ 000$; (b) $Ra = 2\ 500$; nach Clever & Busse (1987).

Sulem et al. (1985) und Meneguzzi et al. (1987) führen erstmals direkte numerische Simulationen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Quecksilber ($Pr = 0.025$) durch. Die Autoren verwenden ein Pseudo-Spektralverfahren (16·16·33 Knoten) und betrachten die Konvektion bei schwach überkritischen Rayleigh-Zahlen $1\ 708 \leq Ra \leq 2\ 000$. In den horizontalen Richtungen geben sie periodische Randbedingungen vor, wobei sie die Kanalabmessung über die Wellenlänge der am stärksten instabilen Mode der zweidimensionalen Konvektionsrollen festlegen. Bezogen auf die Höhe der Fluidschicht betrachten sie lediglich ein Rechengebiet der Größe $2 : 2.5 : 1$. Beginnend mit zweidimensionalen stationären Konvektionsrollen bei $Ra = 1\ 708$ identifizieren die Autoren mit wachsender

Rayleigh-Zahl verschiedene Strömungszustände. Im Bereich $1\,887 < Ra < 1\,895$ treten dreidimensionale oszillatorische Instabilitäten auf, die zur Wanderwellenkonvektion und zu zeitlich periodischen Lösungen führen. Für $Ra > 1\,900$ beobachten sie eine Modulation der Amplitude der Oszillation und neben der horizontalen Oszillation der Rollen auch eine vertikale Oszillation. In Fortführung dieser Arbeiten untersucht Thual (1992) unter Beibehaltung der Geometrie speziell den Grenzfall $Pr = 0$. Die Ergebnisse stellt er denjenigen der Simulation mit $Pr = 0.025$ gegenüber. Thual (1992) findet, daß die Verzweigungsdiagramme der ersten Instabilitäten in beiden Fällen sehr ähnlich sind. Für $Pr = 0.025$ führt er mit der verfeinerten Auflösung von $32 \cdot 32 \cdot 64$ Knoten Simulationen bis $Ra = 128\,000$ durch und ermittelt die Proportionalität

$$Nu \sim (Ra - Ra_c)^{0.584} . \quad (2.12)$$

Der Exponent ist wesentlich höher als bei den aus Experimenten abgeleiteten Korrelationen (2.6), (2.7), (2.8), (2.9) und (2.10). Die starke Überschätzung des konvektiven Wärmetransportes deutet darauf hin, daß das in der numerischen Simulation zugrundegelegte Rechengebiet deutlich zu klein ist [Grötzbach (1982), (1983)].

2.3 Anforderungen an die numerische Simulation

Die direkte numerische Simulation eines physikalischen Strömungsproblems stellt eine Lösung der dieses Problem beschreibenden exakten mathematischen Gleichungen dar. Die Methode beinhaltet - im Gegensatz zur Grobstruktursimulation oder der statistischen Simulation - keine empirischen Annahmen oder Erweiterungen zur Modellierung physikalischer Vorgänge (vergl. Kapitel 3.4). Es muß aber sichergestellt sein, daß die der Simulation zugrundeliegende räumliche und zeitliche Diskretisierung alle physikalisch relevanten Längen- und Zeitmaßstäbe erfaßt.

Aussagen über die in einer Strömung auftretenden Längenmaßstäbe liefert z.B. das Energiespektrum der räumlichen Fluktuationen. Abb. 2.6 zeigt in schematischer Weise das Spektrum der kinetischen Energie und der Temperaturfluktuationen bei Rayleigh-Bénard-Konvektion in einem Flüssigmetall. Charakteristische Größen des Längenspektrums sind die Kolmogorofflänge η und die makroskopische Wellenlänge λ . Die Kolmogorofflänge kennzeichnet den dissipativen Bereich des Spektrums und ist ein Maß für die Größe der Wirbel, bei der die kine-

tische Energie in Wärme dissipiert wird. Sie ermöglicht damit eine Abschätzung für die Größe der kleinsten mit der Simulation aufzulösenden Skalen. Demgegenüber kann die makroskopische Wellenlänge als ein Maß für die größten in der Strömung auftretenden räumlichen Strukturen angesehen werden.

Bei Naturkonvektion in einem Flüssigmetall ist das Spektrum der Temperaturfluktuationen sehr langwellig. Ursache dafür ist die hohe Wärmeleitfähigkeit der Flüssigmetalle, die zum einen eine weite räumliche Kopplung bewirkt und andererseits kurzwellige Temperaturfluktuationen sehr stark dämpft. Dies äußert sich in der relativ großen "Kolmogorofflänge" η_T . Im Gegensatz zum Temperaturfeld treten im Geschwindigkeitsfeld neben relativ großräumigen Strukturen auch sehr kleine Wirbel auf. Zurückzuführen sind diese auf die nur geringe Zähigkeit der Flüssigmetalle. Diese hat unter anderem eine große Empfindlichkeit der in der Strömung auftretenden dünnen Scherschichten gegenüber Scherinstabilitäten zur Folge.

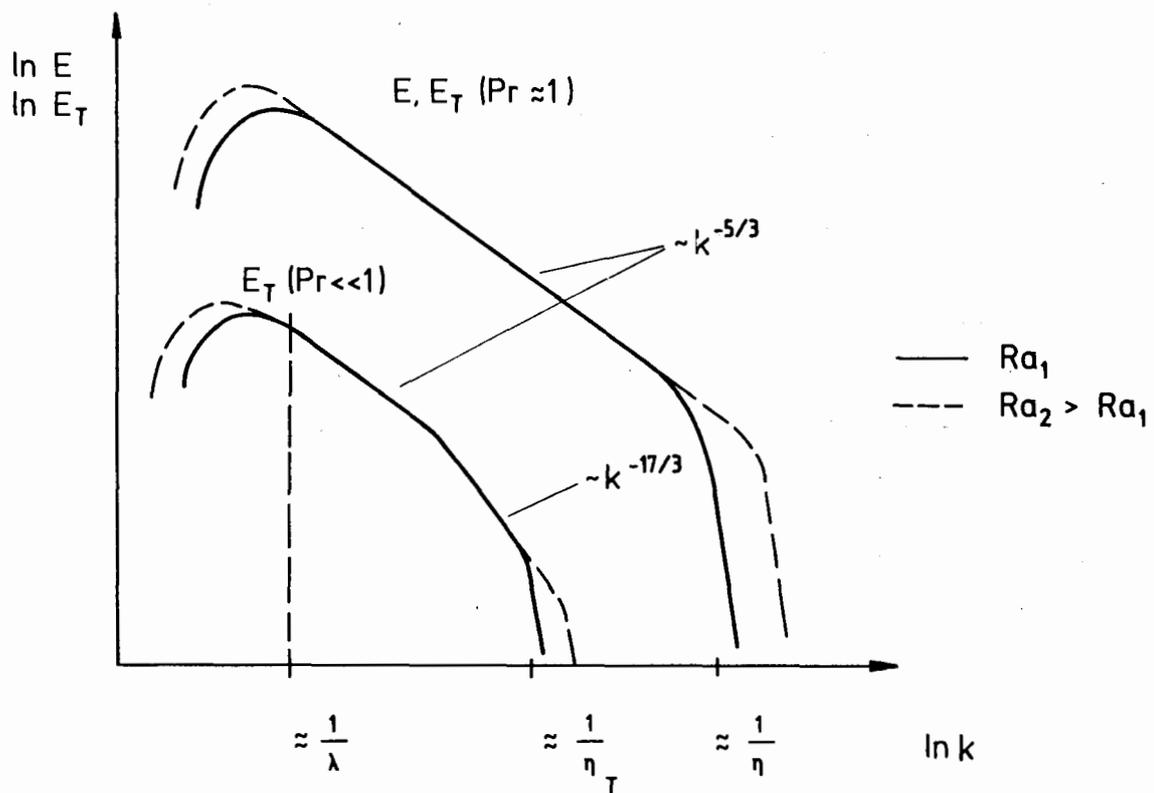


Abb. 2.6: Spektren der turbulenten Fluktuationen der kinetischen Energie E und der Temperatur E_T , aufgetragen über der Wellenzahl k für Flüssigmetallnaturkonvektion. Der Einfluß einer wachsenden Rayleigh-Zahl auf die Spektren ist angedeutet.

Aus der Notwendigkeit, bei einer direkten numerischen Simulation sowohl den großen Längenmaßstab des Temperaturfeldes als auch den sehr kleinen des Geschwindigkeitsfeldes aufzulösen, erwachsen hohe Anforderungen an das Maschennetz. Es sind große Kanalweiten mit sehr feinen Maschen zu diskretisieren, was zwangsläufig auf entsprechend große Maschenanzahlen führt. Andererseits hat das Auftreten sehr kurzweiliger Strukturen im Geschwindigkeitsfeld und das Fehlen derselben im Temperaturfeld zur Folge, daß bei einer Grobstruktursimulation des Geschwindigkeitsfeldes unter Umständen für das Temperaturfeld eine direkte Simulation durchgeführt werden kann. Dies ist der Fall, wenn die kleinsten relevanten Skalen des Geschwindigkeitsfeldes durch das Maschennetz nicht mehr, aber die des Temperaturfeldes noch erfaßt werden [Grötzbach (1981)].

In Abb. 2.6 ist auch der qualitative Einfluß der Rayleigh-Zahl auf die Spektren dargestellt. Eine Erhöhung der Rayleigh-Zahl führt sowohl zum Auftreten noch kurzweiligerer Anteile als auch zur Ausbildung noch größerer Strukturen [Lipps & Somerville (1971), Koschmieder (1974)] und damit zu einer weiteren Verbreiterung des Längenspektrums. Damit deutet sich an, daß direkte numerische Simulationen turbulenter Konvektion in Flüssigmetallen mit den derzeitigen Rechnern und Methoden auf einen unteren Rayleigh-Zahlen-Bereich beschränkt sind.

Eine weitere Besonderheit bei der Naturkonvektion in Fluiden kleiner Prandtl-Zahl ist die langsame zeitliche Entwicklung der Strömung. Typische Einlaufzeiten bei den Experimenten von Kek (1989) in flüssigem Natrium bei einer Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ waren, ausgehend vom Ruhezustand, ca. drei Stunden und etwa eine Stunde bei einer Änderung der angelegten Temperaturdifferenz. Im unteren Rayleigh-Zahlen-Bereich beobachtete er zu bestimmten Zeitabschnitten über Zeiträume bis 800 Sekunden Temperaturoszillationen mit Periodendauern zwischen 80 und 200 Sekunden.

Newell & Whitehead (1969) zeigen, daß sich räumliche Ungleichförmigkeiten von kleiner aber endlicher Amplitude über eine charakteristische Länge \hat{L} durch Diffusion mit der Zeitskala

$$\hat{t} = \frac{1 + Pr}{Pr} \cdot \frac{\hat{L}^2}{\hat{\kappa}}, \quad (2.13)$$

bzw. in dimensionsloser Form mit

$$\tau = \frac{1 + Pr}{\sqrt{Pr}} \sqrt{Ra} \left(\frac{\hat{L}}{\bar{D}} \right)^2 \quad (2.14)$$

ausbreiten. Für Fluide mit $Pr < 1$ ist τ die viskose und anderenfalls die thermische Diffusionszeit. Es ist ersichtlich, daß im Fall kleiner Prandtl-Zahl die Zeit, die eine räumliche Störung benötigt, um sich durch Diffusion im Strömungsfeld ausbreiten zu können, sehr groß wird. Wählt man in einer Simulation ruhendes Fluid und randome Temperaturfluktuationen als Anfangsbedingung, so sind zunächst die molekularen Transportmechanismen dominant und es ist für Flüssigmetalle mit einer langen Transiente hin zu einem eingelaufenen Strömungszustand zu rechnen. Dies läßt, eine vergleichbare Rayleigh-Zahl vorausgesetzt, für Flüssigmetalle eine größere zu simulierende Problemzeit erwarten als für Fluide mittlerer Prandtl-Zahl und wirkt sich damit unmittelbar in einem erhöhten numerischen Aufwand für eine Simulation aus.

3. Mathematische Beschreibung

3.1 Grundgleichungen

Ausgangsbasis für die mathematische Beschreibung reibungs- und auftriebsbehafteter Strömungen sind die physikalischen Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie [siehe z.B. Schlichting (1958)]. In dieser Arbeit werden ausschließlich Newtonsche Fluide betrachtet, bei denen ein lineares isotropes Stoffgesetz für die Schubspannungen in Abhängigkeit der Deformationsgeschwindigkeit angesetzt werden kann. Desweiteren soll von konstanten Stoffwerten der Fluide ausgegangen werden. Insbesondere werden die Medien als inkompressibel angenommen. Lediglich im Auftriebsterm wird entsprechend der Boussinesq-Approximation eine lineare Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur unterstellt. Die Gültigkeit der Boussinesq-Approximation ist für Wasser und Luft bis zu Rayleigh-Zahlen der Größenordnung 10^{17} gesichert, solange die angelegte Temperaturdifferenz nicht zu groß wird [Gray & Giorgini (1976)]. Für flüssiges Natrium ist der Gültigkeitsbereich sogar noch um einige Größenordnungen höher anzusetzen [Sugiyama et al. (1991)]. Als weitere Vereinfachung, deren Gültigkeit unterstellt werden kann, wird die Dissipation als vernachlässigbare Wärmequelle betrachtet und in der Energiegleichung demzufolge nicht als Quellterm berücksichtigt.

Es ist sinnvoll, auf die Betrachtung dimensionsloser Größen überzugehen. Dies führt auf dimensionslose Kennzahlen und bietet den Vorteil, daß unterschiedliche, aber physikalisch ähnliche Stromfelder durch exakt denselben Gleichungssatz beschrieben werden können. Darüber hinaus ergeben sich durch die Normierung auch numerische Vorteile. Da die verschiedenen Terme nun von ähnlicher Größenordnung sind, wird der Fehler bei Rechenoperationen reduziert. Als Längenmaßstab wird bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion üblicherweise der Plattenabstand \hat{D} herangezogen. Die geeignete Bezugsgröße für Geschwindigkeiten in Naturkonvektionsströmungen ist

$$\hat{u}_o = \sqrt{\hat{g}\hat{\beta}\Delta\hat{T}_W\hat{D}}. \quad (3.1)$$

Diese Geschwindigkeit kann als freie Fallgeschwindigkeit eines Fluidteilchens in einer nicht zähen, nicht wärmeleitenden, aber temperaturgeschichteten Flüssigkeit aufgefaßt werden. Als Zeitmaßstab folgt \hat{D}/\hat{u}_o . Dies ist die Brunt-Väisälä-Zeitskala. Sie gibt die Periodendauer der Schwingung eines Fluidballens in einer mit dem Temperaturgradienten $d\hat{T}/d\hat{x}_3 = \Delta\hat{T}_w/\hat{D}$ stabil geschichteten, nicht wär-

meleitenden und reibungsfreien Fluidschicht an. Für die Normierung der Temperatur wird die Beziehung

$$T = \frac{\hat{T} - \hat{T}_{W2}}{\hat{T}_{W1} - \hat{T}_{W2}} = \frac{\hat{T} - \hat{T}_{W2}}{\Delta \hat{T}_W} \quad (3.2)$$

gewählt. Hier ist \hat{T}_{W1} und \hat{T}_{W2} die Temperatur der unteren und oberen Wand. Für den dimensionslosen Druck folgt die Beziehung $p = \hat{p} / (\hat{\rho} \hat{u}_o^2)$.

Damit ergibt sich für ein kartesisches Koordinatensystem der folgende dimensionslose Gleichungssatz zur mathematischen Beschreibung des physikalischen Problems:

- die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.3)$$

- die Navier-Stokes-Gleichungen ($i = 1, 2, 3$)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} \\ + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - (T_{ref} - T) \delta_{i3} \end{aligned} \quad (3.4)$$

- die Energiegleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial (T u_j)}{\partial x_j} = \frac{1}{\sqrt{Ra \cdot Pr}} \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} \quad (3.5)$$

Es ist zu beachten, daß die Einsteinsche Summationskonvention anzuwenden ist. Das heißt, über paarweise auftretende Indizes ist von 1 bis 3 zu summieren.

3.2 Rand- und Anfangsbedingungen

Mit den Gleichungen (3.3 - 3.5) liegt ein geschlossenes System von fünf gekoppelten partiellen Differentialgleichungen für die fünf abhängigen Variablen $\underline{u} = (u_1, u_2, u_3)$, p und T vor. Zur Lösung dieses Gleichungssystems für die in Abb. 3.1 skizzierte Geometrie einer ebenen Fluidschicht, die von zwei horizontalen Platten begrenzt ist, ist die Spezifikation von Rand- und Anfangsbedingungen notwendig. Für das Geschwindigkeitsfeld wird an beiden horizontalen Wänden die Haftbedingung

$$\underline{u} \left(x_1, x_2, x_3 = 0, t \right) = \underline{u} \left(x_1, x_2, x_3 = 1, t \right) = 0 \quad (3.6)$$

vorgegeben. Für das Temperaturfeld werden an beiden Wänden isotherme Randbedingungen vorgeschrieben. Mit der Normierungsbeziehung (3.2) folgt für die dimensionslosen Wandtemperaturen

$$T \left(x_1, x_2, x_3 = 0, t \right) = T_{W1} = 1 \quad (3.7a)$$

$$T \left(x_1, x_2, x_3 = 1, t \right) = T_{W2} = 0 . \quad (3.7b)$$

Zur Abbildung der in den horizontalen Richtungen theoretisch unendlich ausgedehnten Fluidschicht des Rayleigh-Bénard-Problems werden in der numerischen

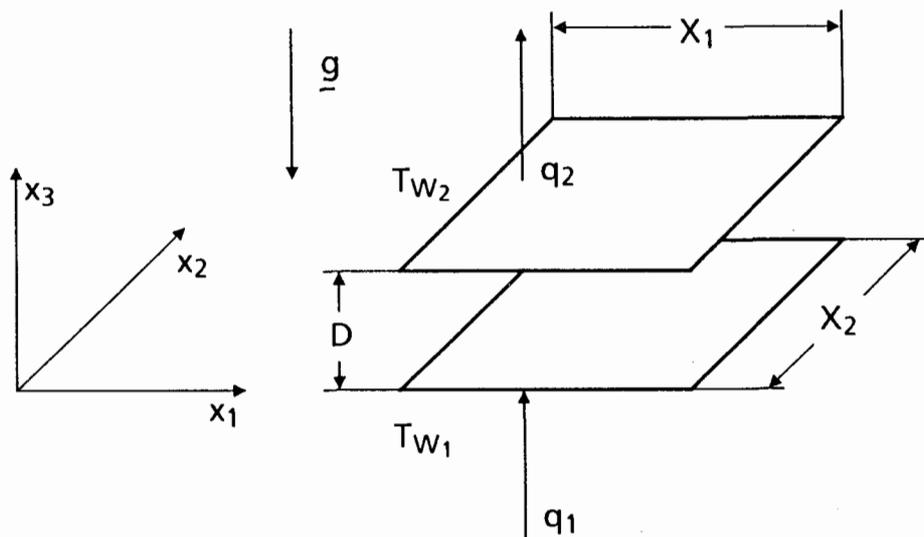


Abb.: 3.1: Geometrie der betrachteten Fluidschicht

Simulation periodische Randbedingungen verwendet. Mit ϕ als Platzhalter für \underline{u} und T und den Periodenlängen X_1 und X_2 als den auf die Schichthöhe \hat{D} bezogenen Abmessungen des Rechengebietes in x_1 - bzw. x_2 -Richtung, gilt:

$$\phi \left(x_1 + n X_1, x_2 + m X_2, x_3 \right) = \phi \left(x_1, x_2, x_3 \right), \quad n, m \in \mathbb{Z} \quad (3.8)$$

Eine angemessene Wahl der Periodenlängen ist eine wichtige Voraussetzung für die korrekte Abbildung des physikalischen Problems durch die Numerik (siehe auch Abschnitt 5.1.1).

Als Anfangsbedingung für das Geschwindigkeitsfeld wird von einem in Ruhe befindlichen Fluid ausgegangen. Für das Temperaturfeld wird ein dem Wärmeleitungsstatus entsprechendes lineares Temperaturprofil vorgegeben, dem randomisierte Störungen kleiner Amplitude, typischerweise 10% von ΔT_W , überlagert sind. Diese Vorgehensweise erscheint für kleine Rayleigh-Zahlen sinnvoll, da so sichergestellt ist, daß nicht durch ein vorgegebenes Geschwindigkeitsfeld ein Strömungspfad aufgeprägt wird, der im Verlauf der Simulation nicht mehr verlassen werden kann. Für größere Rayleigh-Zahlen wird eine andere Vorgehensweise gewählt. Hier wird ein im statistischen Sinne eingelaufener Strömungszustand einer kleineren Rayleigh-Zahl vorgegeben. Dies erscheint zulässig, da man davon ausgehen kann, daß das Turbulenzfeld mit wachsender Rayleigh-Zahl genug „Störungsenergie“ enthält, um das vorgegebene Strömungsmuster der kleineren Rayleigh-Zahl in den der neuen Rayleigh-Zahl entsprechenden Zustand zu überführen.

3.3 Diskretisierung des Rechengebietes

Analytische Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen sind nur für wenige spezielle Geometrie- und Randbedingungskombinationen bekannt [Wang (1989, 1991)] und beschränken sich auf laminare Strömungsvorgänge. Turbulente Strömungen sind gekennzeichnet durch unregelmäßige zeitliche und räumliche Schwankungen, sind daher prinzipiell zeitabhängig und dreidimensional und bezüglich ihrer lokalen momentanen Eigenschaften einer analytischen Behandlung nicht zugänglich. Vielmehr ist eine turbulente Strömung als ein chaotischer Vorgang zu verstehen, dessen Eigenschaften nicht deterministisch, sondern nur mit den Methoden der Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik erfaßt und beschrieben

ben werden können. Von der mathematischen Seite kommt daher nur eine numerische Integration der Grundgleichungen in Betracht.

Grundlage eines numerischen Lösungsverfahrens ist die Einführung einer räumlichen Diskretisierung. Hierzu wird das Rechengebiet mit einem Maschennetz überzogen. Dieses ist definiert durch eine Menge von Flächen $x_i = \text{konst.}$. Im folgenden werden in x_1 - und x_2 -Richtung äquidistante Maschenweiten Δx_1 und Δx_2 vorausgesetzt. Demgegenüber wird in x_3 -Richtung eine nicht-äquidistante Diskretisierung gewählt. Damit ist das Rechengebiet in endliche Kontrollvolumina unterteilt. Das Volumenelement $V_{i,j,k}$ umfaßt dabei den räumlichen Bereich

$$\begin{aligned} x_1 |_{i-1} &= (i-1) \Delta x_1 \leq x_1 \leq x_1 |_i = i \cdot \Delta x_1, \\ x_2 |_{j-1} &= (j-1) \Delta x_2 \leq x_2 \leq x_2 |_j = j \cdot \Delta x_2, \\ x_3 |_{k-1} &= \sum_{l=1}^{k-1} \Delta x_3(l) \leq x_3 \leq x_3 |_k = \sum_{l=1}^k \Delta x_3(l). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Zur Diskretisierung einer kontinuierlichen Strömungsgröße ϕ wird eine Mittelungsoperation über ein Volumenelement $V_{i,j,k}$ definiert:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3(k)}$$

$$\int_{x_1 |_{i-1}}^{x_1 |_i} \int_{x_2 |_{j-1}}^{x_2 |_j} \int_{x_3 |_{k-1}}^{x_3 |_k} \phi(x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3. \quad (3.10)$$

Wendet man den Mittelungsoperator (3.10) auf die Grundgleichungen (3.3) - (3.5) an, so kann in den Volumenintegralen der Ableitungen erster Ordnung eine Integration formal ausgeführt werden [Schumann (1973)]. Es ergeben sich Differenzen von Termen, in denen nur noch über zwei räumliche Variablen zu integrieren ist. Die Volumenmittelung $\bar{\phi}$ wird in eine Differenzbildung von Flächenmittelwerten $\bar{\phi}_i$ überführt, wobei i den Index der Richtung der Flächennormalen darstellt. Für den ersten Term der Kontinuitätsgleichung kommt z.B.

$$\begin{aligned}
\overline{V} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) &= \frac{1}{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3} \\
\int_{\Delta x_1} \int_{\Delta x_2} \int_{\Delta x_3} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) dx_1 dx_2 dx_3 \\
&= \frac{1}{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3} \int_{\Delta x_2} \int_{\Delta x_3} \\
&\quad \left[u_1(i\Delta x_1, x_2, x_3) - u_1((i-1)\Delta x_1, x_2, x_3) \right] dx_2 dx_3 \\
&= \frac{1}{\Delta x_1} \left(\overline{u_1(i\Delta x_1, x_2, x_3)} - \overline{u_1((i-1)\Delta x_1, x_2, x_3)} \right) \\
&= \delta_1 \overline{u_1} . \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Die Grundgleichungen in Differenzenform ergeben sich mit dieser Schreibweise zu

$$\delta_i \overline{u_i} = 0 \tag{3.12}$$

$$\overline{V} \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} \right) + \delta_j \left(\overline{u_i u_j} \right) = - \delta_i \overline{p} +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{Gr}} \delta_j \overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)} + \left(T_{ref} - \frac{V}{T} \right) \delta_{i3} \quad (3.13)$$

$$\overline{\left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)} + \delta_j \overline{\left(T u_j \right)} = \frac{1}{\sqrt{Ra \cdot Pr}} \delta_j \overline{\left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right)} \quad (3.14)$$

Da die auftretenden Flächenmittelwerte je nach Geschwindigkeitskomponente über ein anderes Flächenstück der Masche zu bilden sind, ist es zweckmäßig, ein versetztes Maschennetz ("staggered grid") zu benutzen. Dabei werden die skalaren Größen Druck und Temperatur im Maschenmittelpunkt definiert, die Geschwindigkeiten dagegen jeweils um eine halbe Maschenweite in Richtung der entsprechenden Komponente versetzt. Diese Vorgehensweise gestattet es, die Kontinuitätsgleichung mit quadratischer Fehlerordnung bezüglich der Maschenweite zu diskretisieren, und so die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes mit erhöhter Genauigkeit sicherzustellen. Desweiteren spiegelt ein versetztes Maschennetz in anschaulicher Weise wider, daß eine Druckdifferenz zwischen zwei benachbarten Maschenmittelpunkten die treibende Kraft für die dazwischenliegende Geschwindigkeitskomponente ist. Eine ausführlichere Diskussion über die Vorteile eines versetzten Maschennetzes findet man bei Patankar (1980).

In den volumengemittelten Grundgleichungen (3.13) und (3.14) treten auf der rechten Seite in den diffusiven Termen Flächenmittelwerte von Differentialquotienten auf. Diese werden durch Differenzenquotienten der diskreten Variablen approximiert, z.B.

$$\overline{\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)} \approx \delta_1 \overline{u_1} \quad (3.15)$$

Diese Näherung ist für ein äquidistantes Gitter der Maschenweite Δx_1 von zweiter Ordnung genau, d.h. der Abbruchfehler ist von der Ordnung $O(\Delta x_1^2)$. Für Differentialquotienten in x_3 -Richtung, in der eine nichtäquidistante Diskretisierung

vorgesehen ist, wird die quadratische Fehlerordnung der Approximation durch einen parabolischen Ansatz sichergestellt [siehe hierzu Schumann (1973), S. 73].

Durch die Betrachtung volumen- bzw. flächengemittelter Größen auf einem versetzten Maschennetz treten in den Differenzenformeln Größen an Stellen auf, an denen sie nicht definiert sind. Diese werden durch arithmetische Mittelung über die Nachbarmaschen angenähert, wobei nicht-äquidistante Maschen durch entsprechende Gewichtung berücksichtigt werden. Ebenso werden Größen, die als Volumenmittelwert definiert sind, aber als Flächenmittelwert benötigt werden, durch lineare Mittelung aus den Werten angrenzender Maschen berechnet. Da Geschwindigkeiten nur als Mittelwerte über senkrecht zur Geschwindigkeitskomponente orientierte Flächen vorliegen, müssen Ausdrücke, bei denen die Richtung der Geschwindigkeitskomponente in der Ebene der Mittelungsfläche liegt, ebenfalls approximiert werden. Die Definition der einzelnen Mittelungsoperationen sowie die getroffenen Näherungen findet man bei Schumann (1973) und Mauch (1991).

Das in TURBIT realisierte Diskretisierungsverfahren der Finiten Differenzen bietet als wesentliche Vorteile die relativ einfache Umsetzbarkeit in ein Rechenprogramm und die einfache Implementierbarkeit von Randbedingungen für die hier betrachtete Plattengeometrie. Nachteilig ist die durch Abbruchfehler bedingte beschränkte Genauigkeit. Eine höhere Genauigkeit weisen Spektralverfahren auf, bei denen für die abhängigen Variablen eine Reihenentwicklung durchgeführt wird. Ein wichtiger Vorteil dieser Methode ist die Möglichkeit der analytischen Bestimmung von Gradienten der Strömungsgrößen. Als Nachteile sind die hohe Komplexität und schwierig zu implementierende Randbedingungen aufzuführen. Finite Differenzen- und Spektralverfahren sind jedoch gleichermaßen ungeeignet, wenn es um Strömungsvorgänge in oder um unregelmäßige Gebiete geht. Hier ist die Finite Elemente-Methode zu bevorzugen, bei der das Rechengebiet in einzelne Teilbereiche (üblicherweise Tetraeder) aufgeteilt wird und auch krummlinige Gebiete abgebildet werden können. Vorteilhaft ist auch die Möglichkeit einer lokalen Gitterverfeinerung in für das Strömungsverhalten sensitiven Bereichen des Rechengebietes. Diesen Vorteilen steht auf der anderen Seite ein großer numerischer Aufwand zur Lösung der auftretenden komplexen Gleichungssysteme gegenüber. Einen detaillierteren Überblick über die einzelnen Verfahren sowie deren Vor- und Nachteile findet man bei Fasel (1979).

3.4 Simulationsmethode

Die Integration der Grundgleichungen über endliche Maschenvolumina ist für die kontinuierlich variierenden Strömungsgrößen gleichbedeutend mit einer Filtrierung. Treten in dem realen physikalischen Problem Wirbel auf, deren Abmessungen kleiner als die Maschenweite sind, so können turbulente Austauschvorgänge, die auf diese Wirbel zurückzuführen sind, mit den volumengemittelten Gleichungen nicht beschrieben werden. Im Energiehaushalt der Strömung spielen diese Wirbel jedoch eine wesentliche Rolle, da sie die in großräumigen Wirbelstrukturen erzeugte kinetische Energie in Wärme dissipieren (Vorstellung der Energiekaskade). Für die numerische Simulation bedeutet dies, daß der physikalische Einfluß dieser nicht durch das Maschennetz aufgelösten Wirbel modelliert werden muß. Dies führt auf die Methode der **Grobstruktursimulation** ("large-eddy-simulation"). Deren Grundprinzip ist die Aufspaltung einer Größe ϕ in den sogenannten Grobstrukturanteil $\bar{\phi}$ und den nicht durch das Maschennetz erfaßten Feinstrukturanteil ϕ_{FS}

$$\phi = \bar{\phi} + \phi_{FS} \quad (3.16)$$

Führt man diesen Ansatz in die Grundgleichungen ein, so treten nach der Volumenmittelung Zusatzterme auf, die auf die nichtlinearen konvektiven Glieder zurückzuführen sind und formal den diffusiven Termen der Impuls- bzw. Energiegleichung zugeschlagen werden. Diese sogenannten Feinstrukturspannungen und -wärmeströme repräsentieren den Einfluß der nicht durch das Maschennetz aufgelösten Wirbel. Die entsprechenden physikalischen Vorgänge werden bei der Grobstruktursimulation empirisch über das sogenannte Feinstrukturmodell berücksichtigt. Einen Überblick über die Methode der Grobstruktursimulation sowie übliche Feinstrukturmodelle bieten die Arbeiten von Ferziger (1983) und Voke & Collins (1983).

Bei der **statistischen Simulation** werden die Strömungsvariablen in einen zeitlichen Mittelwert und einen Schwankungswert aufgespalten, und es erfolgt eine Mittelung der Grundgleichungen über den gesamten zeitlichen Frequenzbereich (siehe hierzu Abschnitt 5.6.1). Damit setzen sich die zu modellierenden Reynoldsschen Spannungen und turbulenten Wärmeströme aus Anteilen aller im betrachteten Strömungsproblem vorhandenen Frequenzen zusammen. Ein großer Vorteil der Grobstruktursimulation, bei der nur eine Mittelung über einen begrenzten *räumlichen* Frequenzbereich erfolgt, gegenüber der statistischen Simulation ist,

daß das Feinstrukturmodell mit zunehmender Verfeinerung des Maschennetzes an Bedeutung verliert. Ist das Gitter so fein, daß es auch die kleinsten Skalen des physikalischen Problems erfaßt, so geht die Grobstruktursimulation über in eine **direkte numerische Simulation**. Dann wird das physikalische Problem vollständig durch die Gleichungen (3.12-3.14) beschrieben und es ist keine darüber hinausgehende empirische Modellierung physikalischer Vorgänge notwendig. Einen detaillierten Überblick über die verschiedenen numerischen Verfahren zur Simulation inkompressibler turbulenter Strömungen findet man bei Ferziger (1987).

In dieser Arbeit werden ausschließlich mit der direkten Simulationsmethode erzielte Ergebnisse vorgestellt. Es wird also stets angenommen, daß der Feinstrukturanteil ϕ_{FS} verschwindet und somit keine Variationen der Strömungsgrößen innerhalb eines Maschenvolumens auftreten. Ein solches, der direkten Simulation des Problems angemessenes, Maschennetz zu spezifizieren und damit die getroffenen Voraussetzungen zu rechtfertigen, ist eine wichtige Forderung, die an den Programmbenutzer zu stellen ist. Nur so können mit der direkten Simulationsmethode aussagefähige und belastbare Ergebnisse erzielt werden.

3.5 Zeitintegrationsverfahren

In Abschnitt 3.3 war es über die Einführung einer räumlichen Diskretisierung möglich, die Differentialquotienten der Ortsableitungen durch Differenzenquotienten der diskreten Variablen anzunähern. In diesem Abschnitt steht die Diskretisierung des Zeitableitungsterms im Vordergrund. Diese ist notwendig, um eine Integration der Grundgleichungen über der Zeit durchführen zu können.

3.5.1 Gegenüberstellung expliziter und impliziter Verfahren

Prinzipiell ist zu unterscheiden zwischen expliziten und impliziten Zeitintegrationsverfahren. Bei ersteren erfolgt die Berechnung der Werte einer neuen Zeitebene unmittelbar aus den bekannten Werten zurückliegender Zeitebenen. Demgegenüber sind bei impliziten Zeitintegrationsverfahren räumlich benachbarte Werte der neuen Zeitebene miteinander gekoppelt. Solche Verfahren erfordern daher für jeden Zeitschritt die Lösung eines Gleichungssystems und beinhalten demzufolge gegenüber expliziten Verfahren einen größeren numerischen Aufwand. Ein weiterer Vorteil expliziter Verfahren ist neben den geringeren Kosten

pro Zeitschritt die einfachere Implementierung in Rechenprogramme. Nachteilig gegenüber impliziten Methoden sind die unter Umständen deutlich strengeren Stabilitätskriterien. Desweiteren behandeln explizite Verfahren die Gleichungen mehr als ein Anfangs- denn ein Randwertproblem, wie es für turbulente Strömungen zutreffender wäre. Bei impliziten Verfahren ist dagegen ein unmittelbarer Einfluß der Randbedingungen auf die neue Zeitebene gewährleistet.

Bei der numerischen Simulation zeitabhängiger Strömungsvorgänge ist es wichtig, daß die Lösung nicht nur im Raum, sondern auch in der Zeit möglichst genau ist. Als eine ausgewogene numerische Methode erscheint eine solche, bei der die Fehler durch die Zeitintegration in etwa gleich groß sind wie diejenigen, die durch das räumliche Diskretisierungsverfahren eingebracht werden. Sind räumliches Diskretisierungsverfahren und Zeitintegrationsverfahren ausgewählt, so bestimmt diese Genauigkeitsüberlegung die Zeitschrittweite. Dabei muß das Zeitintegrationsverfahren für die so ausgewählte Zeitschrittweite stabil sein. Ist dies für ein explizites Schema der Fall, so besteht keine Notwendigkeit, die Extrakosten eines impliziten Verfahrens in Kauf zu nehmen [Ferziger (1983)].

3.5.2 Euler-Verfahren und Projektionsmethode von Chorin

Das einfachste Zeitintegrationsverfahren ist das explizite Euler-Verfahren, bei dem die Zeitableitung durch eine Vorwärtsdifferenz approximiert wird. Betrachtet man die Impulsgleichung und stellen K_I , D_I , A_I und P_I die Finite Differenzenapproximation der konvektiven, diffusiven, Auftriebs- und Druckterme dar, so lautet das Integrationsschema

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = - K_I^n + D_I^n + A_I^n - P_I^n. \quad (3.17)$$

Hierin ist Δt die Zeitschrittweite, n der Index zur Kennzeichnung der Zeitdiskretisierung und i repräsentiert die drei Komponenten der Impulsgleichung ($i = 1,2,3$). Führt man die Integration aus, so ergibt sich im allgemeinen ein Geschwindigkeitsfeld, das der Kontinuitätsgleichung nicht genügt.

Ein häufig verwendetes Verfahren, die Divergenzfreiheit von \underline{u}^{n+1} sicherzustellen, ist die Projektionsmethode von Chorin (siehe z.B. Peyret & Taylor (1983)). Die Vorgehensweise ist wie folgt. Man berechnet zunächst unter Vernachlässigung

der Druckterme über

$$\frac{u_i^* - u_i^n}{\Delta t} = -K_I^n + D_I^n + A_I^n \quad (3.18)$$

eine Näherung \underline{u}^* für das Geschwindigkeitsfeld \underline{u}^{n+1} . Dieses ist gemäß

$$\frac{\underline{u}^{n+1} - \underline{u}^*}{\Delta t} = -\nabla p^{n+1} \quad (3.19)$$

um den Druckeinfluß zu korrigieren. Für das unbekannte Druckfeld p^{n+1} kann durch Anwendung des Divergenzoperators auf Gl. (3.19) über die Forderung der Divergenzfreiheit für \underline{u}^{n+1} eine Bestimmungsgleichung abgeleitet werden:

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \underline{u}^* \quad (3.20)$$

Man kann zeigen, daß für diese (diskretisierte) Druck-Poissongleichung Neumannsche Randbedingungen an den Wänden vorzuschreiben sind. Ist Gl. (3.20) gelöst, so kann aus Gl. (3.19) das divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld \underline{u}^{n+1} der neuen Zeitebene berechnet werden.

Es ist darauf hinzuweisen, daß die Lösung der Druck-Poissongleichung für jeden Zeitschritt erfolgen muß und einen erheblichen numerischen Aufwand bedeutet. Die Verwendung hocheffizienter Poisson-Löser stellt deshalb eine wesentliche Voraussetzung dar, um die Gesamt-CPU-Zeit der Simulationsrechnung möglichst gering zu halten. Auf den Lösungsalgorithmus des in TURBIT verwendeten Poisson-Lösers wird in Abschnitt 4.7 ausführlich eingegangen.

3.5.3 Euler-Leapfrog-Verfahren

In TURBIT wird für die Integration der Impuls- und Energiegleichung nicht das Euler-Verfahren, sondern das (ebenfalls explizite) Euler-Leapfrog-Verfahren verwendet. Die Zeitintegration läuft dabei nach einem festen, sich wiederholenden und typischerweise $N = 40$ Zeitschritte umfassenden Zyklus ab. Dieser beginnt mit einem Euler-Schritt, dem $N-2$ Leapfrog-Schritte folgen, und endet mit einem abschließenden gemischten Euler-Leapfrog-Schritt. Der im Prinzip instabile

Euler-Schritt zu Beginn des Integrationszyklusses ist notwendig, da bei der Integration aus den Anfangswerten nur eine Zeitebene bekannt ist und das auf den Werten zweier zurückliegender Zeitebenen beruhende Leapfrog-Verfahren deshalb nicht verwendet werden kann. Das Leapfrog-Verfahren weist für diffusionsdominierte Probleme eine nur schwache Kopplung benachbarter Zeitebenen auf. Dies kann zum Auftreten zeitlicher Oszillationen in der Lösung führen. Um solche eventuell vorhandenen $2\Delta t$ -Oszillationen zu dämpfen, wird nach einer bestimmten Anzahl von Leapfrog-Schritten ein abschließender gemischter Euler-Leapfrog-Integrationsschritt ausgeführt.

Übernimmt man zur Charakterisierung eines allgemeinen, drei Zeitebenen umfassenden Zeitintegrationsverfahrens die Schreibweise von Beam & Warming (1982), so können diese z.B. für die Energiegleichung (mit K_T und D_T als Abkürzung für die konvektiven und diffusiven Terme) in dem Schema

$$\begin{aligned}
 & (1 + \xi) T^{n+1} - (1 + 2\xi) T^n + \xi T^{n-1} = \\
 & - \Delta t \left[\theta_K K_T^{n+1} + (1 - \theta_K - \phi_K) K_T^n + \phi_K K_T^{n-1} \right] \\
 & + \Delta t \left[\theta_D D_T^{n+1} + (1 - \theta_D - \phi_D) D_T^n + \phi_D D_T^{n-1} \right] \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

zusammengefaßt werden. Die expliziten Werte der Größen ξ , θ_K , ϕ_K , θ_D und ϕ_D sind für das Euler-Verfahren, das Leapfrog-Verfahren und für den Mittelungsschritt zusammen mit der Fehlerordnung der entsprechenden Methode in Tabelle 3.1 angegeben.

Tab. 3.1: Faktoren in Gl. (3.21) für die verschiedenen in TURBIT verwendeten Integrations Schritte

Verfahren	ξ	θ_K	ϕ_K	θ_D	ϕ_D	Fehlerordnung
Euler	0	0	0	0	0	1
Leapfrog	-1/2	0	0	0	1	2
gemischt	-1/3	0	0	0	1	1

Nach Abschluß jedes Makro-Integrationszyklusses erfolgt eine Neuberechnung der Zeitschrittweite. Schumann (1973) leitet mit Hilfe einer linearen Von Neumann-Stabilitätsanalyse

$$\Delta t_{max} = \frac{1}{\frac{|u_i|_{max}}{\Delta x_i} + 4 \frac{\mu}{\Delta x_i^2}} \quad (3.22a)$$

$$\text{mit } \mu = \text{Max} \left(\nu + \nu_t, \kappa + \kappa_t \right) \quad (3.22b)$$

als Stabilitätskriterium zur Bestimmung der maximal zulässigen Zeitschrittweite ab. Hierin stellen ν und κ die molekularen, ν_t und κ_t die turbulenten Diffusivitäten von Impuls und Energie dar. Für die in Kapitel 3.1 eingeführte Normierung ist $\nu = 1/\sqrt{Gr}$ und $\kappa = 1/\sqrt{Ra \cdot Pr}$. Die turbulenten Diffusivitäten sind nur für den Fall der Grobstruktursimulation zu berücksichtigen. Die vorliegende Arbeit befaßt sich ausschließlich mit direkten numerischen Simulationen, so daß stets

$$\nu_t = \kappa_t = 0, \quad (3.23)$$

und damit

$$\mu = \text{Max} \left(\nu, \kappa \right) \quad (3.24)$$

vorausgesetzt wird. Die tatsächlich verwendete Zeitschrittweite ist dann

$$\Delta t = SF \cdot \Delta t_{max} \quad 0 < SF \leq 1 \quad (3.25)$$

wobei für den Sicherheitsfaktor SF typischerweise Werte zwischen 0.5 und 0.8 vorgegeben werden.

Man erkennt, daß Δt_{max} in starker Weise von den Maschenweiten Δx_i abhängt. Eine feine räumliche Diskretisierung zieht damit automatisch eine entsprechend feine Diskretisierung in der Zeit nach sich. Dies ist anschaulich, wenn man sich klar macht, daß ein explizites Zeitintegrationsverfahren nur dann sinnvolle Er-

gebnisse liefert, wenn sichergestellt ist, daß innerhalb einer Zeitschrittweite keine physikalische Information weiter als eine Maschenweite transportiert wird. Vorhandene physikalische Transportmechanismen sind Konvektion und Diffusion von Impuls und Energie. Für den konvektiven Transportprozeß führt obige anschauliche Stabilitätsbetrachtung auf das bekannte Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium (kurz: CFL-Kriterium)

$$C = \frac{\Delta t \cdot |u_i|_{max}}{\Delta x_i} \leq 1, \quad (3.26)$$

das sich aus dem Stabilitätskriterium (3.22) für den Spezialfall $\mu = 0$ (d.h. keine Diffusion) ergibt. Hierin ist C die Courant-Zahl. Entsprechend erhält man für den Fall $|u_i|_{max} = 0$ (d.h. keine Konvektion) als Kriterium für die Diffusionszahl D das Ergebnis

$$D = \frac{\mu \Delta t}{\Delta x_i^2} \leq \frac{1}{4}. \quad (3.27)$$

4. Methodische Erweiterung von TURBIT um ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren

Im folgenden soll das Stabilitätskriterium des Euler-Leapfrog-Verfahrens speziell im Hinblick auf die direkte numerische Simulation von Naturkonvektion in Flüssigmetallen analysiert werden. Dabei wird sich zeigen, daß ein vollexplizites Zeitintegrationsverfahren für diesen Anwendungsfall äußerst ineffizient ist, da die zulässige Zeitschrittweite durch die Auflösung der sehr kleinen Zeitskala des thermischen Diffusionsprozesses stark beschränkt wird. Wesentlich effektiver sind Verfahren, deren Zeitschrittweite sich an der für die Turbulenz relevanten und deutlich größeren Zeitskala der konvektiven Transportprozesse orientiert. Das folgende Kapitel befaßt sich daher mit der methodischen Erweiterung von TURBIT um ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung, um damit effiziente numerische Simulationen turbulenter Naturkonvektion in Flüssigmetallen zu ermöglichen.

4.1 Analyse des Stabilitätskriteriums des Euler-Leapfrog-Verfahrens

Die aus dem Stabilitätskriterium (3.22) resultierende zulässige Zeitschrittweite Δt_{max} des Euler-Leapfrog-Verfahrens hängt in starker Weise von den Maschenweiten Δx_i ab. Bei der direkten numerischen Simulation von Kanalströmungen ist es üblich, in der Richtung senkrecht zu Wänden eine nicht-äquidistante Diskretisierung vorzunehmen. Dies ist sinnvoll, da zur Auflösung der viskosen bzw. thermischen Grenzschicht die Wandmaschen im allgemeinen deutlich feiner gewählt werden müssen, als es für Maschen in wandfernen Regionen zur Auflösung der dortigen kleinsten Wirbel notwendig ist [Grötzbach (1982)]. Da für die Zeitskala des konvektiven Transportprozesses die Proportionalität

$$\Delta t_{max \text{ Konvektion}} \sim \Delta x, \quad (4.1)$$

für die der Diffusion aber

$$\Delta t_{max \text{ Diffusion}} \sim \Delta x^2 \quad (4.2)$$

gilt (vergl. Gl. (3.26) und (3.27)), wird bei einer direkten Simulation die Zeitschrittweite wegen $\Delta x_{3Wand} \ll 1$ im wesentlichen durch die Stabilitätsanforde-

rungen der Diffusionsprozesse bestimmt. Dies gilt für Naturkonvektion umso mehr, als hier die in das Stabilitätskriterium des konvektiven Transportprozesses eingehenden Maximalgeschwindigkeiten im allgemeinen deutlich niedriger sind als bei Zwangskonvektion. Betrachtet man speziell Flüssigmetalle mit ihren sehr kleinen Prandtl-Zahlen, so müssen die Wandmaschen wegen der sehr dünnen viskosen Grenzschicht besonders fein gewählt werden, während zur Auflösung der deutlich dickeren thermischen Grenzschicht im Prinzip weitaus größere Maschenweiten ausreichen würden.

In das Stabilitätskriterium (3.22) geht wegen $\mu = \text{Max}(\nu, \kappa)$ nur der effektivere der beiden molekularen Transportprozesse ein. In Flüssigmetallen ist κ um gut 2 Größenordnungen größer als ν , und somit ist die thermische Diffusion der Transportprozeß, der die Zeitschrittweite bestimmt und diese auf wesentlich kleinere Werte beschränkt, als es für die numerische Stabilität des viskosen Diffusions- und des konvektiven Transportprozesses notwendig wäre. Diese starke Zeitschrittlimitierung bringt bei der direkten numerischen Simulation von Naturkonvektion in Flüssigmetallen mit einem vollexpliziten Zeitintegrationsverfahren enorme Rechenzeitanforderungen mit sich.

Vom physikalischen Gesichtspunkt wird Turbulenz entscheidend durch konvektive Vorgänge bestimmt. Es ist daher sinnvoll, ein numerisches Verfahren zu verwenden, dessen Stabilitätseigenschaften im wesentlichen durch die Zeitskala des Konvektionsprozesses (also dem CFL-Kriterium) bestimmt ist und das nicht an die zeitliche Auflösung der für die Turbulenz irrelevanten hochfrequenten thermischen Diffusionsmechanismen gebunden ist. Dies kann erreicht werden durch ein Zeitintegrationsverfahren, bei dem die viskosen und thermischen Diffusionsterme implizit behandelt werden. Eine implizite Behandlung der konvektiven Terme bringt jedoch keine weiteren Vorteile, da die direkte numerische Simulation turbulenter Strömungen nur dann sinnvoll ist, wenn nicht nur die kleinsten Strukturen der Turbulenz, sondern auch deren Zeitskala aufgelöst wird (vergl. Schumann et al. (1987)). Aus diesem Grund verwenden nahezu alle Rechenprogramme zur direkten Turbulenzsimulation Verfahren, bei denen die konvektiven Terme explizit behandelt werden.

Eine Abschätzung der theoretisch mit halbimpliziten Verfahren erreichbaren Steigerung der Zeitschrittweite ist möglich, wenn man ein typisches Maschennetz für eine direkte numerische Simulation zugrunde legt und Werte für die Maximalgeschwindigkeiten aus vorhandenen Simulationsergebnissen für Naturkonvektion in Flüssigmetallen übernimmt. Die Ergebnisse einer solchen Abschät-

zung sind für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ und die Prandtl-Zahlen von Quecksilber und Natrium in Tabelle 4.1 zusammengefaßt.

Tab. 4.1: Zeitschrittanalyse angestrebter Simulationen: $Ra = 6\,000$,
Maschennetz $180 \cdot 180 \cdot 32$, $\Delta x_{1,2} = 0.044$, $0.005 \leq \Delta x_3 \leq 0.045$

Zeitschritt- weite	$Pr = 0.021$		$Pr = 0.006$	
	Δt_{\max}	Faktor	Δt_{\max}	Faktor
Zeitinte- grations- verfahren				
vollexplizit	$6.8 \cdot 10^{-5}$	1	$3.95 \cdot 10^{-5}$	1
thermische Diffusion implizit	$2.74 \cdot 10^{-3}$	40	$4.7 \cdot 10^{-3}$	118
thermische und viskose Diffusion implizit	$1.97 \cdot 10^{-2}$	289	$2.78 \cdot 10^{-2}$	703

Es ist ersichtlich, daß bei impliziter Behandlung beider Diffusionsprozesse theoretisch um bis zum Faktor 700 größere Zeitschrittweiten möglich sind. Da in Flüssigmetallen der viskose Diffusionskoeffizient wesentlich kleiner ist als der thermische, erlaubt bereits allein ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung eine ganz erhebliche Steigerung der Zeitschrittweite (bis zum Faktor 118 für Natrium). Tabelle 4.1 belegt aber auch, daß sich das Potential halbimpliziter Zeitintegrationsverfahren mit zunehmender Prandtl-Zahl sehr stark verringert.

Es erscheint sinnvoll, zunächst ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung in TURBIT zu implementieren und über die Variation der Zeitschrittweite Erfahrungen zu sammeln, inwieweit das theoretische Zeitschrittpotential praktisch ausgenutzt werden kann. Aufbauend auf diesen Erfahrungen kann dann zu einem späteren Zeitpunkt gegebenenfalls auch für die diffusiven Terme in der Impulsgleichung ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren ins Auge gefaßt werden.

4.2 Literaturstand zu halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren

Ähnliche Probleme mit expliziten Zeitintegrationsverfahren, wie sie im vorangehenden Abschnitt für Naturkonvektion in Fluiden kleiner Prandtl-Zahl diskutiert wurden, treten bei der numerischen Simulation von isothermen turbulenten Kanalströmungen auf. Hier sind es die Diffusionsterme in der Impulsgleichung, die die zulässige Zeitschrittweite entscheidend beschränken. Zur Überwindung dieser Zeitschrittrestriktion werden verschiedene Zeitintegrationsverfahren verwendet, die eine implizite Behandlung der viskosen und eine explizite der konvektiven Terme gemeinsam haben.

Kleiser & Schumann (1980) verwenden für ihre Simulationen ein Spektralverfahren, bei dem die abhängigen Variablen in den homogenen Richtungen in Fourierreihen und in Richtung senkrecht zu den Wänden in eine Reihe von Tschebyscheffschen Polynomen entwickelt werden. Für die Integration der Impulsgleichung verwenden sie für die nichtlinearen Terme das Adams-Bashforth-Verfahren und für die viskosen Terme das Crank-Nicolson-Verfahren. Die Autoren behandeln den Druck explizit mit dem Adams-Bashforth-Verfahren und sichern die Erfüllung der Kontinuitätsgleichung durch Lösung der Druck-Poissongleichung. Moin & Kim (1980, 1982) verwenden für die Richtung senkrecht zur Wand nicht Tschebyscheff-Polynome, sondern Finite Differenzen. Sie verwenden für die Druckterme das implizite Crank-Nicolson-Schema und lösen die Kontinuitätsgleichung für den neuen Zeitschritt direkt. Beide Methoden sind von zweiter Ordnung genau.

Die numerischen Simulationen von Orszag & Kells (1980) basieren ebenfalls auf einem Spektralverfahren, allerdings ziehen sie zur Integration der Impulsgleichung eine Dreischrittmethode heran. Im ersten Schritt ermitteln sie mit dem halbimpliziten Adams-Bashforth-Verfahren aus dem die Strömung antreibenden Druckgradienten und den nichtlinearen Termen eine erste Schätzung für das Geschwindigkeitsfeld. Dieses wird im zweiten Integrationsschritt derart korrigiert, daß es der Kontinuitätsgleichung genügt. Das Geschwindigkeitsfeld der neuen Zeitebene erhalten sie durch eine abschließende vollimplizite Integration der viskosen Terme. Das Verfahren hat die Fehlerordnung $O(\Delta t^2 + \Delta t/Re)$ und ist damit praktisch nur von erster Ordnung genau. Ein weiterer Nachteil ist, daß zwar das Zwischengeschwindigkeitsfeld der Kontinuitätsgleichung genügt, aber nicht das Geschwindigkeitsfeld zur neuen Zeitebene.

Eine ähnliche Dreischrittmethodete findet Anwendung im Spektralcode von Goldhirsch et al. (1989) zur numerischen Simulation thermischer Konvektion bei mittleren Prandtl-Zahlen. Im ersten Schritt erfolgt die explizite Integration der nichtlinearen Terme mit dem Adams-Bashforth-Verfahren. Aus dem daraus resultierenden Zwischengeschwindigkeitsfeld wird mit Hilfe eines Druckgradienten, zu dessen Ermittlung die Druck-Poissongleichung gelöst wird, ein solenoidales Geschwindigkeitsfeld bestimmt. Aus diesem ergibt sich im dritten Schritt durch Anwendung des Crank-Nicolson-Schemas auf die verbleibenden viskosen Terme das Geschwindigkeitsfeld der neuen Zeitebene. Zur Bestimmung des Temperaturfeldes wenden die Autoren den ersten und dritten Schritt in entsprechender Weise auf die Energiegleichung an.

Kim & Moin (1985) berechnen sich mit ihrem Zweischrittverfahren mit der Fehlerordnung $O(\Delta t^2)$ unter Vernachlässigung des Druckes ein Zwischengeschwindigkeitsfeld. Dabei verwenden sie wie in ihren früheren Arbeiten für die nichtlinearen Terme das Adams-Bashforth-Verfahren und für die viskosen Terme das Crank-Nicolson-Schema. Die Berechnung des divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldes der neuen Zeitebene erfolgt im zweiten Schritt über die Addition des Gradienten eines Skalars, zu dessen Ermittlung sie - wie auch andere Verfahren - die Druck-Poissongleichung lösen.

Leonard & Wray (1982) verwenden eine halbimplizite Spektralmethode, die auf der Entwicklung des Geschwindigkeitsfeldes in divergenzfreie Vektorfunktionen basiert. Dabei erfüllt jede Vektorfunktion die Randbedingungen und genügt der Kontinuitätsgleichung. Dadurch können die Druckterme eliminiert werden, und zur Beschreibung des Geschwindigkeitsfeldes genügen zwei Komponenten. Wie andere Verfahren auch behandeln sie die nichtlinearen Terme explizit und verwenden für die viskosen Terme das Crank-Nicolson-Schema.

Die Durchsicht der in der Literatur für numerische Simulationen turbulenter Strömungsvorgänge verwendeten Zeitintegrationsverfahren zeigt, daß bei impliziter Behandlung der viskosen Terme ausnahmslos das Crank-Nicolson-Verfahren Verwendung findet. Werden die konvektiven Terme explizit behandelt, so überwiegt die Anwendung des Adams-Bashforth-Verfahrens.

4.3 Auswahlkriterien für TURBIT

Ein wichtiger Aspekt, der bei der Auswahl des in TURBIT zu implementierenden halbimpliziten Zeitintegrationsverfahrens für die Energiegleichung von Bedeutung ist, ist der Sachverhalt, daß das bisher in TURBIT verwendete vollexplizite Euler-Leapfrog-Verfahren für die Impulsgleichung beibehalten werden soll. Es erscheint daher angebracht, bei der Auswahl des halbimpliziten Zeitintegrationsverfahrens für die Energiegleichung besonderen Wert auf die Verträglichkeit zum Euler-Leapfrog-Verfahren zu legen. Aus diesem Grund und um die in Kapitel 3.5.2 angegebene Methode beibehalten zu können, scheiden Mehrschrittverfahren ("fractional step methods") aus, und es wird Verfahren der Vorzug gegeben, bei denen die Integration der konvektiven und diffusiven Terme in einem einzigen Integrationsschritt erfolgt. Im Hinblick auf die mit einem halbimpliziten Verfahren realisierbaren wesentlich größeren Zeitschrittweiten ist eine quadratische Fehlerordnung wünschenswert. Eine weitere Anforderung erwächst aus den für turbulente Strömungen charakteristischen unregelmäßigen Fluktuationen. Um dieses physikalische Verhalten mit der numerischen Simulation möglichst genau wiederzugeben, sind Verfahren zu bevorzugen, die eine nur geringe numerische Dämpfung beinhalten.

Damit sind die wesentlichen Anforderungen an das halbimplizite Zeitintegrationsverfahren formuliert. Von den in Kapitel 4.2 vorgestellten Verfahren erscheint für die Anwendung in TURBIT nur das Adams-Bashforth-Crank-Nicolson Verfahren (im folgenden kurz ABCN-Verfahren) als geeignet, das von Kleiser & Schumann (1980) und Moin & Kim (1980, 1982) für die Impulsgleichung verwendet wird. Peyret & Taylor (1980) empfehlen neben dem ABCN- auch das Leapfrog-Crank-Nicolson-Verfahren (im folgenden kurz LFCN-Verfahren). Die Integrationsvorschrift beider Verfahren ergibt sich durch Einsetzen der in Tabelle 4.2 aufgeführten Werte in das allgemeine Integrationsschema nach Gl. (3.21).

Tab. 4.2: Integrationsschema von ABCN-, LFCN- und Euler-CN-Verfahren. Die Werte der Koeffizienten beziehen sich auf Gl. (3.21).

Verfahren	ξ	Θ_K	Φ_K	Θ_D	Φ_D	Fehlerordnung
ABCN	0	0	- 1/2	1/2	0	2
LFCN	- 1/2	0	0	1/2	1/2	2
Euler-CN	0	0	0	1/2	0	1

ABCN- und LFCN-Verfahren benötigen, ebenso wie das explizite Leapfrog-Verfahren, die bekannten Werte zweier zurückliegender Zeitebenen und können daher für den ersten Integrationsschritt nicht verwendet werden. Der erste Integrationsschritt innerhalb eines jeden Makro-Integrationszyklusses wird daher mit einem Euler-Verfahren durchgeführt, das nur eine zurückliegende Zeitebene benötigt, aber auch nur von erster Ordnung genau ist. Zur Vermeidung der Zeitschrittrestriktion durch die diffusiven Terme werden diese wie bei ABCN- und LFCN-Verfahren implizit mit dem Crank-Nicolson-Schema behandelt. Die Integrationsvorschrift für das Euler-Crank-Nicolson-Verfahren (im folgenden kurz Euler-CN-Verfahren) kann ebenfalls Tabelle 4.2 entnommen werden.

4.4. Analytische Untersuchung der halbimpliziten Verfahren

4.4.1 Bemerkungen zu Konsistenz, Stabilität und Konvergenz

Die numerische Simulation eines physikalischen Vorgangs, der durch eine Differentialgleichung beschrieben wird, kann im allgemeinen mit einer Vielzahl verschiedener Lösungsverfahren erfolgen. Jedes Verfahren ist dabei durch seine diskretisierte Version der Differentialgleichung charakterisiert. Entscheidend für die Brauchbarkeit und Güte eines Verfahrens ist die Erfüllung folgender Kriterien (siehe z.B. Hirsch (1988)):

- **Konsistenz:** Die diskretisierte Version der Differentialgleichung muß in dieselbe übergehen, wenn Maschenweiten und Zeitschrittweite gegen null streben.
- **Stabilität:** Fehler beliebiger Ursache, wie z.B. Rundungsfehler, dürfen im Verlauf der Rechnung nicht anwachsen.
- **Konvergenz:** Die Lösung der diskretisierten Gleichung muß sich mit zunehmender Verfeinerung des Maschennetzes der exakten Lösung der Differentialgleichung annähern.

Nach dem Äquivalenztheorem von Lax ist für ein sachgemäß gestelltes ("well-posed") Anfangswertproblem und ein konsistentes Diskretisierungsverfahren Stabilität notwendige und hinreichende Bedingung für die Konvergenz. Einen Beweis findet man z.B. bei Richtmyer & Morton (1967). Der Nachweis der Konver-

genz von ABCN- und LFCN-Verfahren hinsichtlich der Lösung der Energiegleichung erfordert also:

1. Überprüfung der Konsistenz

Dies erfolgt anhand der modifizierten (äquivalenten) Gleichung, die auch Aufschluß über die Fehlerordnung und den Diskretisierungsfehler der Verfahren gibt.

2. Überprüfung der Stabilitätseigenschaften

Dazu wird eine Von Neumann-Stabilitätsanalyse durchgeführt, die zusätzlich Informationen über die Frequenzverteilung des Fehlers, d.h. dessen Verhalten als Funktion der in der numerischen Lösung enthaltenen Frequenzen, liefert.

Die analytische Untersuchung der beiden Verfahren erfolgt der Einfachheit wegen anhand der eindimensionalen linearisierten Version der Energiegleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_0 \frac{\partial T}{\partial x} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{mit } u_0, \kappa = \text{konst.} \quad (4.3)$$

Im folgenden wird zur Kennzeichnung der Maschenwerte für eine räumlich und zeitlich äquidistante Diskretisierung mit den Schrittweiten Δx und Δt die Schreibweise

$$T_i^n = T(i \cdot \Delta x, n \cdot \Delta t) \quad \begin{array}{l} i = 0, 1, 2, \dots, M \\ n = 0, 1, 2, \dots \end{array} \quad (4.4)$$

eingeführt. In Analogie zu TURBIT erfolgt die Approximation der räumlichen Differentialquotienten in Gl. (4.3) formal durch zentrale Finite Differenzen:

$$u_0 \frac{\partial T}{\partial x} \rightarrow u_0 \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2 \Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (4.5)$$

$$\kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \rightarrow \kappa \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (4.6)$$

4.4.2 Nachweis der Konsistenz mit der Methode der modifizierten Gleichung

Jedes Differenzenverfahren löst nicht exakt die Differentialgleichung, auf die es angewandt wird, sondern die um den Abbruchfehler ("truncation error") davon abweichende sogenannte modifizierte Gleichung. Diese wird durch das Verfahren bis auf Rundungsfehler exakt gelöst. Zur Herleitung der modifizierten Gleichung wird jeder Term des Differenzschemas in eine Taylor-Reihe um den Ort $x = i \cdot \Delta x$ und den Zeitpunkt $t = n \cdot \Delta t$ entwickelt, z.B.:

$$T_i^{n\pm 1} = T_i^n \pm \Delta t \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_i^n + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \Big|_i^n \pm \frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 T}{\partial t^3} \Big|_i^n + \dots \quad (4.7)$$

$$T_{i\pm 1}^n = T_i^n \pm \Delta x \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_i^n + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_i^n \pm \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \Big|_i^n + \dots \quad (4.8)$$

Einsetzen dieser Taylor-Entwicklungen in die diskretisierte Version der Differentialgleichung führt auf eine Differentialgleichung, in der sich alle Terme auf den Ort $x = i \cdot \Delta x$ und die Zeit $t = n \cdot \Delta t$ beziehen. Schreibt man diese Gleichung so um, daß auf der linken Seite die exakte Differentialgleichung für $x = i \cdot \Delta x$ und $t = n \cdot \Delta t$ steht, so stellt die rechte Seite den Abbruchfehler des Verfahrens dar. Er setzt sich aus verschiedenen partiellen Ableitungen nach Ort und Zeit zusammen und hängt neben den Parametern der Differentialgleichung auch von den Diskretisierungsparametern Δx und Δt ab. Mit einer im Prinzip einfachen, aber sehr mühsamen Prozedur ist es - unter Verwendung der Gleichung selbst - möglich, alle Zeitableitungen der rechten Seite zu eliminieren und den Abbruchfehler allein als Summe von Ortsableitungen darzustellen (siehe dazu z.B. Anderson et al. (1984)). Das Ergebnis dieses Prozesses ist die modifizierte Gleichung.

Die modifizierte Gleichung für die Modellgleichung (4.3) lautet bei Verwendung der räumlichen Differentialquotientenapproximationen (4.5) und (4.6) für das ABCN-Verfahren

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_o \frac{\partial T}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{u_o}{12} \left[5 u_o^2 (\Delta t)^2 - 2 (\Delta x)^2 \right] \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{1}{12} \left[\kappa \left((\Delta x)^2 - 9 u_o^2 (\Delta t)^2 \right) + 3 u_o^4 (\Delta t)^3 \right] \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \dots \quad (4.9)$$

und für das LFCN-Verfahren

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_o \frac{\partial T}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{6} u_o \left[u_o^2 (\Delta t)^2 - (\Delta x)^2 \right] \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{1}{12} \kappa (\Delta x)^2 \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \dots \quad (4.10)$$

Für den Grenzübergang $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ gehen beide modifizierte Gleichungen in die partielle Differentialgleichung (4.3) über. Damit ist die Konsistenz von ABCN- und LFCN-Verfahren hinsichtlich des gestellten Problems gesichert. Da der Abbruchfehler jeweils proportional zur zweiten Potenz der Zeitschrittweite ist, handelt es sich bei beiden Schemata um Verfahren zweiter Ordnung.

Der Abbruchfehler beider Verfahren setzt sich aus Termen mit gerader und ungerader Ordnung der partiellen Ableitungen nach der Ortskoordinate zusammen. Diese haben einen unterschiedlichen Einfluß auf die Art des Fehlers. Terme des Abbruchfehlers mit geradzahligem Ableitungsgrad stellen im Prinzip Diffusionsterme dar, die je nach Vorzeichen den physikalischen Diffusionseinfluß verstärken oder abschwächen. Diese Verfälschung der Diffusion durch das Differenzenverfahren bezeichnet man als numerische Dissipation. Ein anderer quasiphysikalischer Effekt ist die sogenannte Dispersion, die auf die Ableitungsterme ungeradzahligem Ordnung zurückgeht. Als Ergebnis der Dispersion werden Phasenbeziehungen zwischen verschiedenen Wellen gestört. Abb. 4.1 illustriert den Einfluß von Dissipation und Dispersion auf eine Diskontinuität in der exakten Lösung. Beide Fehlereinflüsse werden unter dem Begriff der numerischen Diffusion zusammengefaßt. Allgemein gilt, daß ein Differenzenverfahren, dessen niedrig-

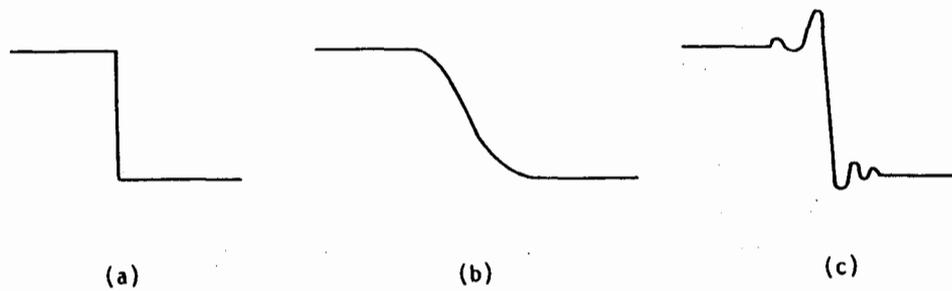


Abb. 4.1: Effekte von numerischer Dissipation und Dispersion
 (a) Exakte Lösung
 (b) Numerische Lösung verfälscht durch Dissipationsfehler
 (c) Numerische Lösung verfälscht durch Dispersionsfehler

ster Ableitungsterm des Abbruchfehlers von gerader Ordnung ist, vorwiegend zu Dissipationsfehlern führt. Andernfalls wird die Lösung hauptsächlich durch Dispersionsfehler verfälscht. [Anderson et al. (1984), S. 92]. Der führende Term des Abbruchfehlers in Gl. (4.9) und (4.10) ist von dritter Ableitungsordnung. Demzufolge sind für ABCN- und LFCN-Verfahren vorwiegend dispersive Fehlereinflüsse zu erwarten. Die modifizierten Gleichungen können auch herangezogen werden, um die numerische Diffusion beider Verfahren quantitativ zu vergleichen. Ergebnisse hierzu finden sich in Anhang A.

Für das für den Startschritt verwendete halbimplizite Euler-Crank-Nicolson-Verfahren ergibt sich die modifizierte Gleichung für das betrachtete Modellproblem zu

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_o \frac{\partial T}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = - \frac{1}{2} \Delta t u_o^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$- \frac{1}{6} u_o (\Delta x)^2 \cdot \left[1 - 3 \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2} + 2 \left(\frac{u_o \Delta t}{\Delta x} \right)^2 \right] \cdot \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \dots \quad (4.11)$$

Das Verfahren ist also nur von erster Ordnung in der Zeit genau. Das Auftreten eines Terms von zweiter Ableitungsordnung im Abbruchfehler deutet zudem auf

eine bedeutend stärkere numerische Diffusion hin, als sie bei den beiden Verfahren zweiter Ordnung gegeben ist.

Es liegt nahe, die modifizierte Gleichung auch zu Stabilitätsuntersuchungen heranzuziehen. Basierend auf den Ableitungstermen geradzahligter Ordnung haben Warming & Hyett (1974) eine "heuristische" Stabilitätstheorie entwickelt. Diese liefert jedoch nicht in allen Fällen, so z.B. bei den hier interessierenden, eine Aussage. Es soll daher an dieser Stelle nicht weiter darauf eingegangen werden.

4.4.3 Stabilitätsuntersuchung mit der Von Neumann-Methode

Zur Stabilitätsuntersuchung numerischer Verfahren wurden verschiedene Methoden entwickelt, die aber nahezu alle auf lineare Probleme beschränkt sind. Trotz dieser Einschränkung kann die Stabilitätsuntersuchung für Anfangs- und Randwertprobleme sehr kompliziert sein. Die in der Fluidodynamik am häufigsten verwendete Methode zur Stabilitätsuntersuchung von linearen Problemen mit konstanten Koeffizienten ist das Von Neumann-Verfahren [siehe z.B. Hirsch (1988)]. Es soll nachfolgend kurz erläutert werden.

Bei einem linearen Problem genügt der Fehler derselben Differentialgleichung wie die Lösung und besitzt demzufolge auch dasselbe Wachstumsverhalten über der Zeit. Liegen periodische Randbedingungen vor, so kann der Fehler ε für jede Masche in eine Fourierreihe entwickelt werden:

$$\varepsilon_i^n = \sum_{j=-N}^N E_j^n e^{I k_j i \Delta x} \quad (4.12)$$

$$\text{mit } I = \sqrt{-1}, \quad k_j = j \frac{\pi}{N \Delta x}.$$

Das Produkt $k_j \Delta x$ wird oft als Phasenwinkel dargestellt:

$$\phi = k_j \cdot \Delta x = \frac{j\pi}{N}, \quad -\pi \leq \phi \leq \pi. \quad (4.13)$$

Dabei entspricht der Bereich um $\phi = 0$ tiefen Frequenzen (großen Wellenlängen) und $\phi = \pi$ der höchsten auflösbaren Frequenz, die zu der Wellenlänge $2\Delta x$ gehört. Da es sich um eine lineare Differentialgleichung handelt, muß auch jede einzelne Harmonische

$$E_j^n e^{I i \phi} \quad (4.14)$$

der Reihenentwicklung der Differentialgleichung genügen. Das Einsetzen einer solchen Harmonischen in das Differenzenschema des Verfahrens führt auf den Verstärkungsfaktor

$$G = \frac{E^{n+1}}{E^n} = G(\phi, \Delta t, \Delta x) \quad (4.15)$$

bzw. im allgemeinen Fall zu einer Verstärkungsmatrix G . Der Stabilitätsbedingung, daß der Fehler von einem Zeitschritt zum nächsten nicht anwachsen darf, entspricht die Forderung

$$|G| \leq 1 \quad (4.16)$$

bzw. allgemein, daß der Spektralradius der Verstärkungsmatrix G kleiner gleich eins ist. Diese Bedingung ist für ein endliches Δt und für alle Werte von $\phi \in [-\pi, \pi]$ zu erfüllen. Damit ist ein Kriterium gefunden, das Aussagen über die Stabilitätsbedingung von Differenzenverfahren macht.

Für das explizite Euler-Leapfrog-Verfahren führt die Von Neumann-Analyse für die hier betrachtete Modellgleichung (4.3) auf das Stabilitätskriterium

$$\left(\frac{u_o \Delta t}{\Delta x} \right)^2 + 4 \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 1, \quad (4.17)$$

bzw. in der Darstellungsweise mit der Courant-Zahl $C = u_o \Delta t / \Delta x$ und der Diffusionszahl $D = \kappa \Delta t / (\Delta x)^2$ auf

$$C^2 + 4D \leq 1. \quad (4.18)$$

Dieses Kriterium schließt sowohl $|C| \leq 1$ als auch $D \leq 0.25$ ein. Für feste Parameter u_0 und κ und eine vorgegebene räumliche Diskretisierung ergibt sich aus $C = 1$ und $D = 0.25$ eine charakteristische Zeitskala Δt der konvektiven und diffusiven Ausbreitungsvorgänge. Für ein explizites Verfahren bedeutet dabei $|C| \leq 1$ und $D \leq 0.25$, daß im gesamten Strömungsfeld innerhalb einer Zeitschrittweite physikalische Information weder durch Konvektion noch durch Diffusion weiter als eine Maschenweite transportiert werden kann. Für implizite Verfahren kann anhand der Courant- und Diffusionszahl beurteilt werden, ob und inwieweit wegen $|C| > 1$ oder $D > 0.25$ eine zeitliche Filterung hochfrequenter Konvektions- bzw. Diffusionsmechanismen vorliegt.

Die vollständige Von Neumann-Stabilitätsanalyse für das LFCN- und ABCN-Verfahren ist in Anhang B zu finden. Im folgenden sollen nur die Ergebnisse diskutiert werden. So ergibt sich für das LFCN-Verfahren das bekannte Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium

$$C = \frac{|u_0| \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (4.19)$$

als Bedingung für die numerische Stabilität des explizit formulierten Konvektionsprozesses. Der implizit behandelte Diffusionsprozeß ist beim LFCN-Verfahren unbedingt stabil und hat, wie gewünscht, keinen Einfluß auf das Zeitschrittkriterium. Für das ABCN-Verfahren kann kein analytisches Stabilitätskriterium angegeben werden. Eine numerische Auswertung führt auf das Stabilitätsdiagramm in Abb. 4.2. Danach ist das Stabilitätskriterium des ABCN-Verfahrens im Gegensatz zu dem des LFCN-Verfahrens nicht unabhängig von der Diffusionszahl. Zur Stabilität ist stets eine gewisse Mindestdiffusivität notwendig. Diese ist für kleine Courant-Zahlen verschwindend gering, wird aber für $C > 0.5$ beträchtlich. Andererseits erlaubt das ABCN-Verfahren für Diffusionszahlen $D > 0.5$ Werte der Courant-Zahl, die größer als eins sind. Dies ist eventuell für Anwendungen von Vorteil, bei denen nur eine stationäre Lösung interessiert. Für zeitabhängige Strömungsvorgänge ist die Einhaltung der CFL-Bedingung zur Vermeidung einer Zeitfilterung des Konvektionsprozesses im Hinblick auf die Genauigkeit der numerischen Lösung aber wesentlich (vergl. Abschnitt 4.1). Zudem sind im vorliegenden Fall wegen der Beibehaltung des expliziten Euler-Leapfrog-

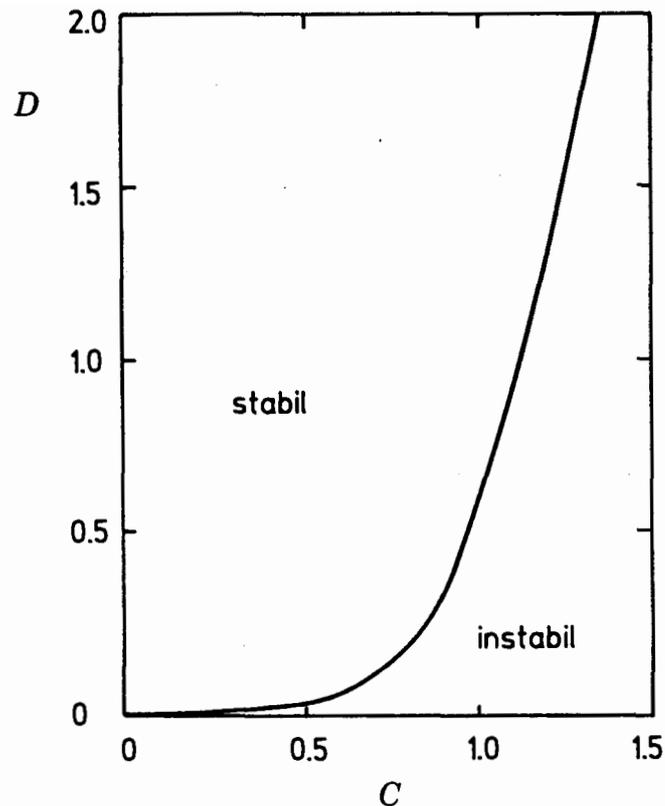


Abb. 4.2: Stabilitätsdiagramm des ABCN-Verfahrens nach Peyret & Taylor (1983)

Verfahrens für die Impulsgleichung Courant-Zahlen größer als eins ohnehin ausgeschlossen.

Das halbimplizite Euler-Crank-Nicolson-Verfahren erfordert ebenso wie das ABCN-Schema eine gewisse Mindestdiffusivität zur numerischen Stabilität. Diese ist im relevanten Bereich der Courant-Zahl $0 \leq C \leq 1$ noch etwas größer als die des ABCN-Verfahrens. Da das Verfahren jedoch nur für den jeweils ersten Schritt eines Integrationszyklusses angewandt wird, ist eine für das LFCN-Verfahren erlaubte, hier jedoch im Prinzip unzulässige Parameterkombination von Courant- und Diffusionszahl praktisch ohne Bedeutung.

4.4.4 Spektralanalyse des numerischen Fehlers

Die aus der Von Neumann-Analyse ermittelten komplexen Eigenwerte der Verstärkungsmatrix (s. Anhang B, Gl. (B.3) und (B.12)) kennzeichnen das Wachstumsverhalten der im Laufe der Rechnung auftretenden Fehler. Gleichzeitig beschreiben diese Eigenwerte aber auch das Dämpfungsverhalten des Verfahrens bezüglich der in der numerischen Lösung auftretenden periodischen Anteile. Durch Vergleich der Eigenwerte mit dem exakten Dämpfungsverhalten periodischer Signale, das sich aus der zugrundeliegenden Differentialgleichung berechnen läßt, erhält man Aufschluß darüber, mit welcher Genauigkeit das numerische Verfahren das zeitliche Verhalten harmonischer Signale für verschiedene Frequenzen wiedergibt. Gewissermaßen kann eine Spektralanalyse der numerischen Diffusion durchgeführt werden [Hirsch (1988)].

Eine exakte Lösung der Modellgleichung (4.3) lautet mit $I = \sqrt{-1}$

$$T(x, t) = e^{-\kappa k^2 t} e^{Ik(x-u_0 t)} \quad (4.20)$$

Damit berechnet sich der exakte Verstärkungsfaktor zu

$$G_{ex} = \frac{T(x, t + \Delta t)}{T(x, t)} = e^{-\kappa k^2 \Delta t} e^{-Ik u_0 \Delta t} \quad (4.21)$$

Die Darstellung in Polarkoordinaten führt mit Einführung des Phasenwinkels $\phi = k \cdot \Delta x$ auf

$$G_{ex} = \lambda_{ex} e^{-I\psi_{ex}}, \quad (4.22a)$$

$$\text{mit } \lambda_{ex} = e^{-D\phi^2} \text{ und } \psi_{ex} = -C\phi. \quad (4.22b)$$

Hier stellen C und D die oben eingeführte Courant- bzw. Diffusionszahl dar. Der Betrag λ_{ex} kennzeichnet die zeitliche Dämpfung der Amplitude und die Phase ψ_{ex}

die Transportgeschwindigkeit einer räumlichen Welle mit dem Phasenwinkel ϕ bzw. der Wellenzahl k .

In Abb. 4.3 ist der exakte Wert λ_{ex} zusammen mit dem Betrag des jeweils betragsgrößten Eigenwertes von LFCN- und ABCN-Verfahren für die Courant-Zahl $C = 0.1$ und die Diffusionszahlen $D = 0.1$, $D = 1$ und $D = 10$ als Funktion des Phasenwinkels ϕ aufgetragen. In allen Fällen wird das Dämpfungsverhalten der tieffrequenten Wellen (kleines ϕ) durch beide Verfahren sehr gut wiedergegeben. Dagegen werden die hochfrequenten Anteile ($\phi \rightarrow \pi$) durch die numerischen Verfahren zu schwach gedämpft. Dieser Fehler wird mit wachsender Diffusionszahl immer größer. Während nach der exakten Lösung der Verstärkungsfaktor für sehr hohe Frequenzen praktisch null ist und diese Wellen somit sofort weggedämpft werden, strebt der Verstärkungsfaktor der numerischen Verfahren mit wachsendem D gegen eins. Damit bleiben diese Wellen nahezu ungedämpft.

Dieses Ergebnis ist konsistent mit Resultaten, die sich aus der in Abschnitt 4.4.2 durchgeführten Analyse des Abbruchfehlers ableiten lassen: Betrachtet man ein periodisches Signal $T(x) = \sin(mx)$, so ergibt sich wegen $d^2T/dx^2 = -m^2\sin(mx)$ und $d^4T/dx^4 = m^4\sin(mx)$ eine Unterschätzung der physikalischen Diffusion durch das numerische Verfahren, die besonders für hochfrequente Signale (großes m) zu großen Fehlern führt.

Der hier nicht wiedergegebene Vergleich der Phasenwerte von ABCN- und LFCN-Verfahren mit dem exakten Wert Ψ_{ex} führt auf ein entsprechendes Ergebnis: Für die tiefen Frequenzen, bei denen das Dämpfungsverhalten hervorragend wiedergegeben wird, stimmt auch die Transportgeschwindigkeit der Wellen ausgezeichnet mit der exakten Lösung überein. Bei hochfrequenten Wellen treten aber auch bei der Phase große Abweichungen auf.

Nach Abb. 4.3 ist das LFCN- dem ABCN-Verfahren für $C = 0.1$ und kleine Diffusionszahlen gleichwertig, aber für mittleres und hohes D deutlich unterlegen. Dies gilt auch für das Phasenverhalten. Eine Erhöhung der Courant-Zahl bedeutet beim LFCN-Verfahren für kleine Diffusionszahlen keine und bei größeren D nur eine sehr geringe Verschlechterung der Genauigkeit von Betrag und Phase. Dagegen verschlechtert sich die Genauigkeit des ABCN-Verfahrens bei einer Erhöhung der Courant-Zahl für kleine und mittlere Diffusionszahlen erheblich. Schließlich überschreitet der Betrag des Eigenwertes den Wert eins und das Verfahren ist instabil. Für große Diffusionszahlen wird insbesondere die Approximation des Phasenverhaltens der hochfrequenten Wellen ungenauer.

Auch wenn ABCN- und LFCN-Verfahren für unbegrenzt hohe Diffusionszahlen numerisch stabil sind, so zeigt die hier durchgeführte Spektralanalyse des numerischen Fehlers, daß im Hinblick auf die Genauigkeit der Ergebnisse eine Beschränkung der Diffusionszahl sinnvoll ist. Denn mit wachsendem D wird der Frequenzbereich derjenigen Wellen, deren Dämpfungs- und Transportverhalten die halbimpliziten Verfahren gut wiedergeben, immer schmaler. Die hochfrequenten Anteile, die nach der exakten Lösung sofort weggedämpft werden, bleiben nahezu ungedämpft. In der Praxis bedeutet die Beschränkung auf einen bestimmten Diffusionszahlbereich für einen vorgegebenen thermischen Diffusionskoeffizienten κ und eine festliegende räumliche Diskretisierung eine Einschränkung der Zeitschrittweite. Damit ist zu erwarten, daß das in Abschnitt 4.1 abgeschätzte Zeitschrittweitenpotential der halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren nicht für alle Anwendungsfälle voll ausgenutzt werden kann.

Insbesondere bei Problemen, deren physikalisches Längenspektrum sich bis hin zu der größten auflösbaren Wellenzahl $k = 2\pi/\Delta x$ (d.h. $\phi = \pi$) erstreckt, erscheint im Hinblick auf die Genauigkeit der numerischen Lösung eine Beschränkung auf sehr kleine Diffusionszahlen notwendig. Bei dem hier zugrundeliegenden Fall der Naturkonvektion in Flüssigmetallen ist das Spektrum der Temperaturfluktuationen jedoch sehr langwellig und weist im Vergleich zu dem Spektrum der kinetischen Turbulenzenergie keine hochfrequenten Anteile auf (vergl. Abschnitt 2.3). Dieser Sachverhalt ermöglicht die Anwendung von ABCN- und LFCN-Verfahren zur Lösung der Energiegleichung auch für größere Diffusionszahlen, ohne daß dadurch eine wesentliche Verfälschung des physikalischen Verhaltens der numerischen Lösung zu erwarten wäre.

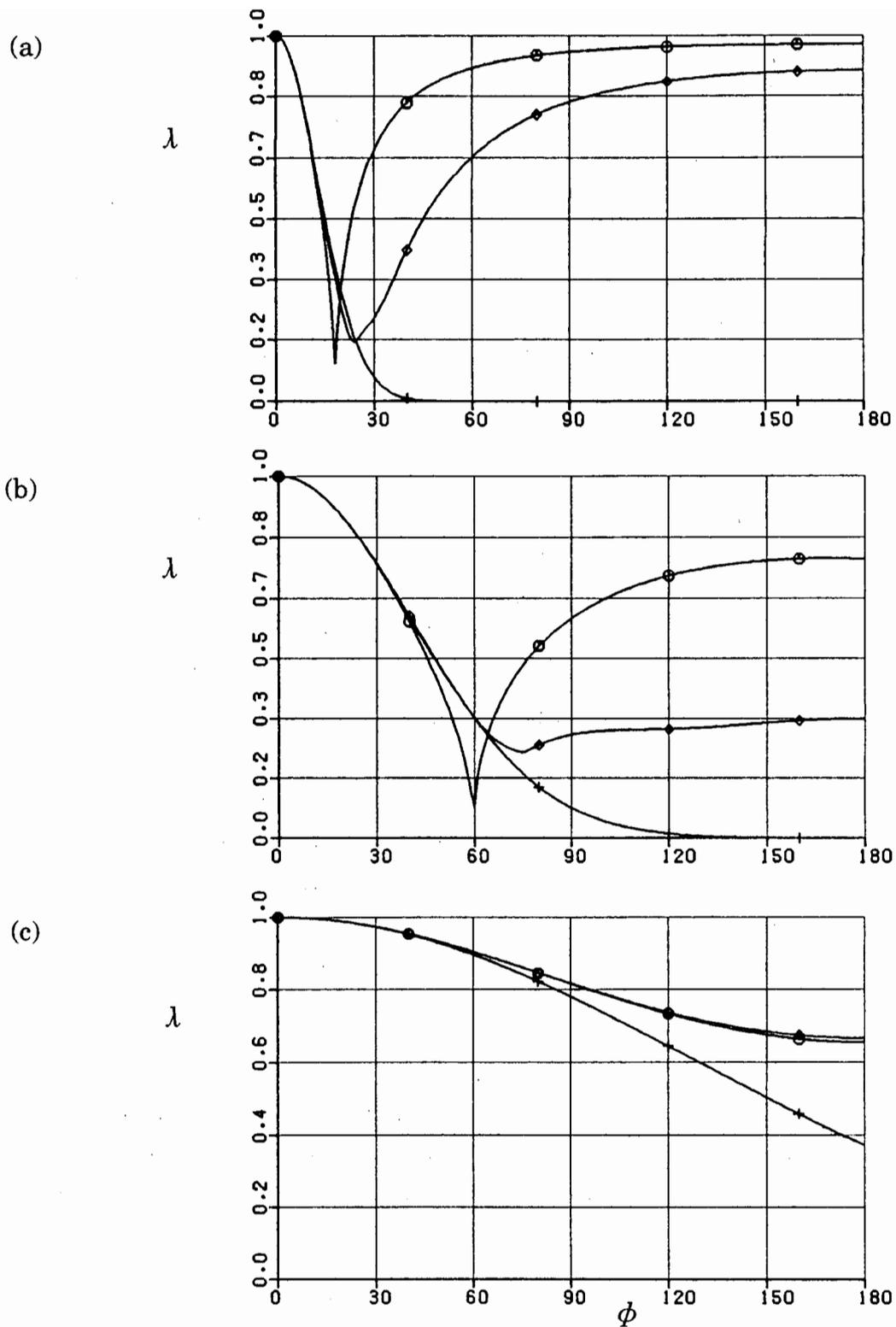


Abb. 4.3: Spektralanalyse der numerischen Dissipation von LFCN- und ABCN-Verfahren für die Courant-Zahl $C = 0.1$ und verschiedene Diffusionszahlen. (a): $D = 10$, (b): $D = 1$, (c): $D = 0.1$. (+): λ_{ex} , (o): λ_{LFCN} , (◇): λ_{ABCN} .

4.5 Numerische Untersuchungen

In dem vorangegangenen Abschnitt wurden die beiden halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren anhand der eindimensionalen linearisierten Version der Energiegleichung analytisch hinsichtlich ihrer Konsistenz, Stabilität und Genauigkeit untersucht. In diesem Abschnitt sollen beide Verfahren zur numerischen Lösung dieser Modellgleichung herangezogen werden, um durch Vergleich der Ergebnisse mit einer bekannten exakten zeitabhängigen Lösung am konkreten Beispiel Erfahrungen über das Lösungsverhalten der beiden Zeitintegrationsverfahren sammeln zu können. Die Ergebnisse dieser numerischen und analytischen Untersuchungen sollen uns dann in die Lage versetzen, Schlußfolgerungen bezüglich der Eignung beider Verfahren für ihre Anwendung in TURBIT zu ziehen.

Die numerische Lösung der eindimensionalen linearisierten Energiegleichung (4.3) soll für den Bereich $0 \leq x \leq L$ auf einem äquidistanten Gitter mit der Maschenweite $\Delta x = L / (M-1)$ erfolgen. Bei einem Finite Volumen-Code, wie es TURBIT ist, gelangt man durch Integration der Differentialgleichungen über ein Maschenvolumen zu einer diskretisierten Form der Differentialgleichungen. Die dabei im dreidimensionalen Fall auftretenden Flächenmittelwerte sind im eindimensionalen Fall einfach die Werte an den Maschengrenzen. Aus dieser Methode folgt, daß zum Vergleich der so ermittelten numerischen Lösung nicht lokale Werte der kontinuierlichen Lösung $T_{ex}(x,t)$ der Modellgleichung (4.3), sondern über Δx gemittelte Volumenmittelwerte \overline{vT}_{ex} herangezogen werden müssen. Als Randbedingung für die beiden Wandmaschen werden hier dagegen - wie in TURBIT - nicht die volumengemittelten, sondern die exakten Werte $T_{ex}(0,t)$ und $T_{ex}(L,t)$ vorgegeben.

Beide Zeitintegrationsverfahren führen aufgrund ihres halbimpliziten Charakters auf ein lineares Gleichungssystem. Im vorliegenden eindimensionalen Fall ist die dabei entstehende Matrix tridiagonal, so daß die Lösung mit dem sehr effektiven Thomas-Algorithmus durchgeführt werden kann [siehe z.B. Hirsch (1988)].

Die exakte Lösung von Gleichung (4.3) für die Anfangsbedingung

$$T(x, 0) = \sin(kx) \quad \text{mit } k \in \mathbb{N} \quad (4.23)$$

und die Randbedingungen

$$T(0, t) = -\sin(k u_o t) e^{-k^2 \kappa t} \quad (4.24a)$$

$$T(L, t) = -\sin\left[k(L - u_o t)\right] e^{-k^2 \kappa t} \quad (4.24b)$$

lautet

$$T_{ex}(x, t) = \sin\left[k(x - u_o t)\right] e^{-k^2 \kappa t} \quad (4.25)$$

[Anderson et al. (1984)]. Diese exakte Lösung ist geeignet, die zeitliche Genauigkeit von ABCN- und LFCN-Verfahren zu untersuchen. Für die numerischen Studien wurden mit $L = \pi$ und $\kappa = 0.25$ feste Werte für die Problemlänge und den Diffusionskoeffizienten vorgegeben. Die Geschwindigkeit u_o wurde zwischen 0.1 und 1.0 variiert und k von 1 bis 3, doch beschränken sich die nachfolgend vorgestellten Ergebnisse auf den Fall $u_o = 0.1$ und $k = 2$. Abb. 4.4 zeigt die zu diesen

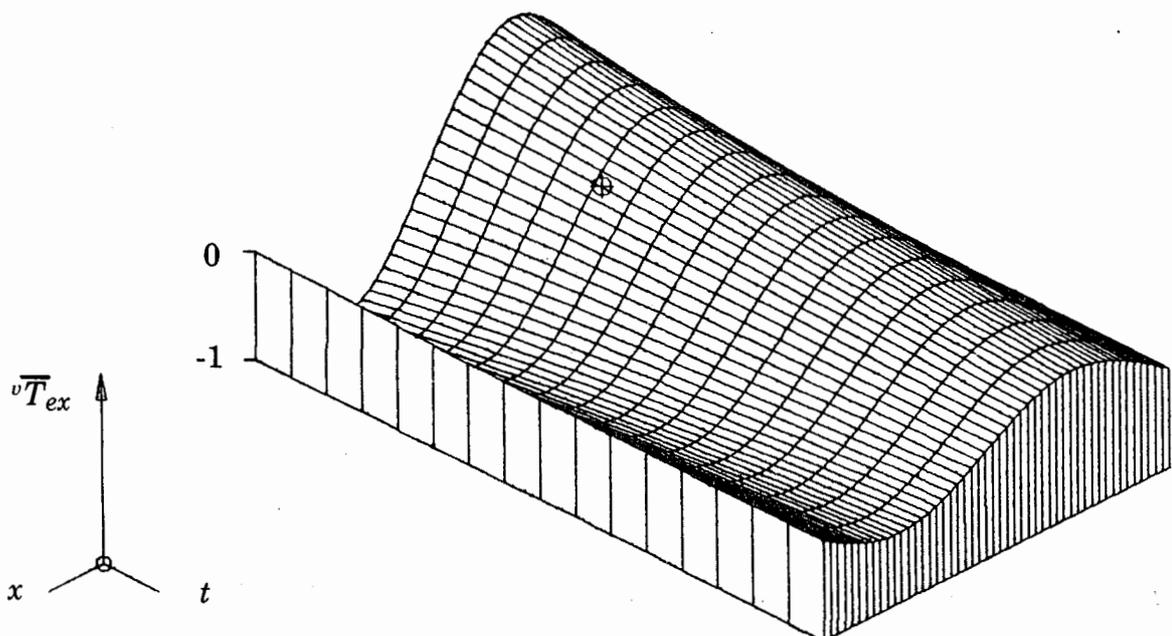


Abb. 4.4: Exakte Lösung $v\bar{T}_{ex}$ des zeitabhängigen linearen Modellproblems (4.3) für die Parameter $\kappa = 0.25$, $u_o = 0.1$, $k = 2$ und den Lösungsbereich $0 \leq x \leq \pi$, $0 \leq t \leq 1.03$.

Parametern gehörende Lösung $\overline{vT_{ex}}$ in einer dreidimensionalen Darstellungsweise. Dabei sind die diskreten "Temperaturwerte" als z -Koordinate über der durch die x - und t -Achse aufgespannten Raum-Zeit-Ebene aufgetragen.

Für die numerischen Untersuchungen von ABCN- und LFCN-Verfahren wurde ein Maschennetz mit $M = 50$ Knoten und der daraus resultierenden Gitterweite $\Delta x = \pi/(50-1) \approx 0.064$ zugrundegelegt. Variiert wurde in den Rechnungen die Zeitschrittweite Δt und damit auch Courant- und Diffusionszahl. Abb. 4.5 zeigt den Betrag der Abweichung der numerischen Lösung von ABCN- und LFCN-Verfahren von $\overline{vT_{ex}}$ für Rechnungen mit der Zeitschrittweite $\Delta t = \Delta x \approx 0.064$. Die Abbildung läßt ein sehr unterschiedliches Lösungsverhalten der beiden Zeitintegrationsverfahren erkennen. So ist der zeitliche Verlauf des Fehlers beim ABCN-Verfahren sehr glatt. Die Größe des Fehlers und auch dessen Vorzeichen ändern sich für jeden Ort nur sehr langsam über der Zeit. Dagegen sind beim LFCN-Verfahren starke zeitliche Oszillationen im Fehlerverlauf zu erkennen. Betrachtet man die Abweichung der numerischen Lösung von der exakten Lösung nicht betragsmäßig, sondern vorzeichenbehaftet, so zeigt sich, daß sich beim LFCN-Verfahren das Vorzeichen des Fehlers an einem bestimmten Ort über große Zeiträume jeweils von einem Zeitschritt zum nächsten ändert, also oszilliert. Dies bedeutet, daß das LFCN-Verfahren die exakte Lösung abwechselnd über- und unterschätzt. Dagegen bleibt das Fehlervorzeichen beim ABCN-Verfahren an jedem Ort über lange Zeiträume gleich, so daß die exakte Lösung dort stets über- bzw. unterschätzt wird. Abb. 4.5 zeigt weiterhin, daß der im ersten Integrationsschritt durch das Euler-Crank-Nicolson-Verfahren eingebrachte Fehler beim LFCN-Verfahren im Verlauf der Integration deutlich gedämpft wird, beim ABCN-Verfahren aber dagegen in etwa erhalten bleibt.

Abb. 4.6 gibt in einer entsprechenden Darstellungsweise die zeitliche Entwicklung des Fehlerbetrages beider Zeitintegrationsverfahren wieder, wenn die Rechnungen - unter Beibehaltung der räumlichen Diskretisierung - mit einer fünffach kleineren Zeitschrittweite, also $\Delta t/\Delta x = 0.2$, erfolgen. Im Gegensatz zu Abb. 4.5 sind bezüglich der Fehlerentwicklung jetzt nur sehr geringe Unterschiede zwischen ABCN- und LFCN-Verfahren zu erkennen. Insbesondere fällt auf, daß bei LFCN-Verfahren nur noch sehr schwache zeitliche Oszillationen vorhanden sind. Darüber hinaus hat die Verringerung der Zeitschrittweite um den Faktor fünf zur Folge, daß der Fehler zu Beginn der Rechnung deutlich reduziert wird. Mit Fortschreiten der Integration nimmt der maximale Fehlerbetrag z_{max} für beide Verfahren sogar geringfügig größere Werte an als in der vorangegangenen Studie.

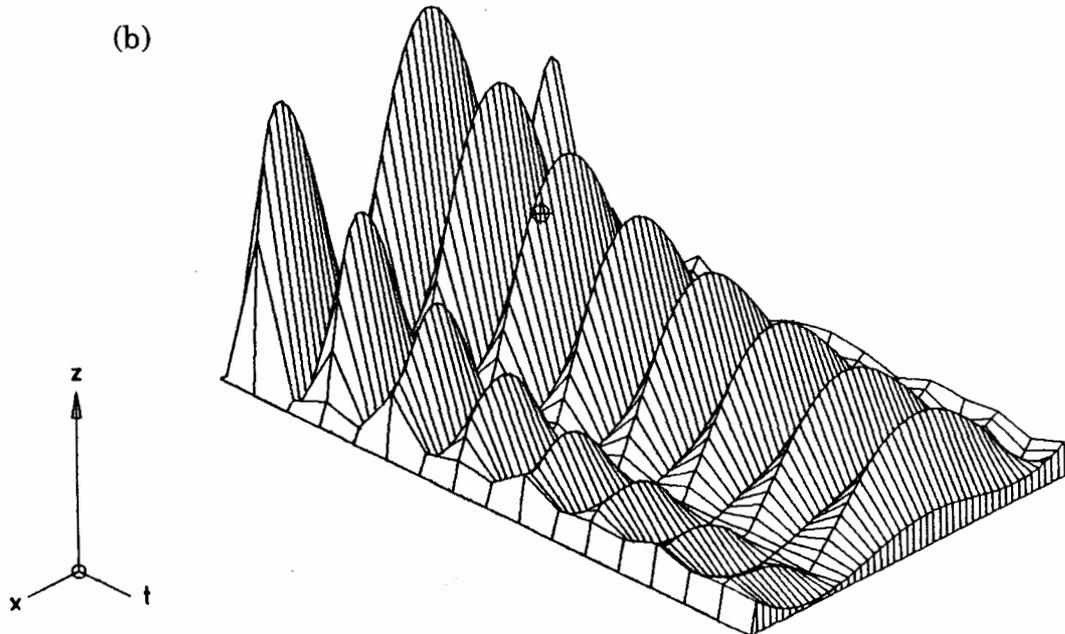
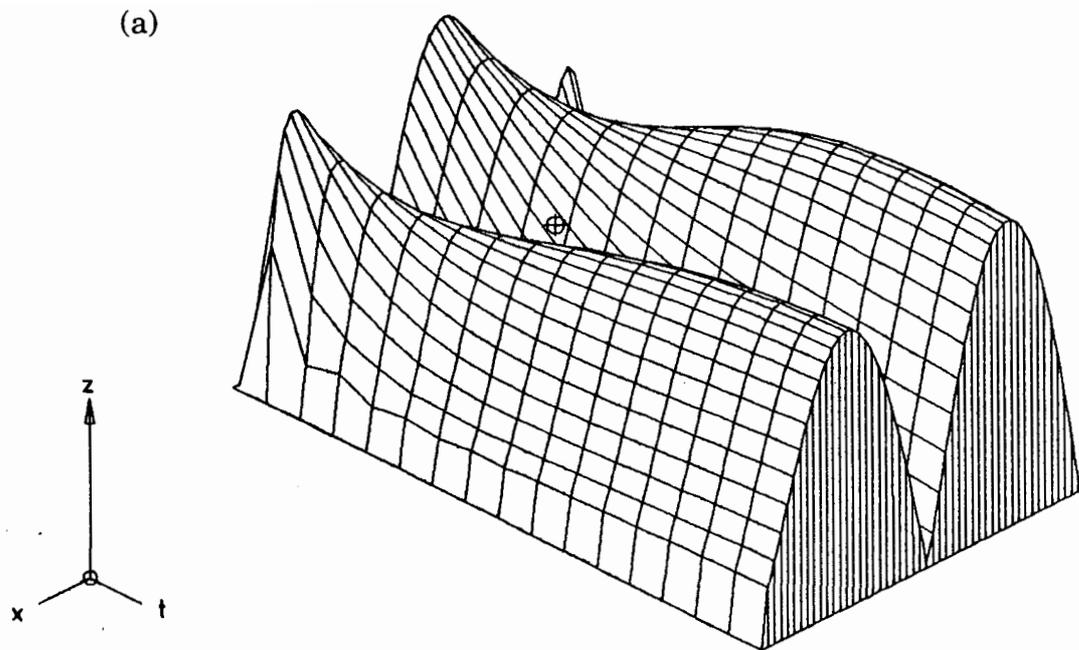


Abb. 4.5: Zeitliche Entwicklung des Fehlerbetrages für das Diskretisierungsverhältnis $\Delta t/\Delta x = 1$, $C = 0.1$, $D = 3.9$ und den Lösungsbereich $0 \leq x \leq \pi$, $0 \leq t \leq 1.03$: (a) ABCN-Verfahren: $z_{max} = 4.08 \cdot 10^{-4}$, (b) LFCN-Verfahren: $z_{max} = 3.9 \cdot 10^{-4}$

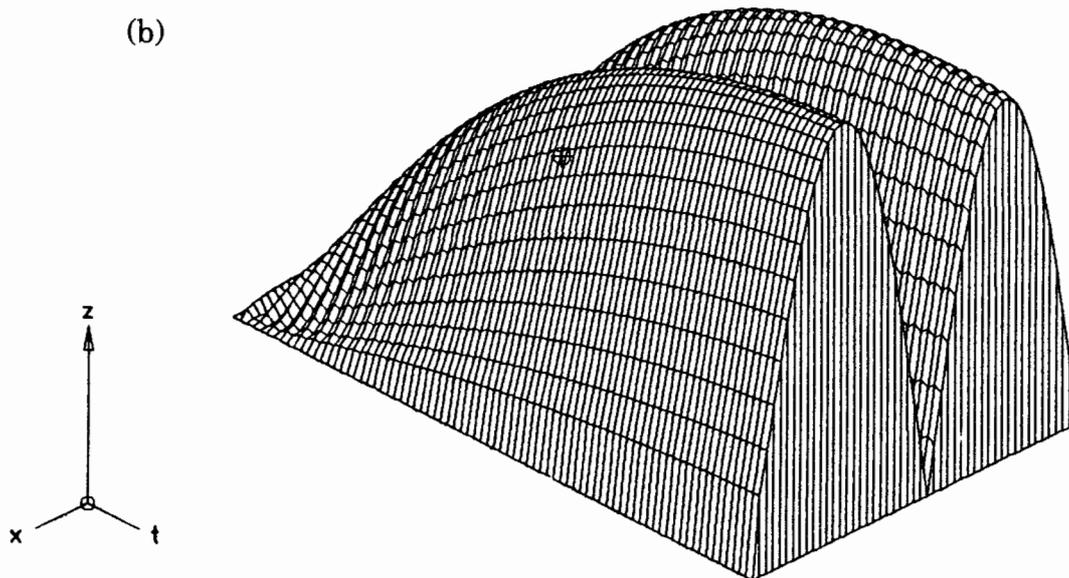
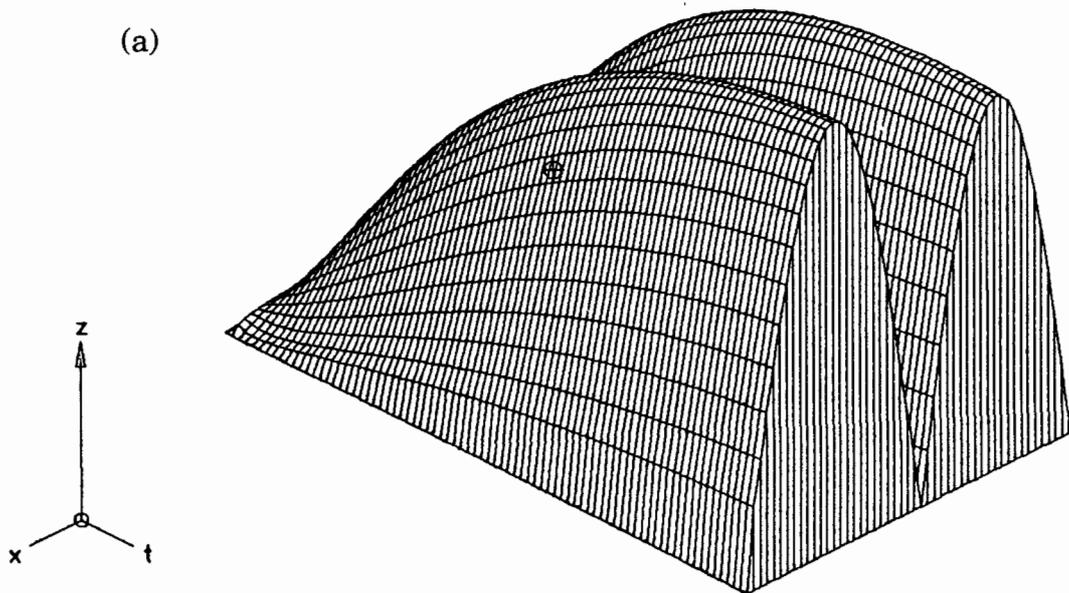


Abb. 4.6: Zeitliche Entwicklung des Fehlerbetrages für das Diskretisierungsverhältnis $\Delta t/\Delta x = 0.2$, $C = 0.02$, $D = 0.78$ und den Lösungsbereich $0 \leq x \leq \pi$, $0 \leq t \leq 1.03$: (a) ABCN-Verfahren: $z_{max} = 5.6 \cdot 10^{-4}$, (b) LFCN-Verfahren: $z_{max} = 5.45 \cdot 10^{-4}$

Abb. 4.7 schließlich zeigt den Fehlerverlauf beider Verfahren, wenn die Rechnungen mit einer dem Diskretisierungsverhältnis $\Delta t/\Delta x = 2$ entsprechenden Zeitschrittweite vorgenommen werden. Der im ersten Integrationsschritt eingebrachte Fehler ist nun wesentlich größer als in den Rechnungen zuvor. Dies ist plausibel, da mit dem Euler-Crank-Nicolson-Schema ein Verfahren verwendet werden muß, das nur von erster Ordnung genau ist. Weiterhin ist zu erwarten, daß der in diesem Schritt eingebrachte Fehler insbesondere für große Zeitschrittweiten wesentlich größer ist als der, der sich im weiteren Verlauf der Integration mit dem ABCN- bzw. LFCN-Verfahren - die ja beide von zweiter Ordnung sind - einstellen wird. Abb. 4.7 zeigt, daß das ABCN-Verfahren in der Tat in der Lage ist, den großen Fehler beim Startschritt bereits nach wenigen Integrationsschritten wesentlich zu reduzieren. Demgegenüber ist das Lösungsverhalten des LFCN-Verfahrens charakterisiert durch starke $2\Delta t$ -Oszillationen im Fehlerverlauf und eine nur schwache Dämpfung der Fehleramplitude über der Zeit.

Die Ursache dieser Oszillationen des LFCN-Verfahrens soll nachfolgend untersucht werden. Das für obige Rechnungen verwendete Integrationsschema des LFCN-Verfahrens hat die Form

$$\left[\left(2 + \frac{1}{D} \right) T_i - \left(T_{i+1} - T_{i-1} \right) \right]^{n+1} = -\frac{C}{D} \left(T_{i+1} - T_{i-1} \right)^n + \left[\left(T_{i+1} - T_{i-1} \right) - \left(2 - \frac{1}{D} \right) T_i \right]^{n-1}. \quad (4.26)$$

Man erkennt, daß beim LFCN-Verfahren benachbarte Zeitebenen nur schwach gekoppelt sind und für kleine Verhältnisse

$$\frac{C}{D} = \frac{u_o \Delta x}{\kappa} = Pe_{\Delta x} \quad (4.27)$$

- also kleine Maschen-Peclet-Zahlen - praktisch sogar eine Entkopplung gerader und ungerader Zeitebenen vorliegt. Damit und mit dem Fehler des Startschrittes lassen sich die beobachteten $2\Delta t$ -Oszillationen des LFCN-Verfahrens erklären: Für die Zeitebene $t = 0$ werden die exakten Anfangsbedingungen vorgegeben, so daß der Fehler hier identisch null ist. Im ersten Integrationsschritt werden dann

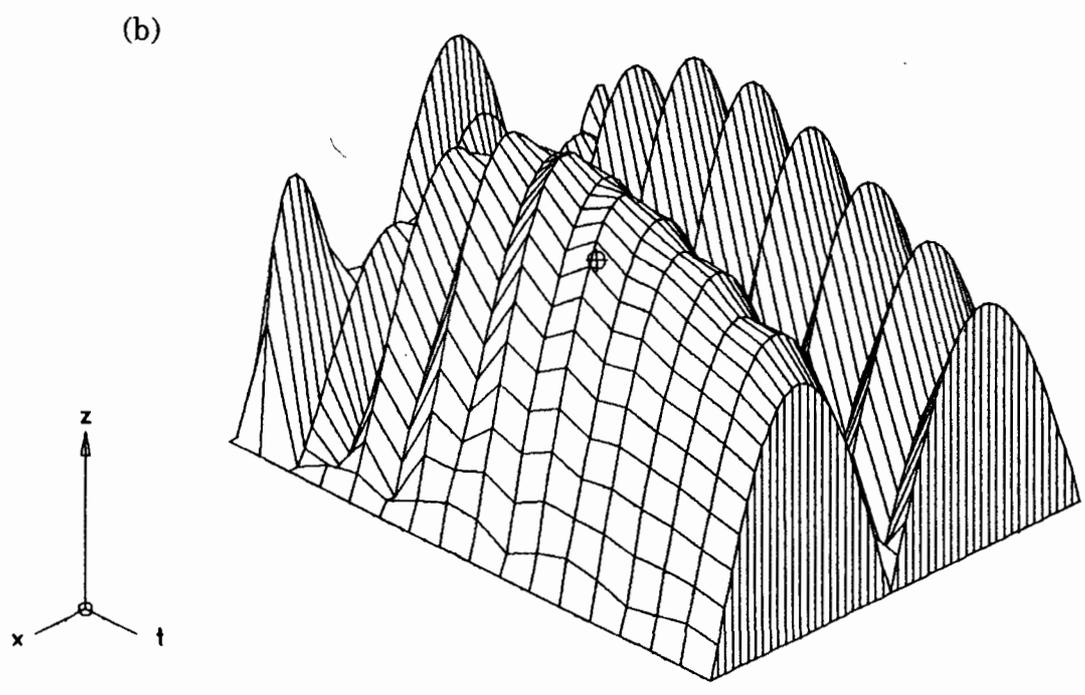
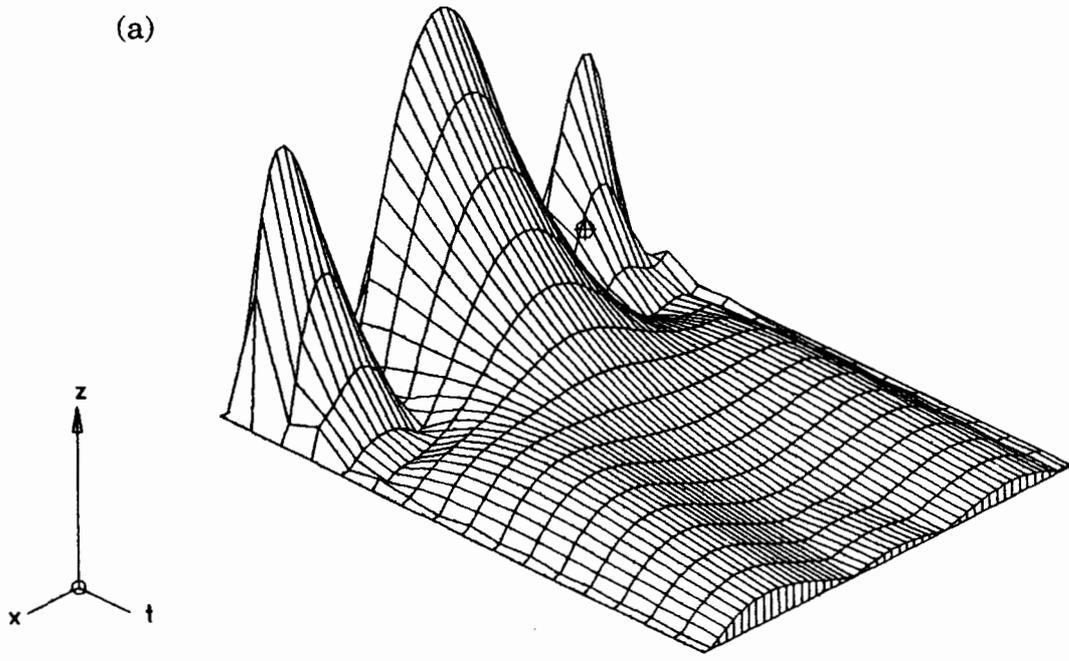


Abb. 4.7: Zeitliche Entwicklung des Fehlerbetrages für das Diskretisierungsverhältnis $\Delta t/\Delta x = 2$, $C = 0.2$, $D = 7.8$ und den Lösungsbereich $0 \leq x \leq \pi$, $0 \leq t \leq 2.05$: (a) ABCN-Verfahren: $z_{max} = 1.51 \cdot 10^{-3}$, (b) LFCN-Verfahren: $z_{max} = 1.69 \cdot 10^{-3}$

durch das Euler-Crank-Nicolson-Verfahren - je nach Größe des Diskretisierungsverhältnisses $\Delta t/\Delta x$ - mehr oder weniger große Fehler eingebracht. Der dann durchgeführte erste LFCN-Schritt verwendet zur Berechnung der Zeitebene $2\Delta t$ fast ausschließlich die exakten Anfangswerte und führt, da es von zweiter Ordnung genau ist, besonders für große Diskretisierungsverhältnisse zu wesentlich geringeren Fehlern als das Euler-Crank-Nicolson-Verfahren. Damit tritt eine Oszillation im Fehlerverlauf auf, die im Falle einer sehr kleinen Maschen-Peclet-Zahl über einen längeren Zeitraum bestehen bleibt.

Die Neigung des LFCN-Verfahrens zu zeitlichen Oszillationen ist auch an den komplexen Eigenwerten der Von Neumann-Analyse zu erkennen. Nach Gl. (B.4) sind betragsmäßig gleiche Eigenwerte mit dem Wert

$$|\lambda_{1,2}| = \frac{\sqrt{1 - 16 D^2 \sin^4 \frac{\phi}{2}}}{1 + 4 D \sin^2 \frac{\phi}{2}} \quad (4.28)$$

aber mit unterschiedlicher Phase möglich. Damit ergibt sich eine Oszillation, die je nach den Werten von Diffusionszahl D und Phasenwinkel ϕ mehr oder weniger stark gedämpft ist. Dieses Problem existiert beim ABCN-Verfahren nicht, da hier stets ein Eigenwert betragsmäßig über den anderen dominiert.

Eine übliche Methode, die bei Leapfrog-Verfahren möglichen $2\Delta t$ -Oszillationen in der numerischen Lösung zu beschränken, ist es, nach einer begrenzten Anzahl von Leapfrog-Schritten einen Mittelungsschritt durchzuführen. Diese auch in TURBIT praktizierte Vorgehensweise (vergl. Abschnitt 3.5.3) hat sich allgemein bewährt.

Um den großen Fehler des Euler-Crank-Nicolson-Startschrittes bei großen Diskretisierungsverhältnissen und die daraus resultierenden Oszillationen des LFCN-Verfahrens nach Möglichkeit zu vermeiden, wurden verschiedene Studien durchgeführt. Insbesondere wurde die Auswirkung einer Verkleinerung der Zeitschrittweite des Euler-Schrittes gegenüber der dann beim LFCN-Verfahren zu verwendenden Zeitschrittweite untersucht. Es zeigt sich, daß damit der Fehler des Euler-Verfahrens auf die Größenordnung der zweiten Ordnung Verfahren in der Zeit begrenzt werden kann. Der darauf folgende LFCN-Schritt ist jedoch aufgrund der unterschiedlichen Zeitschrittweite zwischen den drei Zeitebenen nur mehr von erster Ordnung genau und weist eine wesentlich größere numerische Diffu-

sion auf. Die Fehlerordnung $O(\Delta t)$ kann auch nicht durch eine andere Gewichtung der beiden zurückliegenden Zeitebenen verbessert werden. Damit wird der große Fehler, den man beim Euler-Startschritt vermeiden konnte, im darauffolgenden Integrationsschritt eingebracht. Das Verfahren bringt somit keine Vorteile gegenüber der bisherigen Vorgehensweise. Eine weitere Möglichkeit wäre, die für die LFCN-Schritte vorgesehene Zeitschrittweite Δt nicht mit einem einzigen, sondern z.B. n Euler-Crank-Nicolson-Schritten der Zeitschrittweite $\Delta t_{Eu} = \Delta t/n$ zu überbrücken. Damit könnte der Fehler gegenüber der bisherigen Praxis mit $n = 1$ deutlich reduziert werden. Wesentlicher Nachteil ist jedoch, daß für einen z.B. 40 Δt umfassenden Makrointegrationszyklus nicht mehr 40, sondern z.B. bei $n = 10$ nunmehr 49 Integrationsschritte notwendig sind. Damit bringt eine solche Vorgehensweise einen unter Umständen erheblichen Mehraufwand mit sich.

4.6 Schlußfolgerungen für die Anwendung in TURBIT

Im folgenden sollen die Ergebnisse der analytischen und numerischen Untersuchungen von ABCN- und LFCN-Verfahren im Hinblick auf eine Implementierung in TURBIT zusammenfassend diskutiert und bewertet werden.

Die in Abschnitt 4.4.3 durchgeführte Von Neumann-Stabilitätsanalyse ergab, daß beim LFCN-Verfahren der Diffusionsprozeß durch die implizite Formulierung numerisch unbedingt stabil ist und somit keinen Einfluß auf die zulässige Zeitschrittweite hat. Diese wird allein durch die Stabilität des Konvektionsprozesses bestimmt. Das Stabilitätskriterium des LFCN-Verfahrens für die Energiegleichung ist damit vollständig in dem Kriterium des für die Integration der Impulsgleichung verwendeten expliziten Euler-Leapfrog-Verfahrens enthalten. Damit sichert eine Zeitschrittweite, die nach dem Stabilitätskriterium (3.22) mit $\mu = \nu$ bestimmt wird, automatisch auch die Stabilität des LFCN-Verfahrens für die Energiegleichung. Hingegen erfordert die numerische Stabilität des ABCN-Verfahrens stets eine gewisse (von der Courant-Zahl abhängige) Mindestdiffusivität. Daraus erwächst ein wesentlicher Nachteil für das ABCN-Verfahren, denn es ist im allgemeinen nicht - wie beim LFCN-Verfahren - möglich, die Zeitschrittweite allein aus dem Stabilitätskriterium für die Impulsgleichung zu bestimmen. Dieses Kriterium gestattet zum Teil Parameterkombinationen von Courant- und Diffusionszahl, für die das ABCN-Verfahren instabil ist, so daß eine Überprüfung hinsichtlich deren Zulässigkeit notwendig wird. Gegebenenfalls ist eine Korrek-

tur der Zeitschrittweite durchzuführen. Die Von Neumann-Stabilitätsanalyse läßt also eindeutige Vorteile des LFCN-Verfahrens erkennen.

Das wesentliche Ergebnis der numerischen Untersuchungen in Kapitel 4.5 ist der entscheidende Einfluß des Diskretisierungsverhältnisses $\Delta t/\Delta x$ auf das Fehlerverhalten des LFCN-Verfahrens. Ist dieses Verhältnis beim linearen Problem kleiner als eins, so ist das LFCN- dem ABCN-Verfahren hinsichtlich der Größe des Fehlers leicht überlegen bzw. für sehr kleine $\Delta t/\Delta x$ gleichwertig. Überschreitet das Diskretisierungsverhältnis den Wert eins, so werden die beim LFCN-Verfahren auftretenden zeitlichen Fehleroszillationen sehr stark, und der Fehler des ABCN-Verfahrens ist deutlich geringer.

Die Eignung der beiden halbimpliziten Verfahren bezüglich ihrer Anwendung in TURBIT hängt also entscheidend von dem zu erwartenden Diskretisierungsverhältnis ab. Da das bisher in TURBIT verwendete explizite Zeitintegrationsverfahren aus Stabilitätsgründen nur sehr kleine Zeitschrittweiten zuläßt, lag das Verhältnis $\Delta t/\Delta x$ bei bisherigen Simulationen von Naturkonvektion in Flüssigmetallen stets in der Größenordnung 1/100. Bei den durch die Implementierung eines halbimpliziten Zeitintegrationsverfahrens möglich werdenden wesentlich größeren Zeitschrittweiten kann man mit einem Diskretisierungsverhältnis in der Größenordnung $\Delta t/\Delta x \approx 0.1 - 1$ rechnen. Als Ergebnis der numerischen Untersuchungen ist somit für die Lösung der Energiegleichung das LFCN-Verfahren zu empfehlen.

Anders liegen die Verhältnisse, wenn neben der Energiegleichung auch die Impulsgleichung halbimplizit gelöst werden soll. Dann ist eine weitere Steigerung der Zeitschrittweite möglich, was Diskretisierungsverhältnisse bis hin zu $\Delta t/\Delta x \approx 1 - 10$ bedeuten kann. Nach den Erfahrungen mit den numerischen Testfällen ist dann das LFCN-Verfahren ungeeignet und das ABCN-Verfahren sowohl für die Lösung der Impuls- als auch der Energiegleichung zu bevorzugen.

Wägt man die Ergebnisse der analytischen und numerischen Untersuchungen ab, so bleibt festzuhalten, daß die geringen Vorteile des ABCN-Verfahrens, die sich aus der Spektralanalyse des numerischen Fehlers ergeben, nicht so hoch zu bewerten sind wie das eindeutig bessere Stabilitätsverhalten des LFCN-Verfahrens und dessen etwas höhere Genauigkeit bei Simulationen mit Diskretisierungsverhältnissen $\Delta t/\Delta x < 1$. Darüber hinaus spricht für das LFCN-Verfahren, daß dann Impuls- und Energiegleichung mit ähnlichen Zeitintegrationsverfahren gelöst werden. Dadurch werden mögliche Phasenfehler zwischen Geschwindigkeits- und Temperaturfeld, die bei solch unterschiedlichen Zeitintegrationsverfahren - wie

es das explizite Euler-Leapfrog- und das halbimplizite ABCN-Verfahren sind - auftreten können, vermieden. Für die halbimplizite Lösung der Energiegleichung bei gleichzeitiger Beibehaltung des expliziten Euler-Leapfrog-Verfahrens für die Impulsgleichung wird daher das LFCN-Verfahren als das zu bevorzugende Verfahren für TURBIT ausgewählt.

Bei der direkten numerischen Simulation von Naturkonvektion in Medien mit mittlerer Prandtl-Zahl ($Pr \approx 1$) ist ein Rechenzeitgewinn nur möglich, wenn neben der Energiegleichung auch die Impulsgleichung halbimplizit gelöst wird. Nach den Ergebnissen der numerischen Untersuchungen ist für diesen Fall das ABCN-Verfahren eindeutig zu bevorzugen. Es ist sinnvoll, sich die Option einer Erweiterung von TURBIT auf ein halbimplizites Zeitintegrationsverfahren für die Impulsgleichung offenzuhalten. Aus diesem Grund und da eine zusätzliche Implementierung des ABCN- neben der des LFCN-Verfahrens keinen wesentlichen Mehraufwand darzustellen scheint, wird eine Entscheidung zugunsten einer Einbindung beider Verfahren in TURBIT getroffen.

4.7 Lösung der Bestimmungsgleichung für das Temperaturfeld

Aufgrund des halbimpliziten Charakters von LFCN- und ABCN-Verfahren ist es - im Gegensatz zur bisher angewandten expliziten Methode - nicht mehr möglich, die Temperaturwerte der neuen Zeitebene direkt aus bekannten Temperatur- und Geschwindigkeitswerten zurückliegender Zeitebenen zu berechnen. Stattdessen führen die halbimpliziten Verfahren auf ein Gleichungssystem, aus dem die diskreten Temperaturwerte der neuen Zeitebene zu bestimmen sind. Da die Lösung dieses Gleichungssystems einen bedeutenden zusätzlichen numerischen Aufwand darstellt, ist die Verwendung eines geeigneten Lösungsverfahrens eine wichtige Voraussetzung für die Effizienz des gesamten Rechenprogramms.

Betrachtet man die Temperatur zunächst als eine räumlich kontinuierliche aber zeitlich diskrete Größe, so ergibt sich bei Verwendung des LFCN-Verfahrens für die Energiegleichung die Berechnungsvorschrift

$$\frac{T^{n+1} - T^{n-1}}{2\Delta t} = -\nabla \left(\underline{u}^n T^n \right) + \frac{1}{2\sqrt{Ra \cdot Pr}} \left(\nabla^2 T^{n+1} + \nabla^2 T^{n-1} \right) \quad (4.29)$$

für die unbekanntenen Temperaturen T^{n+1} . Diese Gleichung kann dargestellt werden als

$$\nabla^2 T^{n+1} - \frac{\sqrt{Ra \cdot Pr}}{\Delta t} T^{n+1} = f \left(T^n, T^{n-1}, \underline{u}^n, \Delta t, \sqrt{Ra \cdot Pr} \right). \quad (4.30)$$

Da es sich bei Gl. (4.30) um eine Helmholtz-Gleichung für T^{n+1} handelt, führen beide halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren auf Gleichungssysteme, die dem einer diskretisierten Helmholtz-Gleichung entsprechen. In TURBIT ist wegen der Verwendung der Chorinschen Projektionsmethode für jeden Zeitschritt die Lösung einer diskreten Helmholtz-Gleichung für den Druck erforderlich. Da hierzu im Code ein Poisson-Löser vorhanden ist, liegt es nahe, zu untersuchen, inwieweit dieser zur Lösung der Helmholtz-Gleichung für das Temperaturfeld herangezogen werden kann, bzw. welche Modifikationen und Erweiterungen dieses Löser hier zu erforderlich sind.

Das in TURBIT implementierte Poisson-Löser-Paket stammt von Schmidt et al. (1984). Es umfaßt drei Unterprogramme, die alle die dreidimensionale Helmholtz-Gleichung in kartesischen Koordinaten in einem quaderförmigen Gebiet lösen. Das Programmpaket wurde von Reeder (1986) für die Anwendung auf Ringspaltgeometrien erweitert. Der Diskretisierung der Differentialgleichung liegen auf einem versetzten Maschennetz definierte Finite Differenzen zweiter Ordnung zugrunde. Es sind verschiedene Variationen von Neumannschen, Dirichletschen und periodischen Randbedingungen vorgesehen. Je nach Randbedingungen werden dabei verschiedene Lösungsmethoden verwendet, auf die hier nur kurz eingegangen werden soll. Wesentlich ist die Durchführung einer schnellen Fourier-Transformation für die Richtungen, in denen periodische Randbedingungen vorliegen. Sind in zwei Richtungen periodische Randbedingungen vorgegeben, so führt dies auf ein tridiagonales Gleichungssystem, das mit der Methode der Gaußschen Elimination gelöst wird (Unterprogrammpaket H3DCY2). Für den Fall, daß nur in einer Richtung periodische Randbedingungen spezifiziert sind (Unterprogramm H3VNDC) und in zwei Richtungen feste Wände vorliegen, führt die FFT auf ein block-tridiagonales Gleichungssystem. Dieses wird mit zyklischer Reduktion und Gaußscher Elimination gelöst [siehe hierzu Sweet (1973), Schumann & Sweet (1976)].

Aus diesen Ausführungen geht hervor, daß die Programme H3DCY2 und H3VNDC prinzipiell zur Lösung der Helmholtz-Gleichung, die sich bei Verwen-

dung eines halbimpliziten Zeitintegrationsverfahrens ergibt, geeignet sind. Eine Schwierigkeit erwächst jedoch aus der Tatsache, daß Dirichletsche und Neumannsche Randbedingungen in dem Programmsystem nicht einheitlich behandelt werden. Zur Verdeutlichung soll die Druck-Poisson-Gleichung dienen, bei der an festen Wänden homogene Neumannsche Randbedingungen vorzugeben sind. Unter Berücksichtigung der in Abb. 4.8 skizzierten Geometrie ergibt sich aus der Approximation

$$\frac{\partial p}{\partial x_3} \Big|_{Wand} \approx \frac{p(1) - p(0)}{\Delta x_3(1)} = 0 \quad (4.31)$$

die auch so in H3DCY2 und H3VNDC realisierte Vorschrift

$$p(0) = p(1). \quad (4.32)$$

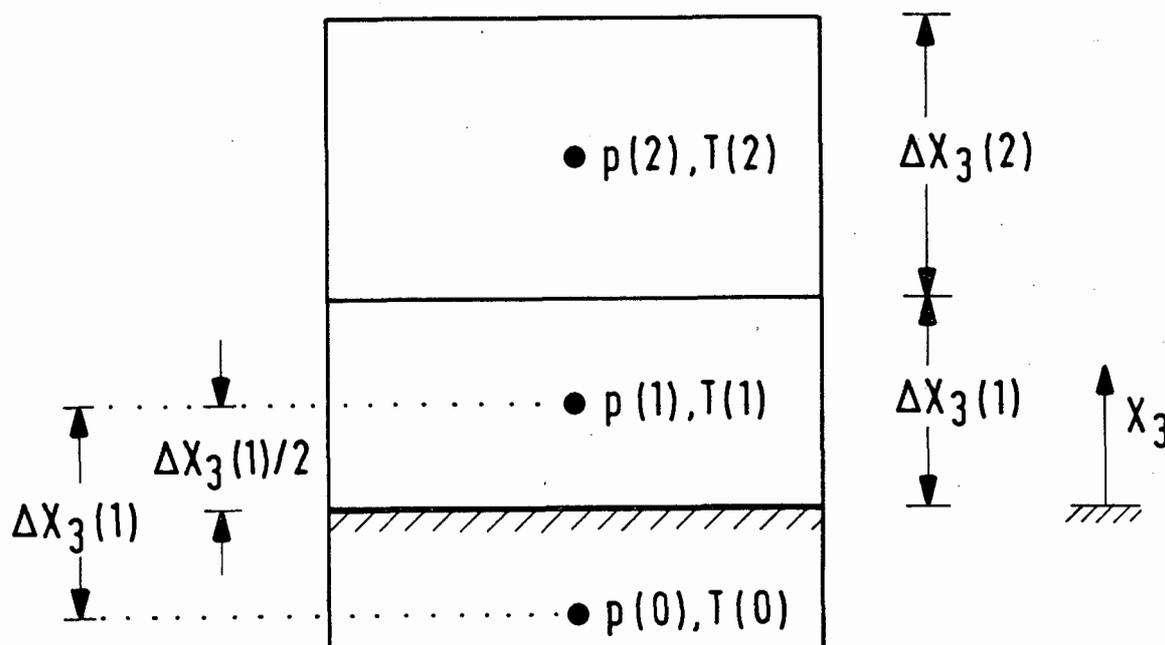


Abb. 4.8: Gitterabstände des versetzten Maschennetzes in x_3 -Richtung nahe der unteren Wand. Die Position der Maschenmittelpunkte mit den an dieser Stelle definierten Druck- und Temperaturwerten ist durch Vollkreise angedeutet.

Für die Temperatur ist es neben der Aufprägung von Wandwärmeströmen durch Neumannsche Randbedingungen wesentlich, mittels Dirichletscher Randbedingungen auch die Wandtemperaturen vorgeben zu können. Für die homogene Dirichletsche Temperaturrandbedingung ergibt sich bei Zugrundelegen einer linearen Verteilung

$$T|_{\text{Wand}} = \frac{1}{2} (T(0) + T(1)) = 0, \quad (4.33)$$

und daraus die Vorschrift

$$T(0) = - T(1), \quad (4.34)$$

die jedoch nicht so im Poisson-Löser realisiert ist. Vielmehr wird dort wegen $T(0) = 0$ die homogene Dirichletsche Randbedingung an einer um eine halbe Maschenweite in die Wand versetzten Stelle $x_3 = -\Delta x_3 (1)/2$ formuliert. Die korrekte Implementierung Dirichletscher Randbedingungen für die Temperatur ist von großer Bedeutung, da dies unmittelbare Auswirkungen auf den sich an den Wänden einstellenden Temperaturgradienten und damit auch auf die Nusselt-Zahl hat. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit, das existierende Poisson-Lösungspaket derart zu erweitern, daß die Spezifikation Dirichletscher Randbedingungen auf einem versetzten Maschennetz - und damit die Vorgabe der Temperatur direkt an der Wand - möglich wird.

Die entsprechenden Erweiterungen sind für das Programmpaket H3DCY2 in relativ einfacher Art und Weise durchzuführen, da dies auf einer relativ hohen Programmebene erfolgen kann. Dagegen gestaltet sich diese Aufgabe für H3VNDC ungleich schwieriger. Hier wirken sich die Modifikationen bis auf die unterste Programmebene aus, und es ist eine tiefere Einarbeitung sowohl in die dem Lösungsverfahren zugrundeliegende Theorie als auch ihre Realisierung im Programm notwendig. Die den Erweiterungen der Module H3DCY2 und H3VNDC zugrundeliegende Mathematik ist in Anhang C zu finden. Die korrekte programmtechnische Umsetzung der den Erweiterungen zugrundeliegenden Theorie wurde mit einem speziellen Testprogramm für alle möglichen Geometrie- und Randbedingungskombinationen überprüft. Die möglichen Randbedingungen des erweiterten Poisson-Löser-Paketes sind in Tabelle 4.3 zusammengefaßt.

Tab. 4.3: Mögliche Randbedingungen des erweiterten Poisson-Löser-Paketes: *CYC* = periodische Randbedingungen, *NS* = Neumannsche Randbedingungen auf einem versetzten Maschennetz, *DS* = Dirichletsche Randbedingungen auf einem versetzten Maschennetz

Modul	Koordinatenrichtung		
	x1	x2	x3
H3DCY2	CYC	CYC	NS - NS DS - DS DS - NS NS - DS
H3VNDC	NS - NS DS - DS DS - NS NS - DS	CYC	NS - NS

Die Verwendung des beschriebenen direkten hocheffizienten Poisson-Löser-Paketes für das sich bei halbimpliziter Integration der Energiegleichung ergebende Gleichungssystem bringt aber auch weitergehende Einschränkungen mit sich. Da der Lösungsalgorithmus von einem konstanten thermischen Diffusionskoeffizienten ausgeht, kann damit das sich bei einer Grobstruktursimulation für das Temperaturfeld ergebende Gleichungssystem nicht gelöst werden, da hier der molekulare thermische Diffusionskoeffizient noch durch Anteile aufgrund der räumlich variierenden Feinstrukturwärmeströme modifiziert wird. Neben dieser Beschränkung auf direkte Simulationen für das Temperaturfeld ergibt sich eine weitere Einschränkung aus der Tatsache, daß bei der Formulierung der Temperatur-Randbedingungen von einer linearen Näherung ausgegangen wurde. Damit liefert das Lösungsverfahren im strengen Sinne in Wandnähe nur dann richtige Ergebnisse, wenn die Temperaturgrenzschicht mit mindestens einer Masche aufgelöst wird. Da diese Forderung bei einer direkten Simulation in jedem Fall zu stellen ist, erwächst aus der linearen Wandnäherung in der Praxis keine zusätzliche Einschränkung.

4.8 Realisierung der Verfahren in TURBIT

Bei der praktischen Umsetzung von LFCN- und ABCN-Verfahren in TURBIT wurde besonderer Wert auf folgende Kriterien gelegt:

- weitgehende Beibehaltung der bestehenden Programmstruktur
- Beschränkung auf möglichst wenige, aber hochflexible Unterprogramme
- Minimierung des zusätzlich notwendigen Hauptspeicherbedarfs
- Auswahl des für die Energiegleichung zu verwendenden Zeitintegrationsverfahrens (explizit, LFCN- oder ABCN-Verfahren) in einer für den Programmbeutzer möglichst einfachen Art und Weise.

Die Realisierung dieser Vorgaben wurde dadurch erreicht, daß alternativ zu den beim expliziten Verfahren verwendeten Integrationsroutinen GTP1, GTPK und GTPKM bei halbimpliziter Integration die Unterprogramme WTP1, WTPK und WTPKM aufgerufen werden. In diesen Routinen wird für die Ebene $k = 1, 2 \leq k \leq KM-1$ und $k = KM$ unter Berücksichtigung des entsprechenden Zeitintegrationsverfahrens sowie der thermischen Randbedingungen für jede Masche die rechte Seite von Gl. (4.30) berechnet. Das Ergebnis wird entsprechend der von dem Poisson-Löser H3DCY2 bzw. H3VNDC erwarteten Eingabestruktur in das Feld YTP gespeichert. Dieses Feld ist zusammen mit den Koeffizientenvektoren A_k, B_k und C_k (siehe Gl. (C.1)), die nur einmal zu Beginn der Rechnung bestimmt werden müssen, Eingabe für das modifizierte Poisson-Lösungs-Paket (Entry H3VETP). Von diesem wird als Ergebnis das dreidimensionale Temperaturfeld der neuen Zeitebene, gespeichert im Feld YTP, zurückgeliefert. In den Unterprogrammen WTPSTO und WFINIS werden die Temperaturwerte nach jedem Mikrozeitschritt bzw. am Ende des Makrointegrationszyklusses in das Feld TP umgespeichert. Bei der beschriebenen Vorgehensweise beschränkt sich der zusätzliche Hauptspeicherbedarf bei halbimpliziter Integration der Energiegleichung für den Löser H3DCY2 auf

$$(IM+2) JM \cdot KM + 3 \cdot KM - 4$$

Feldelemente, und für den Löser H3VNDC auf

$$(IM+2) (JM+2) (KM+2) + KM$$

Feldelemente. Dies ist nur ca. 1/16 der Hauptspeicheranforderungen der vollexpliziten Programmversion.

Die Festlegung, welches Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung verwendet werden soll, erfolgt in der Karteneingabe über die beiden Logikvariablen LTPIEX und LTPILF, siehe Tab. 4.4.

Tab. 4.4: Auswahl des Zeitintegrationsverfahrens für die Energiegleichung. LTPIEX und LTPILF sind in der Karteneingabe zu spezifizierende Logikvariablen.

Zeitintegrationsverfahren	Typ	LTPIEX	LTPILF
Euler-Leapfrog	explizit	TRUE	beliebig
LFCN-Verfahren	halbimplizit	FALSE	TRUE
ABCN-Verfahren	halbimplizit	FALSE	FALSE

Die Steuerung eines typischerweise $N = 40$ Zeitschritte umfassenden Makrointegrationszyklusses läuft - wie bisher - programmintern ab. Beginnend mit einem Euler-Crank-Nicolson-Schritt folgen, je nachdem, welches der halbimpliziten Verfahren verwendet wird, entweder $N-2$ LFCN-Schritte und ein abschließender gemischter Euler-Crank-Nicolson-LFCN-Schritt oder $N-1$ ABCN-Schritte.

4.9 Verifikation der neuen Simulationsmethode

4.9.1 Erfahrungen mit den halbimpliziten Verfahren

Zur Überprüfung der richtigen programmtechnischen Umsetzung der beiden halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren wurden für verschiedene Geometrien und Randbedingungen Testrechnungen vorgenommen. Dabei wurde neben dem expliziten Zeitintegrationsverfahren auch eine Integration der Energiegleichung mit dem LFCN- und ABCN-Verfahren durchgeführt, wobei stets die Zeitschrittweite des expliziten Verfahrens zugrundegelegt wurde. Die Ergebnisse dieser Studien finden sich in Anhang D.

In einem nächsten Schritt wurde untersucht, inwieweit das theoretische Zeitschrittweitenpotential von LFCN- und ABCN-Verfahren in der Praxis tatsächlich

ausgenutzt werden kann. In Rechnungen mit Prandtl-Zahlen $0.001 \leq Pr \leq 0.021$ zeigte sich, daß verschiedentlich numerische Instabilitäten auftraten, obwohl Zeitschrittweiten verwendet wurden, die nach der linearen Stabilitätstheorie zulässig sind. In allen untersuchten Fällen waren dabei LFCN- und ABCN-Verfahren entweder beide stabil oder beide instabil. Im Falle der Stabilität waren zwischen den Ergebnissen beider Verfahren für Zeitsignale lokaler Größen praktisch keine Unterschiede festzustellen. Das Auftreten numerischer Instabilitäten wurde jeweils dann beobachtet, wenn größere Diffusionszahlen vorlagen. Die Instabilitäten traten dabei zuerst im Temperaturfeld auf und äußerten sich in zeitlichen Oszillationen mit stark anwachsender Amplitude. Ausgangspunkt waren jeweils die wandnächsten Maschen, also der Bereich, wo die Diffusionszahl am größten ist. Auf die Notwendigkeit einer Beschränkung der Diffusionszahl bei praktischen Rechnungen wurde bereits in Abschnitt 4.4.4 hingewiesen, ohne daß dort eine konkrete Obergrenze angegeben werden konnte. Im Rahmen der hier durchgeführten numerischen Studien war die niedrigste Diffusionszahl, bei der die halbimpliziten Verfahren instabil wurden, $D = 5.84$ und die höchste Diffusionszahl, bei der die Verfahren noch stabil liefen, $D = 6.6$. Aus diesen Erfahrungen heraus wurde bei allen folgenden Rechnungen durch eine gegebenenfalls erfolgende Zeitschrittweitenanpassung sichergestellt, daß die Diffusionszahl den Wert $D_{max} = 4$ nicht überschreitet. Diese Obergrenze hat sich in der Praxis bewährt, da im Rahmen aller mit diesem Kriterium durchgeführten Simulationen keine numerischen Instabilitäten beobachtet wurden.

Die zusätzliche Rechenzeit pro Zeitebene, die die Verwendung der halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren gegenüber dem vollexpliziten Verfahren mit sich bringt, hängt davon ab, welches der beiden Unterprogrammpakete des Poisson-Lösers verwendet wird. Liegen in zwei Koordinatenrichtungen periodische Randbedingungen vor und wird demzufolge das Modul H3DCY2 verwendet, so ist dies etwa 10%. Für den Fall, daß nur in einer Richtung periodische Randbedingungen vorgegeben sind und die Lösung mit H3VNDC erfolgt, erhöht sich der zusätzliche numerische Aufwand auf etwa 20%. Die Größe der mit den halbimpliziten Verfahren möglichen Steigerung der Zeitschrittweite hängt stark vom Anwendungsfall ab. Insbesondere sind hier die Prandtl-Zahl und wegen des Diffusionszahlkriteriums die Größe der Wandmaschen entscheidend. Typische Werte liegen jedoch im Bereich von Faktor 10 bis 40. In dieser Größenordnung liegt auch die effektive Rechenzeiteinsparung bei halbimpliziter Integration der Energiegleichung.

4.9.2 Nachrechnung eines Benchmark-Problems

Zur Verifikation der beiden neu in TURBIT implementierten halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren wird ein von der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM) 1987 ausgeschriebenes Benchmark-Problem nachgerechnet. Dieses befaßt sich mit der zweidimensionalen Konvektion von Fluiden kleiner Prandtl-Zahl in einem Rechteckbehälter. Das Höhen- zu Seitenverhältnis H/L ist 1:4, siehe Abb. 4.9. Der Behälter besitzt feste horizontale und vertikale Wände. Die isothermen vertikalen Wände befinden sich auf den Temperaturen T_1 und T_2 , wobei gilt $\Delta T = T_2 - T_1 > 0$. Für die horizontalen Wände wird ein mit y linear von T_1 nach T_2 ansteigendes Temperaturprofil vorgegeben.

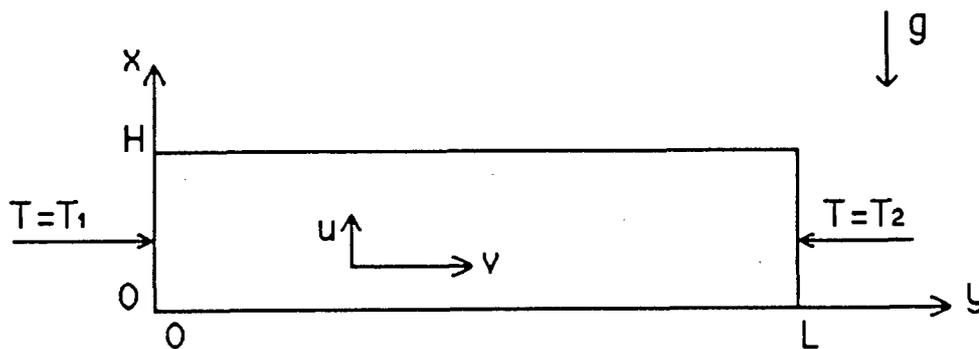


Abb. 4.9: Geometrie des Benchmark-Problems (nach Roux (1990a))

Experimente von Hart (1983) und Hurle et al. (1974) zeigen, daß die für $T_1 \neq T_2$ einsetzende auftriebsinduzierte Strömung nach Überschreiten eines bestimmten kritischen Wertes der Grashof-Zahl Gr_{osz} in einen oszillatorischen Zustand übergeht. Es ist zu beachten, daß sich die hier zugrunde gelegte Definition der Grashof-Zahl

$$Gr = \frac{\hat{g}\hat{\beta} \frac{\Delta\hat{T}}{\hat{L}} \hat{H}^4}{\hat{\nu}^2} \quad (4.35)$$

von der in TURBIT verwendeten Definition unterscheidet (vergl. Gl. (2.3)). Die auftretenden Geschwindigkeiten sind klein genug, um die Strömung als laminar ansehen zu können. Ziel des Benchmarks war es, verschiedene numerische Methoden für Situationen zu vergleichen, bei denen eine Grashof-Zahl leicht unter- und

oberhalb des kritischen Wertes Gr_{osz} vorliegt. Die Beiträge der verschiedenen Autoren sind in Roux (1990a) veröffentlicht. Die Ergebnisse werden von Roux (1990b) zusammenfassend bewertet und diskutiert. Bemerkenswert ist, daß Repräsentanten aller der an diesem Benchmark beteiligten Programmklassen (Finite Differenzen, Finite Volumen, Finite Elemente und spektrale Methoden) genaue Ergebnisse liefern und sich keine Methode als klar überlegen erweist.

Wir beschränken uns hier auf die Grashof-Zahl $Gr = 40\,000$. Die Prandtl-Zahl hat den Wert $Pr = 0.015$, so daß in der Benchmark-Terminologie der Fall C, $Gr = 40\,000$, $Pr = 0.015$, R-R betrachtet wird. Experimentelle Daten für das betrachtete Problem sind in der Literatur nicht verfügbar. Stattdessen werden auf einem sehr feinen Maschennetz (321·81 Gitterpunkte) mit einem Referenzcode [Behnia & de Vahl Davis (1990)] ermittelte numerische Ergebnisse als Vergleichsbasis herangezogen. Für den oben spezifizierten Fall wird das Auftreten einer oszillatorischen Konvektionsform vorhergesagt. Als charakteristische Größen für diese Konvektionsform waren von den verschiedenen Codes das Maximum der Vertikalgeschwindigkeit U^*_{max} für $x = H/2$, $0 < y < L$ sowie die Oszillationsfrequenz f blind vorherzusagen.

Die Anwendung von TURBIT auf das als zweidimensionales Problem definierte GAMM-Benchmark ist möglich, wenn man für eine Richtung, in der periodische Randbedingungen vorliegen, die Minimalanforderung von lediglich vier Maschen vorgibt und in dieser Richtung eine kleine Maschenweite wählt. Infolge der periodischen Randbedingungen und der geringen Maschenanzahl ist die Kopplung der Gleichungen so stark, daß die Ergebnisse in dieser Raumrichtung praktisch keinerlei Variation aufweisen. Auf diese Weise konnte Grötzbach (1990b) mit TURBIT unter Verwendung des vollexpliziten Zeitintegrationsverfahrens zweidimensionale Lösungen des Benchmark-Problems realisieren.

Eine Behandlung des Benchmark-Problems mit den beiden neu in TURBIT implementierten halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren ist nur möglich, wenn die Temperaturreandbedingungen leicht modifiziert werden. Dies ist deshalb notwendig, weil das Poisson-Lösungs-Paket H3VNDC nur an zwei der vier Wände die Vorgabe Dirichletscher Randbedingungen erlaubt (vergl. Tab. 4.3). Dies bedeutet, daß das lineare Temperaturprofil der horizontalen Wände so abbildbar ist, für die vertikalen Wände jedoch nicht die Temperaturen T_1 und T_2 , sondern stattdessen Wandwärmeströme als Randbedingung vorgegeben werden müssen. Da die exakten Wandwärmeströme nicht bekannt sind, werden diese aus den mit dem vollexpliziten Zeitintegrationsverfahren erzielten Ergebnissen übernommen. Hierbei

ist anzumerken, daß diese Wandwärmeströme räumlich und zeitlich leicht variieren. Mit der Vorgabe der räumlich und zeitlich konstanten mittleren Wandwärmeströme kann das Benchmark-Problem hinsichtlich der Randbedingungen nur näherungsweise abgebildet werden.

Die mit TURBIT berechneten Ergebnisse für die Maximalgeschwindigkeit U^*_{max} und die zugehörige Oszillationsfrequenz f sind in Tabelle 4.5 zusammengefaßt [Wörner & Grötzbach (1992)] und den Werten des Referenzprogramms gegenübergestellt. Bei Verwendung eines der halbimpliziten Zeitintegrationsverfahrens für die Energiegleichung und einem Gitter mit $30 \cdot 4 \cdot 64$ Maschen ist gegenüber dem vollexpliziten Zeitintegrationsverfahren eine Steigerung der Zeitschrittweite Δt um den Faktor 37 möglich. Die zusätzliche Rechenzeit von ABCN- und LFCN-Verfahren liegt etwa bei 20% des vollexpliziten Verfahrens, so daß eine Effizienzsteigerung um gut den Faktor 30 erreicht werden konnte. Gegenüber dem expliziten Verfahren können damit bei gleicher CPU-Zeit wesentlich größere Problemzeiten t_{sim} realisiert werden. Dies führt für U^*_{max} zu nur geringfügig, aber für die Frequenz f deutlich verbesserten Werten im Vergleich zu den Ergebnissen des Referenzprogramms. Eine Verfeinerung des Maschennetzes auf $50 \cdot 4 \cdot 102$ Gitterpunkte hat eine deutliche Verbesserung des Ergebnisses für U^*_{max} zur Folge.

Tab. 4.5: Vergleich der TURBIT-Ergebnisse für die Geschwindigkeitsamplitude U^*_{max} und die Oszillationsfrequenz f mit den Referenzwerten nach Behnia & de Vahl Davis (1990).

Rechenprogramm	Gitter	Δt	t_{sim}	U^*_{max}	f
Referenzprogramm	81·321	-	-	1.093	21.76
TURBIT (explizit)	30·4·64	$2.6 \cdot 10^{-4}$	72.1	0.987	22.35
TURBIT (ABCN)	30·4·64	$9.8 \cdot 10^{-3}$	228.1	0.991	22.00
TURBIT (LFCN)	30·4·64	$9.8 \cdot 10^{-3}$	189.0	0.991	21.74
TURBIT (LFCN)	50·4·102	$4.2 \cdot 10^{-4}$	103.4	1.026	21.86

4.9.3 Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft

Die erfolgreiche Nachrechnung des GAMM-Benchmarks ist als eine mathematische Verifikation der erweiterten TURBIT-Version zu bewerten und kann nicht als ausreichende physikalische Verifikation der Simulationsmethode angesehen werden. Für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium wird wegen der nur beschränkt zur Verfügung stehenden experimentellen Daten nur eine schwache Absicherung der Simulationsergebnisse möglich sein, dies zudem nur an integralen Daten, wie der Nusselt-Zahl, und an wenigen statistischen Daten des Temperaturfeldes, in keiner Weise jedoch für das Geschwindigkeitsfeld. Die physikalische Verifikation der neuen Simulationsmethode soll daher für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft erfolgen, wo ausreichend experimentelle Daten in der Literatur verfügbar sind.

Als Vergleichsbasis wird ein Experiment von Deardorff & Willis (1967) für die Rayleigh-Zahl $Ra = 630\,000$ und die Prandtl-Zahl $Pr = 0.71$ herangezogen. Die Experiment-Reihe ($Ra = 6.3 \cdot 10^5, 2.5 \cdot 10^6, 10^7$) wurde in einem außergewöhnlich großen Behälter (366 cm x 94 cm) durchgeführt, wobei die Meßsensoren in der Längsrichtung über eine Strecke von 300 cm verfahren werden konnten. Die Schichthöhe konnte zwischen 4 cm und 30 cm variiert werden. Die Meßergebnisse der Experimente sind nur in graphischer Form angegeben. Die entsprechenden Zahlenwerte sind aus Diagrammen ermittelt und in die TURBIT-Normierung umgerechnet worden.

Bei der Vorgabe von Anfangswerten für die Simulation turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft für die Rayleigh-Zahl $Ra = 630\,000$ kann auf vorhandene Ergebnisse einer Simulation für die Rayleigh-Zahl $Ra = 380\,000$ zurückgegriffen werden [Grötzbach (1989), (1990a)]. Diese auf einem Maschennetz der Größe $180 \cdot 180 \cdot 32$ vorliegenden Ergebnisse werden für einen bestimmten Zeitpunkt unter Beibehaltung der Periodenlängen $X_1 = X_2 = 7.92$ auf ein Maschennetz mit $200 \cdot 200 \cdot 39$ Gitterpunkten ($0.005 \leq \Delta x_3 \leq 0.032$) interpoliert. Gleichzeitig wird die Rayleigh-Zahl auf den neuen Wert hochgesetzt. Durch die Maschennetzverfeinerung wird eine der direkten numerischen Simulation bei der erhöhten Rayleigh-Zahl angemessene räumliche Diskretisierung sichergestellt. Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, daß sich bereits nach relativ kurzer Simulationszeit ein der neuen Rayleigh-Zahl entsprechender Strömungszustand einstellt. Lange transiente Phasen, die sich bei der Vorgabe eines ruhenden Mediums mit dem linearen mittleren Temperaturprofil überlagerten randomen Temperaturschwankungen ergeben, können so vermieden werden. Für die Integration der Energie-

gleichung wird das LFCN-Verfahren verwendet. Da das Beschleunigungspotential des halbimpliziten Verfahrens mit wachsender Prandtl-Zahl stark abnimmt und für $Pr \geq 1$ überhaupt nicht mehr gegeben ist, erscheint es bemerkenswert, daß das LFCN-Verfahren selbst bei der hier betrachteten Simulation mit $Pr = 0.71$ noch um ca. 20% effizienter ist als das vollexplizite Zeitintegrationsverfahren.

In Abb. 4.10 ist das vertikale Profil der mittleren Temperatur von Experiment und Rechnung wiedergegeben. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen, sowohl hinsichtlich der isothermen Kernströmung als auch bezüglich Verlauf und Dicke der thermischen Grenzschichten. Weniger gut, aber insgesamt doch zufriedenstellend ist die Übereinstimmung des in Abb. 4.11 dargestellten vertikalen Profils der Standardabweichung der Temperaturschwankungen (üblicherweise als RMS-Wert bezeichnet, $RMS = \text{''root mean square''}$). Insbesondere werden die sich in der Rechnung ergebenden ausgeprägten Maxima am Rande der thermischen Grenzschicht durch das Experiment in dieser Überhöhung nicht bestätigt.

Abb. 4.12 stellt das vertikale Profil des RMS-Wertes der Vertikalgeschwindigkeit von Experiment und Rechnung gegenüber. Bis auf die fünf wandnächsten Mä-schen ist eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen. Die Abweichungen innerhalb der viskosen Grenzschicht dürften auf Ungenauigkeiten des Experiments zurückzuführen sein. Ein Indiz hierfür ist der unsystematische Verlauf des vertikalen Profils des Korrelationskoeffizienten der Temperatur mit der Vertikalgeschwindigkeit, den Deardorff & Willis (1967) in ihrer Arbeit angeben. Da ähnliche Abweichungen zwischen numerischen und experimentellen Ergebnissen für den wandnahen Bereich auch bei den früheren Simulationen für $Ra = 380\,000$ mit dem expliziten Verfahren auftraten, handelt es sich hier nicht um einen Effekt, der in direktem Zusammenhang mit dem halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren steht.

Das vertikale Profil des RMS-Wertes der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten zeigt Abb. 4.13. Vom qualitativen Verlauf her stimmen Rechnung und Experiment recht gut überein, allerdings liefert erstere allgemein etwas höhere Werte. Dies liegt möglicherweise daran, daß im Experiment aufgrund der endlichen Kanalabmessungen die horizontalen Geschwindigkeitskomponenten durch vertikale Wände gedämpft werden. Eine solche Dämpfung ist in der Rechnung wegen den periodischen Randbedingungen in beiden horizontalen Richtungen nicht gegeben. Bei der numerischen Simulation fallen die RMS-Profile der Geschwindigkeitskomponenten in x_1 - und x_2 -Richtung nicht zusammen. Dies läßt

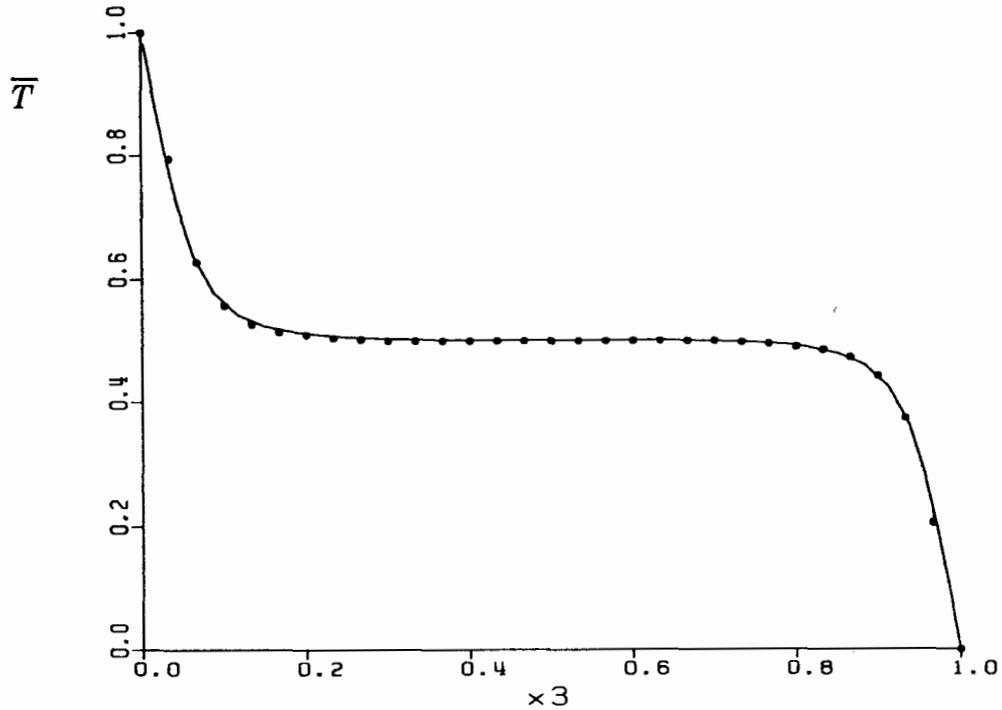


Abb. 4.10: Vertikales Profil der mittleren Temperatur für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft, $Ra = 630\,000$. Vergleich der numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linie) mit experimentellen Daten (Vollkreise) von Deardorff & Willis (1967).

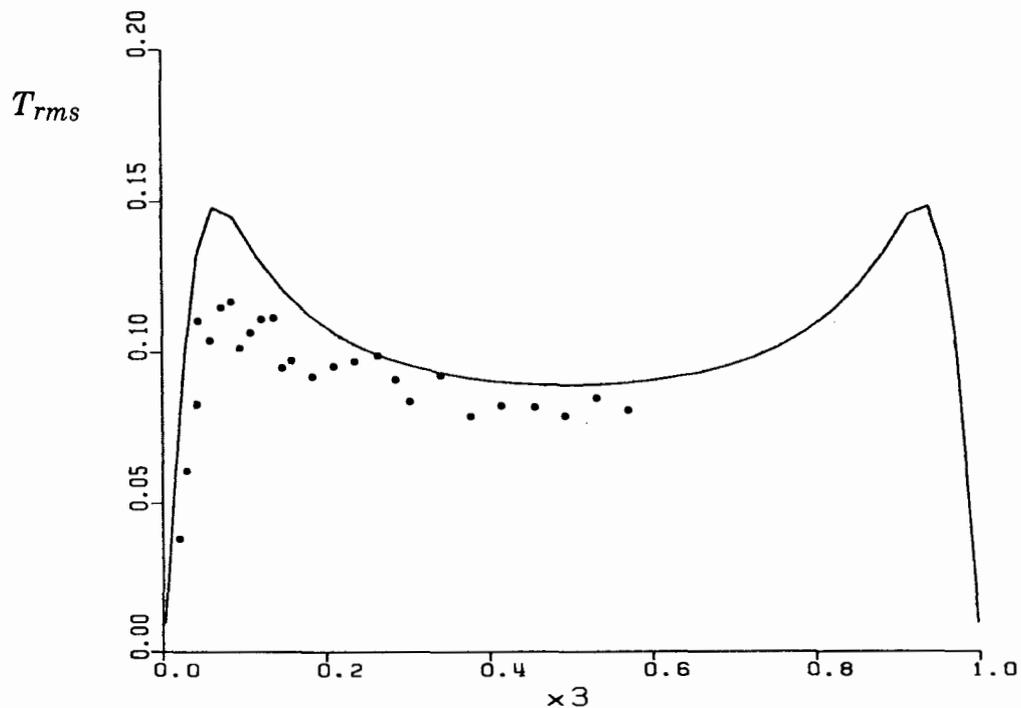


Abb. 4.11: Vertikales Profil des RMS-Wertes der Temperaturfluktuationen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft, $Ra = 630\,000$. Vergleich der numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linie) mit experimentellen Daten (Vollkreise) von Deardorff & Willis (1967).

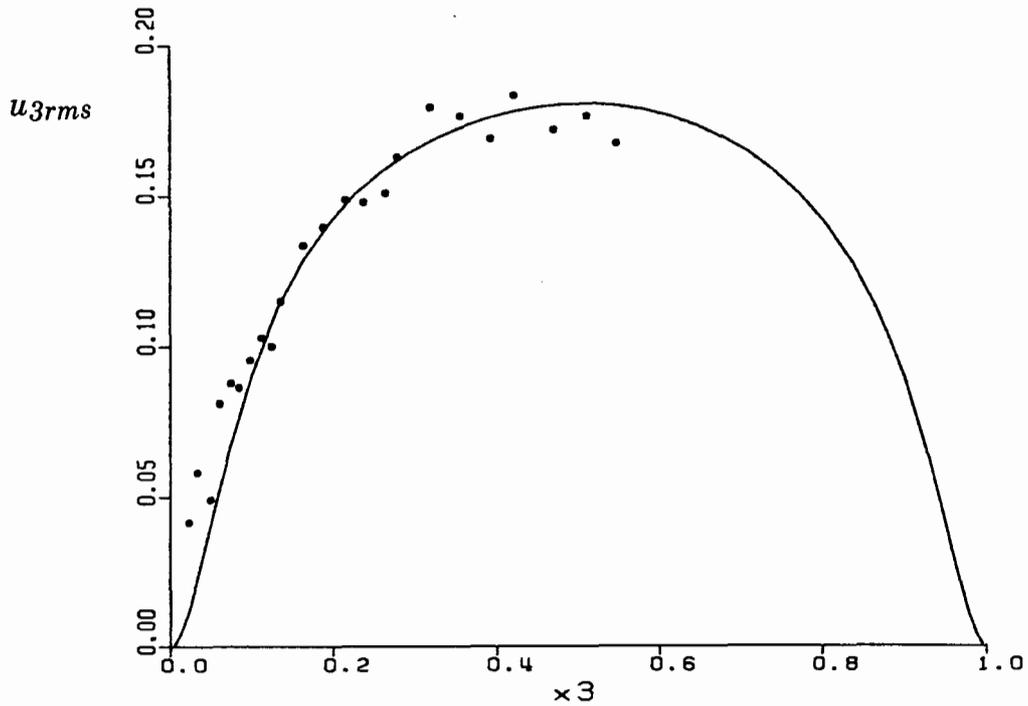


Abb. 4.12: Vertikales Profil des RMS-Wertes der Vertikalgeschwindigkeit für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft, $Ra = 630\,000$. Vergleich der numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linie) mit experimentellen Daten (Vollkreise) von Deardorff & Willis (1967).

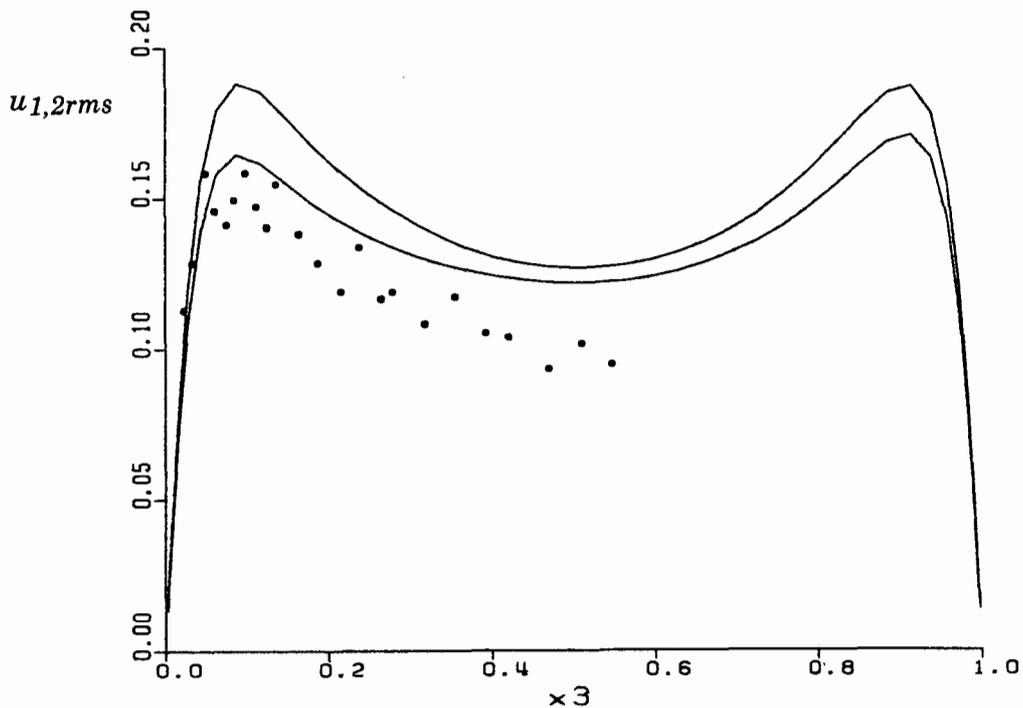


Abb. 4.13: Vertikales Profil des RMS-Wertes der beiden Horizontalgeschwindigkeitskomponenten für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft, $Ra = 630\,000$. Vergleich der numerischen Ergebnisse (durchgezogene Linie) mit experimentellen Daten (Vollkreise) von Deardorff & Willis (1967).

darauf schließen, daß in der Strömung über größere Zeiträume räumliche Strukturen vorhanden sind, die diese schwache Anisotropie bewirken.

Zusammenfassend kann man eine gute Übereinstimmung zwischen den numerischen und experimentellen Ergebnissen feststellen. Die erweiterte TURBIT-Version kann damit als verifiziert angesehen werden. Weitere Analysen der Ergebnisse für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft werden in Kapitel 5 vorgestellt, wo aus einem Vergleich mit Ergebnissen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium auf Einflüsse der Prandtl-Zahl geschlossen werden soll.

5. Anwendungen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium

5.1 Numerische Vorstudien

Bei einer direkten numerischen Simulation werden die das physikalische Problem beschreibenden Erhaltungsgleichungen gelöst, ohne daß empirische Modellierungsansätze eingehen. Die Simulationsmethode erfordert daher eine räumliche und zeitliche Diskretisierung, die die Auflösung aller relevanten Längen- und Zeitmaßstäbe des physikalischen Problems gewährleistet. Ein wichtiger Aspekt der direkten numerischen Simulation ist daher die Spezifikation eines angemessenen Maschennetzes und insbesondere die Verifikation der getroffenen Wahl anhand der Simulationsergebnisse.

Bei der in Abschnitt 4.9.2 vorgestellten Simulation von Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft konnte bei der Festlegung geeigneter Maschenweiten und Periodenlängen auf einen über 17 Jahre hinweg angesammelten Erfahrungsschatz zurückgegriffen werden [Lipps (1976), McLaughlin & Orszag (1982), Grötzbach (1982)]. Ein solcher Erfahrungsschatz ist für Flüssigmetalle nicht verfügbar. Auch Experimente, die Aufschluß über das in solchen Strömungen auftretende Spektrum an Längenmaßstäben geben, sind, anders als bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion von Luft, kaum verfügbar. Es erscheint daher sinnvoll, für Flüssigmetalle zunächst in Vorstudien Erfahrungen über den Einfluß von Maschennetzparametern auf die Simulationsergebnisse zu sammeln. Die Analyse dieser Ergebnisse soll uns in die Lage versetzen, sinnvolle Maschennetze für die eigentlichen rechenzeitintensiven Simulationsläufe festzulegen.

5.1.1 Der Einfluß der Größe des Rechengebietes

Zunächst soll in einer Studie der Einfluß der Periodenlängen $X_{1,2}$ auf die Simulationsergebnisse untersucht werden. Die Simulationen werden für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ und die Prandtl-Zahl $Pr = 0.006$ durchgeführt. Da ausschließlich der Einfluß der Periodenlängen auf die sich einstellenden großräumigen Konvektionsstrukturen untersucht werden soll, werden für alle Simulationen dieselben Maschenweiten zugrundegelegt. Aufgrund der nur begrenzt zur Verfügung stehenden Rechenzeit können für eine solche Studie nicht derart feine Maschenweiten verwendet werden, wie sie im eigentlichen Sinne für eine direkte numerische Simulation dieser Rayleigh-Zahl notwendig wären. Die hier verwendeten Ma-

schenweiten sind um etwa den Faktor zwei zu grob. Sie sollten aber fein genug sein, um alle wesentlichen Vorgänge, die für die Ausbildung der großräumigen Strukturen von Bedeutung sind, erfassen zu können. Die Maschennetzparameter der Simulationen sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt.

Tab. 5.1: Periodenlängen, Maschenweiten und Anzahl der Gitterpunkte der Simulationen im Rahmen der Periodenlängenstudie ($Ra = 6\,000$, $Pr = 0.006$).

$X_{1,2}$	$\Delta x_1 = \Delta x_2$	Δx_3	IM·JM·KM
4	0.1	0.05 - 0.1	40·40·13
6	0.1	0.05 - 0.1	60·60·13
8	0.1	0.05 - 0.1	80·80·13
10	0.1	0.05 - 0.1	100·100·13
16	0.1	0.05 - 0.1	160·160·13

Abb. 5.1 zeigt für diese Simulationen Momentanbilder des Temperaturfeldes in der Ebene $x_3 = 0.5$. Die Isolinien kennzeichnen die Orte, an denen die Temperatur den mittleren Wert $T = 0.5$ annimmt. Auffallend sind die ausgeprägten Bandstrukturen, die für Periodenlängen $X_{1,2} \geq 6$ zu finden sind. Demgegenüber stellt sich bei der Periodenlänge $X_{1,2} = 4$ eine völlig andere Konvektionsform ein. Daraus kann geschlossen werden, daß diese Periodenlänge auf keinen Fall ausreichend ist. Eine typische Wellenlänge von dreidimensionalen Störungen entlang der Rollenachsen kann für $X_{1,2} \geq 10$ zu etwa $\lambda = 3-4$ abgeschätzt werden. Damit scheint auch $X_{1,2} = 6$ nicht groß genug zu sein, um solche Effekte mit der Simulation erfassen zu können. Vergleicht man die Wellenlänge der Bandstrukturen für den Fall $X_{1,2} = 8$ und $X_{1,2} = 10$, so scheint diese im ersteren Fall etwas größer zu sein. Dahingegen ist diesbezüglich für $X_{1,2} = 10$ und $X_{1,2} = 16$ kein augenscheinlicher Unterschied festzustellen. Dennoch entscheiden wir uns dafür, die weiteren Simulationen mit den Periodenlängen $X_{1,2} = 8$ durchzuführen, da dies gegenüber $X_{1,2} = 10$ einen um ca. 56% geringeren numerischen Aufwand mit sich bringt.

Mit der vorliegenden Studie wurde erstmals versucht, den Einfluß der Periodenlängen auf die Simulationsergebnisse für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium qualitativ zu erfassen. Die Ergebnisse zeigen, daß die Wahl der Periodenlänge von grundlegender Bedeutung sein kann. Die Festlegung von $X_{1,2}$ darf daher nicht, wie oft üblich, mehr oder weniger willkürlich oder nur unter dem Aspekt des Rechenaufwandes erfolgen, sondern muß sich an den physikalischen

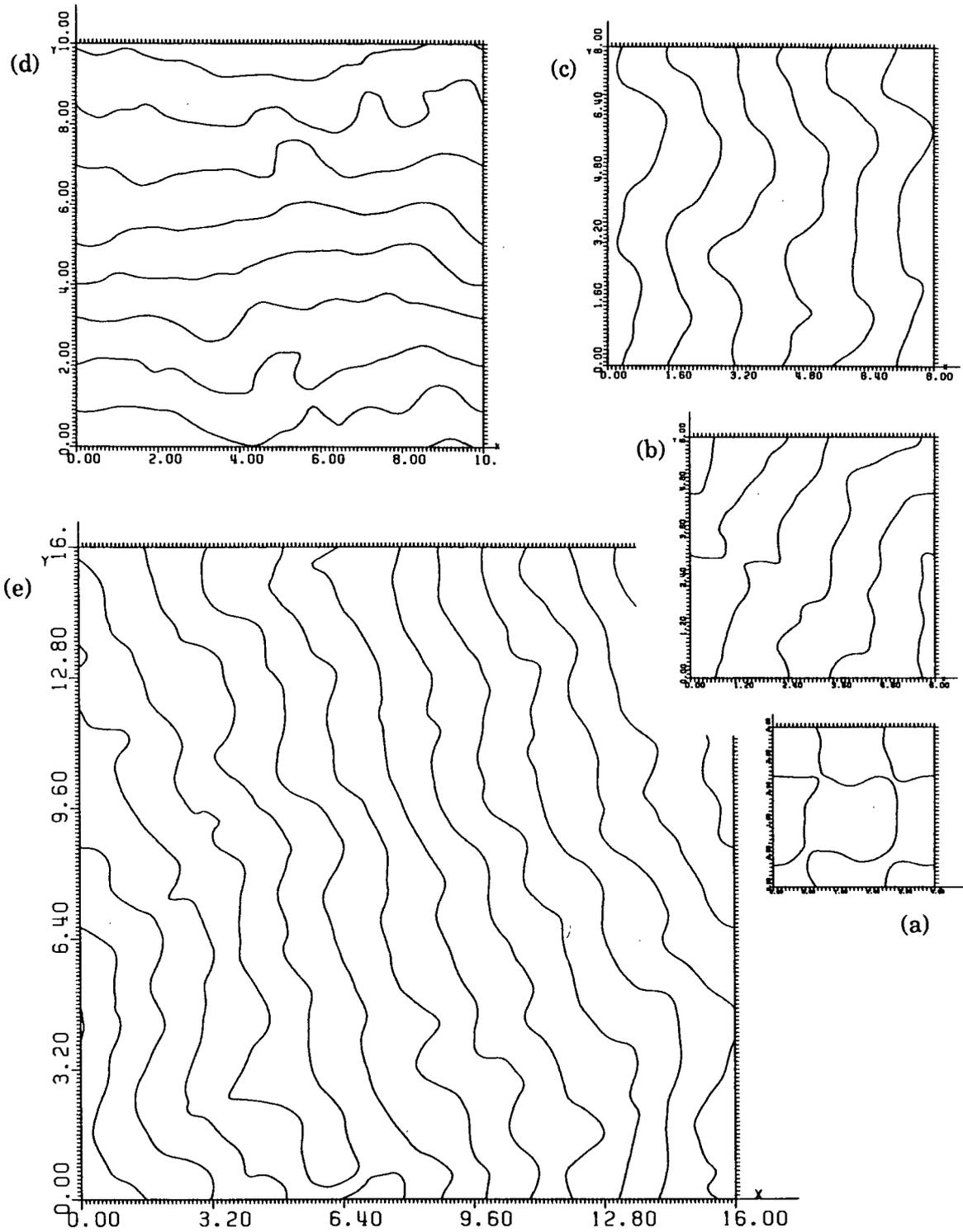


Abb. 5.1: Isolinen des Temperaturwertes $T = 0.5$ in der Ebene $x_3 = 0.5$ für $Ra = 6\,000$, $Pr = 0.006$ und unterschiedliche Periodenlängen. (a): $X_{1,2} = 4$, (b): $X_{1,2} = 6$, (c): $X_{1,2} = 8$, (d): $X_{1,2} = 10$, (e): $X_{1,2} = 16$.

Anforderungen orientieren. Nur, wenn in der Simulation ausreichend große Periodenlängen vorgegeben werden, können damit reale physikalische Vorgänge in Behältern mit großem Seiten- zu Höhenverhältnis beschrieben werden.

Im vorliegenden Fall kann man davon ausgehen, daß die Festlegung $X_{1,2} = 8$ zumindest für einen unteren Rayleigh-Zahlen-Bereich den physikalischen Anforderungen genügt. Für Simulationen mit Rayleigh-Zahlen $Ra \geq 5 \cdot 10^5$ wäre eventuell die Durchführung einer weiteren Periodenlängenstudie sinnvoll, da aus Experimenten bekannt ist, daß zumindest für Fluide mittlerer Prandl-Zahl die charakteristische Wellenlänge λ des Konvektionsmusters mit wachsender Rayleigh-Zahl zunimmt [Koschmieder (1974)]. Über die Steigung $d\lambda/dRa$ können allerdings keine gesicherten Aussagen gemacht werden. Ob in Flüssigmetallen für Rayleigh-Zahlen dieser Größenordnung im Temperaturfeld noch ähnliche Bandstrukturen wie in Abb. 5.1 zu finden sind, ist allerdings nicht bekannt.

Hinzuweisen ist noch auf die zufällige Orientierung der Bandstrukturen, die in Abb. 5.1 für die verschiedenen Periodenlängen zu finden ist. Hieraus kann man schließen, daß durch das Rechenprogramm selbst keine Vorzugsrichtung aufgeprägt wird. Interessant ist auch das Einlaufverhalten der Simulationen mit unterschiedlicher Periodenlänge. Die in dimensionslosen Zeiteinheiten gerechnete Einlaufzeit vom Ruhezustand bis zu einer im statistischen Sinne stationären Strömung nimmt mit wachsender Periodenlänge deutlich zu.

5.1.2 Der Einfluß der Größe der Maschenweiten

Während durch die Periodenlänge die Wellenlänge der größten mit dem Maschenetz erfaßbaren räumlichen Strukturen bestimmt wird, liegt mit der Maschenweite die Größe der kleinsten erfaßbaren Turbulenzelemente fest. Bei einer direkten numerischen Simulation muß die Maschenweite so gewählt werden, daß die Auflösung der Wirbel, bei denen die Dissipation kinetischer Energie in Wärme erfolgt, sichergestellt ist. Nur dann ist in strengem Sinne die Vernachlässigung eines Feinstrukturmodells zulässig.

Die Größe der kleinsten Turbulenzelemente nimmt mit wachsendem Turbulenzgrad kontinuierlich ab, so daß bei einer direkten numerischen Simulation mit zunehmender Rayleigh-Zahl immer feinere Maschenweiten erforderlich sind. Grötzbach (1983) leitet ausgehend von der Theorie isotroper Turbulenz und der Forderung, daß das Feinstrukturmodell in TURBIT keinen Beitrag liefern soll, aus ei-

ner Bilanz von Auftriebsproduktion und Dissipation turbulenter kinetischer Energie ein Kriterium für die erforderliche Maschenweite in Abhängigkeit von Rayleigh-, Prandtl- und Nusselt-Zahl ab. In seiner Herleitung geht er mit der Annahme einer isothermen Kernströmung davon aus, daß der molekulare Beitrag zum Gesamtwärmestrom vernachlässigbar ist. Für Flüssigmetalle ist die Berücksichtigung des molekularen Wärmetransportes aber durchaus sinnvoll. Im Nenner des Maschenweitenkriteriums

$$h \leq 5.13 \left(\frac{Pr^2}{Ra \cdot (Nu-1)} \right)^{1/4} \quad (5.1)$$

tritt dann nicht die Nusselt-Zahl, sondern der Ausdruck $Nu-1$ auf, was einer Abschwächung des ursprünglichen Kriteriums nach Grötzbach (1983) entspricht. Wertet man diese Beziehung für $Pr = 0.006$ und verschiedene Rayleigh-Zahlen unter Verwendung der Nusselt-Zahl-Korrelationen von Kek (1989) aus, so ergeben sich die in Tabelle 5.2 zusammengefaßten Werte für die Maschenweite h .

Tab.: 5.2: Auswertung des Maschenweitenkriteriums (5.1) für $Pr = 0.006$ und verschiedene Rayleigh-Zahlen.

Ra	Nu (nach Kek)	Maschenweite h
3 000	1.05	0.114
6 000	1.104	0.079
12 000	1.192	0.057
24 000	1.488	0.038

Kriterium (5.1) kann nur Anhaltswerte für die Festlegung der Maschenweite liefern. Ob diese Maschenweite ausreichend fein ist, muß anhand der Simulationsergebnisse beurteilt werden. Geeignet für diese Überprüfung sind Spektren turbulenter Schwankungsgrößen. Ein solches Energiespektrum unterteilt sich in verschiedene charakteristische Bereiche [Hinze (1975)]. Wichtig ist der von Trägheitskräften dominierte Bereich ("inertial subrange"), für den nach Kolmogoroff die exponentielle Abhängigkeit

$$E(k) \sim k^{-5/3} \quad (5.2)$$

gegeben ist. Für sehr große Wellenzahlen liefert die Theorie [Rotta (1972), S. 98] die asymptotische Lösung

$$\lim_{k \rightarrow \infty} E(k) \sim k^{-7} \quad (5.3)$$

In isotroper Turbulenz gilt für die Dissipation kinetischer Energie

$$\varepsilon = \lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon_k = \lim_{k \rightarrow \infty} 2\nu \int_0^k (k^*)^2 E(k^*) dk^* \quad (5.4)$$

[Hinze (1975), S. 219]. Der Verlauf der streng monoton wachsenden Funktion ε_k ist in Abb. 5.2 schematisch wiedergegeben. Bei einer direkten numerischen Simulation ergibt sich die größte auflösbare Wellenzahl k_{DNS} aus der Maschenweite:

$$k_{DNS} = \frac{\pi}{\Delta x}. \quad (5.5)$$

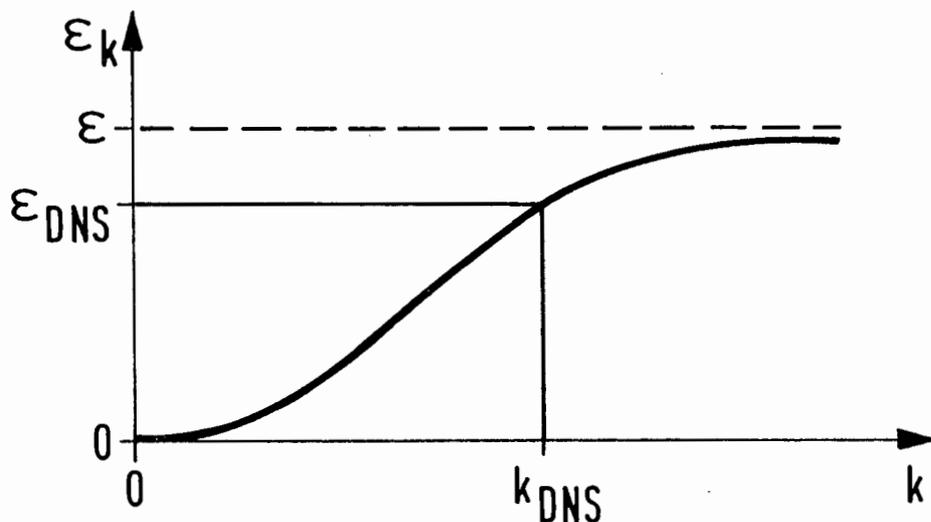


Abb. 5.2: Schematischer Verlauf des Dissipationsintegrals ε_k nach Gl. (5.4) als Funktion der Wellenzahl.

Eine sinnvolle Anforderung, die an eine direkte Simulation zu stellen ist, ist nach Abb. 5.2, daß ε_{DNS} im Sättigungsbereich von ε_k liegt. Dies ist der Fall, wenn

$$\frac{d^2 \varepsilon_k}{d k^2} \Big|_{k_{DNS}} < 0 \quad (5.6)$$

ist. Nimmt man an, daß der Verlauf des Energiespektrums in einem Wellenzahlenintervall Δk durch eine Potenzfunktion der Form

$$\begin{aligned} E(k^*) &= K_E (k^*)^{-m}, \\ k &\leq k^* \leq k + \Delta k, \\ K_E &= \text{konst.} > 0, m \in \mathbb{N} \end{aligned} \quad (5.7)$$

dargestellt werden kann, dann folgt aus (5.4)

$$\frac{d^2 \varepsilon_k}{d k^2} = 2\nu \frac{d}{d k} \left(K_E k^{2-m} \right) = 2\nu (2-m) K_E k^{1-m}, \quad (5.8)$$

und damit aus (5.6) die Forderung

$$m \geq 3. \quad (5.9)$$

Dies bedeutet, daß der Sättigungsbereich in Abb. 5.2 erst dann erreicht werden kann, wenn für die Steigung des Energiespektrums in einem Wellenzahlenbereich

$$\log (E(k)) \leq -3 \quad (5.10)$$

gegeben ist.

Abb. 5.3 zeigt für $Ra = 6\,000$, $Pr = 0.006$, $X_{1,2} = 8$ eindimensionale Energiespektren einer Horizontalgeschwindigkeitskomponente in Kanalmitte (zur Auswertebziehung für die Spektren siehe Abschnitt 5.2.2). Die Simulationen wurden auf unterschiedlich feinen Maschennetzen durchgeführt (siehe Tab. 5.3), um den Einfluß der Maschenweite auf das Energiespektrum zu analysieren. Abb. 5.3 zeigt, daß mit dem Maschennetz des Falles NA6F eine asymptotische Steigung von nur

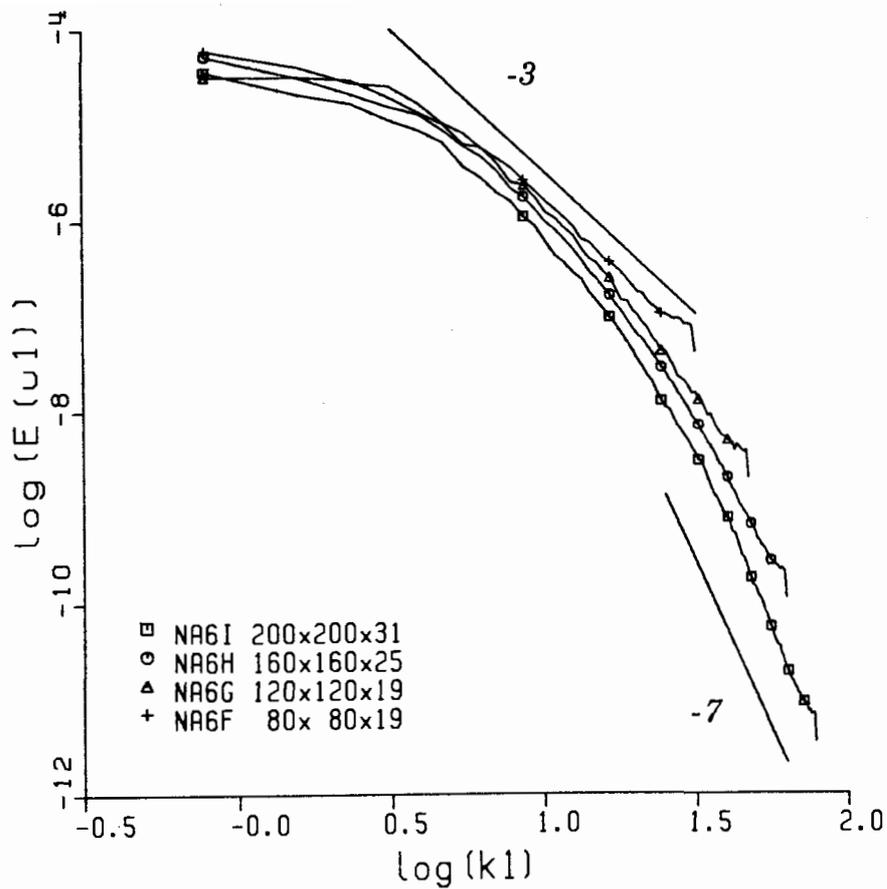


Abb. 5.3: Eindimensionale Energiespektren der Geschwindigkeitskomponente u_1 in der Ebene $x_3 = 0.5$ für verschieden feine Maschennetze ($Ra = 6\,000, Pr = 0.006$).

-3 im hochfrequenten Bereich des Spektrums erreicht wird. Desweiteren deutet der schwächere Abfall des Spektrums im Bereich der höchsten mit dem Maschennetz auflösbaren Wellenzahlen auf einen beträchtlichen Aliasing-Effekt hin. Beides sind Anzeichen, daß die zugrundegelegte räumliche Auflösung nicht ausreichend fein ist.

Tab. 5.3: Gitteranzahl und Maschenweiten von Simulationen im Rahmen der Maschennetzstudie ($Ra = 6\,000, Pr = 0.006, X_{1,2} = 8$).

Fallbezeichnung	IM·JM·KM	$\Delta x_1 = \Delta x_2$	Δx_3
NA6F	80·80·19	0.1	0.03 - 0.06
NA6G	120·120·19	0.067	0.03 - 0.06
NA6H	160·160·25	0.05	0.02 - 0.05
NA6I	200·200·31	0.04	0.01 - 0.04

Dies ist ein Ergebnis, das für diese Maschenweite nach Kriterium (5.1) so zu erwarten war (vergl. Tabelle 5.2 und 5.3). Die Aliasing-Effekte nehmen mit zunehmender Maschenverfeinerung deutlich ab und sind für den Fall NA6I praktisch verschwunden. Der "cut-off" Bereich der Spektren zeigt über Fall NA6G und NA6H einen zunehmend steileren Abfall und erreicht im Fall NA6H eine asymptotische Steigung von -7. Das Maschennetz des Falles NA6I kann damit als ausreichend fein für eine direkte numerische Simulation dieser Rayleigh-Zahl angesehen werden. Abschließend soll darauf hingewiesen werden, daß sich das Spektrum für den Fall NA6I über nahezu acht Größenordnungen erstreckt und damit ein Signal- zu Rauschverhältnis aufweist, wie es bei einem Experiment wohl kaum zu erreichen ist.

5.1.3 Abschätzung für die Dicke der viskosen Grenzschicht

Den dissipativen Bereich des Spektrums aufzulösen ist die eine Forderung, die die Festlegung der Maschenweite bestimmt. Eine zweite, im allgemeinen strengere, erwächst aus der Notwendigkeit die viskosen und thermischen Grenzschichten an den Wänden aufzulösen. Da bei einer direkten numerischen Simulation keine Wandgesetze verwendet werden, ist nur so die Erfassung der starken Geschwindigkeits- und Temperaturgradienten in Wandnähe möglich.

Abb. 5.4 zeigt das vertikale Profil der mittleren Temperatur mit dem für hohe Rayleigh-Zahlen typischen Grenzschichtcharakter. Nimmt man an, daß in den

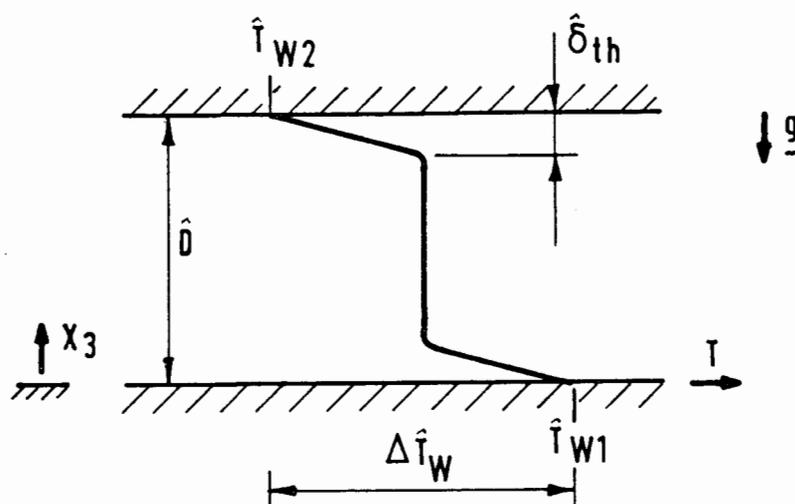


Abb. 5.4: Skizze des vertikalen mittleren Temperaturprofils in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion bei hohen Rayleigh-Zahlen

thermischen Grenzschichten ein rein molekularer Wärmetransport vorliegt, so kann man mit

$$\hat{q}_{gesamt} = \hat{\lambda} \frac{\Delta\hat{T}/2}{\hat{\delta}_{th}} \quad \text{und} \quad \hat{q}_{WL} = \hat{\lambda} \frac{\Delta\hat{T}}{\hat{D}} \quad (5.11)$$

die Beziehung

$$Nu = \frac{\hat{q}_{gesamt}}{\hat{q}_{WL}} = \frac{\hat{D}}{2 \hat{\delta}_{th}} \quad (5.12)$$

herleiten. Unter Heranziehung einer empirischen Korrelation $Nu = f(Ra, Pr)$ erhält man daraus mit

$$\frac{\hat{\delta}_{th}}{\hat{D}} = \frac{1}{2 Nu} \quad (5.13)$$

eine Abschätzung für die Dicke der thermischen Grenzschicht in Abhängigkeit von Rayleigh- und Prandtl-Zahl.

Für Flüssigmetalle mit ihren Prandtl-Zahlen $Pr \ll 1$ ist die thermische Grenzschicht deutlich dicker als die viskose Grenzschicht. Letztere ist damit für die Festlegung der Wandmaschenweite entscheidend. Ein Kriterium für die Abschätzung der viskosen Grenzschichtdicke kann mit Hilfe der Reynolds-Analogie abgeleitet werden. Diese besagt, daß für ein Fluid mit Prandtl-Zahl eins Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld ähnlich sind, und demzufolge auch beide Grenzschichten vergleichbare Dicken aufweisen. Für ein solches Fluid liefert Gl. (5.13) damit sowohl eine Abschätzung für die thermische als auch die viskose Grenzschichtdicke.

Die Idee, auch für Medien mit $Pr \neq 1$ eine Abschätzung für die Dicke der viskosen Grenzschicht abzuleiten, beruht darauf, daß für Rayleigh-Bénard-Konvektion die charakteristische Kennzahl für das Geschwindigkeitsfeld die Grashof-Zahl ist (vergl. Abschnitt 5.4.4). Nimmt man die Grashof-Zahl einer angestrebten Flüssigmetallsimulation Gr_{FM} und berechnet aus einer Nusselt-Zahl-Korrelation für $Pr = 1$ und $Ra = Gr_{FM}$ die thermische Grenzschichtdicke nach Gl. (5.13), so ist das Ergebnis gleichzeitig ein Schätzwert für die Dicke der viskosen Grenzschicht des Flüssigmetallfalles.

Globe & Dropkin (1959) geben für Rayleigh-Bénard-Konvektion die empirische Beziehung

$$Nu = 0.069 \cdot Ra^{0.33} \cdot Pr^{0.074} \quad (5.14)$$

mit dem Gültigkeitsbereich

$$\begin{aligned} 0.02 < Pr < 8750 \\ 1.5 \cdot 10^5 < Ra < 6.8 \cdot 10^8 \end{aligned} \quad (5.15)$$

an. Diese Korrelation führt zusammen mit der Forderung, daß die viskose Grenzschicht mit mindestens drei Maschen aufgelöst werden sollte, auf

$$\Delta x_{3Wand} \leq \frac{1}{3} \frac{\hat{\delta}_{th}}{D} \approx 2.4 \cdot Gr^{-1/3} \quad (5.16)$$

als Abschätzung für die Wandmaschenweite. Diese Beziehung ist für $Pr = 0.006$ und verschiedene Rayleigh-Zahlen in Tabelle 5.4 ausgewertet.

Tab. 5.4: Auswertung des Kriteriums (5.16) für die Festlegung der Wandmaschenweite

Pr	Ra	Gr = Ra/Pr	Δx_{3Wand}
0.006	6 000	10^6	0.024
0.006	12 000	$2 \cdot 10^6$	0.019
0.006	24 000	$4 \cdot 10^6$	0.015

Die aufgeführten Werte können nur als Anhaltswerte dienen. Ob die Wandmasche tatsächlich ausreichend fein ist, ist anhand der Simulationsergebnisse zu verifizieren. Dies kann mittels des vertikalen Profils des RMS-Wertes der Vertikalgeschwindigkeit erfolgen. Entwickelt man die Geschwindigkeitskomponenten in eine Taylor-Reihe nach dem Wandabstand z und setzt diese in die Kontinuitätsgleichung ein, so führt das für die Vertikalgeschwindigkeit auf das Ergebnis

$$u_3(z) \sim z^2 + O(z^3). \quad (5.17)$$

Daraus folgt für den Gradienten von u_3 an der Wand

$$\frac{\partial u_3}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0. \quad (5.18)$$

Hieraus kann man wiederum schließen, daß auch der Gradient des RMS-Wertes der Vertikalgeschwindigkeit an der Wand verschwindet. Findet sich dieser Sachverhalt bei der Auswertung der Simulationsergebnisse nicht wieder, wie z.B. bei Fall NA6H in Abb. 5.5(a), so ist das ein Indiz, daß die Wandmasche nicht fein genug ist. Zum Vergleich zeigt Abb. 5.5(b) das entsprechende Profil des RMS-Wertes von u_3 für den Fall NA6I mit verfeinerter Wandauflösung. Der an der Wand verschwindende Gradient von u_{3rms} wird nun auch durch die Simulation in der Tendenz wiedergegeben.

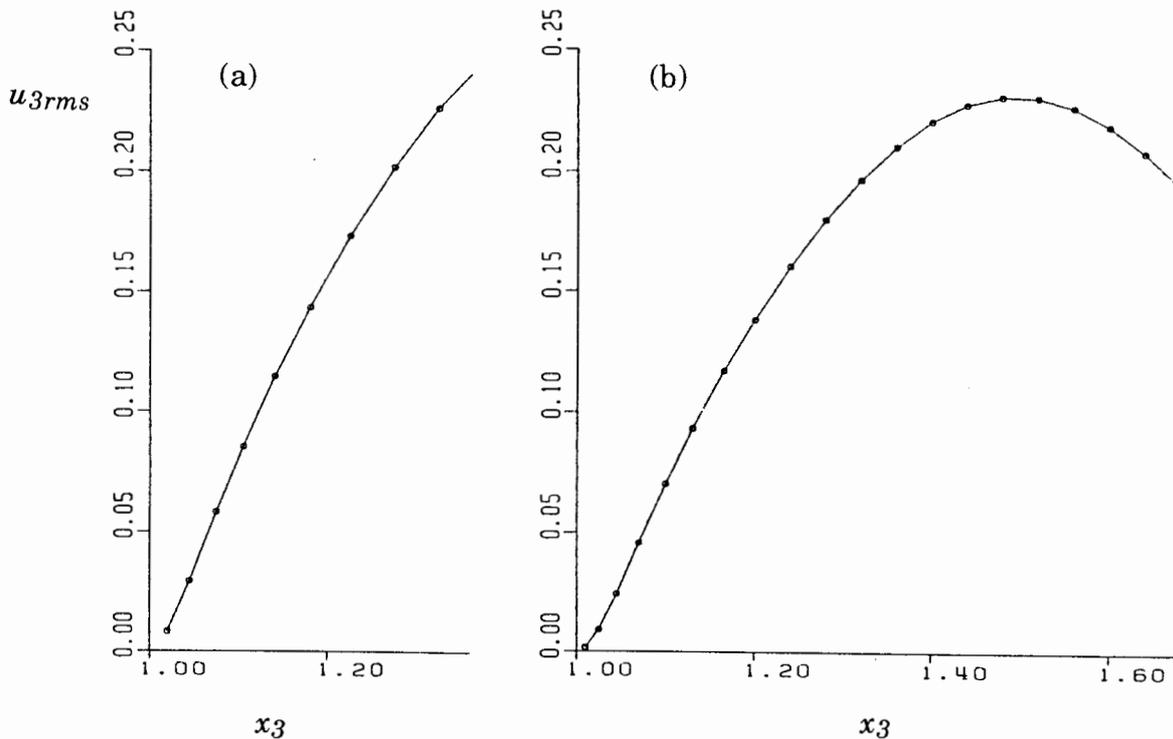


Abb. 5.5: Wandnahe vertikale Profile des RMS-Wertes der Vertikalgeschwindigkeit für $Ra = 6\,000$, $Pr = 0.006$ und Simulationen mit unterschiedlich feiner Wandauflösung. (a): Fall NA6H, $\Delta x_{3W} = 0.02$, (b): Fall NA6I, $\Delta x_{3W} = 0.01$.

5.2 Simulationsführung und Auswerteverfahren

5.2.1 Simulationsstrategie

Eine Auswertung von Simulationsergebnissen hinsichtlich statistischer Daten des Strömungsfeldes ist nur sinnvoll, wenn sich ein im statistischen Sinne stationärer Strömungszustand eingestellt hat. Um beurteilen zu können, wann dies der Fall ist, werden in TURBIT während der Simulation Zeitsignale verschiedener charakteristischer Strömungsgrößen aufgezeichnet. So ist in Abb. 5.6 ein typischer Verlauf der kinetischen Energie der Strömung als Funktion der Problemzeit dargestellt ($Ra = 12\,000$, $Pr = 0.006$).

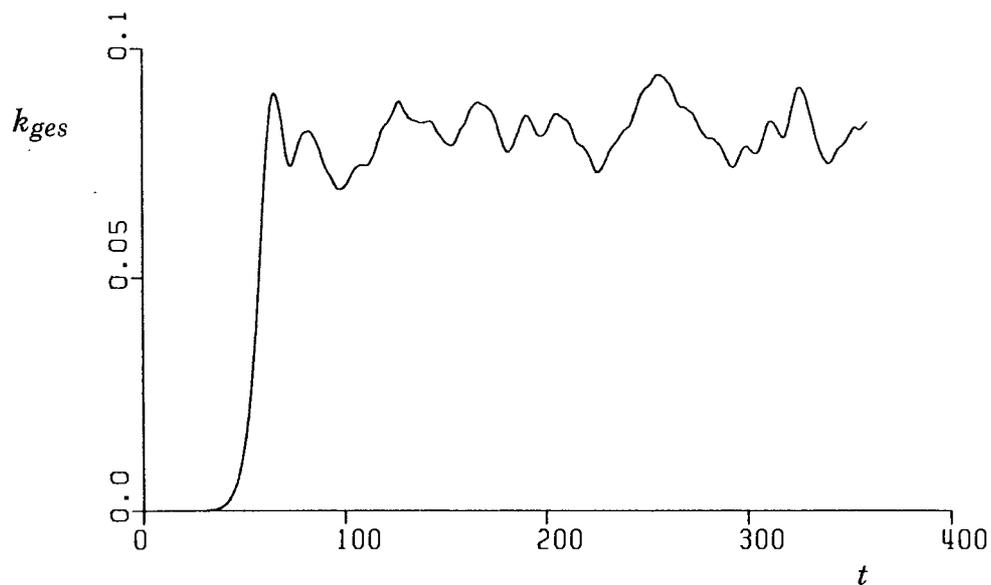


Abb. 5.6: Zeitliche Entwicklung der über das ganze Kanalvolumen gemittelten kinetischen Energie des Strömungsfeldes (Fall NA12C: $Ra = 12\,000$, $Pr = 0.006$).

Ausgehend von dem als Anfangsbedingung für das Geschwindigkeitsfeld vorgegebenen Ruhezustand tritt erst bei $t \approx 40$ eine merkliche Konvektion ein, die sich in einem starken Anstieg der kinetischen Energie bemerkbar macht. Nach einem Überschießen scheint sich ab etwa $t = 160$ ein im statistischen Sinne stationäres Geschwindigkeitsfeld eingestellt zu haben. Neben der kinetischen Energie werden während der Simulation auch Zeitsignale der Wandwärmeströme und des RMS-Wertes der Temperatur in der Kanalmittelebene aufgezeichnet. Diese erlauben eine Beurteilung des Einlaufvorganges des Temperaturfeldes und zeigen einen der Abb. 5.6 qualitativ ähnlichen Verlauf.

Aufgrund der langen Einlaufzeiten sind Simulationen für höhere Rayleigh-Zahlen mit der Anfangsbedingung eines ruhenden Fluides auf ausreichend feinen Maschennetzen wegen des damit verbundenen enormen Rechenzeitaufwandes praktisch nicht durchführbar. Um diese Rechenkosten zu vermeiden, wird die lange Transiente des Einlaufverhaltens stattdessen auf einem relativ groben Maschennetz simuliert. Ist ein quasistationärer Zustand erreicht, erfolgt unter Beibehaltung der Periodenlänge eine Interpolation des Turbulenzfeldes eines Zeitpunktes auf ein verfeinertes Maschennetz. Nach einer kurzen Transiente wird auch hier ein quasistationärer Strömungszustand erreicht. Über eventuelle weitere Interpolationen kann schließlich die Simulation auf einem einer direkten numerischen Simulation dieser Rayleigh-Zahl angemessenen Maschennetz durchgeführt und anschließend ausgewertet werden.

Die Auswirkung der Interpolation von Strömungsdaten auf ein verfeinertes Maschennetz verdeutlicht Abb. 5.7, wo für $Ra = 6\,000$, $Pr = 0.006$ Spektren der Temperaturfluktuationen in der Kanalmittelebene wiedergegeben sind. Man erkennt, daß bei der parabolischen Interpolation langwellige Frequenzanteile unverfälscht erhalten bleiben, dagegen der Energieinhalt der hochfrequenten, d.h. kleinräumigen Strukturen, durch die Interpolation deutlich angehoben wird (vergl. Kurve (a) und (b)). Dieser unphysikalische Energieeintrag ist aber bereits nach nur einer Problemzeiteinheit wieder herausgedämpft, so daß der hochfrequente Bereich des Spektrums wieder einen korrekten Abfall zeigt (vergl. Kurve (b) und (c)).

Für Simulationen, bei denen eine Integration aus dem Ruhezustand nicht notwendig erscheint, weil regelmäßige großräumige Strukturen nicht dominieren, wird eine andere Vorgehensweise gewählt. Hier wird ein aus einer früheren Simulation für eine kleinere Rayleigh-Zahl ermitteltes Turbulenzfeld als Ausgangsbasis für die neue Simulation herangezogen (vergl. Abschnitt 4.9.3). Nach Hochsetzen der Rayleigh-Zahl und Interpolation auf ein der neuen Rayleigh-Zahl angemessenes Maschennetz stellt sich auch hier nach einer relativ kurzen Transiente ein quasistationäres Turbulenzfeld ein.

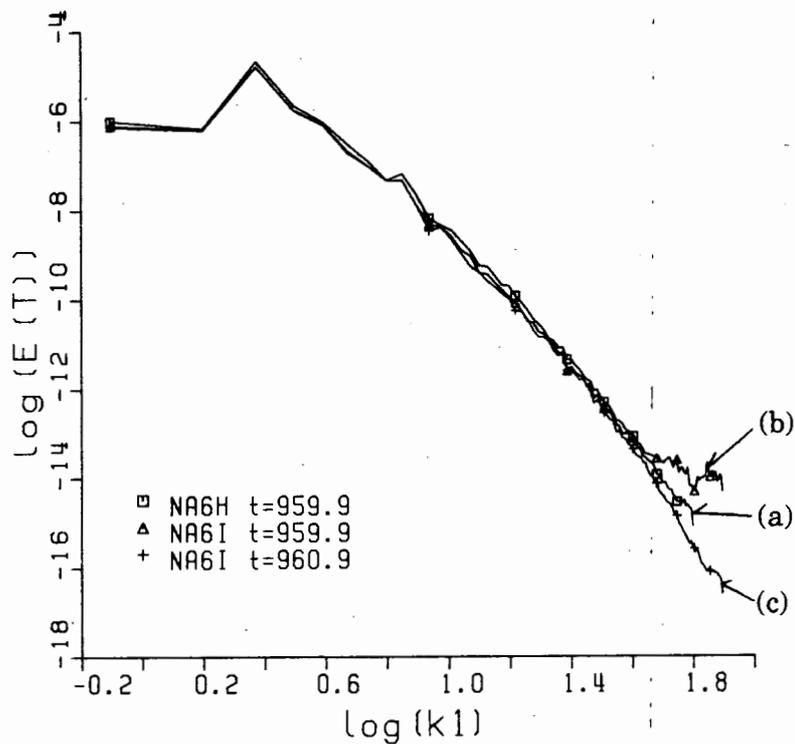


Abb. 5.7: Eindimensionales Energiespektrum der Temperaturfluktuationen in der Ebene $x_3 = 0.5$ für $Ra = 6\,000$, $Pr = 0.006$. (a): Fall NA6H, Maschennetz 160-160-25, $t = 959.9$, (b): Fall NA6I, Maschennetz 200-200-31, $t = 959.9$ (interpolierte Daten), (c): Fall NA6I, Maschennetz 200-200-31, $t = 960.9$.

5.2.2 Auswerteverfahren

In vollturbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion sind bei der statistischen Auswertung zeitabhängiger Strömungsgrößen Variationen der Daten nur in der vertikalen Richtung vorhanden. Ausreichend große Mittelungszeiträume vorausgesetzt, sind die statistischen Daten invariant gegen eine Verschiebung des Meßfühlers in einer Ebene parallel zu den horizontalen Wänden. Die horizontalen Richtungen sind daher im statistischen Sinne homogen.

In TURBIT erfolgt die Berechnung statistischer Daten für einen Zeitpunkt über die Auswertung von in räumlichen Ebenen vorliegenden Strömungsvariablen, also z.B. für die mittlere Temperatur in der Ebene k :

$$\bar{T}_k = \frac{1}{IM \cdot JM} \sum_{i=1}^{IM} \sum_{j=1}^{JM} T_{i,j,k} \quad (5.19)$$

Die Auswertung für alle Gitterebenen $1 \leq k \leq KM$ führt auf vertikale Profile. Durch die Berücksichtigung mehrerer Zeitpunkte (typischerweise 10 bis 40) erfolgt eine zusätzliche zeitliche Mittelung dieser durch Ebenenmittelung erhaltenen vertikalen Profile. Nach der Ergodenhypothese führen zeitliche und räumliche Mittelungsoperationen auf äquivalente Ergebnisse. Damit sind die auf obigem Weg erhaltenen statistischen Daten direkt mit denjenigen aus der Analyse experimentell ermittelter Zeitreihen vergleichbar. Eine einfache Abschätzung (siehe Anhang E) für eine der räumlichen Mittelung in TURBIT äquivalente Meßdauer in einem Experiment mit lediglich einem Sensor zeigt, daß eine Ebenenmittelung über z.B. $IM \cdot JM = 250 \cdot 250$ Maschen einer Meßzeit von mehreren Stunden entspricht.

Für die Auswertung von eindimensionalen Energiespektren wird die entsprechende Größe in TURBIT für festes x_2 und x_3 als ein in x_1 -Richtung räumlich periodisches Signal aufgefaßt. Die Auswertung für eine komplette Ebene $x_3 = \text{konst.}$ führt damit auf insgesamt JM von der Wellenzahl k_1 abhängige Spektren. Das Spektrum für die k -Ebene wird dann durch Mittelung über diese JM Spektren ermittelt. Zusätzlich erfolgt eine weitere Mittelung über die auf diese Weise für unterschiedliche Zeitpunkte erhaltenen Spektren.

5.2.3 Spezifikation der durchgeführten Simulationen

In Tabelle 5.5 sind die wesentlichen Daten der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen von Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium zusammengefaßt. Dabei sind auch die nur als numerische Vorstudien durchgeführten Simulationen aufgeführt. Für Simulationen, bei denen als Anfangswert nicht $u = 0$, sondern ein auf ein verfeinertes Maschennetz interpoliertes Turbulenzfeld einer vorangegangenen Simulation vorgegeben wurde, ist der entsprechende Ausgangsfall in Tab. 5.5 in der Spalte Anfangswerte angegeben. Zu beachten ist, daß in diesen Fällen der Zeitschrittzähler und die Problemzeit nicht auf null zurückgesetzt wurden, sondern die entsprechenden Werte aus der vorangegangenen Simulation übernommen wurden. Beginnend mit der Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ wurde diese über $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ um jeweils den Faktor 2 gesteigert. Darüber hinaus wurden auch Rechnungen für $Ra = 50\,000$

Tab. 5.5: Spezifikation der durchgeführten Simulationen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium ($Pr = 0.006$)

Ra	Bez.	Netz	$X_{1,2}$	$\Delta x_1 = \Delta x_2$	Δx_3	Anf.-Werte	Zeitschritte	Problemzeit	CPU-Zeit
3 000	NA3A	802 · 19	8	0.1	0.03	$\underline{u} = 0$	53 000	809.4	
3 000	NA3B	1282 · 31	8	0.0625	0.01	NA3A	80 000	855.2	25 h
6 000	NA6A	602 · 13	6	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	38 400	2001.0	
6 000	NA6B	402 · 13	4	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	14 800	855.8	
6 000	NA6C	802 · 13	8	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	29 680	1474.3	
6 000	NA6D	1002 · 13	10	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	19 600	921.9	
6 000	NA6E	1602 · 13	16	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	41 000	1751.1	
6 000	NA6F	802 · 19	8	0.1	0.03	$\underline{u} = 0$	49 800	1075.6	
6 000	NA6G	1202 · 19	8	0.067	0.03	$\underline{u} = 0$	45 720	987.3	
6 000	NA6H	1602 · 25	8	0.05	0.02	$\underline{u} = 0$	100 000	959.9	58 h
6 000	NA6I	2002 · 31	8	0.04	0.01	NA6H	116 000	998.3	14 h
12 000	NA12A	802 · 13	8	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	8 600	300.5	
12 000	NA12B	1282 · 19	8	0.0625	0.03	NA12A	21 560	582.6	
12 000	NA12C	1282 · 19	8	0.0625	0.03	$\underline{u} = 0$	16 000	358.8	
12 000	NA12D	1002 · 13	10	0.1	0.05	$\underline{u} = 0$	11 800	389.5	
12 000	NA12E	1602 · 25	8	0.05	0.02	NA12C	19 040	400.1	
12 000	NA12F	1602 · 31	8	0.05	0.01	NA12E	22 000	410.1	
12 000	NA12G	2002 · 35	8	0.04	0.008	NA12F	22 640	411.5	
12 000	NA12H	2502 · 39	8	0.032	0.005	NA12G	61 440	444.4	55 h
24 000	NA24A	2502 · 39	8	0.032	0.005	NA12H	84 000	471.5	60 h

versucht, doch zeigte die Analyse der Ergebnisse, daß dieser Turbulenzgrad mit der derzeit verfügbaren Computerleistung mit einer direkten Simulation - zumindest bei Anforderungen wie sie in Abschnitt 5.1 formuliert wurden - außerhalb der praktischen Möglichkeiten liegt. Für die im folgenden vorgestellten Ergebnisse für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium bei $Ra = 3\ 000$, $6\ 000$, $12\ 000$ und $24\ 000$ wurden bei der Auswertung die auf dem jeweils feinsten Maschennetz ermittelten numerischen Daten herangezogen. Für die entsprechenden Simulationen (es handelt sich um die Fälle NA3B, NA6H, NA6I, NA12H und NA24A) ist in Tab. 5.5 in der letzten Spalte zusätzlich die für die Rechnung benötigte CPU-Zeit auf dem Vektorrechner VP400 des Kernforschungszentrums Karlsruhe angegeben.

5.3 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

Für Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium sind in der Literatur kaum Experimente verfügbar, die als Vergleichsbasis für numerische Ergebnisse dienen könnten (vergl. Literaturüberblick in Kapitel 2.2). Aufgrund dieses Mangels, insbesondere in dem hier interessierenden unteren Rayleigh-Zahlenbereich, muß eine Verifikation auf die in der Arbeit von Kek (1989) aufgeführten wenigen statistischen Daten des Temperaturfeldes sowie der Nusselt-Zahl beschränkt bleiben.

Bevor eine Gegenüberstellung der experimentellen und numerischen Ergebnisse erfolgt, ist es angebracht, sich Klarheit zu verschaffen über die grundlegenden Unterschiede und Defizite in der Abbildung des Rayleigh-Bénard-Problems durch Experimente und Numerik. Nur so ist eine sinnvolle vergleichende Bewertung der Ergebnisse möglich.

Die theoretisch unendlich ausgedehnte ebene Fluidschicht des Rayleigh-Bénard-Problems kann bei der numerischen Simulation mit Hilfe von periodischen Randbedingungen abgebildet werden. Allerdings müssen hierzu - wie bereits in Abschnitt 5.1.1 diskutiert - die Periodenlängen ausreichend groß gewählt werden, um tatsächlich alle großräumigen Strukturen mit der Simulation erfassen zu können. Experimente sind naturgemäß nur in endlich großen Behältern möglich. Im Gegensatz zu einer numerischen Simulation mit periodischen Randbedingungen liegt daher im Experiment durch feste vertikale Wände stets ein die Konvektion hindernder Einfluß vor. Diesen Einfluß klein zu halten, ist durch ein ausrei-

chend großes Verhältnis von Breite (bzw. Durchmesser) zu Höhe des Behälters sicherzustellen.

Eine weitere Diskrepanz zwischen Experiment und Simulation ergibt sich aufgrund der thermischen Randbedingung der horizontalen Wände. Im Experiment von Kek (1989) setzen sich auf räumliche und zeitliche Konvektionsstrukturen zurückzuführende Temperaturdifferenzen im Fluid auch in die als Wände dienenden Kupferplatten fort. In der numerischen Simulation werden dagegen vereinfachend perfekt wärmeleitende Wände betrachtet. Eine realistischere Abbildung des Experiments würde daher die Berücksichtigung von Wärmeleitungsvorgängen innerhalb der Wände notwendig machen.

Kek (1989) kann aus technischen Gründen Temperaturen nicht direkt an der Oberfläche der Natriumschicht messen. Stattdessen bringt er Temperaturmeßfühler in die Kupferplatten ein. Die Oberflächentemperaturen berechnet er dann unter Annahme einer homogenen Wärmestromdichte und Abschätzungen für die auftretenden Wärmestromverluste. Dabei sind im unteren Rayleigh-Zahlen-Bereich die Wärmestromverluste von gleicher Größenordnung wie der konvektive Wärmetransport selbst. Demgegenüber bereitet die experimentelle Erfassung dynamischer Temperatursignale in der Natriumschicht keine vergleichbaren Schwierigkeiten.

5.3.1 Vergleich von Nusselt-Zahlen

Abb. 5.8 zeigt die experimentellen Ergebnisse von Kek (1989) für die Nusselt-Zahl im unteren Rayleigh-Zahlen-Bereich. Die Messungen wurden in einem zylindrischen Behälter von 500 mm Durchmesser und 15.5 mm bzw. 46.5 mm Schichthöhe durchgeführt. Auffallend ist die nur relativ geringe Streuung der Ergebnisse, die mit dem kleineren Behälter für Rayleigh-Zahlen bis etwa $Ra \approx 7\,000$ erzielt wurden. Demgegenüber sind bei den mit der Schichthöhe $\hat{h} = 46.5$ mm gewonnenen Ergebnissen besonders im Bereich $Ra \leq 12\,000$ große Streubreiten festzustellen. Ab $Ra > 15\,000$ nimmt die Systematik der Ergebnisse jedoch auch für diese Schichthöhe deutlich zu.

In TURBIT wird im Verlauf der Simulation der Momentanwert der Nusselt-Zahl berechnet und in Abhängigkeit der Problemzeit aufgezeichnet. Diese momentane Nusselt-Zahl nimmt auch bei einem eingelaufenen Strömungszustand keinen konstanten Wert an, sondern ist eine um einen Mittelwert schwankende Größe.

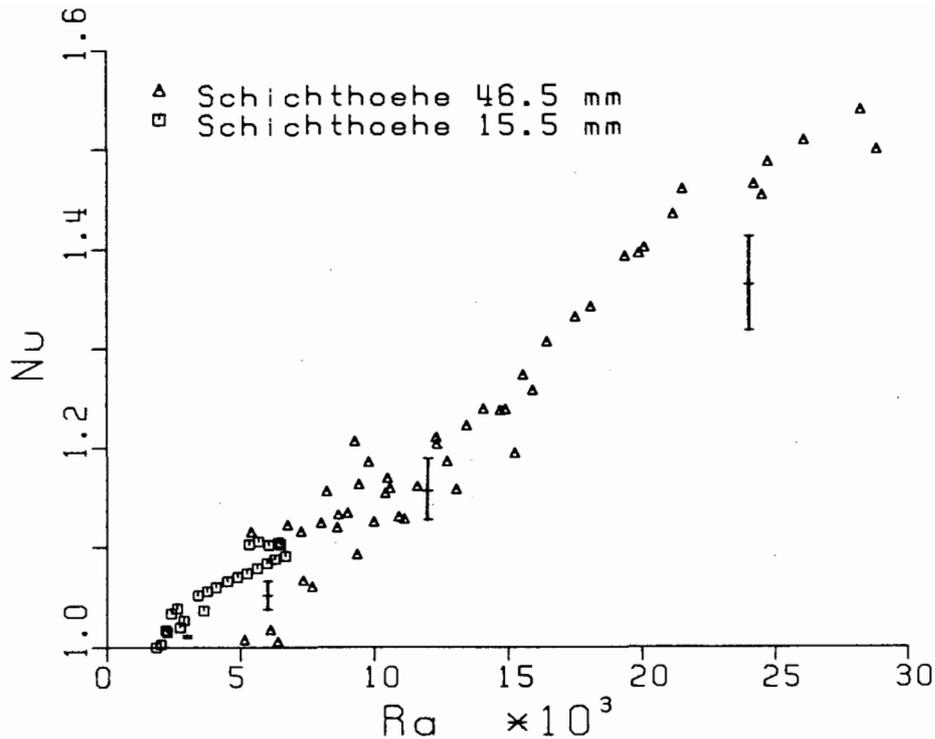


Abb. 5.8: Gemessene und berechnete Nusselt-Zahlen als Funktion der Rayleigh-Zahl. (□,Δ): Experiment von Kek (1989), (I): Simulationsergebnisse von TURBIT.

Diese Schwankungen sind Ausdruck des turbulenten Charakters des Strömungsfeldes und deuten auf ein Wechselspiel unterschiedlich effektiver Konvektionsmechanismen hin. Das in den Simulationen für die Rayleigh-Zahlen $Ra = 3\,000$, $6\,000$, $12\,000$ und $24\,000$ beobachtete Streuband der Nusselt-Zahl ist zusammen mit dem entsprechenden Langzeit-Mittelwert in Abb. 5.8 den Ergebnissen von Kek (1989) gegenübergestellt. Die numerisch ermittelten Nusselt-Zahlen liegen mit Ausnahme der Simulation mit $Ra = 12\,000$ etwas niedriger als die experimentellen Werte. Insbesondere für die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ ist die Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment nicht zufriedenstellend. Als Ursachen für diese Abweichung kommen auf der numerischen Seite eine für die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ unzureichende räumliche Auflösung sowie möglicherweise eine zu kurze simulierte Problemzeit in Frage. Unsicherheiten der experimentellen Daten liegen in den für die Ermittlung der Nusselt-Zahlen zu treffenden Annahmen - speziell für die Wärmestromverluste - sowie in möglicherweise unzureichenden Mittelungszeiträumen begründet.

5.3.2 Vergleich von RMS-Werten von Temperaturfluktuationen

In Abbildung 5.9 sind in doppelt-logarithmischem Maßstab experimentelle und numerische Ergebnisse für den RMS-Wert der Temperaturfluktuationen in der Mitte der Natriumschicht als Funktion der Rayleigh-Zahl aufgetragen. Die Ergebnisse der Simulation fallen für alle vier untersuchten Rayleigh-Zahlen in das von Kek (1989) angegebene Streuband, so daß hier eine sehr gute Übereinstimmung zwischen numerischer Simulation und Experiment festgestellt werden kann. Aus der abrupten Änderung der Schwankungsamplitude im Bereich $Ra \approx 3\,000 - 4\,000$ folgert Kek eine Umstrukturierung von einem eher regelmäßigen Konvektionsmuster zu einem mehr unregelmäßigen Strömungsverhalten. Die numerischen Ergebnisse bei $Ra = 3\,000$ und $Ra = 6\,000$ liefern dagegen keinen Hinweis auf eine derart abrupte Änderung des RMS-Wertes der Temperaturfluktuationen.

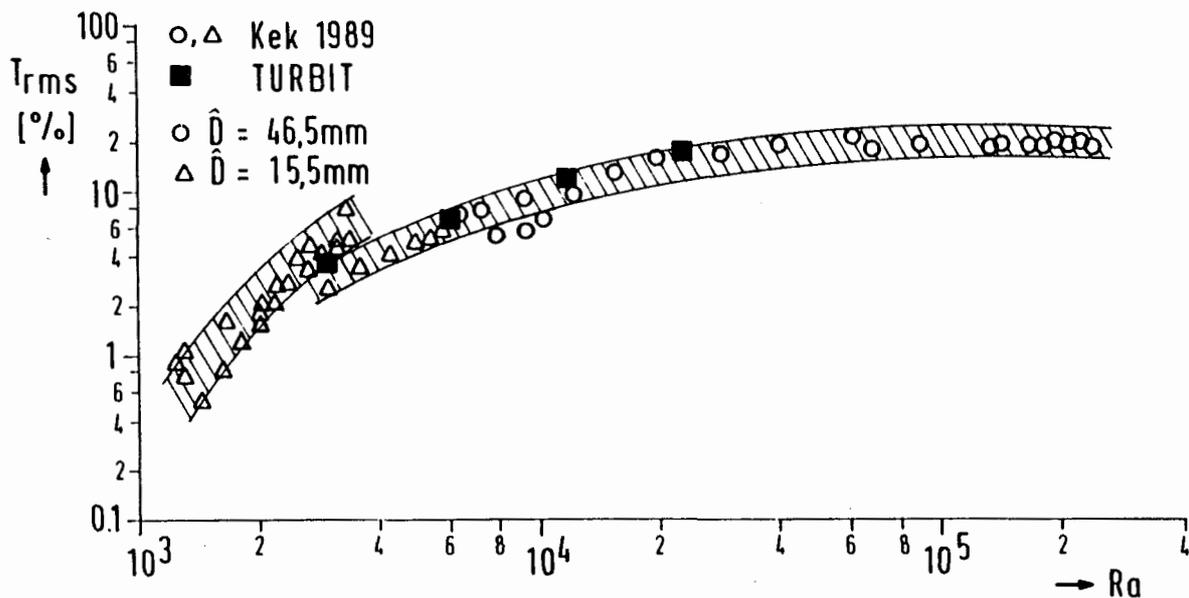


Abb. 5.9: RMS-Werte der Temperaturfluktuationen in der Mitte der Natriumschicht als Funktion der Rayleigh-Zahl (nach Kek (1989)). (\circ, Δ): experimentelle Daten von Kek, (\blacksquare): Ergebnisse von TURBIT.

5.4 Statistische Analyse der Simulationsergebnisse

5.4.1 Ergebnisse zum Temperaturfeld

In Abb. 5.10 ist für alle untersuchten Rayleigh-Zahlen das vertikale Profil der mittleren Temperatur dargestellt. Für $Ra = 3\,000$ und $Ra = 6\,000$ ist kaum eine Abweichung von dem linearen Temperaturprofil ersichtlich, das dem reinen Wärmeleitungszustand entspricht. Für $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ ist ein geringer konvektiver Beitrag zum Wärmetransport festzustellen. Allerdings wird auch hier das Temperaturfeld mit seinen sich über die jeweils halbe Schichthöhe erstreckenden Grenzschichten noch eindeutig durch molekulare Wärmeleitungsvorgänge dominiert. Die Tendenz zur Ausbildung einer isothermen Kernströmung und dünnen Temperaturgrenzschichten (vergl. Abb. 4.10 für die Simulation mit Luft) ist jedoch mit wachsender Rayleigh-Zahl deutlich zu erkennen.

Bei den in Abschnitt 4.9.3 vorgestellten Ergebnissen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft treten die größten Temperaturschwankungen am Rande der thermischen Grenzschichten auf. In flüssigem Natrium erstrecken sich bei den hier untersuchten kleinen Rayleigh-Zahlen die thermischen Grenzschichten über die gesamte Schichthöhe, so daß die größten Temperaturfluktuationen in der Mit-

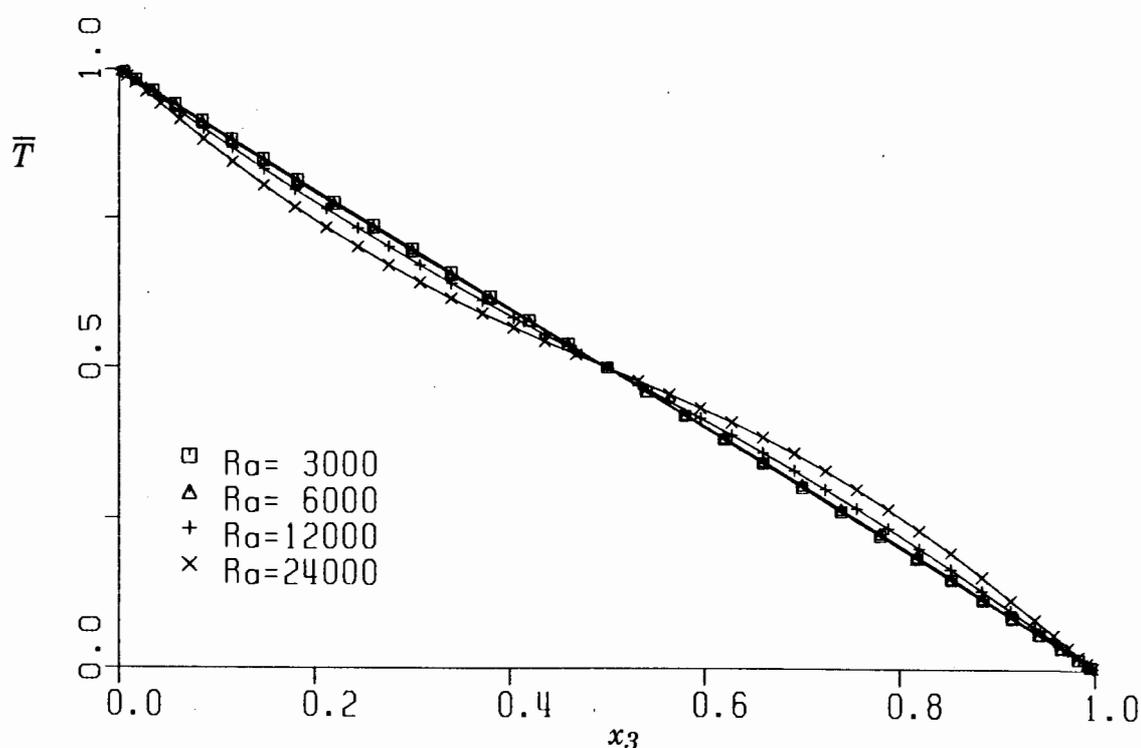


Abb. 5.10: Vertikale Profile der mittleren Temperatur für Natrium bei unterschiedlicher Rayleigh-Zahl. (\square): $Ra = 3\,000$, (Δ): $Ra = 6\,000$, ($+$): $Ra = 12\,000$, (\times): $Ra = 24\,000$.

te der Natriumschicht zu erwarten sind. Dies bestätigt Abb. 5.11, in der für die vier Rayleigh-Zahlen jeweils das vertikale Profil des RMS-Wertes der Temperaturfluktuationen dargestellt ist. Die Amplitude der Temperaturfluktuationen nimmt in Abb. 5.11 mit ansteigender Rayleigh-Zahl deutlich zu. Für die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ ist der Maximalwert von T_{rms} über der Schichthöhe mit etwa 17% der Wandtemperaturdifferenz sogar etwas größer als in der Simulation von Luft bei $Ra = 630\,000$, wo etwa 15% von ΔT_W erreicht werden. Ein qualitativ und quantitativ ganz ähnliches Profil für T_{rms} wie für Natrium bei $Ra = 24\,000$ findet Grötzbach (1982) für Luft bei $Ra = 4\,000$. Weitere Simulationen für Luft bei $Ra = 7\,000$, $Ra = 87\,300$ und $Ra = 381\,000$ verdeutlichen schrittweise den Übergang zu einem Profil, wie es in Abb. 4.11 für Luft bei $Ra = 630\,000$ gefunden wird. Diese Ergebnisse lassen vermuten, daß sich auch in Natrium - bei höheren Rayleigh-Zahlen als in dieser Arbeit realisiert - ein T_{rms} -Profil einstellen wird, das durch zwei Maxima in Wandnähe und ein niedrigeres Niveau in Kanalmitte gekennzeichnet ist.

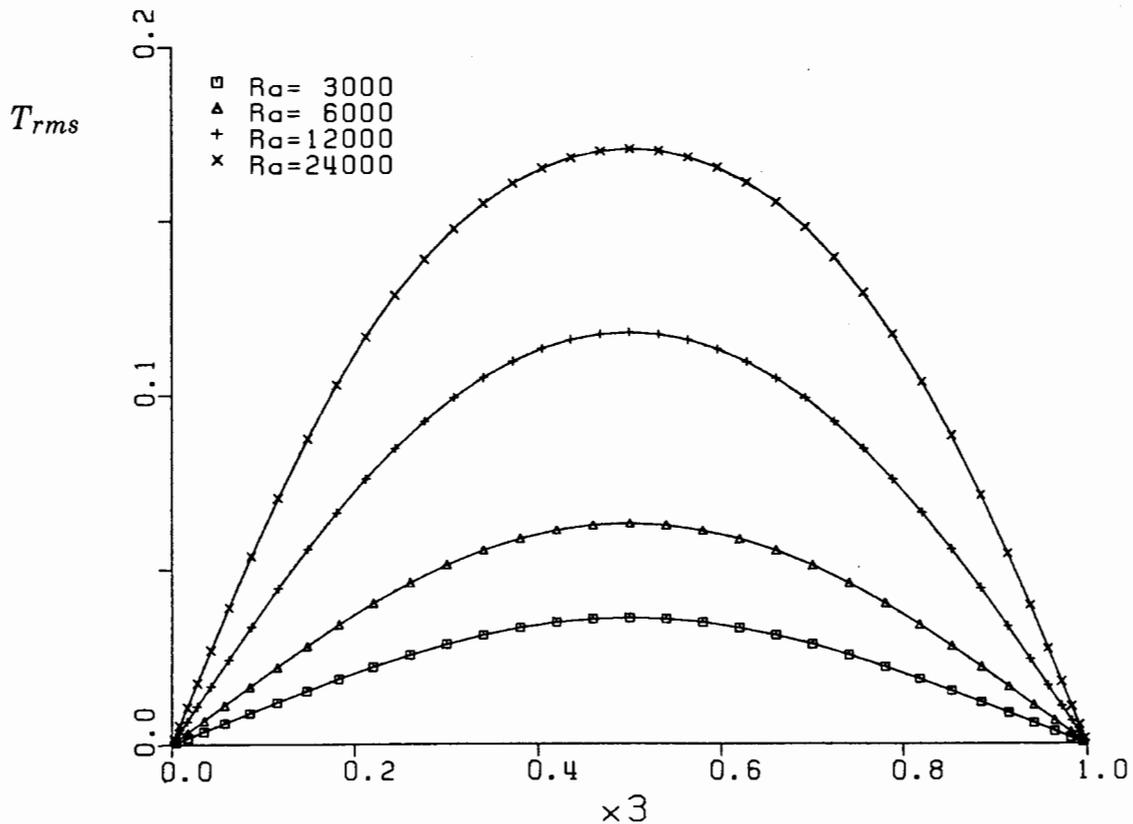


Abb. 5.11: Vertikale Profile des RMS-Wertes der Temperaturfluktuationen für Natrium. (\square): $Ra = 3\,000$, (\triangle): $Ra = 6\,000$, ($+$): $Ra = 12\,000$, (\times): $Ra = 24\,000$.

Zur weiteren Charakterisierung turbulenter Schwankungsgrößen können Verteilungsmomente 3. und 4. Ordnung betrachtet werden. Das mit der 3. Potenz der Standardabweichung normierte 3. Moment wird als Schiefe ("skewness") bezeichnet. Die Schiefe S_ϕ berechnet sich nach

$$S_\phi = \frac{\overline{\phi^3}}{(\overline{\phi^2})^{3/2}} \quad (5.20)$$

und charakterisiert die Asymmetrie der Verteilungsfunktion von ϕ . Die Schiefe einer symmetrischen Verteilung, wie z.B. der Gaußschen Normalverteilung, ist null. Abb. 5.12 gibt eine Vorstellung von der Wahrscheinlichkeitsdichte und dem typischen Verlauf eines Signals mit positiver Schiefe. Das vertikale Profil der Schiefe des Temperaturfeldes für Natrium und $Ra = 24\,000$ ist in Abb. 5.13 dargestellt. Der positive Wert der Schiefe im oberen Bereich des Kanals deutet auf häufige, mit kleiner Amplitude auftretende negative Temperaturabweichungen hin. Positive Temperaturschwankungen erreichen dagegen wesentlich größere Amplitudenwerte. Eine entsprechende Schlußfolgerung kann anhand der negativen Schiefe im unteren Kanalbereich für den Charakter der dort auftretenden Temperaturschwankungen gezogen werden. Die Mechanismen, die für die beobachtete Schiefe der Temperaturfluktuationen verantwortlich sind, werden in Abschnitt 5.4.2 diskutiert. Im Experiment kommt Kek (1989) bei der Auswertung der Schiefe dynamischer Temperatursignale nicht zu eindeutigen Aussagen. Die Ursache hierfür könnte ein unzureichender Mittelungszeitraum sein. Erfahrungen bei der Auswertung numerischer Daten zeigen nämlich, daß mit zunehmenden

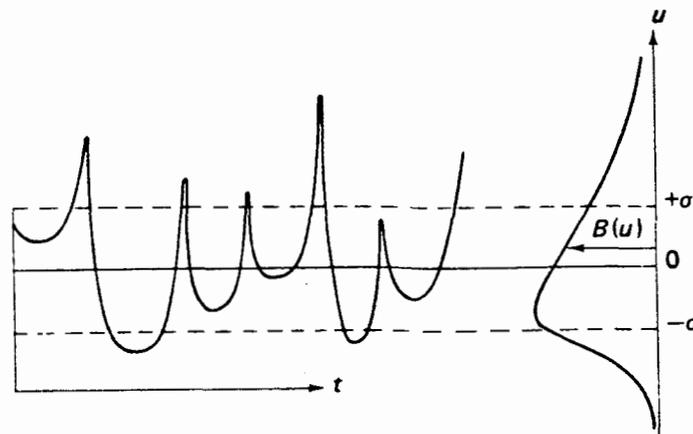


Abb. 5.12: Signal und Wahrscheinlichkeitsdichte einer Funktion mit positiver Schiefe (nach Tennekes & Lumley (1972)).

der Ordnung des Momentes auch eine größere Anzahl von Stichproben (d.h. hier von Zeitebenen) nötig ist, um zu befriedigenden Resultaten zu gelangen. Dieser Sachverhalt liefert auch die Erklärung, warum beim Profil der Schiefe in Abb. 5.13 und bei Profilen verschiedener Korrelationen höherer Ordnung, die in Kapitel 5.6 ausgewertet werden, geringe Asymmetrien vorliegen.

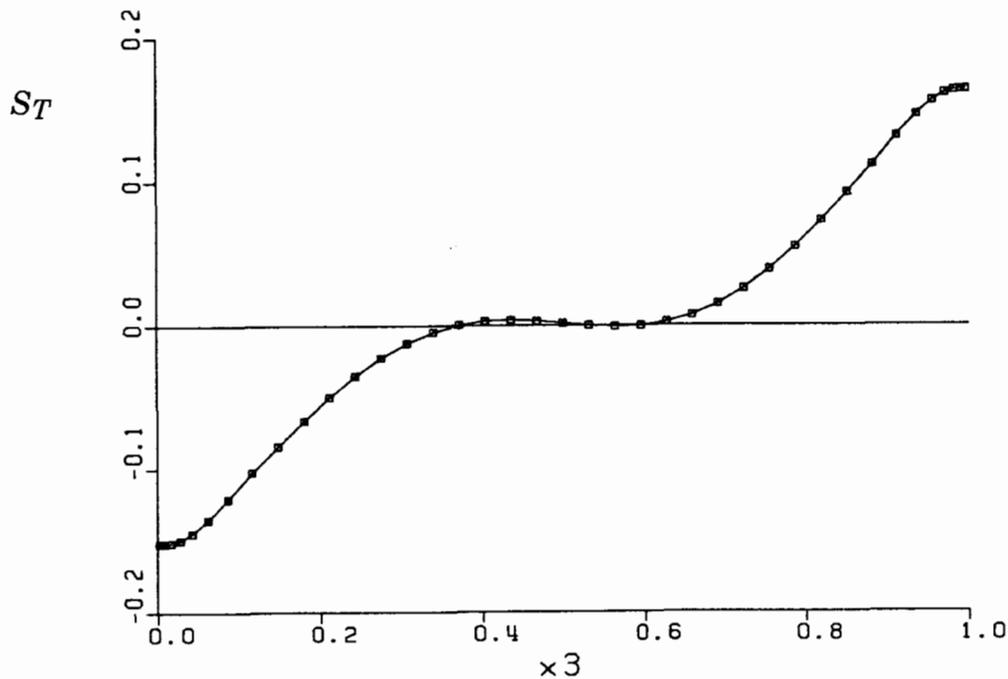


Abb. 5.13: Vertikales Profil der Schiefe der Temperaturfluktuationen für Natrium, $Ra = 24\,000$.

Als Flachheit ("flatness" oder "kurtosis") einer Häufigkeitsverteilung bezeichnet man das mit der 4. Potenz der Standardabweichung normierte 4. Moment

$$F_{\phi} = \frac{\overline{\phi^4}}{(\overline{\phi^2})^2} \quad (5.21)$$

Einen typischen Verlauf von Signalen mit unterschiedlicher Flachheit zeigt Abb. 5.14. Die Flachheit der Gaußschen Normalverteilung hat den Wert 3, die eines deterministischen Sinussignals den Wert 1.5. Das vertikale Profil der Flachheit der Temperaturschwankungen ist in Abb. 5.15 für die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ wiedergegeben. Es ist nur eine schwache Variation über der Kanalhöhe mit leichtem Anstieg der Flachheit hin zu den Wänden festzustellen. Der kleine Wert der

Flachheit läßt darauf schließen, daß das Temperaturfeld überwiegend durch harmonische Schwankungsanteile dominiert ist.

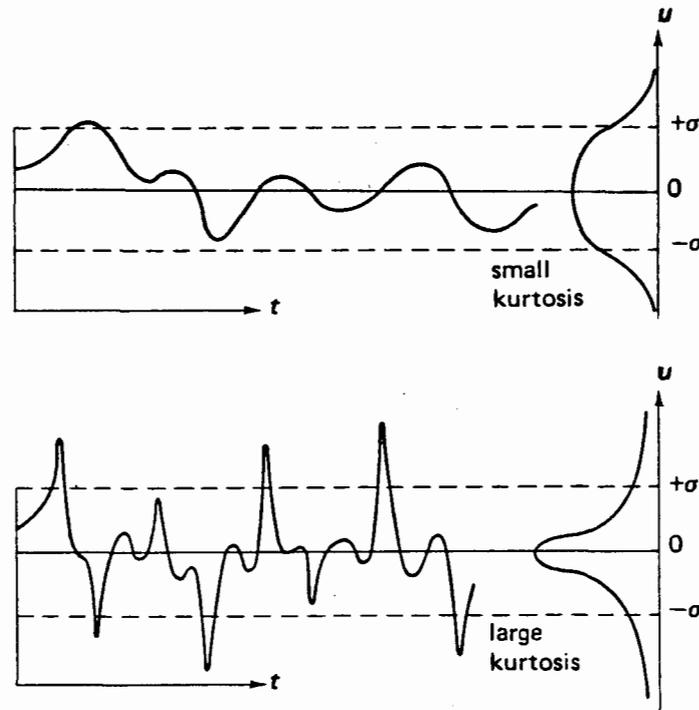


Abb. 5.14: Signal und Wahrscheinlichkeitsdichte von Funktionen mit kleiner und großer Flachheit (nach Tennekes & Lumley (1972)).

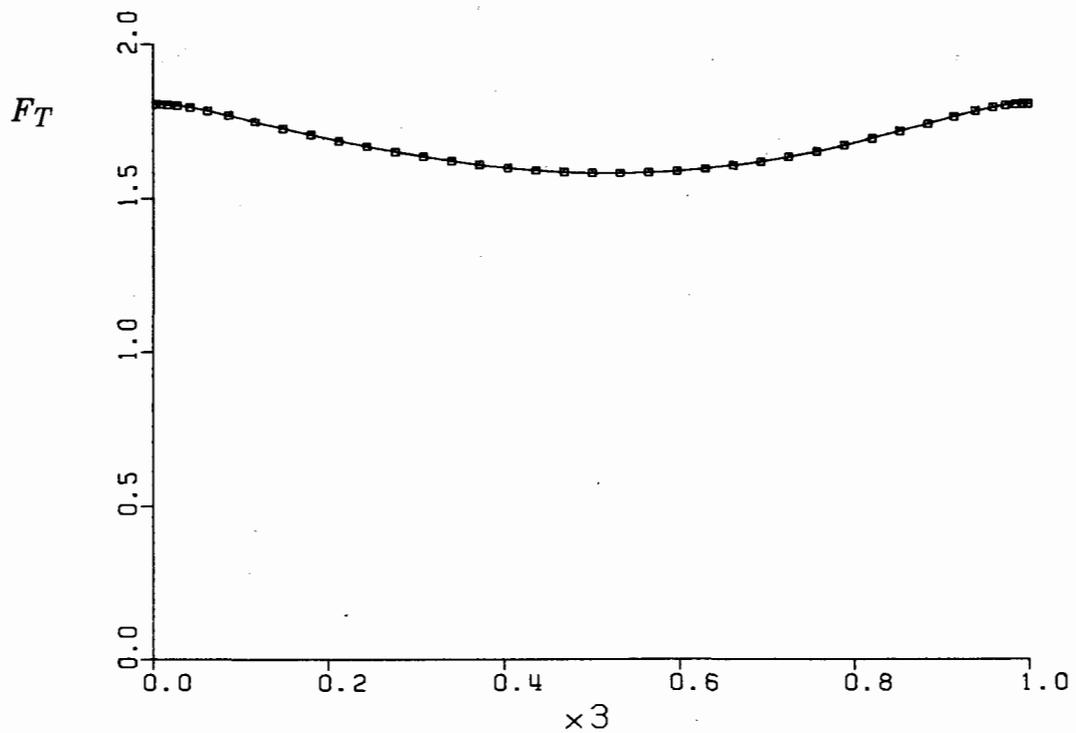


Abb. 5.15: Vertikales Profil der Flachheit der Temperaturfluktuationen für Natrium, $Ra = 24\ 000$.

5.4.2 Ergebnisse zum Geschwindigkeitsfeld

Im Gegensatz zum Temperaturfeld, bei dem sich die thermische Grenzschicht über die gesamte Kanalhöhe erstreckt, ist die Grenzschicht des Geschwindigkeitsfeldes bei den durchgeführten Simulationen auf die unmittelbare Wandnähe beschränkt. Dies belegt Abb. 5.16, in der für alle betrachteten Rayleigh-Zahlen die vertikalen Profile der kinetischen Turbulenzenergie aufgetragen sind. Erwartungsgemäß ist mit wachsender Rayleigh-Zahl eine Abnahme der viskosen Grenzschichtdicke festzustellen. Darüber hinaus erfolgt mit wachsender Rayleigh-Zahl eine deutliche Zunahme der Turbulenzenergie. Mit weiter steigender Rayleigh-Zahl ist aber aufgrund der in TURBIT verwendeten Normierung zu erwarten, daß die Turbulenzenergie nach einem Übergangsbereich nahezu unabhängig von der Rayleigh-Zahl wird [Grötzbach (1982)].

Bei der weiteren Analyse statistischer Daten des Geschwindigkeitsfeldes beschränken wir uns auf die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$. Das Profil des RMS-Wertes der Vertikalgeschwindigkeit in Abb. 5.17 zeigt den typischen Verlauf mit dem Maximum in Kanalmitte, wie es von der Luft-Simulation her bekannt ist (vergl. Abb. 4.12). Qualitativ sehr ähnlich zu dem Ergebnis bei Luft ist auch das Profil des RMS-Wertes der Horizontalgeschwindigkeit in x_1 -Richtung mit den beiden Maxima am Rande der viskosen Grenzschichten. Während im Luftfall die RMS-Profile beider Horizontalgeschwindigkeitskomponenten ähnlich sind, ist dies nach Abb. 5.17 bei Natrium nicht der Fall. Die deutlich geringere Fluktuationsenergie in x_2 -Richtung ist ein Indiz für das Vorhandensein einer Vorzugsrichtung im Strömungsfeld. Die weitere Analyse in Kap. 5.5 zeigt, daß äquivalent zu den Bandstrukturen im Temperaturfeld bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ (vergl. Abb. 5.1) im Geschwindigkeitsfeld großräumige Rollenstrukturen existieren. Deren Orientierung in x_2 -Richtung im vorliegenden Fall erklärt die schwächeren Fluktuationen in dieser Richtung und die deutlich stärkeren Fluktuation senkrecht zu den Rollen.

Abb. 5.18 zeigt die Schiefe der drei Geschwindigkeitskomponenten als Funktion der vertikalen Koordinate. Die Schiefe der beiden Horizontalgeschwindigkeitskomponenten ist über der gesamten Kanalhöhe nahezu null, was auf eine symmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilung schließen läßt. Demgegenüber findet man für die Vertikalgeschwindigkeit eine große negative Schiefe innerhalb der viskosen Grenzschicht nahe der unteren Wand und eine positive nahe der oberen Wand. Damit zeigen sich hier für Natrium bei der Schiefe der Vertikalgeschwin-

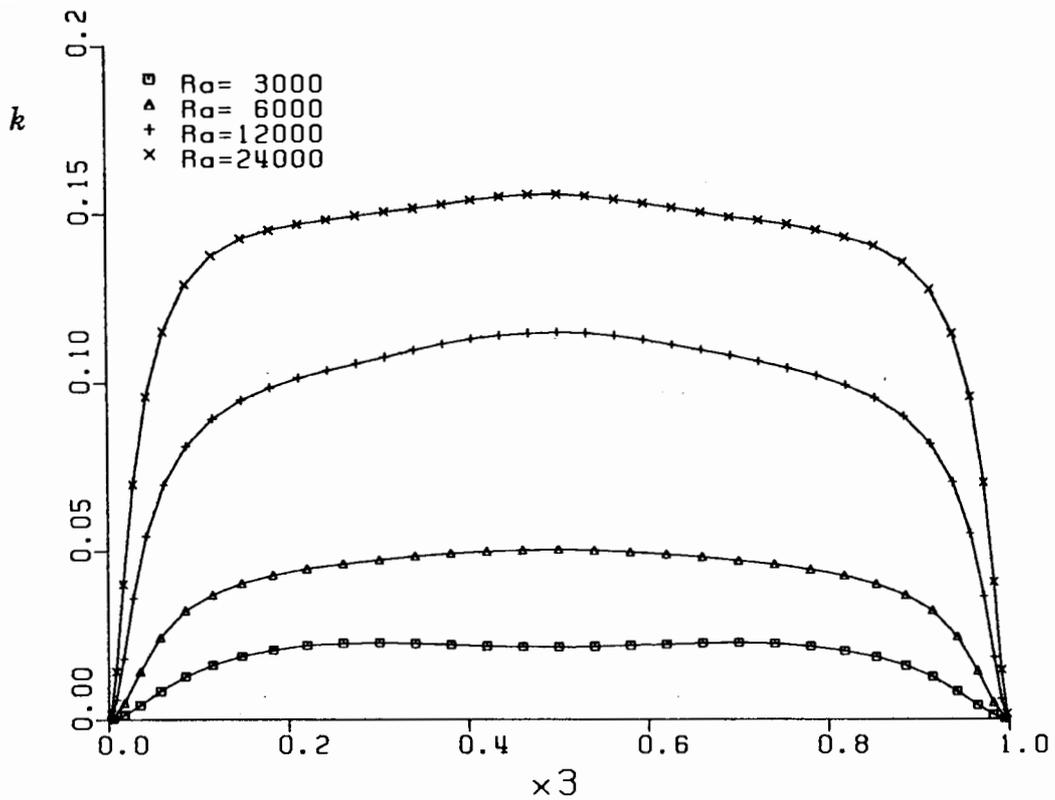


Abb. 5.16: Vertikale Profile der kinetischen Turbulenzenergie für Natrium. (□): $Ra = 3000$, (△): $Ra = 6000$, (+): $Ra = 12000$, (×): $Ra = 24000$.

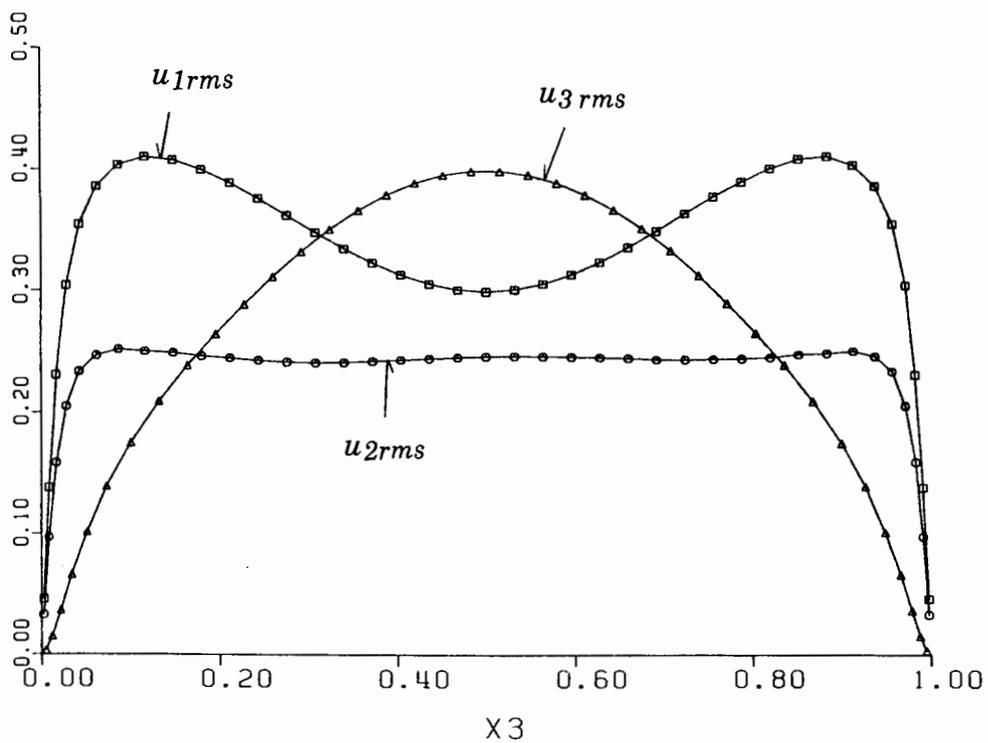


Abb. 5.17: Vertikale Profile der RMS-Werte der Geschwindigkeitskomponenten für Natrium, $Ra = 24000$. (□): u_{1rms} , (○): u_{2rms} , (△): u_{3rms} .

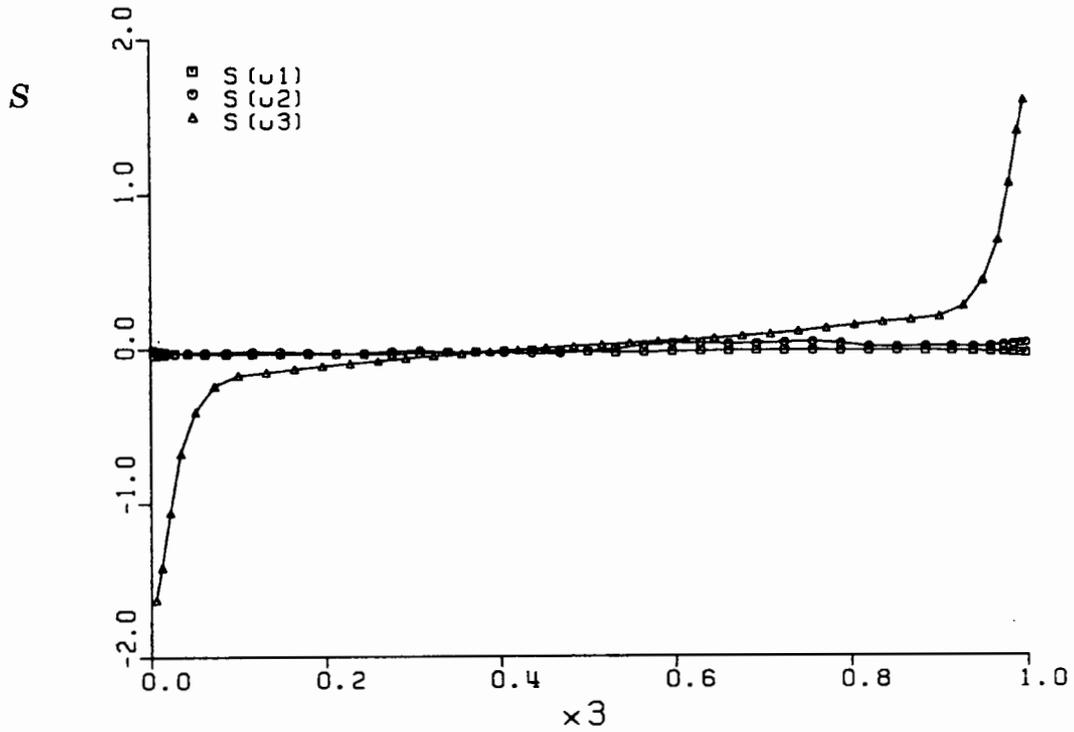


Abb. 5.18: Vertikale Profile der Schiefe der Geschwindigkeitsfluktuationen für Natrium, $Ra = 24\,000$. (\square): S_{u1} , (\circ): S_{u2} , (Δ): S_{u3} .

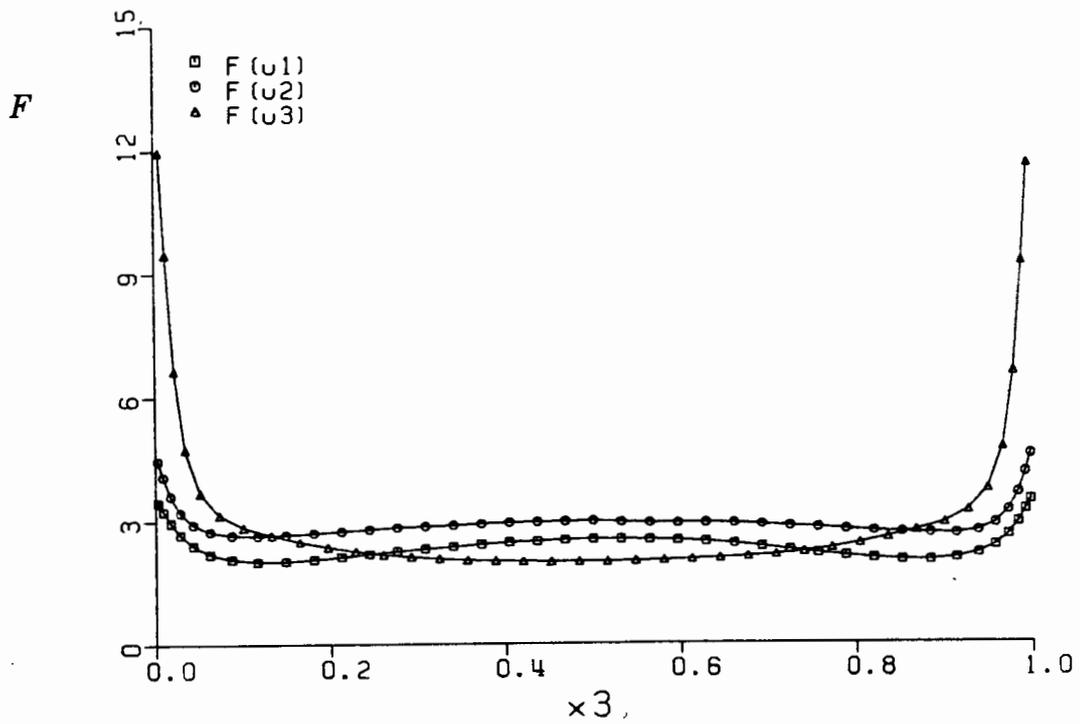


Abb. 5.19: Vertikale Profile der Flachheit der Geschwindigkeitsfluktuationen für Natrium, $Ra = 24\,000$: (\square): F_{u1} , (\circ): F_{u2} , (Δ): F_{u3} .

digkeit dieselben Charakteristika, wie sie von Moeng & Rotunno (1990) in ihrer direkten Simulation von Rayleigh-Bénard-Konvektion bei $Ra = 380\,000$ und $Pr = 1$ gefunden wurden. Die Flachheit der drei Geschwindigkeitskomponenten, dargestellt in Abb. 5.19, weicht in Kanalmitte kaum von der einer Gaußverteilung ab. In Wandnähe ist bei den Horizontalgeschwindigkeiten ein schwacher und bei der Vertikalgeschwindigkeit ein sehr starker Anstieg der Flachheit festzustellen.

Aus der Analyse der Schiefe und Flachheit des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes ergibt sich ein klares Bild über den Charakter der Fluktuationen und die die Grenzschichten dominierenden physikalischen Vorgänge. Zum einen sind die nur mit kleinen Amplituden auftretenden positiven Vertikalgeschwindigkeiten und Abweichungen von der mittleren Temperatur nahe der unteren Wand wohl auf durch die Rayleigh-Taylor-Instabilität bedingte Ablösevorgänge zurückzuführen. Das sich zunächst nur sehr langsam in Bewegung setzende Fluid wird durch Auf- bzw. Abtriebskräfte zunehmend beschleunigt und dringt aufgrund seiner Trägheit mit hoher kinetischer Energie in die Grenzschicht nahe der gegenüberliegenden Wand ein. Hier wird das Fluid abgebremst, horizontal umverteilt und steigt dann langsam und großflächig ab. Ganz entsprechendes gilt für die Vorgänge an der oberen Wand. Es sind also Ablösevorgänge an den gegenüberliegenden Wänden, die letztlich für die großen positiven bzw. negativen Vertikalgeschwindigkeiten an der oberen bzw. unteren Wand und damit für deren extreme Schiefen in den viskosen Grenzschichten verantwortlich sind.

5.4.3 Eindimensionale Energiespektren

Ein wichtiges Analysehilfsmittel zur Beurteilung der Güte der räumlichen Auflösung der Simulation stellen die eindimensionalen Energiespektren der turbulenten Fluktuationen dar (vergl. Abschnitt 5.1.2). In Abb. 5.20 sind für die vier betrachteten Rayleigh-Zahlen die Energiespektren der x_1 -Geschwindigkeitskomponente in Kanalmitte in doppelt-logarithmischem Maßstab gegenübergestellt. Der Energieinhalt der großräumigen Wirbel (kleine Wellenzahlen k_1) nimmt mit Anhebung der Rayleigh-Zahl von $Ra = 3\,000$ auf $Ra = 6\,000$ deutlich zu, während bei einer weiteren Erhöhung auf $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ nur noch ein unwesentlicher Anstieg festzustellen ist. Im hochfrequenten Wellenzahlenbereich führt der wachsende Turbulenzgrad zu einer Anhebung des Energieniveaus der kleinskaligen Wirbel. Es erfolgt eine Verschiebung des dissipativen Bereichs des Spektrums zu immer kleineren Wellenlängen und damit eine kontinuierliche Aufweitung des energietragenden Wellenzahlenbereichs. Da bei der direkten numerischen Simulation die immer kleineren Wirbel mit dem Maschennetz aufgelöst werden müssen, werden zunehmend feinere Gitter benötigt. Ihre Realisierung muß letztlich an bestehenden Rechnerressourcen scheitern. Der Abfall des Spektrums mit lediglich der dritten Potenz der Wellenzahl bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ ist ein Anzeichen, daß damit eine Grenze für den mit der derzeitigen Rechnerleistung mit der direkten Simulationsmethode realisierbaren Turbulenzgrad absehbar ist.

Der Ordinatenmaßstab in Abb. 5.20 wurde so gewählt, daß ein direkter Vergleich mit den Energiespektren der Temperaturfluktuationen möglich ist. Diese sind in Abb. 5.21 wiedergegeben. Auffallend ist der bereits bei relativ großen Wellenlängen einsetzende sehr starke Abfall des Spektrums. Im Gegensatz zum Geschwindigkeitsfeld, dessen breitbandiges Spektrum auf deutlich turbulente Signale schließen läßt, ist das Temperaturfeld offensichtlich geprägt durch niederfrequente Fluktuationsanteile. Das Fehlen kurzweiliger Schwankungen im Temperaturfeld ist auf die hohe Wärmeleitfähigkeit der Flüssigmetalle zurückzuführen. Durch die Dominanz der molekularen Diffusion werden im Temperaturfeld kleinräumige Störungen sofort weggedämpft bzw. deren Ausbildung überhaupt verhindert.

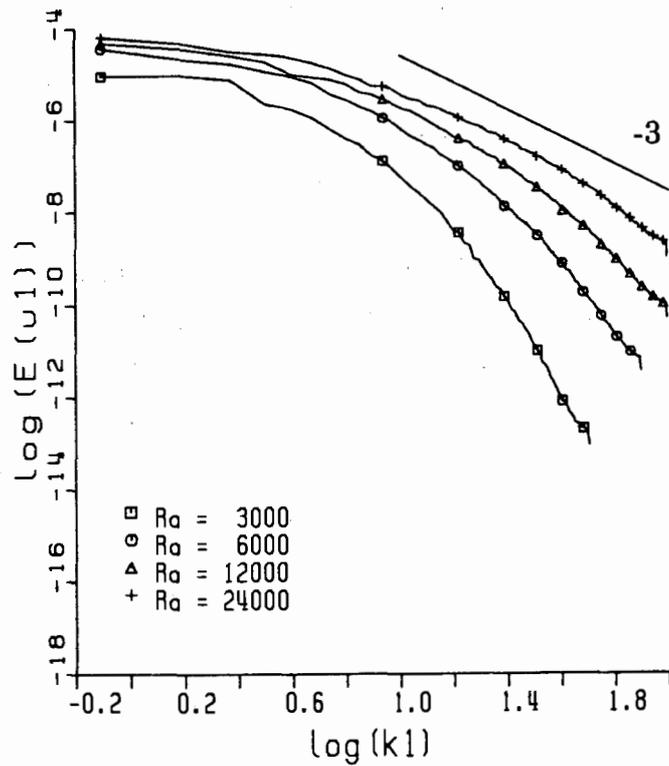


Abb. 5.20: Eindimensionale Energiespektren der u_1 -Geschwindigkeitskomponente in Kanalmitte für Natrium. (\square): $Ra = 3\,000$, (\circ): $Ra = 6\,000$, (\triangle): $Ra = 12\,000$, ($+$): $Ra = 24\,000$.

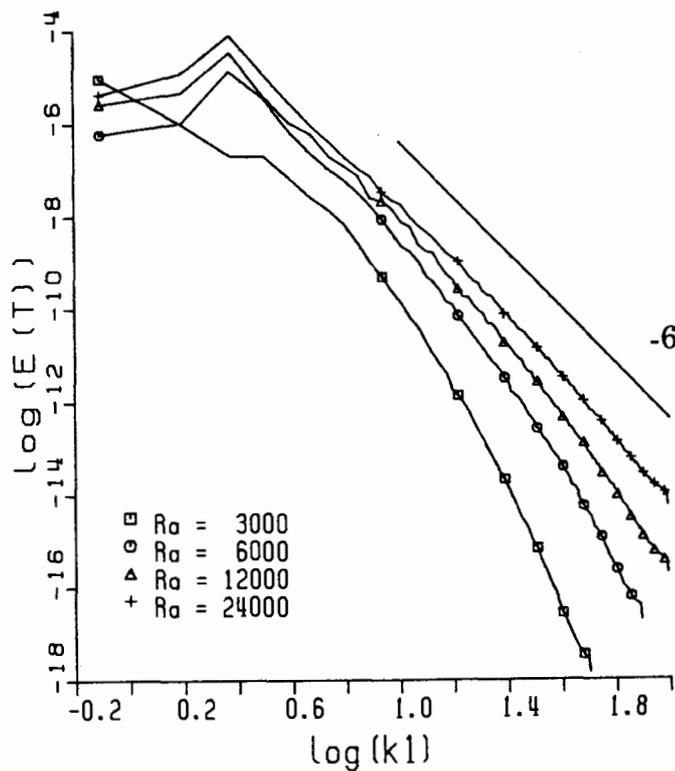


Abb. 5.21: Eindimensionale Energiespektren der Temperaturfluktuationen in Kanalmitte für Natrium. (\square): $Ra = 3\,000$, (\circ): $Ra = 6\,000$, (\triangle): $Ra = 12\,000$, ($+$): $Ra = 24\,000$.

5.4.4 Grashof-Analogie des Geschwindigkeitsfeldes

Auf ein interessantes Ergebnis führt die Gegenüberstellung von Spektren der Geschwindigkeitsfluktuationen für die Simulation in Luft mit $Ra = 630\,000$ und in Natrium mit $Ra = 6\,000$. Abb. 5.22 zeigt für beide Simulationen Spektren der u_1 -Geschwindigkeitskomponente in der Horizontalebene $x_3 = 0.5$. Auffallend ist die gute Übereinstimmung beider Spektren im oberen Wellenzahlenbereich. Trotz der unterschiedlichen Größenordnung von Rayleigh- und Prandtl-Zahl treten bei beiden Simulationen bei kleinen Skalen im Geschwindigkeitsfeld offensichtlich ganz ähnliche Strukturen auf. Die Erklärung für diesen Sachverhalt liefert die dimensionslose Form der Impulsgleichung (3.4). In dieser Gleichung tritt als einzige Kennzahl im Vorfaktor des viskosen Terms die Grashof-Zahl auf. Diese legt damit gewissermaßen die Gewichtung des Reibungsterms gegenüber Trägheits-, Druck- und Auftriebsterm fest und bestimmt so, ab welcher Wirbelgröße Reibungseffekte dominant werden. Für Simulationen mit ähnlicher Grashof-Zahl bedeutet dies, daß die Dissipation der kinetischen Energie bei ähnlichen Wirbelgrößen erfolgt und demzufolge auch die Spektren von Geschwindigkeitsfluktuationen in solchen Simulationen im dissipativen Bereich eine starke Ähnlichkeit aufweisen. Für die beiden betrachteten Simulationen von Luft und Natrium ist die Grashof-Zahl mit

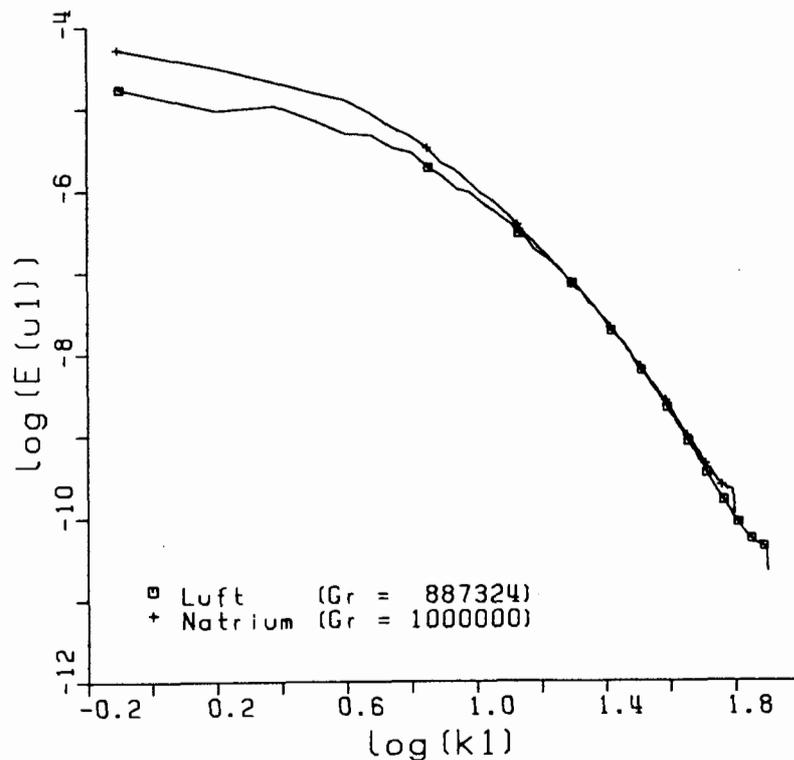


Abb. 5.22: Eindimensionale Energiespektren der u_1 -Geschwindigkeitskomponente in Kanalmitte. (\square): Luft, $Ra = 630\,000$, $Gr = 887\,324$; ($+$): Natrium, $Ra = 6\,000$, $Gr = 10^6$.

$Gr_{Luft} = 887\,324$ und $Gr_{Natrium} = 1\,000\,000$ in der Tat vergleichbar. Abb. 5.22 zeigt aber auch, daß sich die Skalierung des Geschwindigkeitsfeldes mit der Grashof-Zahl auf die kleinen Skalen beschränkt. Unterschiede in den Spektren im tieffrequenten Wellenzahlenbereich sind auf die deutlich unterschiedlichen Temperaturfelder in Luft und Natrium zurückzuführen. Besonders in Natrium prägt das langwellige Temperaturfeld über die Auftriebskräfte dem Geschwindigkeitsfeld entsprechend großräumige Strukturen auf.

5.4.5 Zeitsignale

Die aus den bisherigen statistischen Analysen abgeleiteten Aussagen über das Geschwindigkeits- und Temperaturfeld werden durch Abb. 5.23 ergänzt. Hier sind für Natrium für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ (Fall NA6H) Zeitsignale der Vertikalgeschwindigkeit und der Temperatur an einer festen Position in der Kanalmitte wiedergegeben. Die simulierten ca. 800 dimensionslosen Zeiteinheiten entsprechen im Experiment von Kek (1989) einem realen Zeitraum von ca. 8 (Schichthöhe 15,5 mm) bzw. ca. 72 Minuten (Schichthöhe 46,5 mm). Deutlich zu erkennen ist, daß das Geschwindigkeitsfeld im Gegensatz zu dem durch niederfrequente Schwankungen dominierten Temperaturfeld auch weitaus höherfrequente Signalanteile aufweist.

Die Zeitsignale in Abb. 5.23 lassen auf eine starke Korrelation zwischen Vertikalgeschwindigkeit und Temperatur schließen. Besonders deutlich wird diese Korrelation, wenn man die unabhängige Variable Zeit eliminiert und stattdessen die Vertikalgeschwindigkeit über der Temperatur aufträgt. Diese Darstellungsform vermittelt einen anschaulichen Eindruck von der gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsdichte der aufgetragenen Größen. Spannt man, wie in Abb. 5.24 geschehen, durch die beiden Mittelwerte $\overline{u_3}(x_3 = 0.5) = 0$ und $\overline{T}(x_3 = 0.5) = 0.5$ ein Achsenkreuz auf, so ergeben sich vier Quadranten. Zwei vollständig positiv bzw. negativ korrelierte Signale werden durch die Winkelhalbierende des 1./3. bzw. 2./4. Quadranten repräsentiert. In Abb. 5.24 treten Ereignisse mit hoher Wahrscheinlichkeit im 1. oder 3. Quadranten auf. Dies bedeutet, daß eine positive/negative Vertikalgeschwindigkeit fast ausnahmslos mit einer positiven/negativen Abweichung von der mittleren Temperatur gekoppelt ist. Die geringe Streuung um die Winkelhalbierende des 1./3. Quadranten deutet auf einen ausgesprochen hohen Korrelationskoeffizienten hin. Dieser erreicht in der Kanalmitte in der Tat einen Wert von 0.92.

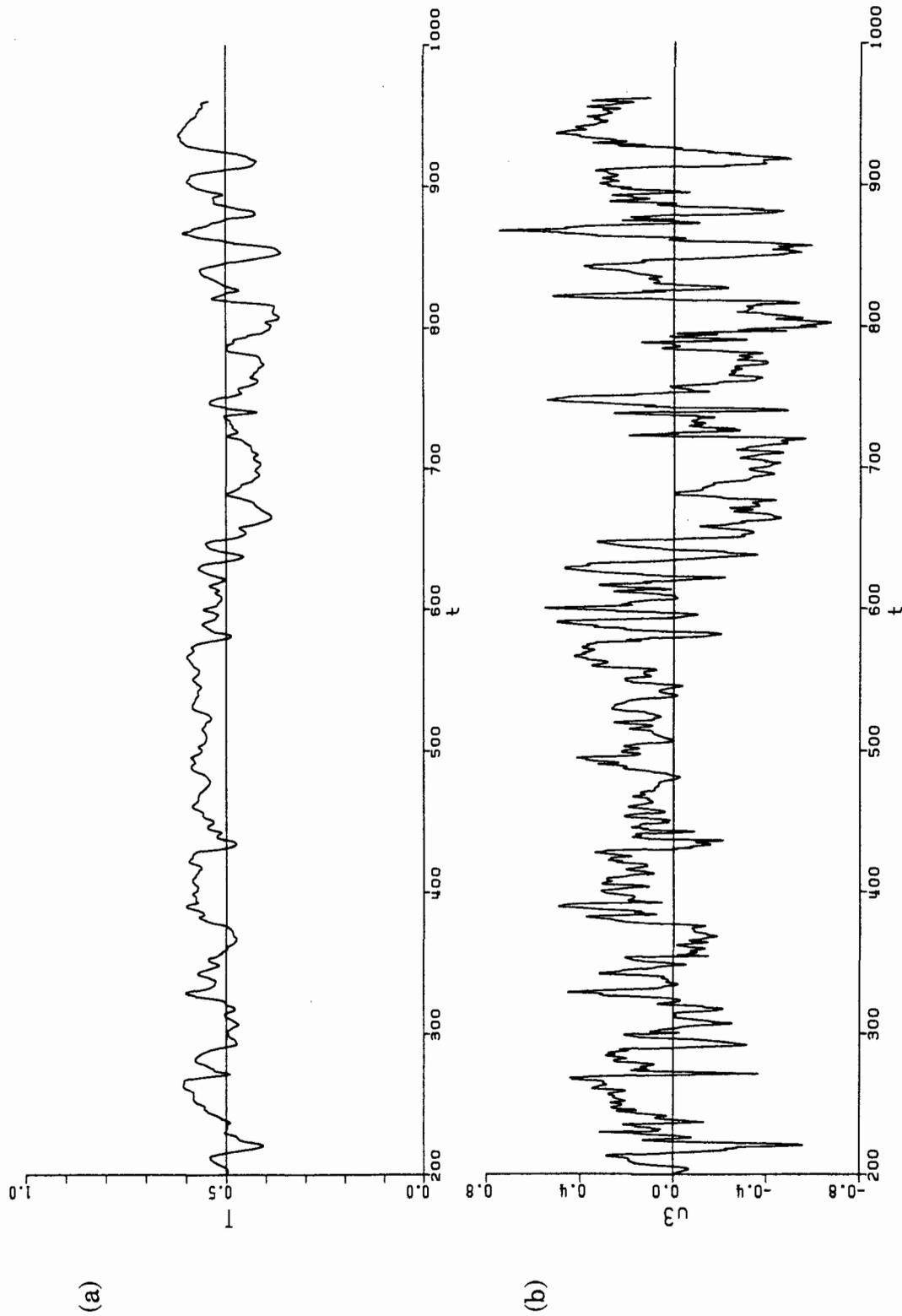


Abb. 5.23: Zeitsignale der Temperatur (a) und der Vertikalgeschwindigkeit (b) an einer festen Position in der Ebene $x_3 = 0.5$ für Natrium, $Ra = 6\,000$ (Fall NA6H).

In einer der Abb. 5.24 entsprechenden Darstellungsweise veranschaulicht Abb. 5.25 die Korrelation zwischen Vertikalgeschwindigkeit und Temperatur für eine Position in unmittelbarer Nähe der unteren Wand ($x_3 = 0.01$). Die starke Asymmetrie bezüglich dem aus den Mittelwerten $\overline{u_3}(x_3 = 0.01) = 0$ und $\overline{T}(x_3 = 0.01) = 0.99$ aufgespannten Achsenkreuz spiegelt anschaulich die negative Schiefe der Geschwindigkeits- und Temperaturfluktuationen nahe der unteren Wand wider (vergl. Abschnitt 5.4.1 und 5.4.2). Häufige, aber nur mit kleiner Amplitude auftretende positive Abweichungen von den Mittelwerten stehen selteneren, aber von der Amplitude her größeren negativen Fluktuationen gegenüber. Ins Auge springen besonders die beiden durch Pfeile markierten Ereignisse. Sie lassen sich so interpretieren, daß ein von der oberen Wand abgelöster Fluidballen mit einem gegenüber der Umgebung niedrigeren Temperaturniveau mit hoher negativer Vertikalgeschwindigkeit in die viskose Grenzschicht an der unteren Wand eindringt.

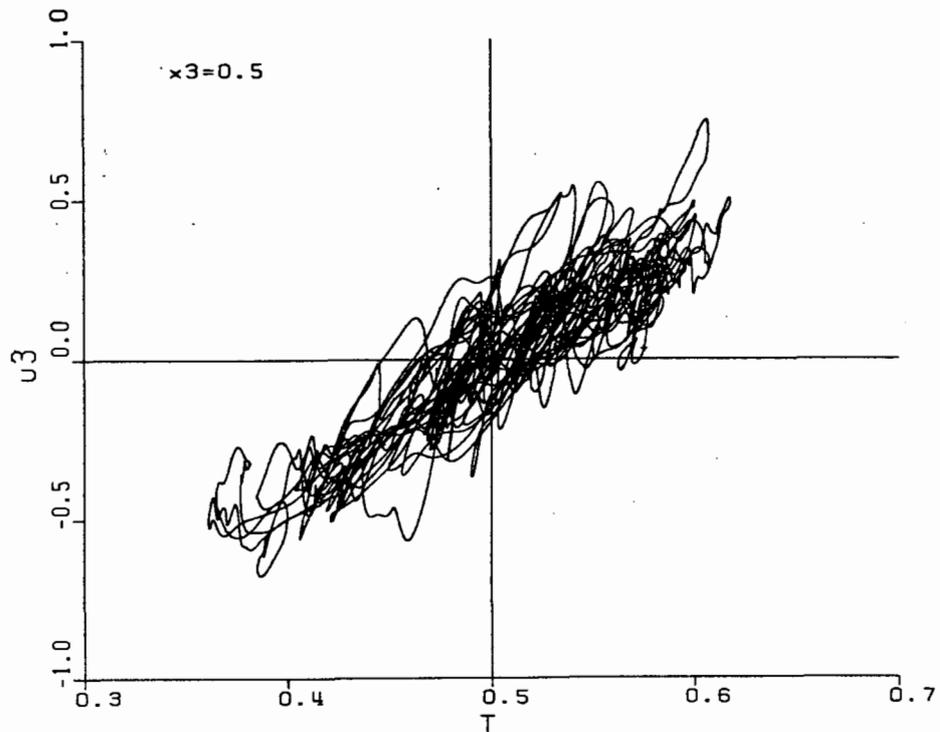


Abb. 5.24: Plot der Vertikalgeschwindigkeit $u_3(t)$ über der Temperatur $T(t)$ für eine Masche in der Ebene $x_3 = 0.5$ für Natrium, $Ra = 6\,000$. Die Hilfslinien repräsentieren die Mittelwerte $\overline{u_3} = 0$ und $\overline{T} = 0.5$ in der Ebene $x_3 = 0.5$.

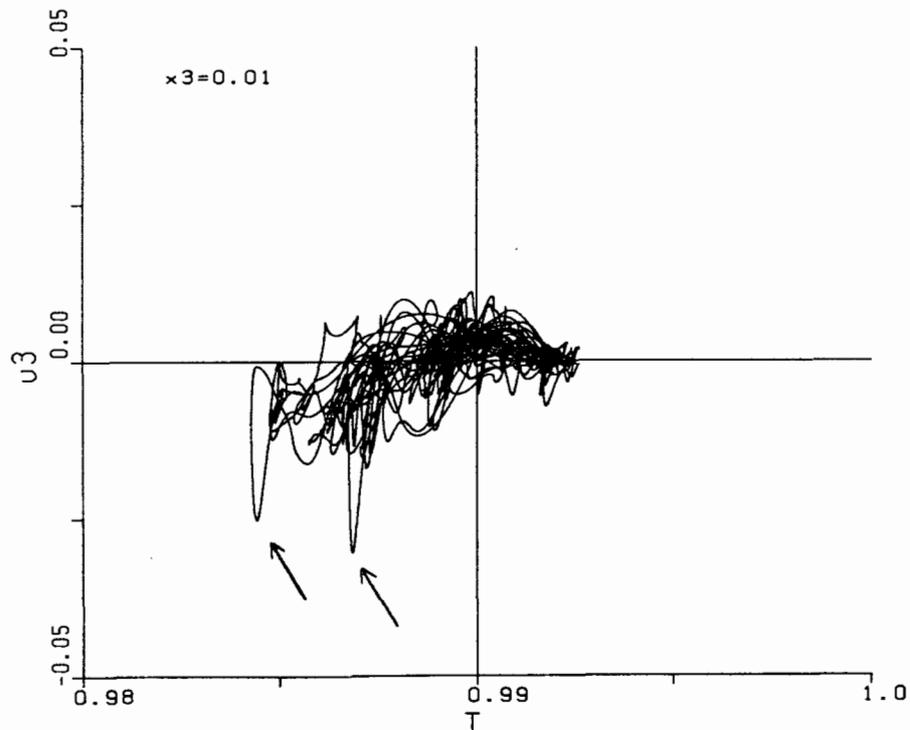


Abb. 5.25: Plot der Vertikalgeschwindigkeit $u_3(t)$ über der Temperatur $T(t)$ für eine Masche in der Ebene $x_3 = 0.01$ für Natrium, $Ra = 6\,000$. Die Hilfslinien repräsentieren die Mittelwerte $\overline{u_3} = 0$ und $\overline{T} = 0.99$ in der Ebene $x_3 = 0.01$.

5.5 Phänomenologische Analyse

Die bis hier mit statistischen Analysemethoden abgeleiteten Aussagen zu den Strukturen und Mechanismen der Konvektion werden im folgenden durch Analysen momentaner Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder untermauert und ergänzt.

5.5.1 Strukturen der Konvektion

Die sich bei Überschreiten der kritischen Rayleigh-Zahl einstellende stationäre Konvektionsform ist charakterisiert durch zweidimensionale Rollen der Wellenlänge $\lambda \approx 2$. Mit wachsender Rayleigh-Zahl wird die Strömung zunehmend anfälliger gegen Instabilitäten, und es stellen sich zeitabhängige dreidimensionale Konvektionsformen ein. Experimente zeigen, daß dies in Flüssigmetallen bereits bei relativ kleinen Rayleigh-Zahlen der Fall ist (vergl. Kapitel 2.2). Dieser Sachverhalt spiegelt sich auch in den numerischen Ergebnissen für Natrium wider, siehe Abb. 5.26. Hier sind für die vier untersuchten Rayleigh-Zahlen Isolinien momentaner Temperaturfelder in der Ebene $x_3 = 0.5$ dargestellt. Abb. 5.26(a) zeigt für die Rayleigh Zahl $Ra = 3\,000$ ein weitgehend zweidimensionales nur schwach gestörtes Temperaturfeld. Mit wachsender Rayleigh-Zahl sind zunehmend größere Temperaturschwankungen zu beobachten, und der Charakter des Temperaturfeldes wird insgesamt dreidimensionaler, Abb. 5.26(b - d). In allen Fällen weist das Temperaturfeld jedoch eine eindeutige Vorzugsrichtung auf. Keinerlei Vorzugsrichtung ist dagegen in Abb. 5.27 auszumachen, wo zum Vergleich das Temperaturfeld der Simulation von Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft mit $Ra = 630\,000$ in der Ebene $x_3 = 0.5$ dargestellt ist.

Deutlich wird der ganz unterschiedliche Charakter des Temperaturfeldes in Natrium und Luft auch in der Analyse von Vertikalschnitten, siehe Abb. 5.28. In Natrium sind für $Ra = 3\,000$ und $Ra = 6\,000$ die Abweichungen vom linearen Temperaturprofil des Wärmeleitungszustandes wegen der hohen Wärmeleitfähigkeit der Flüssigmetalle nur sehr gering, Abb. 5.28 (a, b). Erst für $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ sind etwas größere Auslenkungen der Isolinien zu beobachten, Abb. 5.28 (c, d). Im Gegensatz hierzu ist das Temperaturfeld in Luft geprägt durch dünne Grenzschichten und eine weitgehend isotherme Kernströmung, Abb. 5.28(e). Auftriebsfahnen, die sich aufgrund von Rayleigh-Taylor-Instabilitäten in Wandnähe ausbilden, erstrecken sich oftmals über die gesamte Kanalhöhe.

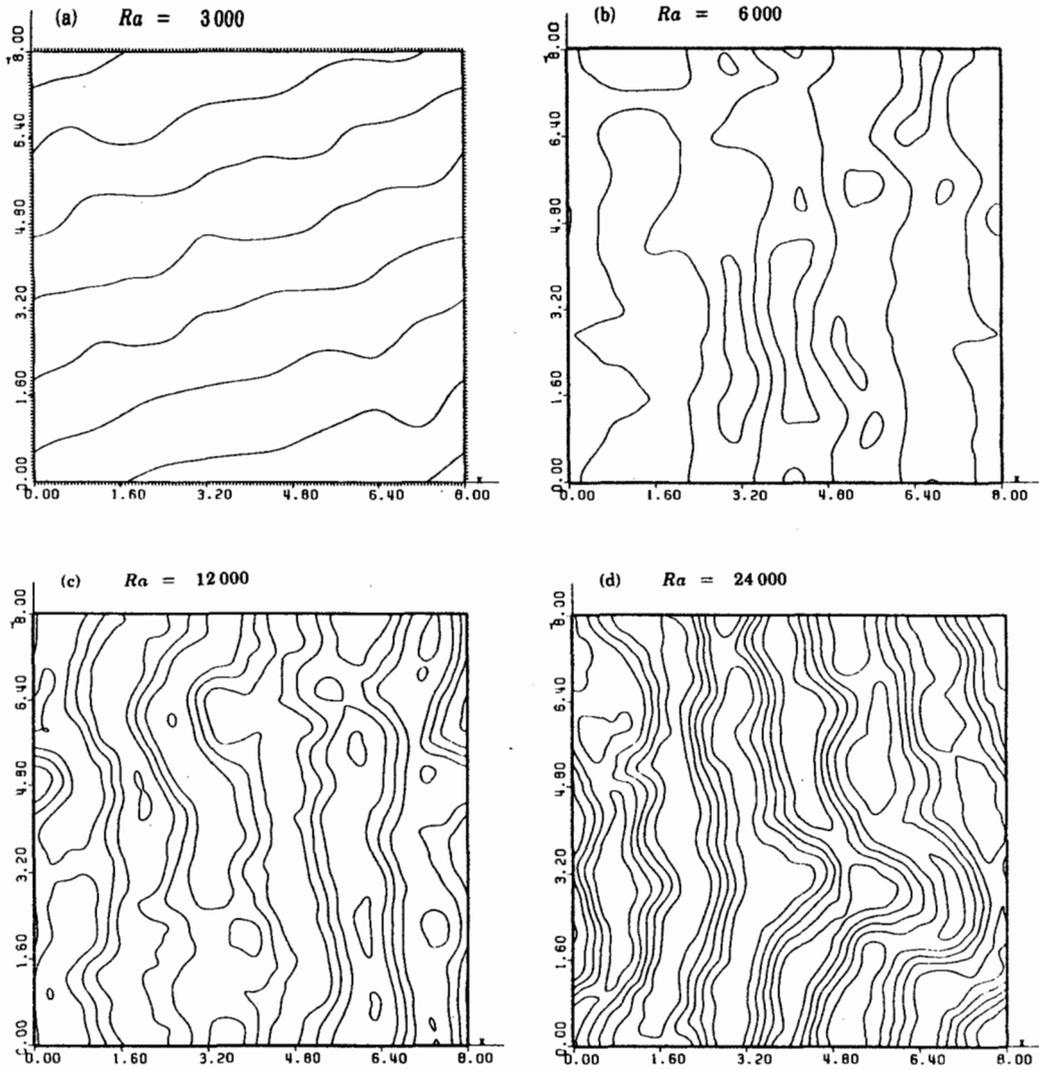


Abb. 5.26: Isolines des Temperaturfeldes (Inkrement: 0.1) in der Ebene $x_3 = 0.5$ für Natrium. (a): $Ra = 3\,000$, $t = 855.24$; (b): $Ra = 6\,000$, $t = 960.39$; (c): $Ra = 12\,000$, $t = 429.5$; (d): $Ra = 24\,000$, $t = 466.7$.

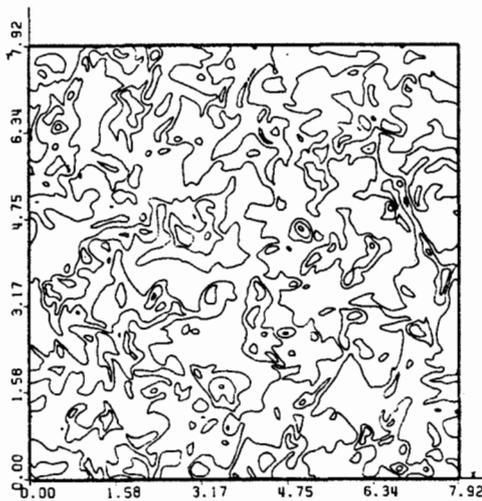


Abb. 5.27: Isolines des Temperaturfeldes (Inkrement: 0.1) in der Ebene $x_3 = 0.5$ für Luft, $Ra = 630\,000$, $t = 166.45$.

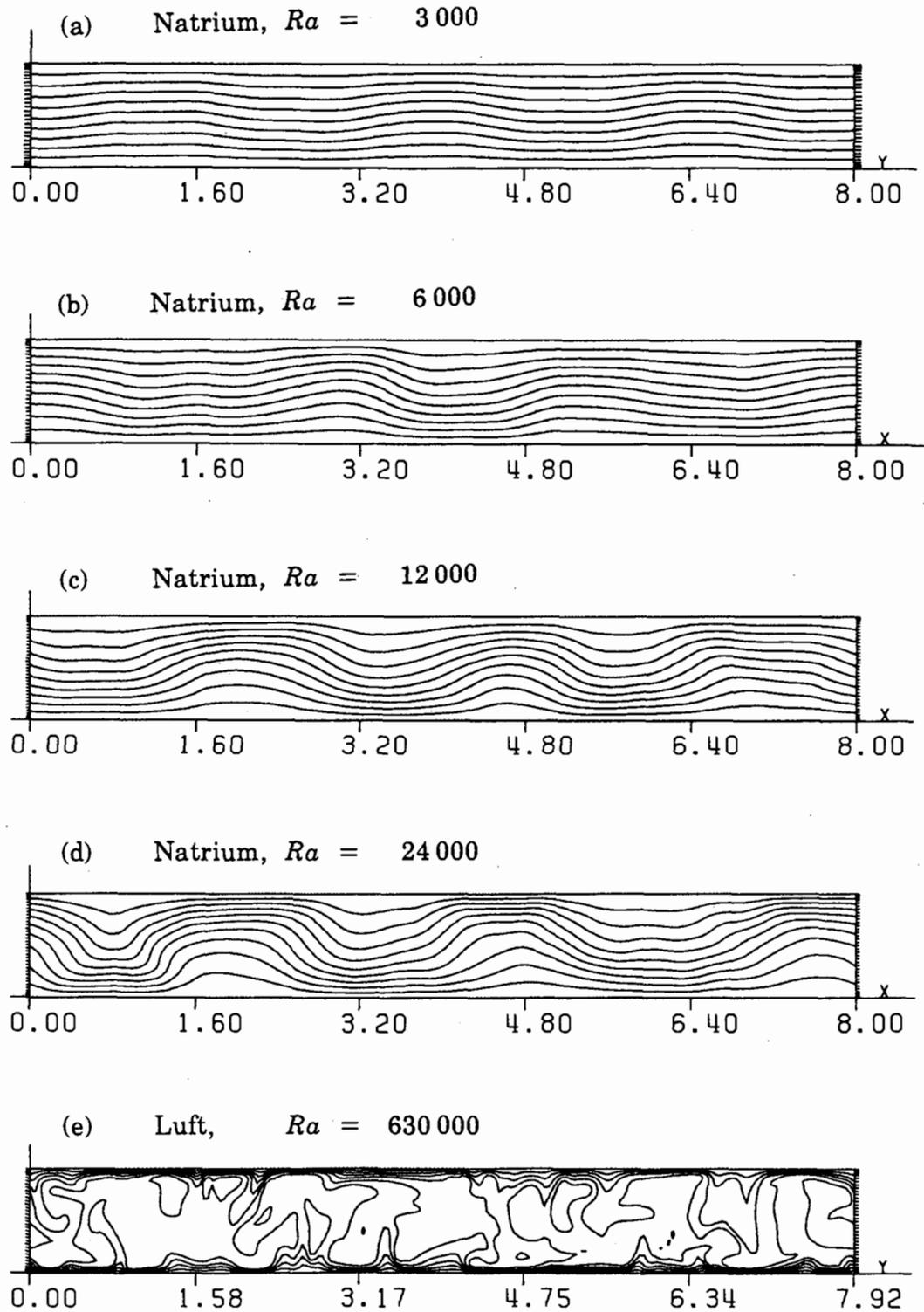


Abb. 5.28: Isolines des Temperaturfeldes (Inkrement: 0.1) für Natrium, (a) - (d), und Luft (e). Die Zeitpunkte entsprechen denen in Abb. 5.26 bzw. 5.27. (a): $Ra = 3\,000$, Ebene $x_1 = 4$; (b): $Ra = 6\,000$, Ebene $x_2 = 4$; (c): $Ra = 12\,000$, Ebene $x_2 = 4$; (d): $Ra = 24\,000$, Ebene $x_2 = 4$; (e): $Ra = 630\,000$, Ebene $x_1 = 4$.

Einen ersten Eindruck über die Strukturen im Geschwindigkeitsfeld in Natrium vermitteln die Isolinien der Vertikalgeschwindigkeit in einer Horizontalebene nahe der Kanalmitte in Abb. 5.29. Für die verschiedenen Rayleigh-Zahlen wird dabei jeweils derselbe Zeitpunkt betrachtet wie bei der Analyse des Temperaturfeldes in Abb. 5.26. Für die Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ fällt in Abb. 5.29(a) die Ähnlichkeit der großräumigen zweidimensional ausgerichteten Strukturen der Vertikalgeschwindigkeit zu denen im Temperaturfeld auf (vergl. Abb. 5.26(a)). Dies gilt auch noch für $Ra = 6\,000$, vergl. Abb. 5.29(b) und 5.26(b). Mit Erhöhung der Rayleigh-Zahl auf $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ löst sich die Vorzugsrichtung im Geschwindigkeitsfeld zunehmend auf und es treten immer kleinräumigere Strukturen in Erscheinung, Abb. 5.29(c, d).

Zum Vergleich mit den Ergebnissen für Natrium sind in Abb. 5.30 Isolinien der Vertikalgeschwindigkeit in der Ebene $x_3 = 0.516$ für die Simulation in Luft mit $Ra = 630\,000$ dargestellt. Auffallend ist die starke Ähnlichkeit der kleinskaligen Strukturen in dieser Simulation und der für Natrium mit $Ra = 6\,000$, vergl. Abb. 5.30 und 5.29(b). Diese Beobachtung bestätigt anschaulich das bereits in Kapitel 5.4.4 aus dem Vergleich eindimensionaler Energiespektren erhaltene Ergebnis, daß im Geschwindigkeitsfeld bei kleinräumigen Wirbeln eine Skalierung mit der Grashof-Zahl vorliegt.

Eine anschaulichere Vorstellung von den Strömungsvorgängen in Rayleigh-Bénard-Konvektion in Natrium und Luft vermitteln die Vektordarstellungen des Geschwindigkeitsfeldes in Abb. 5.31. In Natrium bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ ist das Geschwindigkeitsfeld gekennzeichnet durch sechs in etwa ellipsenförmige Wirbel, Abb. 5.31(a). Benachbarte Wirbel rotieren gegensinnig und sind mit ihren langen Halbachsen leicht gegeneinander geneigt. Bei $Ra = 6\,000$ hat sich der geordnete Wirbelpaarzustand - insbesondere in der linken Hälfte der betrachteten Schnittebene - weitgehend aufgelöst, Abb. 5.31(b). Auffallend ist ein Wirbel, der wesentlich höhere Geschwindigkeiten erkennen läßt, als sie im übrigen Kanal für diesen Zeitpunkt zu finden sind. Neben diesem und anderen großräumigen Wirbeln, deren Durchmesser etwa der Kanalhöhe entspricht, finden sich bei $Ra = 6\,000$ auch Wirbel kleinerer Abmessung. Auch für die Rayleigh-Zahl $Ra = 12\,000$ wird das Geschwindigkeitsfeld von Wirbeln dominiert, deren Durchmesser nahezu der Schichthöhe entspricht, Abb. 5.31(c). Für $Ra = 24\,000$ ist dies dagegen nur noch mit Einschränkung der Fall, Abb. 5.31(d). Hier findet man in weiten Bereichen - ebenso wie in der Simulation von Luft, Abb. 5.31(e) - ein kleinskaliges, stark verwirbeltes und ungeordnetes Geschwindigkeitsfeld.

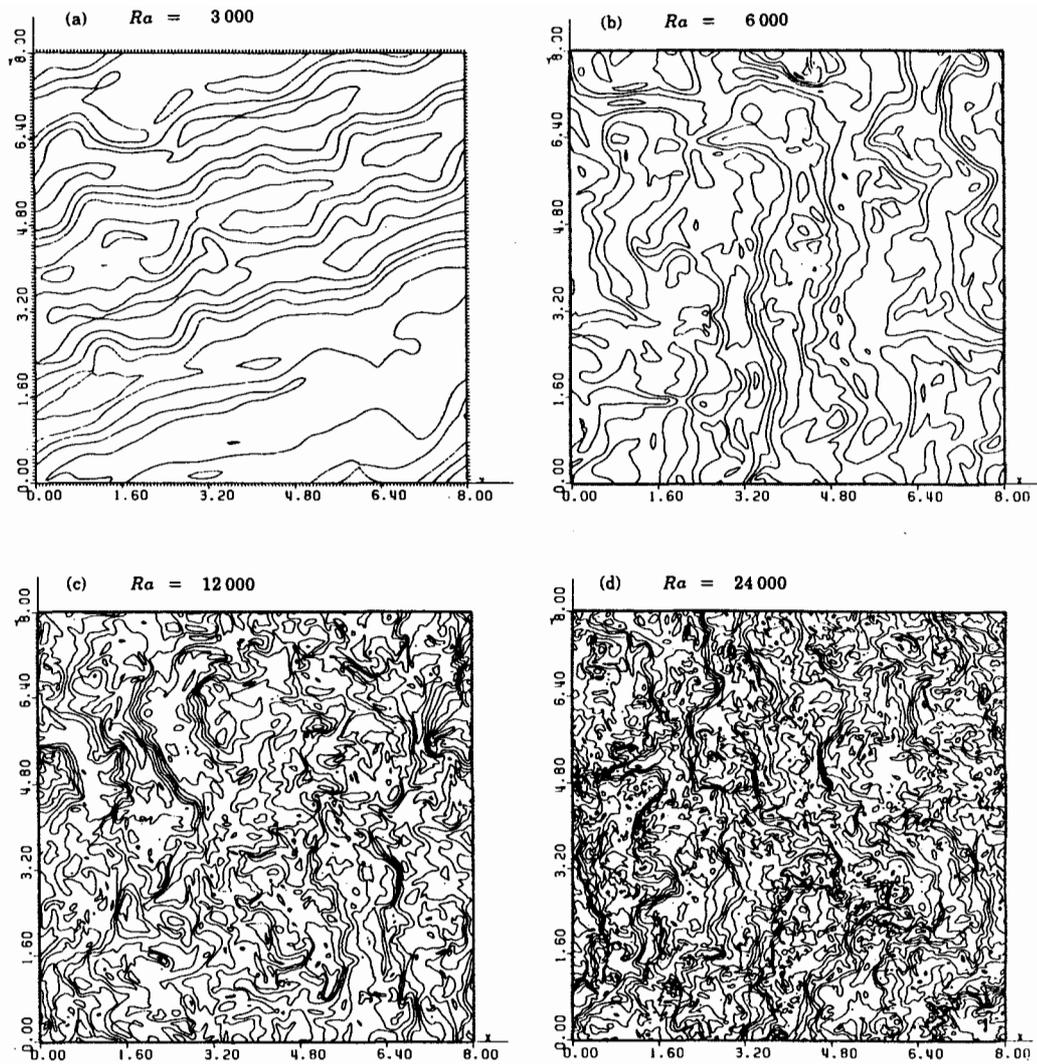


Abb. 5.29: Isolines der Vertikalgeschwindigkeit (Inkrement: 0.2) in Ebenen $x_3 = \text{konst.}$ nahe der Kanalmitte für Natrium (Zeitpunkte wie in Abb. 5.26). (a): $Ra = 3\,000$, $x_3 = 0.52$; (b): $Ra = 6\,000$, $x_3 = 0.52$; (c): $Ra = 12\,000$, $x_3 = 0.516$; (d): $Ra = 24\,000$, $x_3 = 0.516$.

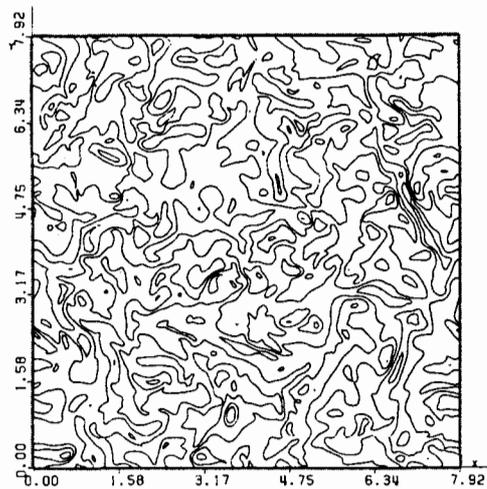


Abb. 5.30: Isolines der Vertikalgeschwindigkeit (Inkrement: 0.2) in Ebene $x_3 = 0.516$ für Luft, $Ra = 630\,000$. (Zeitpunkt wie in Abb. 5.27).

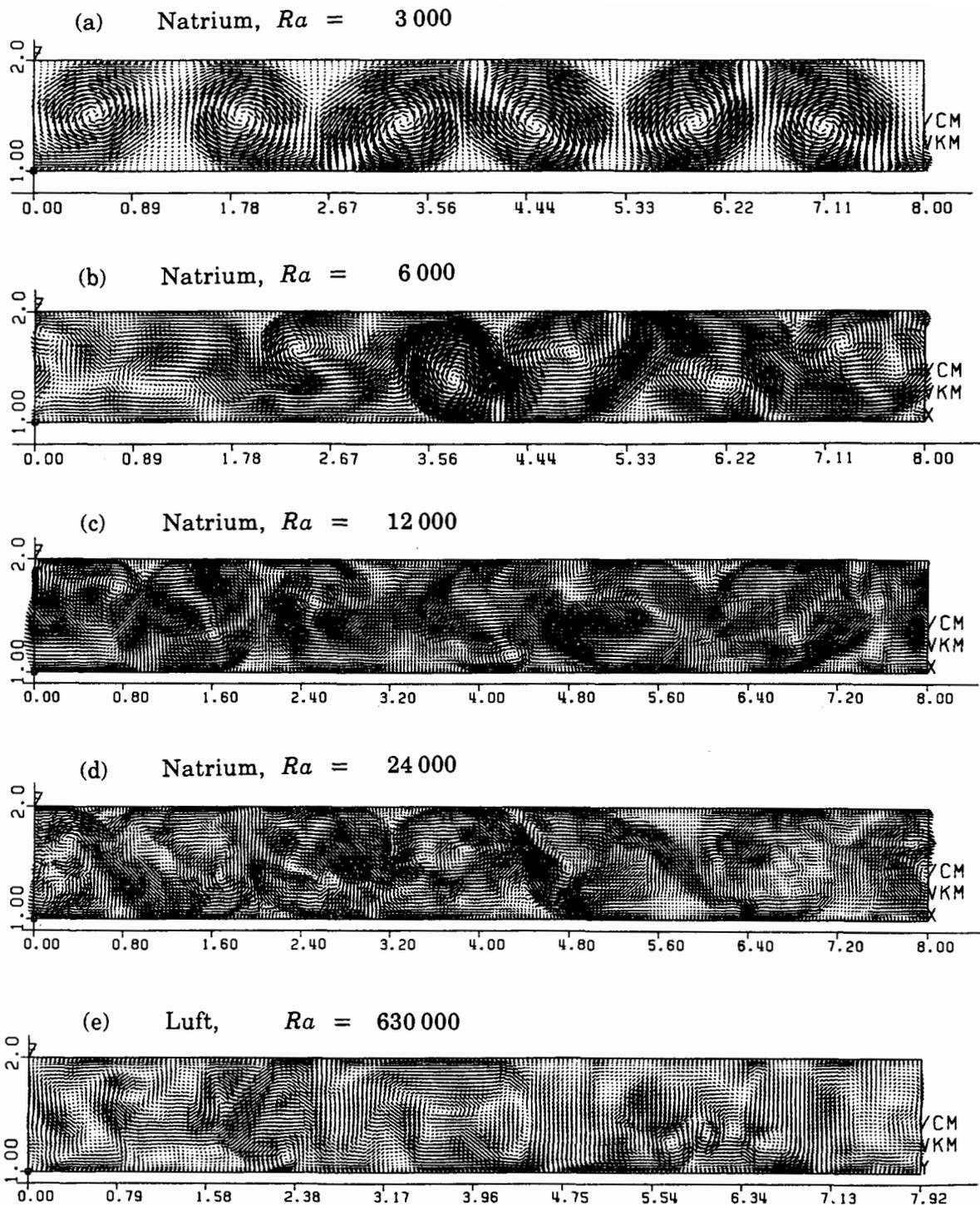


Abb. 5.31: Vektordarstellungen des Geschwindigkeitsfeldes in vertikalen Schnittebenen für Natrium (a) - (d), und Luft (e). Die Zeitpunkte entsprechen denen in Abb. 5.26 bzw. 5.27. (a): $Ra = 3\,000$, Ebene $x_1 = 4$; (b): $Ra = 6\,000$, Ebene $x_2 = 2$; (c): $Ra = 12\,000$, Ebene $x_2 = 4.8$; (d): $Ra = 24\,000$, Ebene $x_2 = 4$; (e): $Ra = 630\,000$, Ebene $x_1 = 2$.

Nachfolgend soll das Geschwindigkeitsfeld für Natrium bei $Ra = 3\,000$ mit dem in Abb. 5.31(a) erkennbaren geordneten Wirbelpaarzustand näher untersucht werden. Ein vergrößerter Ausschnitt in Abb. 5.32 läßt Einzelheiten des Strömungsfeldes besser erkennen. Es wird deutlich, daß die Wirbel nicht in sich geschlossen sind, sondern verschiedentlich ein Austausch von Fluid zwischen benachbarten Wirbeln erfolgt. Bei $x_2 \approx 2.7$ und $x_2 \approx 5$ sind an der unteren Wand und bei $x_2 \approx 1.3$ und $x_2 \approx 3.9$ an der oberen Wand Staupunkte zu erkennen. An den diesen Staupunkten gegenüberliegenden Wandbereichen finden sich Zonen relativer Ruhe. Hier bilden sich schwache, durch die großen Wirbel getriebene Sekundärwirbel aus. Diese sind besonders nahe der oberen Wand bei $x_2 \approx 2.5$ und $x_2 \approx 5$ gut zu erkennen.

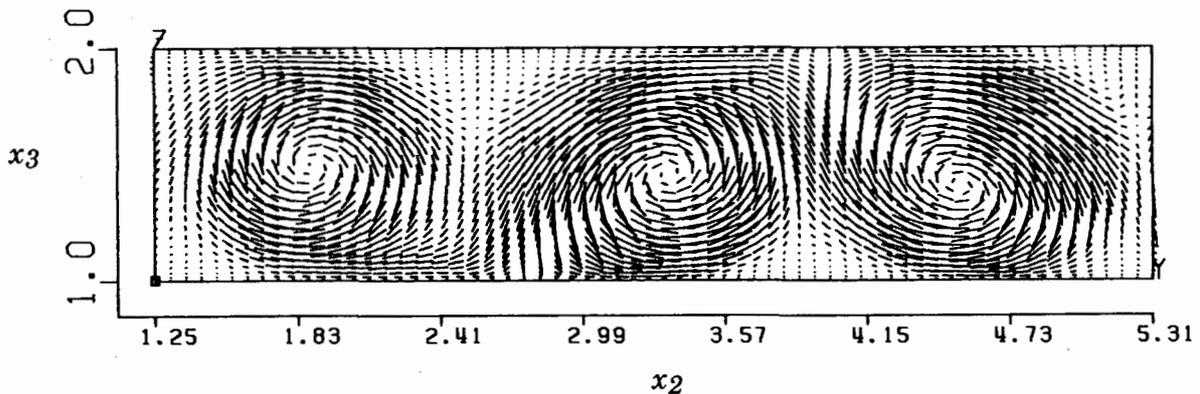


Abb. 5.32: Vektordarstellung des Geschwindigkeitsfeldes in der Ebene $x_1 = 4$ für Natrium, $Ra = 3\,000$ (Ausschnitt von Abb. 5.31(a)).

Das Geschwindigkeitsfeld in Abb. 5.32 mit den bei dieser Konvektionsart in der Literatur bisher nicht bekannten Sekundärwirbeln legt die Vermutung nahe, daß es sich bei der beobachteten Strömungsform um die von anderen theoretischen und experimentellen Untersuchungen für Flüssigmetalle vorhergesagten Trägheits- bzw. Schwungradkonvektion handeln könnte. Um dies näher zu untersuchen, werden momentane lokale Geschwindigkeitsprofile betrachtet. Abb. 5.33(a) zeigt zur Verdeutlichung nochmals das Vektorfeld nach Abb. 5.31(a) und die Linien, für die Geschwindigkeitsprofile ausgewertet werden. Das Profil der Vertikalgeschwindigkeit in x_2 -Richtung für die Position $x_1 = 4, x_3 = 0.48$ ist in Abb. 5.33(b) dargestellt. Danach existiert im Kern aller sechs Wirbel ein Bereich, in dem eine lineare Abhängigkeit der Vertikalgeschwindigkeit vom Abstand zum Wirbelzentrum gegeben ist. Ein ganz entsprechendes Ergebnis ergibt sich nach

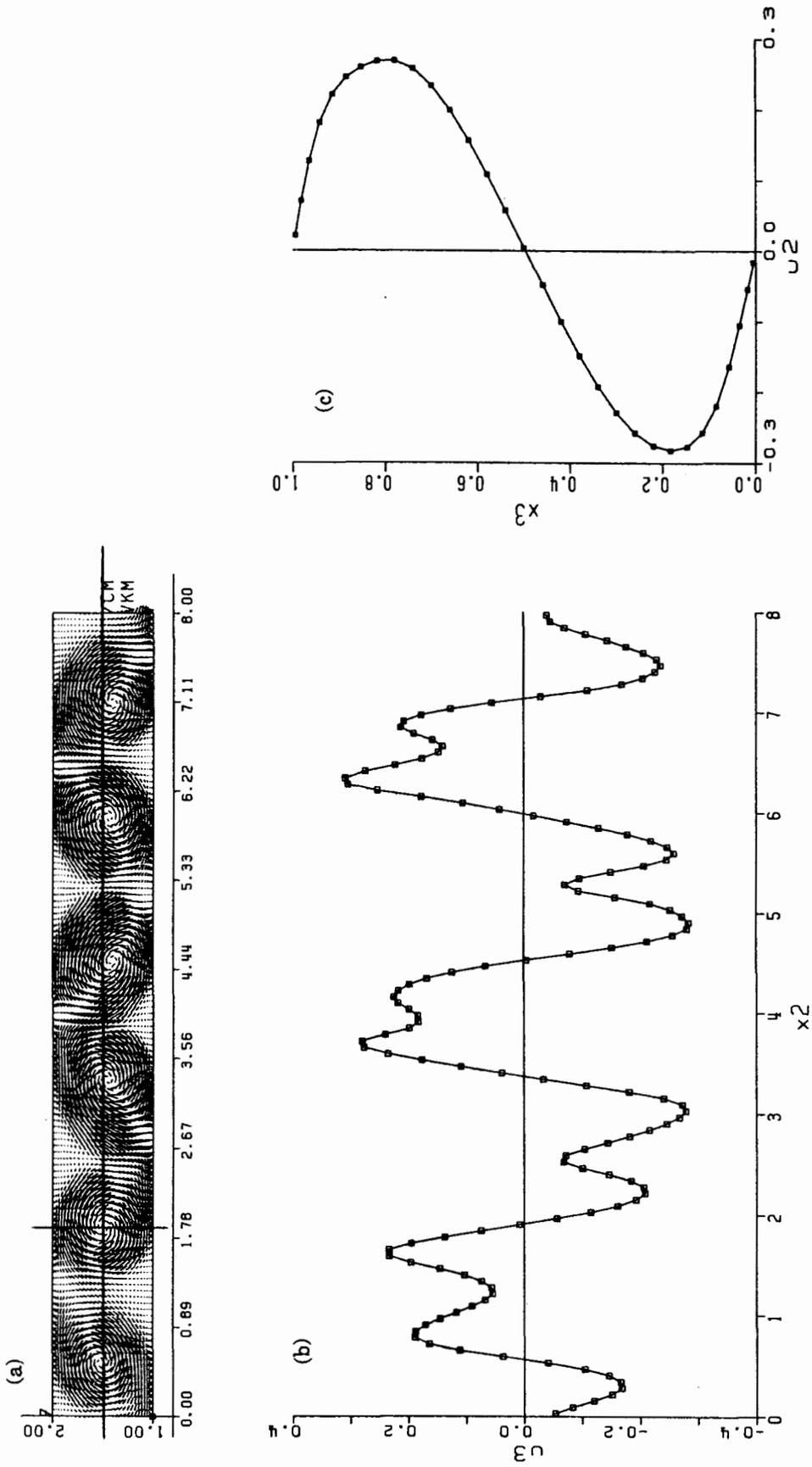


Abb. 5.33: Lokale momentane Geschwindigkeitsprofile für Natrium, $Ra = 3\,000$. (a): Vektordarstellung des Geschwindigkeitsfeldes in der Ebene $x_1 = 4$. Die Linien, an denen lokale Geschwindigkeitsprofile analysiert werden, sind eingezeichnet. (b): Vertikalgeschwindigkeit u_3 als Funktion von x_2 für die Ebenen $x_1 = 4$ und $x_3 = 0.48$. (c): Horizontalgeschwindigkeit u_2 als Funktion von x_3 für die Ebenen $x_1 = 4$ und $x_2 = 1.875$.

Abb. 5.33(c) für das vertikale Profil der Geschwindigkeitskomponente in x_2 -Richtung an der Position $x_1 = 4$, $x_2 = 1.875$. Damit handelt es sich bei dem betrachteten Wirbel (und auch bei den übrigen Wirbeln, in Abb. 5.33(a)) um Starrkörperwirbel. Der Bereich, in dem das Fluid wie ein Starrkörper rotiert, ist bei den verschiedenen Wirbeln unterschiedlich ausgeprägt, beträgt aber typischerweise 25 bis 50 Prozent der Schichthöhe. Eine entsprechende Analyse lokaler Geschwindigkeitsprofile für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ und die Schnittebene nach Abb. 5.31(b) ergibt, daß dort lediglich ein Starrkörperwirbel mit Zentrum bei $x_1 \approx 3.8$ vorliegt. Für die Rayleigh-Zahlen $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ sind in Abb. 5.31(c) und 5.31(d) bereits von der rein visuellen Analyse her keine Starrkörperwirbel auszumachen.

Zur weiteren Aufklärung der räumlichen Strukturen der Konvektion werden nachfolgend dreidimensionale Analysemethoden herangezogen [siehe auch Grötzbach & Wörner (1993)]. Dazu wird die interaktive Visualisierungssoftware AVS (Advanced Visualization System) verwendet, die neben zahlreichen anderen Optionen die Darstellung einer Variablen als räumliche Isofläche erlaubt. Zusätzlich kann als Farbcode auf diese Isofläche eine weitere Variable aufgetragen werden. Abb. 5.34(a) zeigt für Natrium und die Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ die Isofläche einer kleinen positiven Vertikalgeschwindigkeit mit der Temperatur als Farbinformation. Die Isoflächen trennen damit die Bereiche mit positiver Vertikalgeschwindigkeit (innerhalb der Fläche) von denen mit negativem u_3 . Um das Verständnis von Abb. 5.34(a) zu erleichtern, sind in der Vektordarstellung des Geschwindigkeitsfeldes in der Ebene $x_1 = 4$ in Abb. 5.34(b) die Bereiche mit positivem und negativem u_3 durch durchgezogene Linien getrennt. Demnach charakterisieren die seitlichen Begrenzungen der großräumigen zweidimensionalen Strukturen in Abb. 5.34(a) den räumlichen Verlauf der Achsen der einzelnen Starrkörperwirbel. Die durch die Starrkörperwirbel angetriebenen Sekundärwirbel äußern sich nahe der oberen Wand in dünnen schlauchförmigen Isoflächen, die in einen Bereich mit sonst negativer Vertikalgeschwindigkeit eingebettet sind. Entsprechend haben die um eine halbe Wellenlänge versetzten Sekundärwirbel nahe der unteren Wand in der in Abb. 5.34(a) gewählten Darstellungsweise Aussparungen der dortigen Isoflächen zur Folge. In der viskosen Grenzschicht der unteren Wand sind vereinzelt Speichenstrukturen zu erkennen. Hier steigt Fluid mit kleiner Geschwindigkeit aus der Grenzschicht auf. Entsprechende Strukturen in der viskosen Grenzschicht der oberen Wand, also langsam absteigendes Fluid, äußern sich in der Isofläche in Abb. 5.34(a) in senkrecht zur Vorzugsrichtung verlaufenden schmalen Aussparungen.

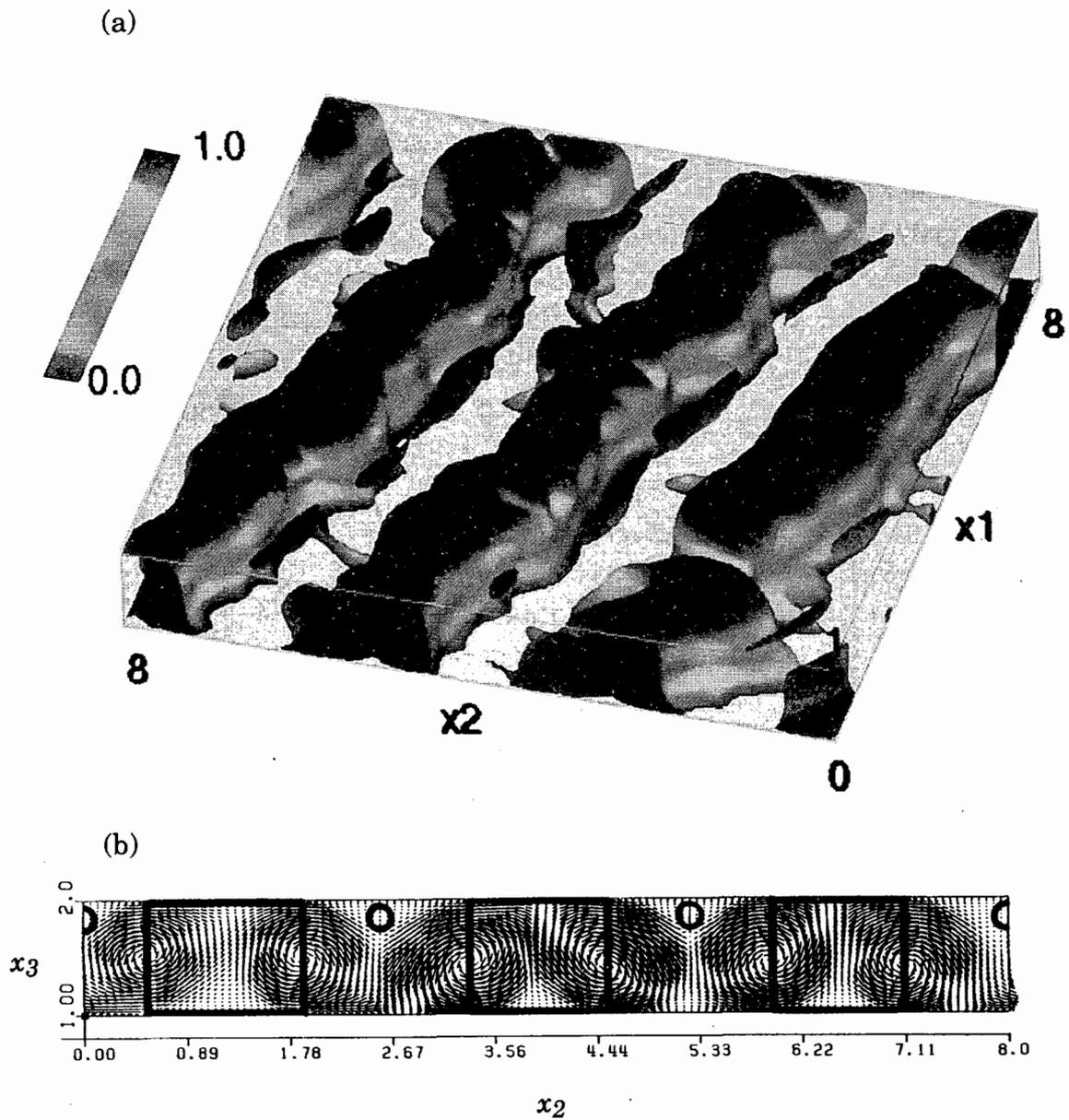


Abb. 5.34: (a): Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit für den Wert $u_3 = 0.001$ mit der Temperatur als Farbinformation (rot: $T = 1$, blau: $T = 0$) für Natrium, $Ra = 3\,000$, $t = 855.24$.

(b): Vektordarstellung des Geschwindigkeitsfeldes in der Ebene $x_1 = 4$ für Natrium, $Ra = 3\,000$, $t = 855.24$. Die durchgezogenen Linien trennen Bereiche mit positiver/negativer Vertikalgeschwindigkeit.

Eine äquivalente Visualisierung der Simulationsergebnisse für Natrium und die Rayleigh-Zahl $Ra = 12\,000$ in Abb. 5.35 verdeutlicht, daß das Geschwindigkeitsfeld auch bei dieser Rayleigh-Zahl eine Vorzugsrichtung besitzt und ebenfalls durch großräumige Rollenstrukturen dominiert ist. Allerdings sind die Rollen gegenüber der Simulation mit $Ra = 3\,000$ wesentlich stärker verformt. Ebenso hat die Anzahl der Speichen in den viskosen Grenzschichten zugenommen. Der höhere Turbulenzgrad äußert sich aber nicht allein in dem mehr dreidimensionalen Charakter des Geschwindigkeitsfeldes, sondern auch durch das Auftreten wesentlich kleinerer Strukturen. Die noch in weiten Bereichen von Abb. 5.35 vorzufindenden Sekundärrollen lassen vermuten, daß auch bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 12\,000$ die Trägheitskonvektion noch von gewisser Bedeutung ist. Betrachtet man die entsprechende Visualisierung des Strömungsfeldes für Natrium und die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$, so stellt man fest, daß sich der Charakter des Geschwindigkeitsfeldes gegenüber der Simulation mit $Ra = 12\,000$ nicht grundlegend geändert hat. Auch wenn die stärkere Gliederung der Isofläche auf das Auftreten kleinerer Wirbel schließen läßt, ist das Geschwindigkeitsfeld auch bei $Ra = 24\,000$ offensichtlich in weiten Bereichen durch großräumige Rollenstrukturen geprägt.

Die ganz unterschiedlichen Längenmaßstäbe, die im Geschwindigkeits- und Temperaturfeld in Flüssigmetallen anzutreffen sind, veranschaulicht Abb. 5.37. Hier ist für $Ra = 12\,000$ auf der Isofläche zum Temperaturwert $T = 0.75$ als Farbcode die Vertikalgeschwindigkeit aufgetragen. Während das Temperaturfeld ausschließlich durch langwellige Fluktuationsanteile kleiner Amplitude geprägt ist, weist das Geschwindigkeitsfeld wesentlich kleinskaligere Strukturen auf. Deutlich zu erkennen sind die nur im Bereich der viskosen Grenzschicht zu beobachtenden Querspeichen. Sie stellen in einem sonst durch Abwärtsbewegung dominierten Bereich relativ schmale Zonen dar, in denen Fluid von der unteren Wand ablöst und aufsteigt.

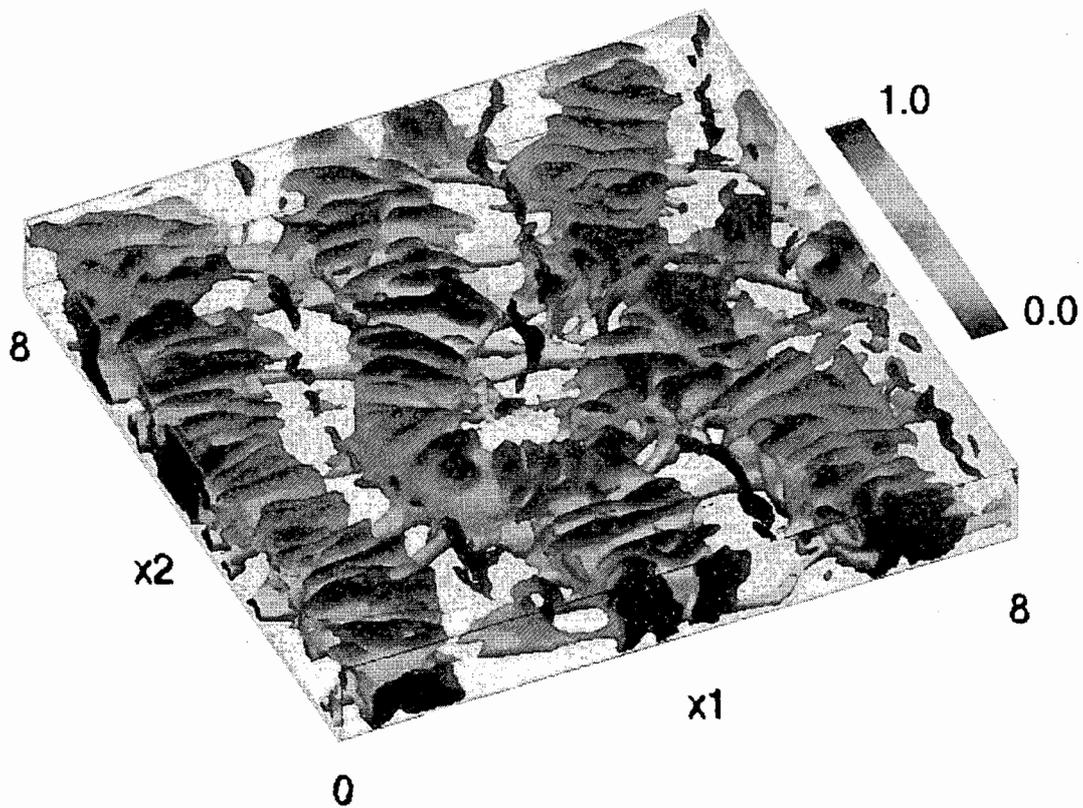


Abb. 5.35: Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit für den Wert $u_3 = 0.05$ mit der Temperatur als Farbinformation (rot: $T = 1$, blau: $T = 0$) für Natrium, $Ra = 12\ 000$, $t = 429.5$.

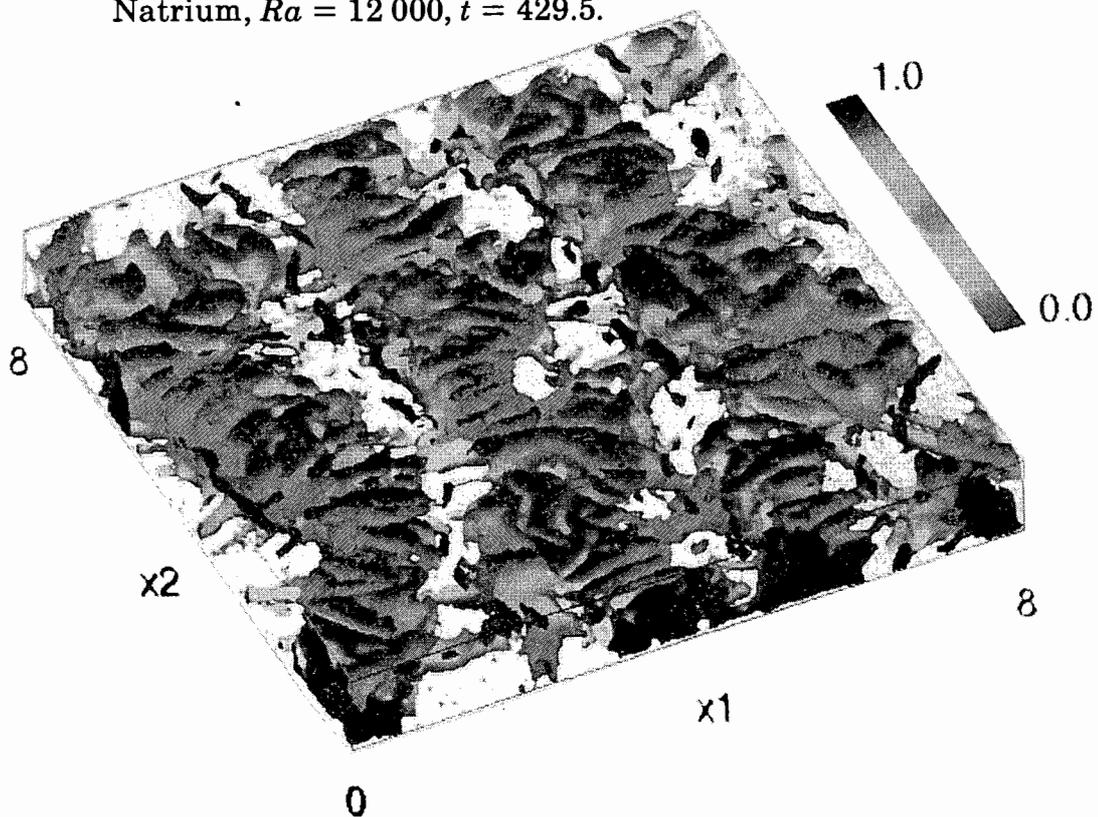


Abb. 5.36: Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit für den Wert $u_3 = 0.05$ mit der Temperatur als Farbinformation (rot: $T = 1$, blau: $T = 0$) für Natrium, $Ra = 24\ 000$, $t = 478.7$.

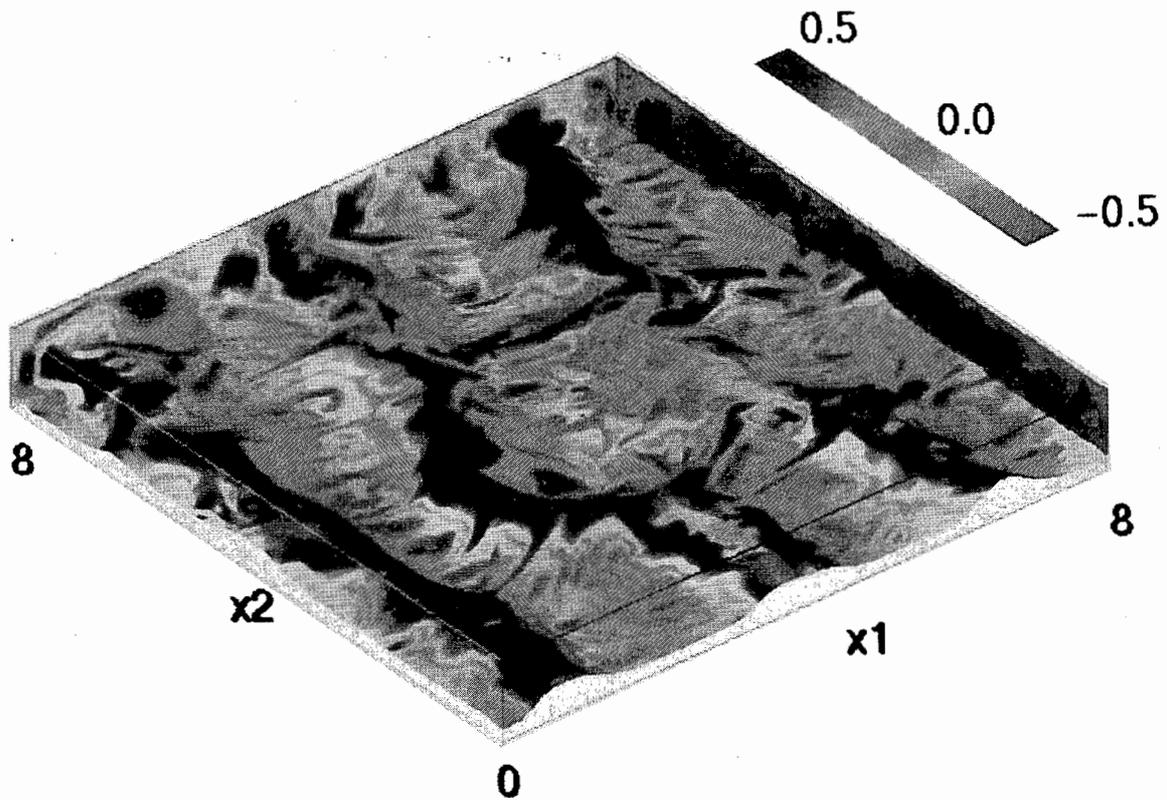


Abb. 5.37: Isofläche der Temperatur für den Wert $T = 0.75$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation (rot: aufwärts, blau: abwärts) für Natrium, $Ra = 12\,000$, $t = 429.5$.

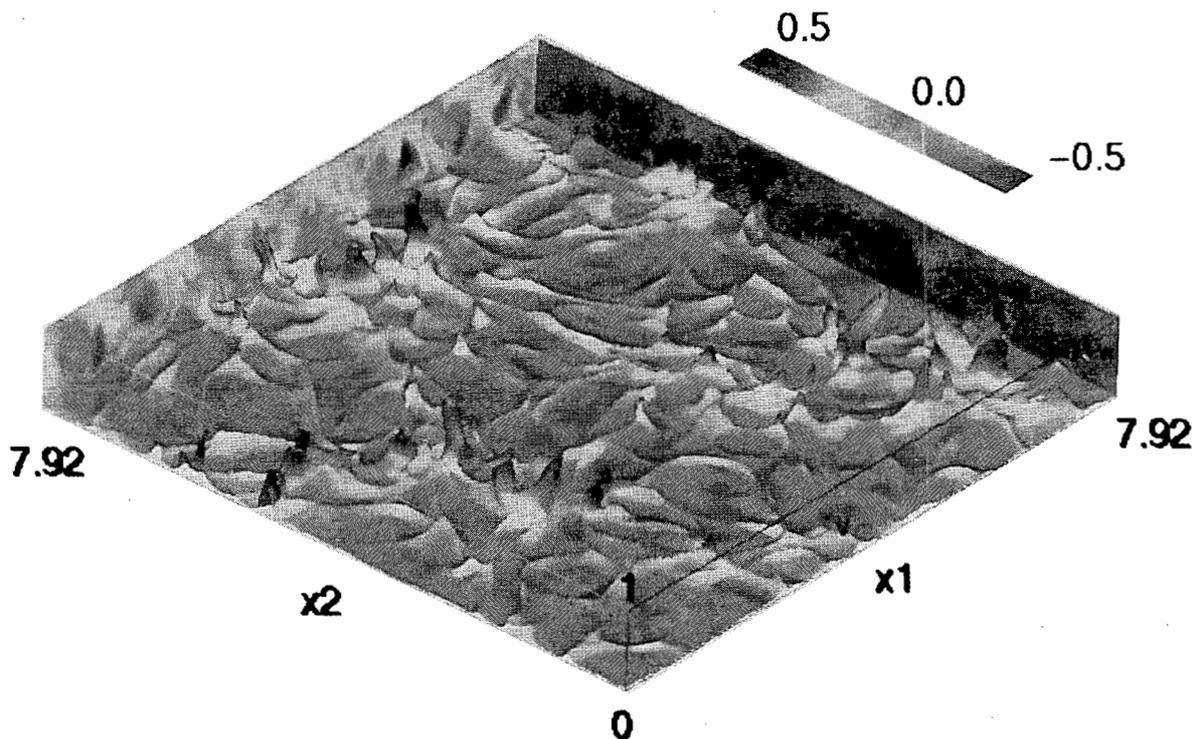


Abb. 5.38: Isofläche der Temperatur für den Wert $T = 0.75$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation (rot: aufwärts, blau: abwärts) für Luft, $Ra = 630\,000$, $t = 169.55$.

Abb. 5.38 zeigt die Isofläche zum Temperaturwert $T = 0.75$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbcode für die Simulation von Luft. Da das Temperaturfeld in Luft im Gegensatz zu den Natriumfällen den typischen Grenzschichtcharakter besitzt, ist der Abstand der Isofläche zur unteren Wand im Mittel nur sehr gering. Die Abbildung läßt erkennen, daß großräumige Gebiete existieren, in denen die Vertikalgeschwindigkeit nahezu null ist. Diese Gebiete werden durchzogen von zahlreichen dünnen "Graten" oder Speichen mit langsam aufsteigendem Fluid. Diese Speichen stellen eine Verbindung zwischen verschiedenen Zentren oder "Knoten" dar, die durch eine Ansammlung von Auftriebsfahnen mit hoher Vertikalgeschwindigkeit gekennzeichnet sind.

Das beschriebene Konvektionsmuster mit dünnen Speichen und Knotenstrukturen in Wandnähe ist aus verschiedenen direkten numerischen Simulationen turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion - allerdings bei niedrigeren Rayleigh-Zahlen - bekannt. Im einzelnen wurden sie von Moeng & Rotunno (1990) für $Pr = 1$, $Ra = 381\,000$ und von Grötzbach (1990a) und Christie & Domaradzki (1993) für Luft bei $Ra = 381\,000$ bzw. $Ra = 250\,000$ gefunden. Für Flüssigmetalle wird das Auftreten ganz ähnlicher Speichenstrukturen dagegen erstmals vorhergesagt. Experimentell nachgewiesen wurden derartige Speichenstrukturen bisher nur für Wasser ($Pr = 7$) und Silikonöl ($Pr = 200$) und Rayleigh-Zahlen in der Größenordnung $Ra = 10^7$ [Kawara et al. (1990)]. Die Visualisierung dieser Strukturen erfolgte dabei mit Hilfe von Flüssigkristallen, die vom Fluid mittransportiert werden und in Abhängigkeit der Temperatur ihre Farbe ändern.

5.5.2 Mechanismen der Konvektion

Bis hier wurden Analysen der Simulationsergebnisse für die verschiedenen Rayleigh-Zahlen jeweils nur anhand eines typischen Zeitpunktes durchgeführt. Nachfolgend werden zur Aufklärung der dynamischen Vorgänge sowie der Mechanismen der Konvektion für verschiedene Rayleigh-Zahlen aufeinanderfolgende Zeitpunkte betrachtet und Filme von Simulationsergebnissen diskutiert [siehe auch Grötzbach & Wörner (1993)].

In Abb. 5.39 ist für Natrium und die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ (Fall NA6H) für vier verschiedene Zeitpunkte in bekannter Darstellungsweise das Temperaturfeld in der Ebene $x_3 = 0.5$ und das Geschwindigkeitsfeld in der Ebene $x_2 = 4$ wieder-

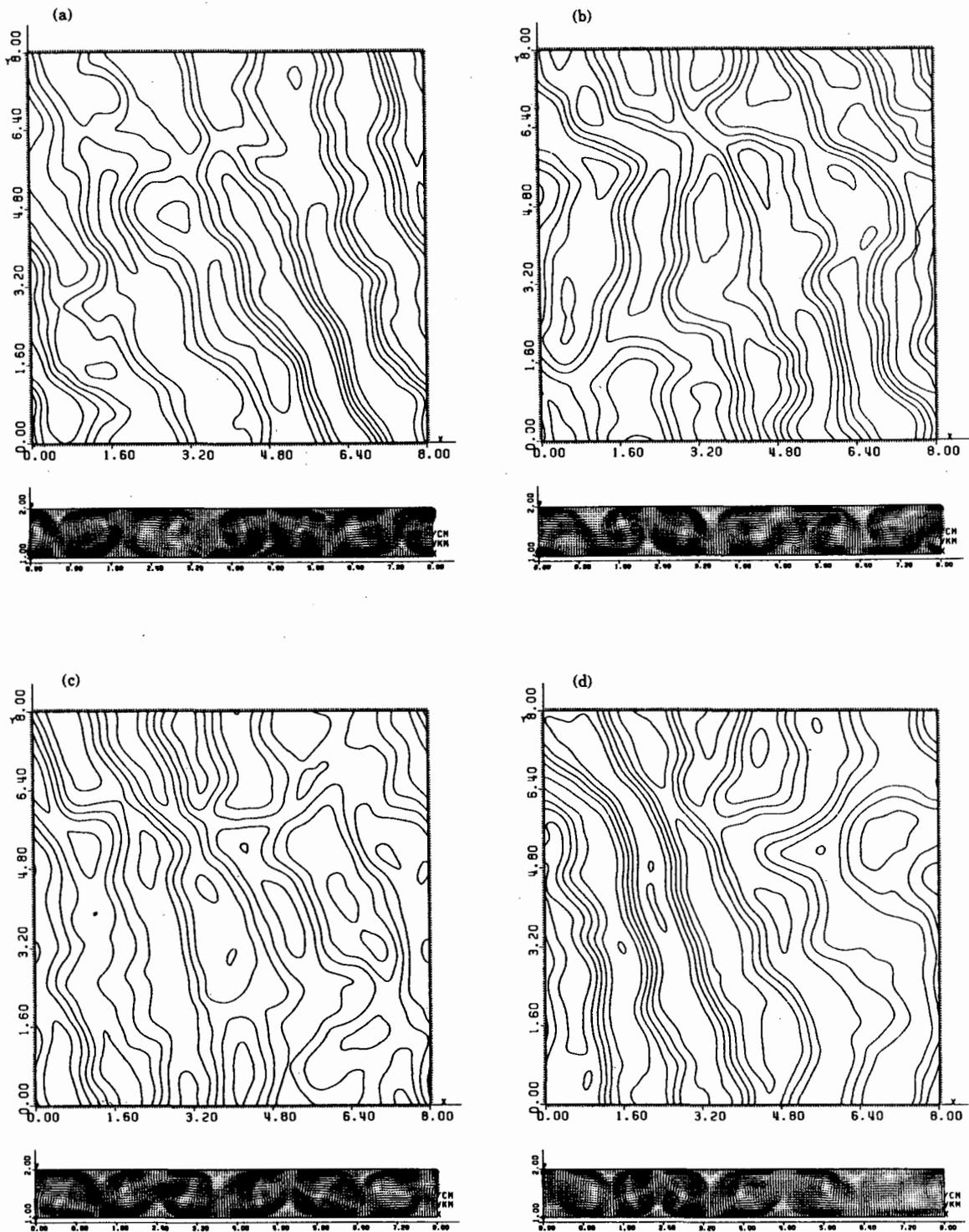


Abb. 5.39: Isofläche des Temperaturfeldes (Inkrement: 0.05) für die Ebene $x_3 = 0.5$ und Vektordarstellung des Geschwindigkeitsfeldes für die Ebene $x_2 = 4$ für Natrium, $Ra = 6\,000$ (Fall NA6H) und verschiedene Zeitpunkte. (a): $t = 859.3$, (b): $t = 873.5$, (c): $t = 888.1$, (d): $t = 902.3$. Das Intervall zwischen den einzelnen Zeitpunkten entspricht im Experiment von Kek (1989) mit den Schichthöhen $\hat{h} = 15.5$ mm und $\hat{h} = 46.5$ mm ca. 9 s bzw. ca. 80 s Realzeit.

gegeben. Zum Zeitpunkt $t = 859.3$ (Abb. 5.39(a)) findet man in der linken Kanalhälfte ein relativ ungeordnetes Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld. Das Temperaturfeld in der rechten Kanalhälfte zum selben Zeitpunkt ist dagegen relativ geordnet und das Geschwindigkeitsfeld läßt zwei Starrkörperwirbelpaare erkennen. Über die entsprechende Darstellung der Simulationsergebnisse für die Zeitpunkte $t = 873.5$ und $t = 888.1$ (Abb. 5.39(b, c)) wird im Temperaturfeld die zunehmende Ordnungsbildung in der bisher ungeordneten linken Kanalhälfte sichtbar. Zum Zeitpunkt $t = 902.3$ (Abb. 5.39(d)) schließlich haben sich die Verhältnisse gegenüber dem ersten der betrachteten Zeitpunkte umgekehrt. Ein im wesentlichen zweidimensionales Temperaturfeld und Starrkörperwirbel hoher kinetischer Energie findet man jetzt in der linken Kanalhälfte. Ein stark dreidimensionales Temperaturfeld und nur relativ kleine Geschwindigkeiten sind jetzt in der rechten Hälfte des Kanals zu beobachten. Die diskutierten Ergebnisse lassen auf einen engen Zusammenhang zwischen der Trägheitskonvektion und dem Charakter des Temperaturfeldes schließen. Dieser ist offensichtlich derart, daß sich Starrkörperwirbel nur in Bereichen ausbilden, in denen das Temperaturfeld weitgehend zweidimensional ist und nur geringe dreidimensionale Störungen aufweist.

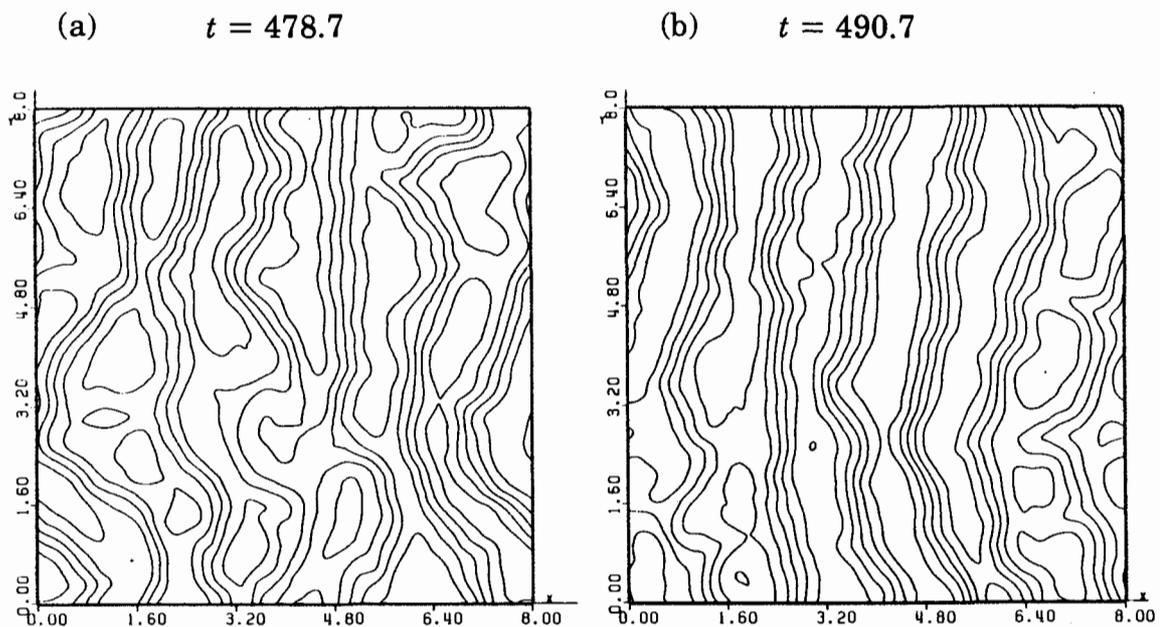


Abb. 5.40: Isolinien des Temperaturfeldes (Inkrement: 0.1) in der Ebene $x_3 = 0.5$ für Natrium, $Ra = 24\,000$ (a): $t = 478.7$, (b): $t = 490.7$. Die Zeitdifferenz zwischen beiden Zeitpunkten entspricht im Experiment von Kek (1989) mit der Schichthöhe $\hat{h} = 46.5$ mm ca. 47 s.

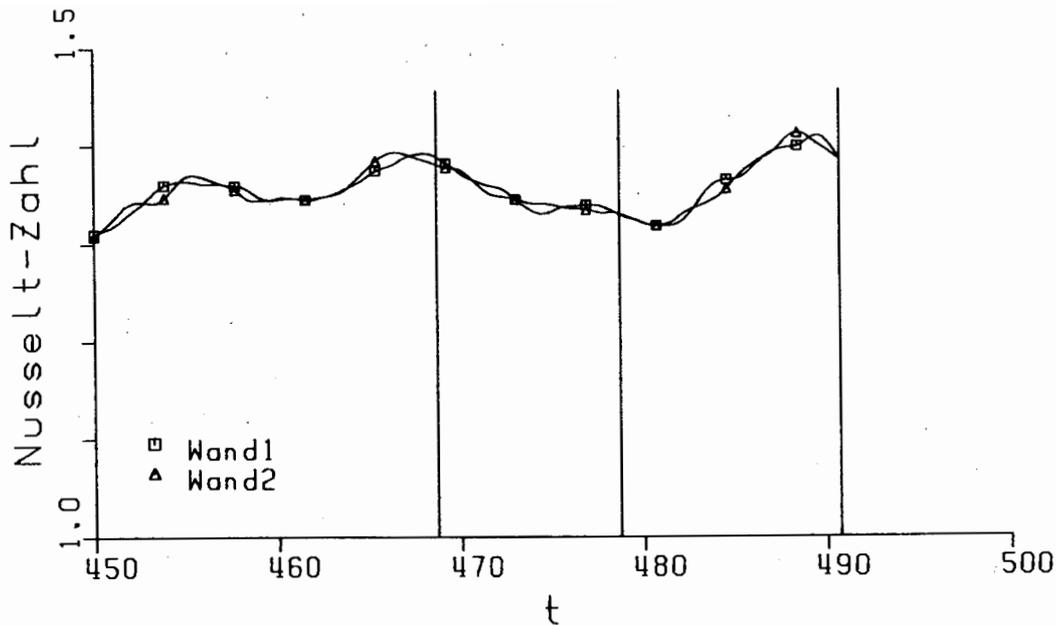


Abb. 5.41: Nusselt-Zahl an unterer und oberer Wand als Funktion der Problemzeit für Natrium, $Ra = 24\ 000$. Die senkrechten Linien kennzeichnen die Zeitpunkte aus Abb. 5.26(d) und Abb. 5.40.

Ähnliche, langsam ablaufende, aperiodische Veränderungen im Temperaturfeld, wie sie Abb. 5.39 zeigt, sind auch in der Simulation für die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\ 000$ zu beobachten. Dies belegt Abb. 5.40, wo für zwei unterschiedliche Zeitpunkte Isolinien des Temperaturfeldes in der Kanalmittelebene $x_3 = 0.5$ wiedergegeben sind. Das Temperaturfeld zum Zeitpunkt $t = 478.7$ (Abb. 5.40(a)) läßt zwar eine Vorzugsrichtung erkennen, ist aber insgesamt deutlich dreidimensional. Zum Zeitpunkt $t = 490.7$ hat sich dagegen in weiten Bereichen ein im wesentlichen zweidimensionales Temperaturfeld entwickelt.

Abb. 5.41 zeigt für diese Simulation den Verlauf der Nusselt-Zahl an der unteren und oberen Wand als Funktion der Problemzeit. Die senkrechten Linien markieren die Zeitpunkte, für die in Abb. 5.26(d) und Abb. 5.40(a, b) Isolinien des Temperaturfeldes in der Ebene $x_3 = 0.5$ analysiert wurden. Demnach hat der Charakter des Temperaturfeldes einen wesentlichen Einfluß auf die Effektivität der konvektiven Wärmeübertragung. Zweidimensionale Konvektionsformen scheinen dabei die Nusselt-Zahl zu maximieren. Dasselbe trifft auf die in der Strömung gespeicherte kinetische Energie zu, die hier nicht dargestellt ist, aber qualitativ einen ähnlichen Verlauf wie die Nusselt-Zahlen in Abb. 5.41 hat. Die Maximierung des Wärmetransportes durch zweidimensionale Konvektionsmuster ist vom Ver-

gleich zwei- und dreidimensionaler numerischer Simulationen her bekannt [Grötzbach (1982), Clever & Busse (1987)]. Physikalisch ist dieser Sachverhalt durchaus plausibel, da im zweidimensionalen Fall keine kinetische Energie in die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Rollenachse - die nicht direkt zum Wärmetransport beiträgt, sondern nur das zweidimensionale Konvektionsmuster stören würde - gesteckt werden kann.

Ein weitergehendes Verständnis der dynamischen Vorgänge in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion wird durch die Verfilmung der zeitabhängigen Simulationsergebnisse erreicht. Dabei werden zwei unterschiedliche Wege beschritten. Die Visualisierung einer beliebigen Variablen als farbig ausgefüllte Konturliniendarstellung in einer beliebigen Schnittebene erfolgt mit Hilfe der DISSPLA-Software, die von perspektivisch dargestellten räumlichen Isoflächen mit Hilfe von AVS. Die Verfilmung von Simulationsergebnissen beschränkt sich auf die Rayleigh-Zahl $Ra = 12\,000$ für Natrium sowie auf die Simulation für Luft mit $Ra = 630\,000$.

Für die Natrium-Simulation mit $Ra = 12\,000$ wurden insgesamt 92 Zeitpunkte berücksichtigt. Dies entspricht bei 5-fach-Belichtung und 24 Bilder pro Sekunde einer Filmdauer von ca. 19 s pro Sequenz. In Bezug auf das Experiment von Kek (1989) mit der Schichthöhe $\hat{h} = 46.5$ mm entspricht die verfilmte Problemzeit ca. 95 s, so daß der Film die realen Verhältnisse in diesem Experiment mit dem Zeitrafferfaktor fünf wiedergibt. Nachfolgend werden Ergebnisse der Verfilmung anhand der einzelnen Sequenzen erläutert.

Die Verfilmung des Temperaturfeldes in der Horizontalebene $x_3 = 0.5$ bestätigt zum einen die schon von der Analyse eines einzelnen Zeitpunktes in Abb. 5.26(c) her bekannte Dominanz großräumiger Strukturen. Zum anderen zeigt sie, daß im Temperaturfeld auch bei der zeitlichen Entwicklung niedrige Frequenzen vorherrschen (vergl. Abschnitt 5.4.5). So laufen zeitliche Veränderungen der das Temperaturfeld dominierenden großräumigen Bandstrukturen sehr langsam ab. In Entsprechung zu den in Abb. 5.39 für $Ra = 6\,000$ und Abb. 5.40 für $Ra = 24\,000$ gefundenen Vorgängen zeigt die Verfilmung der Ergebnisse für $Ra = 12\,000$ Veränderungen der Bandstrukturen in Form von seitlichen Auslenkungen der einzelnen Bänder, der Ausbildung von "Brücken" zwischen benachbarten Bändern und die neuerliche zweidimensionale Ausrichtung des Temperaturfeldes in zuvor stark gestörten Bereichen. In der Verfilmung des Temperaturfeldes in einer senkrecht zur Vorzugsrichtung orientierten Vertikalebene bei $x_2 = 2.56$ äußern sich die oben diskutierten Vorgänge in einer horizontalen Verschiebung der

nach oben bzw. unten ausgelenkten Isolinien (vergl. Abb. 5.28(c)) sowie in einer Abschwächung bzw. Verstärkung der Auslenkung der Isolinien.

Eine weitere Sequenz zeigt die zeitliche Entwicklung des Feldes der kinetischen Turbulenzenergie für die Vertikalebene $x_2 = 2.56$ und den Bereich $0 \leq x_1 \leq 4$. Die Szene verdeutlicht den turbulenten Charakter der Strömung und belegt, daß dynamische Vorgänge im Geschwindigkeitsfeld in Natrium wesentlich rascher ablaufen als im Temperaturfeld. Zu verschiedenen Zeitpunkten lassen sich Strukturen erkennen, die auf die Trägheitskonvektion hindeuten. So zeigt Abb. 5.42 in der rechten Bildhälfte zwei Wirbel, deren Durchmesser nahezu der Schichthöhe entspricht und deren kinetische Energie vom Wert null im Wirbelzentrum radial bis auf einen Maximalwert ansteigt. Solche Strukturen, die sich als Starrkörperwirbel interpretieren lassen, sind allerdings nur sehr kurzzeitig existent.

Die zeitliche Entwicklung der Vertikalgeschwindigkeit in einer Horizontalebene mit etwa 20 % Abstand von der unteren Wand ist Gegenstand einer weiteren Szene. Eine Vorstellung von den zu beobachtenden großräumigen Bandstrukturen und den diese verbindenden Speichen vermittelt Abb. 5.43. Die Filmszene läßt erkennen, daß zeitliche Veränderungen des Grundmusters nur langsam und mit der Zeitskala des Temperaturfeldes ablaufen. Wesentlich rascher erfolgen dagegen die Ausbildung, Translation und Auflösung der Speichen. Diesen Sachverhalt bestätigt auch die Verfilmung der Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit nach Abb. 5.35. In dieser Szene wird darüber hinaus deutlich, daß die dünnen schlauchartigen Isoflächen nahe der oberen Wand, die die Sekundärwirbel kennzeichnen, lokal nur sehr kurzzeitig existieren.

Bei der Visualisierung der Simulationsergebnisse für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft mit $Ra = 630\,000$ wurden 72 aufeinanderfolgende Zeitpunkte berücksichtigt. Für jeden Zeitpunkt wurden dabei mit der Visualisierungssoftware AVS je drei verschiedene Szenen berechnet. Die Filmdauer je Szene ist ca. 15 s. Das verfilmte Zeitintervall entspricht im Experiment von Deardorff & Willis (1967) ebenfalls ca. 15 s, so daß der Film praktisch in Realzeit eine Vorstellung von den in diesem Experiment ablaufenden dynamischen Vorgängen vermittelt. Bei den Szenen handelt es sich um dreidimensionale Darstellungen von Isoflächen, in denen sehr feine räumliche Strukturen auftreten. Um diese Strukturen mit dem Videoband auflösen zu können, wurde in den Szenen jeweils nur ein Viertel des Kanals ($0 \leq x_{1,2} \leq 4$, $0 \leq x_3 \leq 1$) berücksichtigt. Die erste Szene zeigt den Schnitt durch das Temperaturfeld in einer Horizontalebene mit 4.25% Abstand von der unteren Wand. In dieser Darstellung zeichnen sich deutlich die Knoten

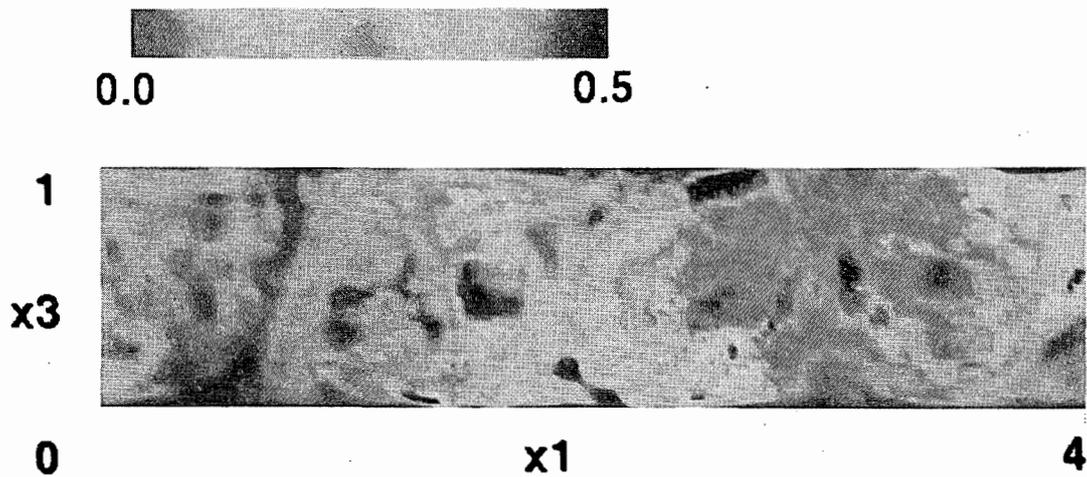


Abb. 5.42: Kinetische Turbulenzenergie in der Ebene $x_2 = 2.56$ und dem Bereich $0 \leq x_1 \leq 4$ für Natrium, $Ra = 12\,000$.

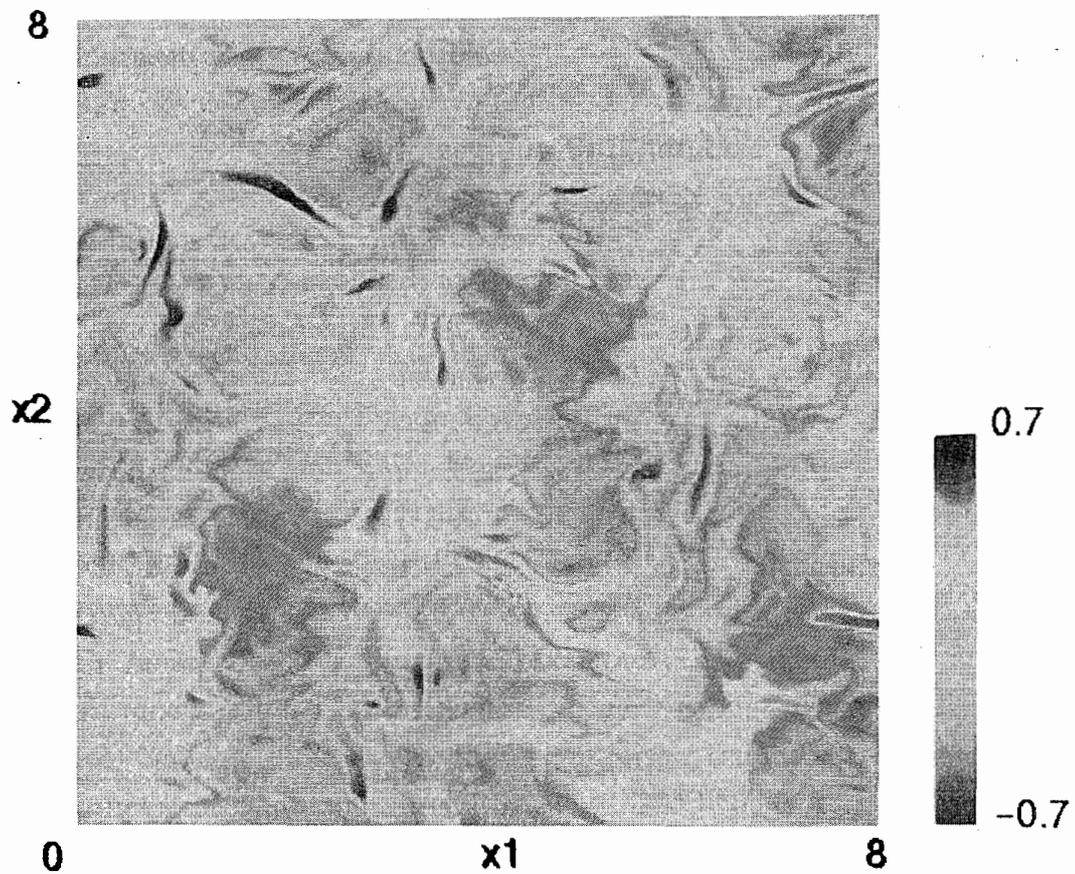


Abb. 5.43: Vertikalgeschwindigkeit in der Ebene $x_3 = 0.196$ für Natrium, $Ra = 12\,000$.

und die diese verbindenden Speichen ab, Abb. 5.44. Die Position der einzelnen Knoten bleibt in dem betrachteten relativ kurzen Zeitintervall nahezu unverändert. Ob über einen längeren Zeitraum gesehen eine räumliche Verlagerung dieser Konvektionszentren stattfindet, kann anhand der vorliegenden Ergebnisse nicht beurteilt werden. Die Dynamik der Speichenstrukturen kommt in der Szene sehr gut zum Ausdruck. Wie schon in der Visualisierung der Natriumsimulation zu beobachten war, bewegen sich auch in Luft die Speichen zu den Knoten hin. Es ergibt sich der Eindruck, daß sie von diesen angezogen und aufgesogen werden.

Weiteren Aufschluß über die dynamischen Vorgänge in Rayleigh-Bénard-Konvektion von Luft gibt die Visualisierung einer Szene entsprechend Abb. 5.38, in der die Isofläche zum Temperaturwert $T = 0.75$ und die Vertikalgeschwindigkeit als Farbcode dargestellt sind. Die Filmsequenz zeigt, daß das Zeitverhalten der Isofläche in größeren wandnahen Bereichen geprägt ist durch Ereignisse, die ein relativ großflächiges "Anpressen" der Isofläche an die untere Wand zur Folge haben. Diese Ausdünnung der Grenzschicht ist offensichtlich auf kaltes Fluid zurückzuführen, das sich von der oberen Wand ablöst, auf seinem Weg durch den Kanal beschleunigt wird und schließlich mit hoher kinetischer Energie in die Grenzschicht der unteren Wand eindringt. Hier wird das Fluid umgelenkt und es treten hohe Horizontalgeschwindigkeiten entlang der Wand auf. Diese bringen einen intensiven Wärmeübergang mit sich. Trifft die durch einen solchen Einschlag hervorgerufene "Wellenfront" des sich vom Einschlagszentrum radial ausbreitenden Fluides auf die Wellenfront eines anderen Einschlages, so treten dort auf engen Bereichen entgegengesetzt gerichtete Horizontalgeschwindigkeiten auf. Wegen der Nähe zur unteren Wand ist nur ein vertikal nach oben gerichtetes Umlenken der aufeinander zulaufenden Fluidfronten möglich. So entstehen dünne langgezogene Bereiche, in denen Fluid aus der Grenzschicht aufsteigt. Da sich dieses aufsteigende Fluid gegenüber der Umgebung auf höherem Temperaturniveau befindet, machen sich diese Strukturen in der Isofläche zum Temperaturwert $T = 0.75$ als dünne langgezogene Grate und in einem Horizontalschnitt durch das Temperaturfeld als Speichenmuster bemerkbar. Der Film zeigt, daß einmal entstandene Speichen über einen gewissen Zeitraum bestehen bleiben, aber durch die fortwährenden Einschläge kälteren Fluids einem andauernden Verformungs- und Translationsprozeß unterliegen. Verschiedentlich kann beobachtet werden, wie benachbarte Speichen aufeinander zulaufen (bzw. aufeinander zugetrieben werden) und sich zu einer einzigen Speiche vereinigen. Speichen, die zu den Knoten hingetrieben bzw. durch den Sog des hier aufsteigenden Fluids angezogen werden, bilden ihrerseits Auftriebsfahnen aus, die den Knoten am Leben erhalten.

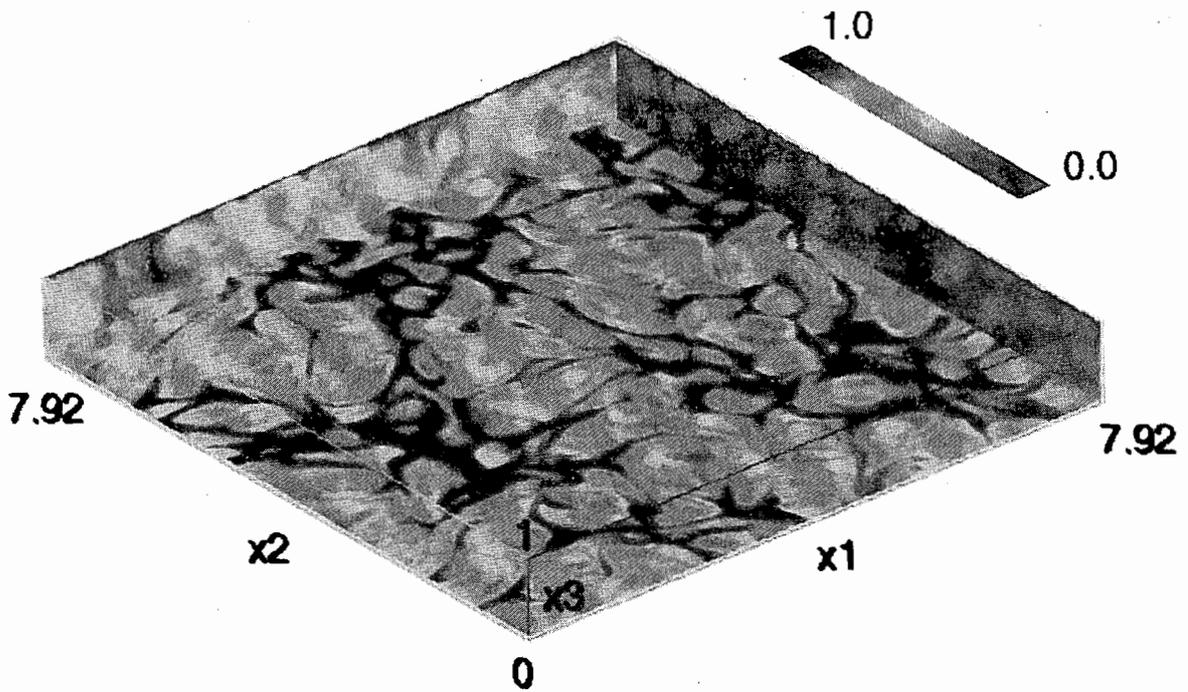


Abb. 5.44: Temperaturfeld in den Ebenen $x_1 = 7.92$, $x_2 = 7.92$ und $x_3 = 0.0425$ für Luft, $Ra = 630\ 000$.

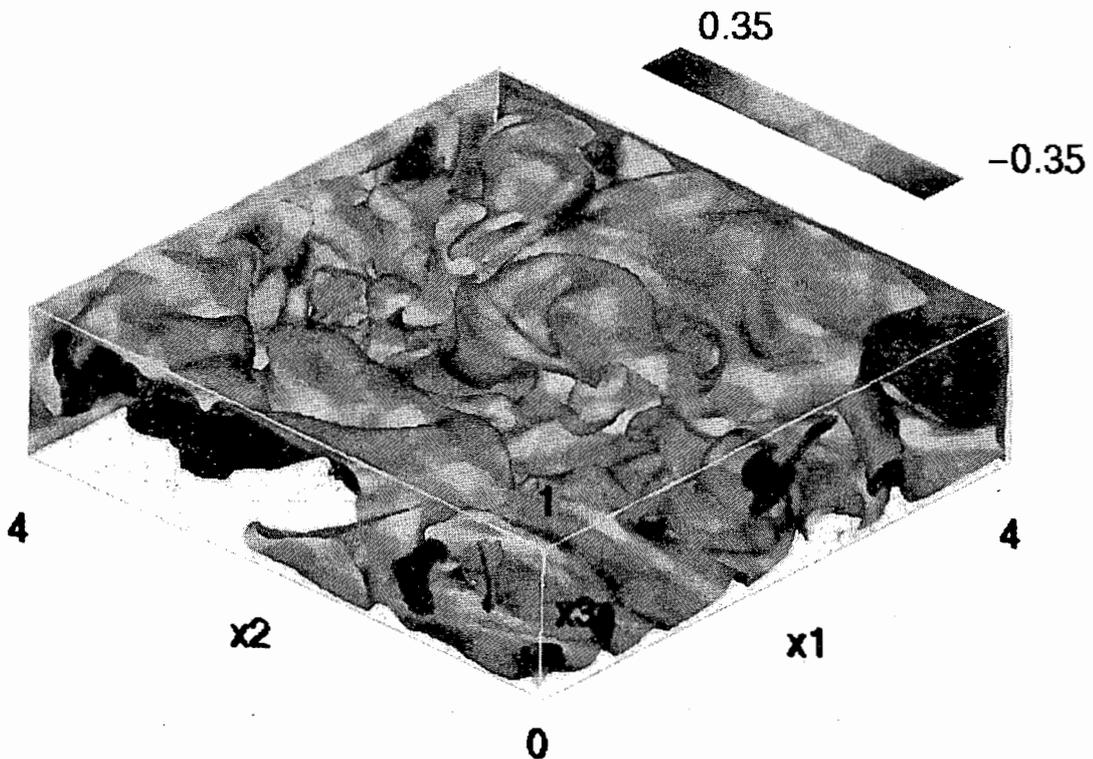


Abb. 5.45: Isofläche der Temperatur für den Wert $T = 0.5$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation für Luft, $Ra = 630\ 000$. Die Abbildung gibt nur ein Viertel des Kanals wieder.

Keine wesentlichen neuen Einblicke, aber eine andere Sichtweite der oben diskutierten Vorgänge liefert die Verfilmung der Temperatur-Isofläche $T = 0.5$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation analog zu Abb. 5.45. Die Szene belegt, daß sowohl nahe der unteren als auch der oberen Wand relativ großräumige Gebiete mit dem Temperaturwert $T = 0.5$ existieren. Besonders deutlich hervortreten in dieser Darstellungsweise Vorgänge, die sich beim Eindringen einer Auftriebsfahne in die obere Grenzschicht abspielen. Hier ist ein regelrechtes "Aufquellen" und Auseinanderlaufen der Isofläche zu beobachten. Benachbarte Einschläge äußern sich in großräumigen "Kissen", die durch tiefe Spalten, in denen kaltes Fluid nach unten dringt, getrennt sind. Diese Spalten sind das Äquivalent zu den in der Szene mit $T = 0.75$ beobachteten Graten bzw. Speichen in der unteren Grenzschicht.

Die diskutierten Ergebnisse verdeutlichen, daß in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft makroskopische Vorgänge nicht mit einem einzigen Mechanismus, wie z.B. der Rayleigh-Taylor-Instabilität erklärt werden können, sondern daß sie nur aus der Wechselwirkung und gegenseitigen Beeinflussung der thermisch instabilen Grenzschichten an unterer und oberer Wand zu verstehen sind.

5.5.3 Diskussion der Ergebnisse zur Trägheitskonvektion

In diesem Abschnitt werden die in 5.5.1 und 5.5.2 vorgestellten Ergebnisse zur Trägheitskonvektion zunächst zusammenfassend diskutiert. Daran anschließend erfolgt eine Bewertung dieser Ergebnisse in Bezug auf die in der Literatur zu diesem Thema existierenden Arbeiten.

Die Analyse der Simulationsergebnisse für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Natrium hat gezeigt, daß die vorherrschende Konvektionsform bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ die Trägheitskonvektion ist. Die dabei ablaufenden fluiddynamischen Vorgänge und die auftretenden Strukturen sind in Abb. 5.46 skizziert. Die Konvektion ist geprägt durch großräumige, weitgehend zweidimensionale Wirbel, deren Durchmesser nahezu der Kanalhöhe entspricht. Die Form der einzelnen Wirbel ist leicht elliptisch. Benachbarte Wirbel rotieren gegensinnig und sind mit ihren langen Halbachsen leicht gegeneinander geneigt. Im Zentrum der einzelnen Wirbel existiert ein Bereich, in dem in radialer Richtung ein linearer Anstieg der Umfangsgeschwindigkeit vorliegt. Der Durchmesser dieses Bereiches, in dem das Fluid wie ein Starrkörper rotiert, liegt typischerweise bei ca. 50% der Schichthöhe. Durch die leichte Neigung der Halbachsen benachbarter Wirbel entstehen in

Wandnähe zwischen diesen abwechselnd Bereiche, in denen eine Staupunktströmung vorliegt, sowie Bereiche relativer Ruhe. In letzteren bilden sich durch die Starrkörperwirbel getriebene jeweils gegensinnig rotierende Sekundärwirbelpaare aus. Deren Durchmesser und Geschwindigkeit ist im Vergleich zu den Starrkörperwirbeln etwa eine Größenordnung kleiner. Die Bereiche mit Staupunktströmung und Sekundärwirbeln sind an unterer und oberer Wand jeweils um eine halbe Wellenlänge versetzt. Die Trägheitskonvektion ist hinsichtlich der Wärmeübertragung besonders effektiv, da durch die großräumigen Wirbel direkt warmes (kaltes) Fluid von der unteren zur oberen Wand (bzw. umgekehrt) transportiert wird.

Die zeitabhängige Analyse der Ergebnisse für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ in Abb. 5.39 und die Verfilmung der Daten für $Ra = 12\,000$ haben gezeigt, daß auch in diesen Simulationen verschiedentlich Starrkörperwirbel zu beobachten sind. Die Trägheitskonvektion tritt dabei jedoch nur lokal und auch nur über einen begrenzten, kurzen Zeitraum auf. Die Ausbildung von Starrkörperwirbeln ist dabei gekoppelt an Bereiche, in denen sich ein nur schwach gestörtes, nahezu zweidimensionales Temperaturfeld eingestellt hat. Das Temperaturfeld selbst ist in den Simulationen für $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$ und auch $Ra = 24\,000$ langsam ablaufenden aperiodischen Veränderungen unterworfen. So werden Bereiche mit einem im wesentlichen zweidimensionalen Temperaturfeld zunehmend dreidimensional. Andererseits ist in Bereichen mit stark dreidimensionalem Temperaturfeld eine Ordnungsbildung hin zu zweidimensionalen Bandstrukturen zu beobachten.

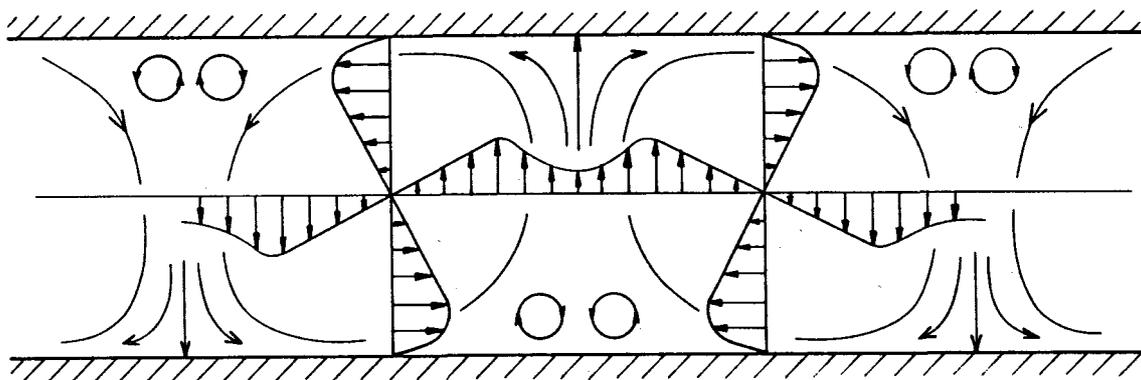


Abb. 5.46: Schematische Darstellung der Wirbelstrukturen und der Geschwindigkeitsprofile bei der Trägheitskonvektion für Natrium, $Ra = 3\,000$.

Im folgenden soll versucht werden, den offensichtlichen Zusammenhang zwischen der Trägheitskonvektion und dem Charakter des Temperaturfeldes in den Simulationen für $Ra = 6\ 000$ und $Ra = 12\ 000$ zu erklären. Hierzu betrachten wir zunächst die dimensionslosen Grundgleichungen (3.3 - 3.5). Diese spiegeln wider, welche physikalischen Vorgänge das Geschwindigkeits- und das Temperaturfeld bestimmen. Sowohl in der Impuls- als auch in der Energiegleichung tritt mit dem Vorfaktor des Diffusionsterm $1/\sqrt{Gr}$ bzw. $1/(Pr\sqrt{Gr})$ nur ein "äußerer Parameter" auf. Dieser entscheidet damit für die jeweilige Erhaltungsgleichung, wie stark der diffusive Term gegenüber den übrigen Termen der Erhaltungsgleichung - insbesondere gegenüber dem nichtlinearen Term - gewichtet wird. Bei den hier durchgeführten Simulationen von Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium ist $1/\sqrt{Gr}$ von der Größenordnung 10^{-3} . Der Vorfaktor $1/(Pr\sqrt{Gr})$ ist um Pr^{-1} , also mit $Pr = 0.006$ um ca. den Faktor 167 größer. Molekulare Wärmeleitungsvorgänge sind damit für das Temperaturfeld von ungleich größerer Bedeutung als es die viskose Reibung für das Geschwindigkeitsfeld ist. Dies bedeutet andererseits, daß der nichtlineare konvektive Term in der Energiegleichung für die Ausbildung des Temperaturfeldes nur eine wesentlich geringere Rolle spielt, als es im Vergleich dazu bei dem nichtlinearen Trägheitsterm in der Impulsgleichung für das Geschwindigkeitsfeld der Fall ist. Experimente zeigen, daß dann, wenn im Impuls- und Temperaturfeld molekulare Vorgänge dominieren - wie es z.B. direkt nach Überschreiten der kritischen Rayleigh-Zahl der Fall ist - sich zweidimensionale Lösungsformen einstellen (vergl. Abb. 2.2). Mit wachsender Rayleigh-Zahl treten zunehmend größere Geschwindigkeiten auf. Damit gewinnen die nichtlinearen Terme verstärkt an Bedeutung, bis schließlich zweidimensionale Lösungsformen nicht mehr stabil sind und sich dreidimensionale zeitabhängige Konvektionsformen einstellen. Die wachsende Bedeutung der nichtlinearen Terme ist es auch, die schließlich den Übergang zu turbulenter Konvektion bewirkt.

Für den betrachteten Fall der Rayleigh-Bénard-Konvektion in einem Fluid sehr kleiner Prandtl-Zahl ist aufgrund der ganz unterschiedlichen relativen Bedeutung der nichtlinearen Terme in der Impuls- und der Energiegleichung zu erwarten, daß ein Parameterbereich für die Grashof-Zahl existiert, in dem im Temperaturfeld noch molekulare Vorgänge dominieren - und das demzufolge einen im wesentlichen zweidimensionalen Charakter zeigt - in dem aber andererseits der nichtlineare Trägheitsterm in der Impulsgleichung bereits so dominant ist, daß zweidimensionale Lösungen im Impulsfeld nicht mehr stabil sind und sich demzufolge ein stark dreidimensionales Geschwindigkeitsfeld einstellt. Dabei ist zu berücksichtigen, daß Temperaturfeld und Geschwindigkeitsfeld über den konvekti-

ven Term der Energiegleichung und den Auftriebsterm in der Impulsgleichung miteinander gekoppelt sind und sich demzufolge wechselseitig beeinflussen. Wie die Analyse von Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld in Abschnitt 5.5.1 und 5.5.2 zeigt, fallen die durchgeführten Simulationen offensichtlich in diesen Bereich der Grashof-Zahl. Das Auftreten der Trägheitskonvektion - die ja nach der Theorie eine zweidimensionale stationäre Konvektionsform darstellt - in dreidimensionaler zeitabhängiger Konvektion kann daher nur über die ganz unterschiedliche relative Bedeutung der nichtlinearen Terme in der Energie- und Impulsgleichung sowie über die Wechselwirkung von Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld verstanden werden.

Zur Erläuterung soll folgendes Gedankenexperiment dienen. Ausgangspunkt ist ein räumlicher Bereich mit einem dreidimensionalen Geschwindigkeitsfeld mit nur relativ geringer kinetischer Energie. Für diesen Bereich spielt dann in der Energiegleichung der konvektive Term kaum eine Rolle. Vielmehr wird diese durch molekulare Wärmeleitungsvorgänge dominiert, so daß sich hier ein im wesentlichen zweidimensionales Temperaturfeld ausbilden wird. Das Temperaturfeld wirkt nun über den Auftriebsterm auf das Geschwindigkeitsfeld zurück und prägt diesem ebenfalls eine Vorzugsrichtung auf. Der zweidimensionale Charakter von Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld wird durch die wechselseitige Kopplung weiter verstärkt. Dies sind die Bedingungen, unter denen sich die Trägheitskonvektion in Form großräumiger zweidimensionaler Wirbelwalzen ausbilden kann. Wesentlich ist nun, daß im Starrkörperbereich dieser Wirbel wegen der besonderen Geschwindigkeitsverteilung keine Dissipation kinetischer Energie in Wärme erfolgt. Es treten daher zunehmend höhere Geschwindigkeiten auf, die ihrerseits einen verstärkten konvektiven Wärmetransport mit sich bringen. Die größeren Geschwindigkeiten führen aber auch dazu, daß der nichtlineare Trägheitsterm in der Impulsgleichung verstärkt an Bedeutung gewinnt. Die Strömung wird zunehmend anfälliger gegen Störungen. Schließlich treten hydrodynamische Instabilitäten auf, die zum Zusammenbruch der Trägheitskonvektion führen. Es erfolgt eine starke dreidimensionale Verwirbelung der Strömung, die sich auch in einer Störung des Temperaturfeldes bemerkbar macht. Die starke Verwirbelung bringt zudem eine verstärkte Dissipation mit sich, so daß sich die kinetische Energie der Strömung und ebenso der konvektive Wärmetransport wesentlich verringern. Damit ist man wieder am Ausgangspunkt des Gedankenexperiments. Die diskutierten Vorgänge, die sich zum Teil anhand von Abb. 5.39 nachvollziehen lassen, erklären sowohl das nur lokal und kurzzeitig erfolgende Auftreten der Trägheitskonvektion in den Simulationen für die Rayleigh-Zahlen $Ra = 6\ 000$, $Ra = 12\ 000$ und $Ra = 24\ 000$, als auch die aperiodischen Veränderungen im

Charakter des Temperaturfeldes sowie die starken Schwankungen des konvektiven Wärmetransportes, die in diesen Simulationen zu beobachten sind.

Die vorgestellten Ergebnisse zur Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium, speziell die zur Trägheitskonvektion, sollen nun in Bezug zu den in der Literatur zu diesem Themengebiet existierenden Arbeiten diskutiert und bewertet werden. Die Simulationsergebnisse für die Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ bestätigen zunächst, daß die Konvektion bereits bei dieser Rayleigh-Zahl dreidimensional und zeitabhängig ist (vergl. Kapitel 2.2). Als vorherrschende Konvektionsform wird die Trägheitskonvektion identifiziert. Dieses Ergebnis steht im Gegensatz zu den theoretischen Untersuchungen von Busse & Clever (1981), die das Auftreten der Trägheitskonvektion für den Grenzfall verschwindender Prandtl-Zahl erst für Rayleigh-Zahlen $Ra > 7373$ vorhersagen. Gleichzeitig bestätigt es aber die experimentellen Ergebnisse von Chiffaudel et al. (1987), die für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Quecksilber bereits für Rayleigh-Zahlen $Ra \approx 1900$ Indizien für die Trägheitskonvektion finden.

Die numerischen Untersuchungen von Clever & Busse (1987, 1990) sowie die direkten Simulationen von Meneguzzi et al. (1987) für Prandtl-Zahlen $Pr = 0.01$ und $Pr = 0.025$ und Rayleigh-Zahlen im Bereich $2\,000 \leq Ra \leq 2\,700$ zeigen ein Konvektionsmuster in Form von Wanderwellen und liefern keinen Hinweis auf eine Trägheitskonvektion (vergl. Kapitel 2.2). Das Auftreten der Trägheitskonvektion in dreidimensionaler zeitabhängiger Konvektion wird mit den vorgestellten Ergebnissen für Natrium ($Pr = 0.006$) und die Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ - sowie mit den diskutierten Einschränkungen auch für $Ra = 6\,000$ - damit erstmals vorhergesagt. Entscheidend für diesen Sachverhalt dürfte sein, daß für die vorgestellten Simulationen ein ungleich größeres Rechengebiet zugrundegelegt wurde, als dies in anderen numerischen Untersuchungen bisher der Fall war. So basieren die TURBIT-Rechnungen auf Periodenlängen $X_1 = X_2 = 8$, während Meneguzzi et al. (1987) $X_1 \approx 2$, $X_2 \approx 2.5$ und Clever & Busse (1990) $X_1 \approx 2.1$, $X_2 \approx 3$ verwenden. Die in Kapitel 5.1.1 durchgeführte Periodenlängenstudie hat verdeutlicht, daß die Wahl der Periodenlängen von ganz wesentlichem Einfluß für das sich einstellende Konvektionsmuster sein kann. Insbesondere liegt mit der Vorgabe der Periodenlängen eine charakteristische Wellenlänge für die größten mit der Simulation abbildbaren Strukturen fest. Grötzbach (1983) zeigt in numerischen Simulationen für Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft, daß die Vorgabe zu kleiner Periodenlängen in der Tat zu falschen Strömungszuständen führen kann.

Die Analyse des Temperaturfeldes für die Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ in Abb. 5.26(a) zeigt die Dominanz großräumiger Bandstrukturen der Wellenlänge $\lambda \approx 2.5$, die ihrerseits entlang der Achsen dreidimensionale Störungen der Wellenlänge $\lambda \approx 5$ aufweisen. Wird diese Simulation z.B. mit Periodenlängen $X_1 = 2.5$, $X_2 = 2$ durchgeführt, so wird dadurch die Wellenlänge der Störungen entlang der Achsen wesentlich reduziert. Es wird sich dann nicht mehr ein deutliches zweidimensional geprägtes, sondern ein dreidimensionales Temperaturfeld einstellen. Da die Trägheitskonvektion aber, wie gezeigt, an großräumige, nahezu ungestörte Bereiche im Temperaturfeld gekoppelt ist, kann mit einer solchen Simulation die Trägheitskonvektion nicht abgebildet werden.

Für ihre numerischen Untersuchungen verwenden Clever & Busse (1987, 1990) ein Galerkin-Verfahren. Durch die Vorgabe von Symmetrieeigenschaften reduzieren die Autoren die Anzahl der unbekanntenen Koeffizienten und schränken damit aber auch die Klasse der möglichen Lösungen ein. Diese erhalten sie stets in der Form eines einzigen, wohldefinierten Konvektionsmusters für das gesamte betrachtete Rechengebiet. Charakteristisch für die Simulationsergebnisse in Natrium bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ sind aber gerade unterschiedliche Konvektionsmuster in verschiedenen räumlichen Bereichen, die zudem einer zeitlichen Veränderung unterworfen sind. Nur durch diesen "Wettbewerb" verschiedener Konvektionsformen kann sich lokal und über bestimmte Zeitintervalle die Trägheitskonvektion ausbilden. Es ist evident, daß derartige Vorgänge mit der für laminare Konvektion und nicht allzu hohe Rayleigh-Zahlen prädestinierten Methode von Clever & Busse nicht beschrieben werden können.

Eine Voraussetzung um die diskutierten Mechanismen mit der direkten numerischen Simulation abbilden zu können, ist es, eine zu starke Kopplung der einzelnen Strömungsmuster aufgrund der periodischen Randbedingungen durch ausreichend große Periodenlängen zu vermeiden. Darüber hinaus erscheint es als wesentlich, als Anfangswerte für die Simulation nicht von einem wohldefinierten Konvektionsmuster auszugehen, sondern statt dessen von ruhendem Fluid und randomen Temperaturstörungen zu starten. Bei einem ausreichend großen Kanal setzt sich die Konvektion dann an unterschiedlichen Stellen unabhängig voneinander in Gang und es findet von Anfang an ein Wettbewerb zwischen den verschiedenen Bereichen statt. Diese Vorgehensweise bildet in guter Näherung die realen im Experiment vorliegenden Anfangsbedingungen ab (sofern dort nicht - wie z.B. durch die Vorgabe von Temperaturstörungen einer bestimmten Wellenlänge auf den Wänden - ein bestimmtes Konvektionsmuster aufgeprägt wird).

5.6 Analyse von Turbulenzmodellansätzen

Praktische Strömungsprobleme zeichnen sich häufig durch komplexe Geometrien und hohe Turbulenzgrade aus. Die Berechnung solcher Strömungen mit der Methode der direkten numerischen Simulation ist mit der derzeitigen Rechnergeneration aufgrund der extrem hohen Speicher- und Rechenzeitanforderungen nicht möglich. Auch das Verfahren der Grobstruktursimulation wird bisher für praktische Anwendungsfälle kaum eingesetzt, doch dürfte diese Methode mit zunehmender Rechenleistung immer interessanter werden. Derzeit erfolgt die Berechnung turbulenter Strömungen für praktische Anwendungsfälle überwiegend mit Hilfe von statistischen Turbulenzmodellen. Diese Modelle enthalten eine Reihe von empirischen Ansätzen und Koeffizienten. In diesem Kapitel sollen die Ergebnisse der numerischen Simulationen herangezogen werden, um aus deren Analyse einen Beitrag zur Validierung und Weiterentwicklung von Turbulenzmodellen für Naturkonvektion in Flüssigmetallen zu leisten. Im einzelnen werden die exakten Terme der Bilanzgleichungen für die kinetische Turbulenzenergie, den turbulenten Wärmestrom und die Temperaturschwankungsquadrate ausgewertet. Für verschiedene Modellterme werden übliche Schließungsansätze analysiert und Modellkoeffizienten bestimmt. Die Analysen werden sowohl für Natrium als auch für Luft durchgeführt, und der Einfluß der Prandtl-Zahl wird diskutiert. Im Hinblick auf diese Zielsetzung wird im folgenden Abschnitt zunächst eine kurze Einführung in die statistische Modellierung turbulenter Strömungen gegeben. Eine ausführliche Darstellung findet man z.B. bei Rodi (1980).

5.6.1 Zu statistischen Turbulenzmodellen

Grundlage für die statistische Beschreibung turbulenter Strömungen ist die Aufspaltung einer Strömungsgröße ϕ , wobei ϕ für u_i , p und T steht, in einen zeitlichen Mittelwert $\bar{\phi}$ und einen turbulenten Schwankungsanteil ϕ' :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (5.22)$$

Die Mittelungsoperation

$$\bar{\phi} = \frac{1}{t_1 - t_0} \int_{t_0}^{t_1} \phi(x_i, t) dt \quad (5.23)$$

ist dabei über ein ausreichend großes Zeitintervall $t_1 - t_0$ durchzuführen. Der Mittelwert des Schwankungsanteils ϕ' ist definitionsgemäß null.

Führt man die Aufspaltung der Strömungsgrößen in Mittel- und Schwankungsanteil in die Grundgleichungen (3.3-3.5) ein und mittelt diese, so erhält man

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = \\ - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \overline{u_i' u_j'} \right) - (T_{ref} - \bar{T}) \delta_{i3} \end{aligned} \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{T})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\sqrt{Ra \cdot Pr}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} - \overline{u_i' T'} \right) \quad (5.26)$$

Diese sogenannten Reynoldsschen Gleichungen enthalten Korrelationen verschiedener Schwankungsgrößen, die auf die Mittelungsoperation über die nichtlinearen Terme zurückzuführen sind und formal den diffusiven Termen zugeschlagen werden können. Die Korrelationen $\overline{u_i' u_j'}$ und $\overline{u_i' T'}$ werden als turbulente (oder

Reynoldssche) Spannungen bzw. Wärmeströme bezeichnet und stellen den Impuls- bzw. Wärmetransport durch turbulente Schwankungsbewegungen dar. Da diese Korrelationen unbekannt sind, ist das Gleichungssystem nicht mehr geschlossen. Eine Hauptaufgabe bei der statistischen Berechnung turbulenter Strömungen ist daher, durch die Modellierung der unbekanntenen Korrelationen dieses Schließungsproblem aufzulösen.

Ein grundsätzlicher Unterschied der statistischen Simulation gegenüber der Grobstruktursimulation besteht darin, daß bei ersterer Methode eine Mittelung über den gesamten zeitlichen Frequenzbereich erfolgt, bei der zweiten Methode aber nur über einen (i.a. durch die Maschenweite) begrenzten räumlichen Frequenzbereich gemittelt wird. Dies hat unmittelbare Auswirkungen auf die mit den Modellen beider Verfahren zu approximierenden Turbulenzterme. Während ein Feinstrukturmodell hier nur den Einfluß kleinräumiger Wirbel erfassen muß, hat ein statistisches Modell für turbulente Strukturen aller Größen und Frequenzen Rechnung zu tragen. Da großräumige Turbulenzstrukturen i.a. stark vom Anwendungsfall (z.B. dessen Geometrie) abhängen, kleinräumige Turbulenzstrukturen aber mit guter Näherung als lokal isotrop betrachtet werden können, ist die Universalität eines statistischen Turbulenzmodells a priori als deutlich geringer anzusehen als die eines Feinstrukturmodells.

Das bekannteste und in Rechenprogrammen am häufigsten verwendete Turbulenzmodell ist das k - ε Modell (siehe z.B. Launder & Spalding (1974)). Dabei erfolgt die Modellierung der Reynoldsschen Spannungen in Analogie zum molekularen Impulstransport über Gradienten des mittleren Geschwindigkeitsfeldes. Der Proportionalitätsfaktor ν_t wird als turbulente (oder Wirbel-) Viskosität bezeichnet. Entsprechend der Dimension der Viskosität L^2/t wird ν_t als Produkt eines charakteristischen Geschwindigkeits- und Längenmaßes der Turbulenz angesetzt. Als Geschwindigkeitsmaß wird die Wurzel der kinetischen Turbulenzenergie $k = 1/2 \overline{u_i' u_i'}$ herangezogen. Das Längenmaß wird aus k und der Dissipationsrate ε von k abgeleitet, $L \sim k^{3/2}/\varepsilon$. Mit dem Proportionalitätsfaktor C_μ folgt für die Wirbelviskosität

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} . \quad (5.27)$$

Der vollständige Ansatz für die Reynoldsschen Spannungen lautet dann

$$\overline{u_i' u_j'} = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} . \quad (5.28)$$

Entsprechend wird für die turbulenten Wärmeströme angesetzt

$$\overline{u_i' T'} = \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} . \quad (5.29)$$

Dabei wird in Analogie zur molekularen Prandtl-Zahl eine turbulente Prandtl-Zahl Pr_t definiert, die die turbulenten Diffusivitäten von Impuls und Wärme ins Verhältnis setzt.

Zur Bestimmung der kinetischen Turbulenzenergie und ihrer Dissipationsrate werden im k - ε Modell Erhaltungsgleichungen für beide Größen gelöst. Diese aus exakten Transportgleichungen für k und ε abgeleiteten Gleichungen enthalten selbst eine Reihe von Modellierungsansätzen. Die zur Schließung des Gleichungssatzes notwendige Festlegung der zahlreichen Modellkoeffizienten (z.B. C_μ , Pr_t) erfolgt anhand experimenteller Daten.

Eine Verallgemeinerung des k - ε Modells stellen Reynoldsspannungsmodelle dar (siehe z.B. Rodi (1980)). Sie verzichten auf das Prinzip der Wirbelviskosität und lösen direkt Transportgleichungen für die Reynoldsschen Spannungen und turbulenten Wärmeströme. Dadurch können sie Anisotropieeffekten weit mehr Rechnung tragen als das k - ε Modell. Auch bei Reynoldsspannungsmodellen müssen unbekannte Korrelationen dritter Ordnung modelliert und Modellkoeffizienten festgelegt werden. Ein Spezialfall sind algebraische Reynoldsspannungsmodelle. Hier werden aus den Transportgleichungen für $\overline{u_i' u_j'}$ und $\overline{u_i' T'}$ unter verschiedenen Vereinfachungen und Vernachlässigungen algebraische Beziehungen für die gesuchten Korrelationen abgeleitet. Dadurch wird der große numerische Aufwand, den die Lösung von neun Differentialgleichungen für $\overline{u_i' u_j'}$ und $\overline{u_i' T'}$ im vollen Reynoldsspannungsmodell darstellt, deutlich verringert.

5.6.2 Zur Überprüfung von Schließungshypothesen

Bei der Berechnung turbulenter Strömungen mit statistischen Turbulenzmodellen hängt der Erfolg der Rechnung entscheidend davon ab, ob und wie gut die getroffenen Modellannahmen die realen physikalischen Gegebenheiten wiedergeben. Die Überprüfung von Schließungsannahmen stellt somit einen wesentlichen Aspekt für die Verifikation von Turbulenzmodellen bzw. deren Weiterentwicklung dar. George & Taulbee (1992) gehen ausführlich auf die Schwierigkeiten des Testens von Schließungshypothesen mit Experimenten ein. Generell weisen sie darauf hin, daß Korrelationen zweiter und dritter Ordnung nur ungenau gemessen werden können und experimentelle Daten nur dann von Wert sind, wenn sichergestellt ist, daß diese auch den die Strömung beschreibenden Grundgleichungen genügen. Insbesondere konstatieren die Autoren das Fehlen zuverlässiger Messungen für die Dissipation und für Korrelationen, die Druckschwankungen beinhalten. Gerade die Dissipation geht aber in viele Modellannahmen ein. Um diese analysieren zu können, muß die Dissipation häufig aus Bilanzen gewonnen werden, wobei bei der Aufstellung der Bilanz selbst wieder die Gültigkeit von Modellannahmen unterstellt werden muß.

Bei der direkten numerischen Simulation werden die exakten Grundgleichungen der Strömungsmechanik gelöst, ohne daß empirische Modellannahmen eingehen. Aus den numerischen Ergebnissen können beliebige Korrelationen und auch die experimentell so schwer bestimmbare Dissipation direkt ausgewertet werden. Die Ergebnisse einer direkten numerischen Simulation können daher genutzt werden, um in Turbulenzmodellen verwendete Schließungsansätze zu analysieren. Allerdings ist der mit der direkten Simulationsmethode zur Zeit erreichbare Turbulenzgrad um Größenordnungen von dem praktischer Probleme entfernt. Dennoch können die Analysen hilfreich sein, um Schließungshypothesen auf ihre grundsätzliche Gültigkeit hin zu untersuchen.

Im folgenden werden die Ergebnisse des Natriumfalles mit $Ra = 24\,000$ herangezogen, um aus der Analyse von Termen der Transportgleichungen für die kinetische Turbulenzenergie k , den vertikalen turbulenten Wärmestrom $\overline{u_3'T'}$ und die Temperaturschwankungsquadrate $\overline{T'^2}$ Bilanzen dieser Turbulenzgrößen aufzustellen. Für einige der in diesen Transportgleichungen auftretenden Schließungsterme werden übliche Modellansätze analysiert. Den Ergebnissen dieser Analysen für Natrium werden zum Teil diejenigen der Simulation von Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft ($Ra = 630\,000$, $Pr = 0.71$) gegenübergestellt, um so den Einfluß der molekularen Prandtl-Zahl zu verdeutlichen und zu diskutieren.

5.6.3 Transportgleichung für die kinetische Turbulenzenergie

Unter Verwendung der zeitlich gemittelten und der zeitabhängigen Navier-Stokes-Gleichung kann eine exakte Gleichung für die Reynoldsschen Spannungen $\overline{u_i' u_j'}$ abgeleitet werden [z.B. Hinze (1975)]. Aus dieser ergibt sich über die Summe der drei Normalspannungskomponenten eine Transportgleichung für die kinetische Turbulenzenergie $k = 1/2 \overline{u_i' u_i'}$. Mit der in TURBIT verwendeten Normierung nimmt die Erhaltungsgleichung für k die folgende dimensionslose Form an (die physikalische Bedeutung der einzelnen Glieder ist angegeben):

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[- \overline{u_j' \left(\frac{u_i' u_i'}{2} + p' \right)} + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$

Änderungs-
rate

konvektiver
Transport

$D_k =$ diffusiver Transport

$$- \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \overline{u_i' T'} \delta_{i3} - \frac{1}{\sqrt{Gr}} \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \quad (5.30)$$

$P_k =$ Produktion
durch Schub-
spannungen

$G =$ Produktion/Vernich-
tung durch Auftriebs-
effekte

$\varepsilon =$ Dissipation

Erfolgt die zeitliche Mittelung über einen ausreichend großen Zeitraum, so existieren in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion keine mittleren Geschwindigkeitsprofile, d.h. es gilt $\overline{u_i} = 0$. Damit tritt in der Bilanz der kinetischen Turbulenzenergie kein konvektiver Transport und keine Produktion durch Schubspannungen auf. Desweiteren ist die Strömung in den horizontalen Richtungen im statistischen Sinne homogen (vergl. Abschnitt 5.2.2) und Gradienten statistischer Größen sind nur in vertikaler Richtung vorhanden. Für den Fall einer eingelaufenen Strömung verschwindet die zeitliche Änderungsrate und die Bilanzgleichung für k vereinfacht sich zu

$$0 = \overline{u_3' T'} + \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\overline{u_3' \frac{u_i' u_i'}{2}} - \overline{u_3' p'} + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial k}{\partial x_3} \right] - \frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \quad (5.31)$$

G D_k ε

Die Erhaltungsgleichung der kinetischen Turbulenzenergie wird in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion also ausschließlich bestimmt durch die Produktion durch Auftriebseffekte G (das ist der vertikale turbulente Wärmestrom), durch die Diffusion D_k und die Dissipation ε .

Die vertikalen Profile von G , D_k und ε sind für Natrium für die Rayleigh-Zahl $Ra = 6\,000$ in Abb. 5.47 dargestellt. Das zugehörige vertikale Profil der kinetischen Turbulenzenergie selbst findet sich in Abb. 5.16. Der turbulente Wärmestrom G ist an der Wand null, steigt mit zunehmendem Abstand von der Wand leicht an und erreicht in Kanalmitte sein Maximum. Die Dissipation ε stellt den Senkenterm dar. Sie ist im Innern des Kanals konstant und nimmt innerhalb der viskosen Grenzschicht mit abnehmendem Wandabstand sehr stark zu. Bei der Diffusion D_k handelt es sich um einen reinen Umverteilungsterm, der integral über den Kanal keinen Beitrag leistet. Durch die Diffusion wird der im Zentrum des Kanals vorhandene Überschuss an kinetischer Turbulenzenergie hin zu den Wänden transportiert und dort durch die Dissipation in Wärme umgewandelt.

Zum Vergleich ist in Abb. 5.48 die Bilanz der kinetischen Turbulenzenergie für die Simulation mit Luft bei $Ra = 630\,000$ angegeben. Das vertikale Profil der Dissipation ε ist dem für Natrium in Abb. 5.47 sehr ähnlich. Dies ist nicht überraschend, da die Dissipation wesentlich durch die hochfrequenten Geschwindigkeitsfluktuationen bestimmt ist. Für den hochfrequenten Bereich des Spektrums der Geschwindigkeitsfluktuationen wurde in Kapitel 5.4.4 eine Skalierung mit

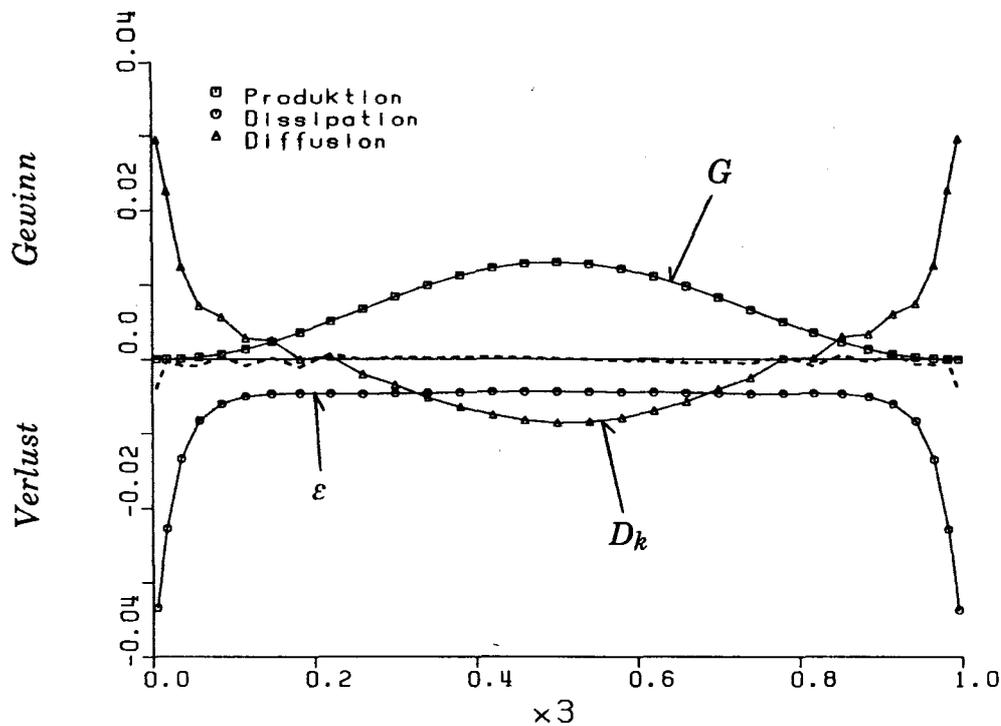


Abb. 5.47: Vertikale Profile von Termen der k -Gleichung für Natrium, $Ra = 24\,000$: G = Produktion, D_k = Diffusion, ε = Dissipation. Die unterbrochene Linie kennzeichnet die Bilanz-Differenz.

der Grashof-Zahl festgestellt; die Grashof-Zahl ist für die betrachteten Simulationen von Luft und Natrium aber von gleicher Größenordnung.

Aus der Grashof-Analogie des Geschwindigkeitsfeldes kann somit gefolgert werden, daß bewährte Modellansätze für Terme der ε -Gleichung für Flüssigmetalle beibehalten werden können und keine Anpassung an Einflüsse der molekularen Prandtl-Zahl notwendig erscheint [Wörner & Grötzbach (1993a)]. Im Gegensatz zur Dissipation unterscheidet sich das vertikale Profil des Produktionsterms G für Luft deutlich von dem in Natrium. Dieser Befund ist keineswegs überraschend, da es sich bei $G = \overline{u_3 T'}$ um den turbulenten Wärmestrom handelt. Hier spielt das Temperaturfeld eine Rolle, das in Natrium nur schwach, aber in Luft stark turbulent ist. Da die vertikalen Profile der Dissipation für Luft und Natrium ähnlich sind, die der Produktion aber gänzlich unterschiedlich sind, folgt aus Gl. (5.31), daß sich auch die Profile der Diffusion in beiden Fluiden in eingelaufener Strömung unterscheiden müssen. Die Abbildungen 5.47 und 5.48 bestätigen dies.

Die Bilanzen der kinetischen Turbulenzenergie für Natrium und Luft lassen erkennen, daß in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion die Diffusion als Umverteilungsprozeß von großer Bedeutung ist und somit kein lokales Gleichgewicht

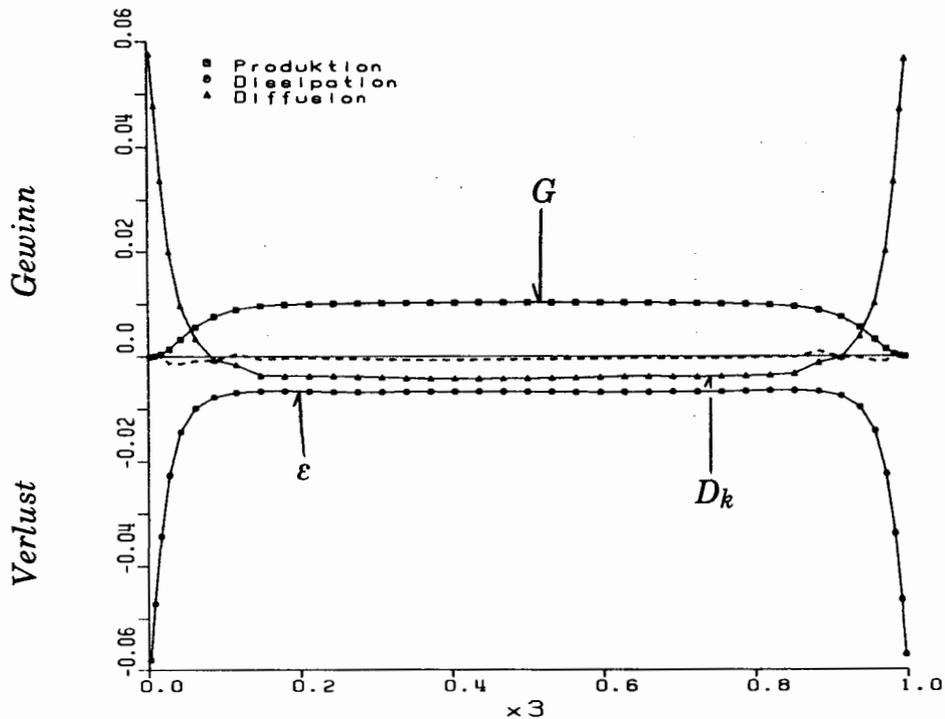


Abb. 5.48: Vertikale Profile von Termen der k -Gleichung für Luft, $Ra = 630\,000$: G = Produktion, D_k = Diffusion, ε = Dissipation. Die unterbrochene Linie kennzeichnet die Bilanz-Differenz.

zwischen Produktion und Dissipation gegeben ist. Peeters & Henkes (1992) finden in ihren Untersuchungen der natürlichen Konvektion entlang einer beheizten vertikalen Platte für die Bilanz der k -Gleichung ebenfalls kein lokales Gleichgewicht. Dies deutet darauf hin, daß diese z.B. in algebraischen Reynoldsspannungsmodellen getroffene Annahme für Naturkonvektionsströmungen ganz allgemein nicht gültig ist. Diese Vermutung wird durch die analytische Arbeit von Lawrence (1989) bestätigt, der findet, daß Turbulenzmodelle ohne Berücksichtigung der Diffusion nicht in der Lage sind, die statistischen Eigenschaften der Turbulenz in Naturkonvektionsströmungen ausreichend zu beschreiben. Lawrence (1989) weist auf einen starken Bedarf nach einem physikalisch sinnvollen Diffusionsmodell hin, das nicht auf dem mittleren Geschwindigkeitsfeld basiert. Gleichzeitig räumt er ein, daß die diffusiven Terme schwierig zu modellieren sind, da das Verhalten der verschiedenen Beiträge nur wenig verstanden ist.

Nach Gl. (5.31) setzt sich die Diffusion aus drei verschiedenen Anteilen zusammen. Die ersten beiden Terme von D_k in Gl. (5.31) sind direkt auf die Wirkung turbulenter Fluktuationen zurückzuführen und werden daher unter dem Begriff der turbulenten Diffusion zusammengefaßt. Dazu kommt als dritter Term von D_k die molekulare Diffusion. In Turbulenzmodellen wird die molekulare Diffusion im

allgemeinen vernachlässigt [Rodi (1980)]. Die Analyse der Simulationsergebnisse für Natrium und Luft ergibt, daß sie im Zentralbereich des Kanals in der Tat von untergeordneter Bedeutung ist. Innerhalb der viskosen Grenzschicht ist die molekulare Diffusion jedoch durchaus relevant und in Wandnähe sogar der dominierende Term. Ursächlich für die turbulente Diffusion ist zum einen eine Dreifachkorrelation von Geschwindigkeitsfluktuationen, zum anderen eine Druck-Geschwindigkeits-Korrelation. Da beide Korrelationen im Rahmen von Schließungsmodellen zweiter Ordnung unbekannt sind, muß die turbulente Diffusion in diesen Verfahren modelliert werden. Dabei wird die Druck-Geschwindigkeits-Korrelation im allgemeinen direkt oder indirekt vernachlässigt. Indirekt ist dabei so zu verstehen, als der gemeinsame Modellierungsansatz für beide Terme sich ausschließlich an der Dreifachkorrelation orientiert. Das üblicherweise verwendete Diffusionsmodell basiert auf einem Gradientenansatz und dem Wirbelviskositätsprinzip [Launder & Spalding (1974)]:

$$\overline{-u_3' \left(\frac{u_i' u_i'}{2} + p' \right)} = \frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_3} \quad (5.32)$$

Hierin ist σ_k eine Prandtl-Zahl für die kinetische Turbulenzenergie, für die üblicherweise Werte $\sigma_k \approx 1$ angenommen werden [Rodi (1980)].

Lumley (1978) schlägt vor, die Druckdiffusion gemäß

$$\overline{u_3' p'} = -\frac{1}{5} \overline{u_3' u_i' u_i'} \quad (5.33)$$

zu berücksichtigen. Dieser Ansatz ist jedoch experimentell nicht verifiziert, da Daten zur Druck-Geschwindigkeits-Korrelation in der Literatur nicht verfügbar sind [George & Taulbee (1992)]. Trotzdem ziehen ihn Shabbir & Taulbee (1990) heran, um für ein Experiment, das eine achsensymmetrische Auftriebsfahne untersucht, über eine Bilanzierung der kinetischen Turbulenzenergie die unbekannte Dissipation zu bestimmen. Diese benötigen sie, um aus Ergebnissen für das mittlere Geschwindigkeitsfeld, der mittleren Temperatur und der kinetischen Turbulenzenergie aus Schließungshypothesen die Reynoldsschen Spannungen und die turbulenten Wärmeströme auszuwerten und diese mit den gemessenen Größen für $\overline{u_i' u_j'}$ und $\overline{u_i' T'}$ vergleichen zu können. Die Autoren betonen, daß sie für

diesen Strömungstyp die Druckdiffusion als signifikant ansehen und ihrem Einfluß daher Rechnung getragen werden sollte, anstatt ihn einfach zu vernachlässigen.

Abb. 5.49 zeigt die aus den Simulationsergebnissen für Natrium und die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ ausgewerteten vertikalen Profile der Korrelationen $\overline{u_3' u_i' u_i' / 2}$ und $\overline{u_3' p'}$. Demnach weisen beide Korrelationen mit Ausnahme der unmittelbaren Wandnähe entgegengesetzte Vorzeichen auf, was den Ansatz (5.33) qualitativ bestätigt. Quantitativ ist für den diffusiven Transport von k aber in erster Linie die Korrelation $\overline{u_3' p'}$ verantwortlich und nicht $\overline{u_3' u_i' u_i' / 2}$. Die Dominanz der Druck-Korrelation über die Dreifachkorrelation geht auch aus der Analyse der Daten der Luftsimulation hervor, Abb. 5.50. Es handelt sich daher offensichtlich nicht um einen auf Flüssigmetalle beschränkten Effekt, sondern wohl vielmehr um eine generelle Eigenschaft turbulenter Naturkonvektion. Allerdings steht das Phänomen, daß der für den diffusiven Transport von k relevante Mechanismus auf die Wechselwirkung von Druck- und Geschwindigkeitsfluktuationen zurückzuführen ist, im Gegensatz zu Zwangsströmungen. Wie die Analyse der Daten einer Simulation für die erzwungene isotherme Kanalströmung von Luft zeigt, stellt der Vorschlag von Lumley (1978) für diesen Strömungstyp in der Tat eine brauchbare Näherung für die Druckdiffusion dar.

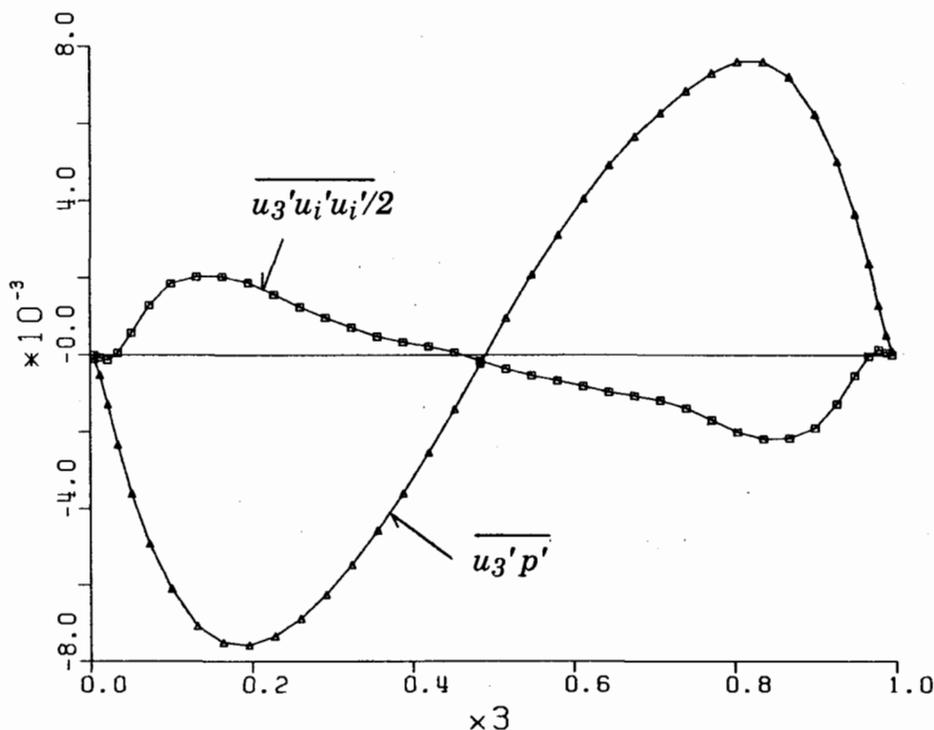


Abb. 5.49: Vertikale Profile von Korrelationen im Diffusionsterm der Erhaltungsgleichung für die kinetische Turbulenzenergie für Natrium, $Ra = 24\,000$.

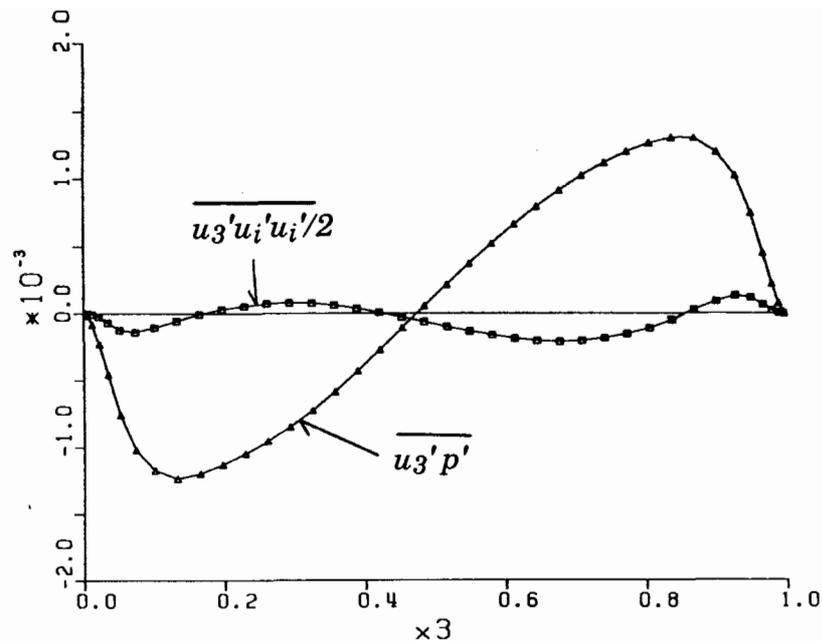


Abb. 5.50: Vertikale Profile von Korrelationen im Diffusionsterm der Erhaltungsgleichung für die kinetische Turbulenzenergie für Luft, $Ra = 630\,000$.

Aus den in diesem Abschnitt diskutierten Ergebnissen ergibt sich die Schlußfolgerung, daß bei der Berechnung von Naturkonvektion mit statistischen Turbulenzmodellen der als Umverteilungsprozeß für die Energiebilanz der Strömung so wesentliche diffusive Transport kinetischer Turbulenzenergie nur mit einem Modell richtig vorhergesagt werden kann, das eine adäquate Schließungshypothese der Druck-Geschwindigkeits-Korrelation beinhaltet [Wörner & Grötzbach (1993b)].

Bei dem Produktionsterm G in der Transportgleichung für die kinetische Turbulenzenergie (5.31) handelt es sich um den vertikalen turbulenten Wärmestrom. In Reynoldsspannungsmodellen wird für diese Größe eine eigene Transportgleichung gelöst. Dadurch wird das Schließungsproblem für den turbulenten Wärmestrom in diesen Modellen hin zu Korrelationen höherer Ordnung in der entsprechenden Transportgleichung verschoben (siehe Abschnitt 5.6.4). Im Rahmen des k - ε Modells muß der turbulente Wärmestrom modelliert werden. Dies erfolgt mit dem in Abschnitt 5.6.1 vorgestellten Konzept der turbulenten Prandtl-Zahl. Dieses stützt sich auf die Annahme, daß turbulenter Impuls- und Wärmeaustausch äquivalente Vorgänge sind. Es beinhaltet die Implikation, daß die Turbulenzstrukturen und -mechanismen des Geschwindigkeitsfeldes direkt auf das Temperaturfeld übertragen werden können. Die Gültigkeit dieser Annahme kann eventuell für Strömungen unterstellt werden, bei denen die Temperatur als passive

skalare Transportgröße betrachtet werden kann und die molekulare Prandtl-Zahl nahe eins ist. Sie ist aber für auftriebsgetriebene oder -beeinflusste Strömungen zumindest fragwürdig. Auch die Vielzahl der in der Literatur existierenden Vorschläge für die turbulente Prandtl-Zahl - Reynolds (1975) gibt z.B. 30 an - deutet auf eine mangelnde Allgemeingültigkeit des Konzeptes hin. Die Auswertung experimenteller Daten hinsichtlich der Beziehung zwischen turbulentem Impuls- und Wärmetransport zeigt, daß die turbulente Prandtl-Zahl zum einen von der molekularen Prandtl-Zahl abhängt, zum anderen aber auch innerhalb eines Strömungstyps über der Geometrie variieren kann. Für Flüssigmetalle wird zudem eine Abhängigkeit von Pr_t vom Turbulenzgrad des Strömungsfeldes beobachtet [Bremhorst & Krebs (1992)].

Die Analyse der turbulenten Prandtl-Zahl aus den vorliegenden Simulationsergebnissen ist nicht ohne weiteres möglich, da die Wirbelviskosität wegen der verschwindenden Reynoldsschen Spannungen und mittleren Geschwindigkeitsprofile in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion nicht definiert ist. Um diese Schwierigkeit zu umgehen wird die Gültigkeit des k - ε Modells vorausgesetzt und ν_t nach Gl. (5.27) mit dem Standardwert $C_\mu = 0.09$ aus den Simulationsergebnissen für k und ε berechnet. Die turbulente Diffusivität κ_t kann entsprechend ihrer Definition

$$\kappa_t = \frac{\overline{u_3' T'}}{\overline{\frac{\partial T}{\partial x_3}}} \quad (5.34)$$

direkt aus den Simulationsergebnissen ausgewertet werden. Die so ermittelten vertikalen Profile der turbulenten Prandtl-Zahl zeigt Abb. 5.51. Dabei wurde für die Darstellung $Pr_t \leq 4$ erzwungen, um eine vernünftige Auflösung des Ordinatenbereichs zu erreichen. Für Natrium stimmt der Wert $Pr_t \approx 1$ in Kanalmitte gut mit der in Turbulenzmodellen verwendeten turbulenten Prandtl-Zahl überein. Die Analyse zeigt jedoch, daß Pr_t für die untersuchte Strömung keine - auch nicht bereichsweise - konstante Größe darstellt. Vielmehr sind starke Variationen über der Kanalhöhe festzustellen. Die hohen Werte von Pr_t in den Bereichen $x_3 < 0.2$ und $x_3 > 0.8$ sind auf die in Flüssigmetallen unterschiedlich dicken viskosen und thermischen Grenzschichten zurückzuführen. So gibt es einen Bereich, der außerhalb der viskosen, aber innerhalb der thermischen Grenzschicht liegt. In diesem Bereich ist demzufolge der turbulente Beitrag zum Gesamttransport von Impuls wesentlich, von Wärme aber nur von untergeordneter Bedeutung. Da mit

zunehmender Annäherung an die Wand wegen $\overline{u_3'T'} \rightarrow 0$ auch $\kappa_t \rightarrow 0$ strebt, aber $\nu_t \sim k^2/\varepsilon$ bis zum Erreichen der viskosen Grenzschicht noch in etwa konstant bleibt, steigt das Verhältnis ν_t/κ_t und damit die turbulente Prandtl-Zahl stark an. Für Luft ist die turbulente Prandtl-Zahl nach Abb. 5.51 lokal null. Dies liegt an Ansatz (5.29), der den turbulenten Wärmestrom als Gradientendiffusionsprozeß modelliert. Da in Luft eine isotherme Kernströmung vorliegt, verschwindet in diesem Bereich der Gradient des mittleren Temperaturprofils (vergl. Abb. 4.10) und liefert somit $Pr_t = 0$. Prinzipiell wird aber kein Turbulenzmodell in der Lage sein, mit dem Gradientenansatz (5.29) eine isotherme Kernströmung vorherzusagen.

Die vorgestellten Ergebnisse stellen die Eignung des Konzepts einer konstanten turbulenten Prandtl-Zahl zur Modellierung des turbulenten Wärmestroms für Naturkonvektionströmungen prinzipiell in Frage (siehe auch Grötzbach & Wörner (1992)). Vielversprechender erscheint der Weg der Reynoldsmodelle, auch für den turbulenten Wärmestrom eine eigene Transportgleichung zu lösen. Die Analyse von Termen dieser Gleichung sowie üblicher Schließungsannahmen ist Gegenstand des folgenden Abschnittes.

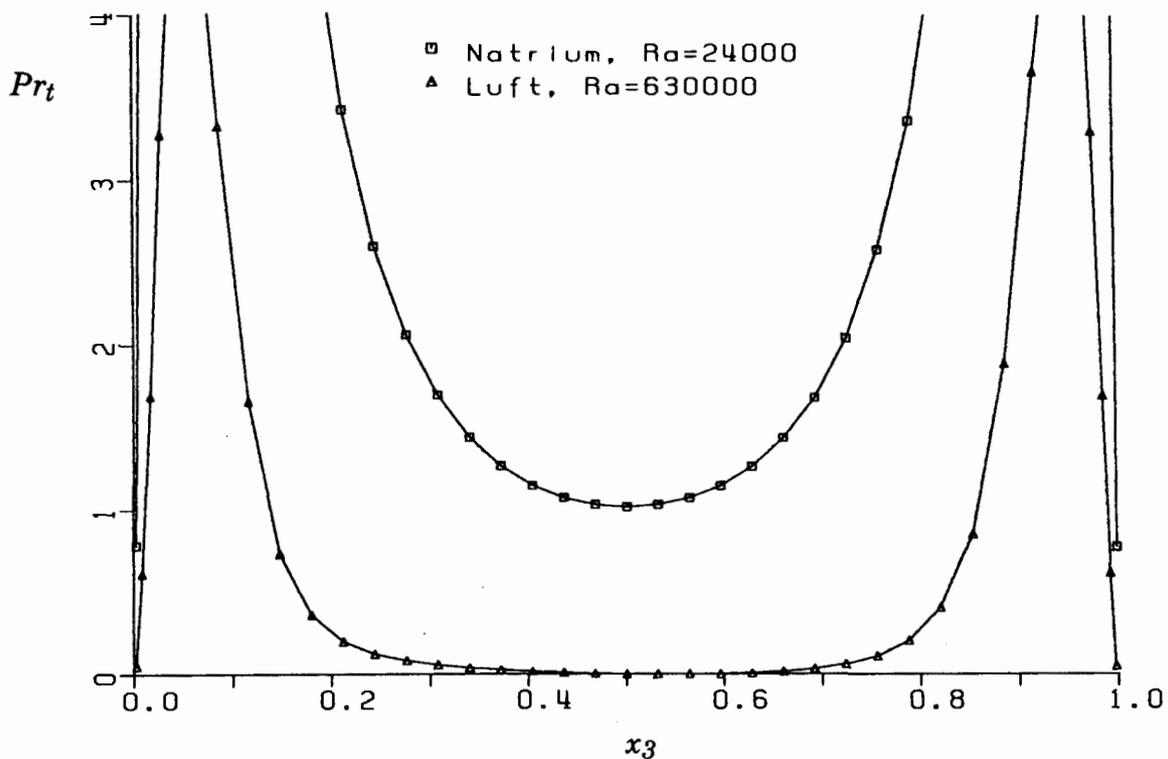


Abb. 5.51: Vertikale Profile der aus den Simulationsergebnissen ausgewerteten turbulenten Prandtl-Zahl. (□): Natrium, $Ra = 24\,000$; (△): Luft, $Ra = 630\,000$. Der Ordinatenbereich ist aus Darstellungsgründen auf Werte $Pr_t \leq 4$ eingeschränkt.

5.6.4 Transportgleichung für den turbulenten Wärmestrom

Auf ähnlichem Wege wie für die k -Gleichung kann auch für die turbulenten Wärmeströme $\overline{u_i T'}$ ($i = 1, 2, 3$) eine exakte Transportgleichung hergeleitet werden (siehe z.B. Hinze (1975)). In Rayleigh-Bénard-Konvektion existieren keine Wärmeströme in x_1 - und x_2 -Richtung. Der für TURBIT unter Mitwirkung von Hiltner (1993) entwickelte Analysemodul beschränkt sich daher auf die Transportgleichung für den turbulenten Wärmestrom in vertikaler Richtung $\overline{u_3 T'}$. In dieser Gleichung entfällt für turbulente Rayleigh-Bénard-Konvektion aufgrund des Fehlens eines mittleren Geschwindigkeitsfeldes der konvektive Transport und der Produktionsbeitrag durch das mittlere Geschwindigkeitsfeld. Für eingelaufene Strömung und mit der in TURBIT eingeführten Normierung ergibt sich damit die folgende Form

$$\begin{aligned}
 0 = - \frac{\partial}{\partial x_3} & \left(\overline{u_3'^2 T'} + \overline{p' T'} - \frac{1}{Pr \sqrt{Gr}} \overline{u_3' \frac{\partial T'}{\partial x_3}} - \frac{1}{\sqrt{Gr}} \overline{T' \frac{\partial u_3}{\partial x_3}} \right) \\
 & \qquad \qquad \qquad D_q \\
 - \overline{u_3'^2} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_3} + \overline{T'^2} & + \overline{p' \frac{\partial T'}{\partial x_3}} \\
 & \qquad \qquad P_q \qquad \qquad \qquad PS \\
 - \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(1 + \frac{1}{Pr} \right) \overline{\frac{\partial u_3}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial T'}{\partial x_i}} & \\
 & \qquad \qquad \qquad MV
 \end{aligned} \tag{5.35}$$

Die beiden Beiträge zum Produktionsterm P_q sind zum einen auf den Gradienten des mittleren Temperaturprofils und zum anderen auf Auftriebskräfte zurückzuführen. Daß der Term $\overline{T'^2}$ die Produktion durch Auftriebskräfte charakterisiert, ist nicht ohne weiteres zu erkennen. In Gl. (5.35) wurde jedoch berücksichtigt, daß die in dem entsprechenden dimensionsbehafteten Term auftretende Komponente des Schwerevektors für das hier betrachtete Koordinatensystem mit der negativen x_3 -Richtung zusammenfällt.

Der molekulare Vernichtungsterm MV verschwindet nur für den Fall isotroper Turbulenz. Dann ist die Druck-Temperaturgradienten-Korrelation PS ("pressure-scrambling"), die das Gegenstück zur Druck-Scher-Korrelation ("pressure-strain") der $\overline{u_i' u_j'}$ -Gleichung ist, der einzige Senkenterm. Die Diffusion D_q setzt sich aus einem turbulenten (1. und 2. Glied) und einem molekularen Anteil (3. und 4. Glied) zusammen und ist auch in der $\overline{u_3' T'}$ -Gleichung ein Term, der nur für die Umverteilung verantwortlich ist.

Abb. 5.52 zeigt die vertikalen Profile der verschiedenen Terme für Natrium für die Rayleigh-Zahl $Ra = 24\ 000$. Die Produktionsrate P_q ist innerhalb der Grenzschichten erwartungsgemäß relativ gering und weist in der Zentralregion des Kanals einen praktisch konstanten Wert auf. Der dominierende Senkenterm ist nicht die Druck-Temperaturgradienten-Korrelation, sondern die viskose Vernich-

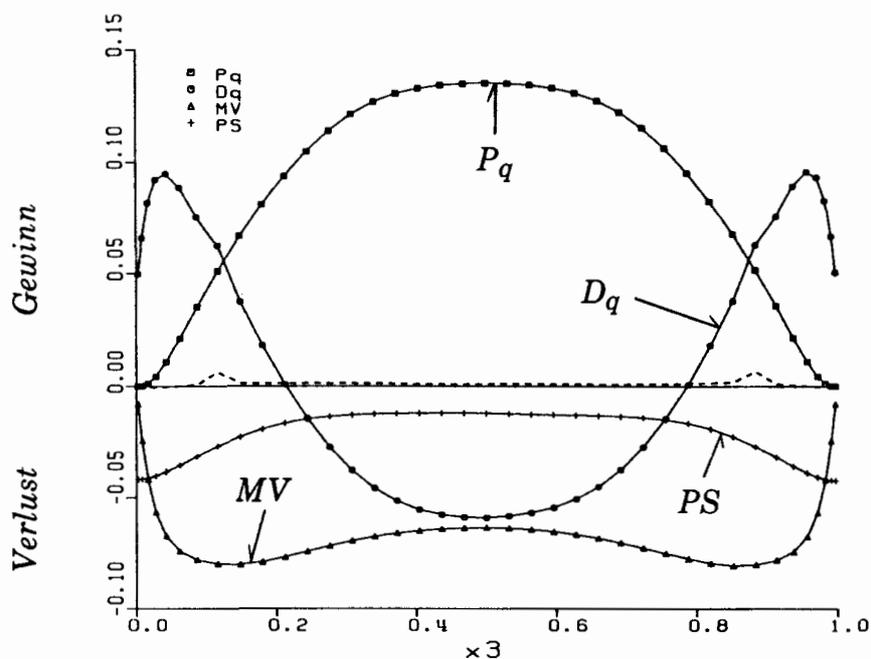


Abb. 5.52: Vertikale Profile von Termen der $\overline{u_3' T'}$ -Gleichung für Natrium, $Ra = 24\ 000$. P_q = Produktion, D_q = Diffusion, PS = Druck-Temperaturgradienten-Korrelation, MV = molekulare Vernichtung. Die unterbrochene Linie kennzeichnet die Bilanz-Differenz.

tung. Dies deutet daraufhin, daß die Strömung stark anisotrop ist. Die Diffusion D_q transportiert - ähnlich wie in der k -Gleichung - den Überschuß des Produktionsterms von der Zentralregion hin zu den Wänden, wo er vornehmlich durch die Druck-Temperaturgradienten-Korrelation vernichtet wird.

Die Bilanz des turbulenten Wärmestroms für Luft in Abb. 5.53 unterscheidet sich deutlich von der in Natrium. Dies liegt an der ganz unterschiedlichen Bedeutung des turbulenten Wärmestroms in beiden Simulationen. So erfolgt in Natrium die Wärmeübertragung zum größten Teil durch Wärmeleitung und nur ein kleiner Beitrag ist auf Konvektion zurückzuführen, was sich auch in der kleinen Nusselt-Zahl $Nu \approx 1.4$ ausdrückt. Demgegenüber ist in Luft mit $Nu \approx 7.2$ die turbulente Wärmeübertragung der dominante Mechanismus und der molekulare Beitrag nur von untergeordneter Bedeutung. Die Vernichtung von $\overline{u_3'T'}$ erfolgt in Luft im wesentlichen innerhalb der Grenzschichten durch die Druck-Temperaturgradienten-Korrelation. Die molekulare Vernichtung ist jedoch nicht null, sondern im Kernbereich der Strömung von gleicher Größe wie das PS -Glied und die Diffusion.

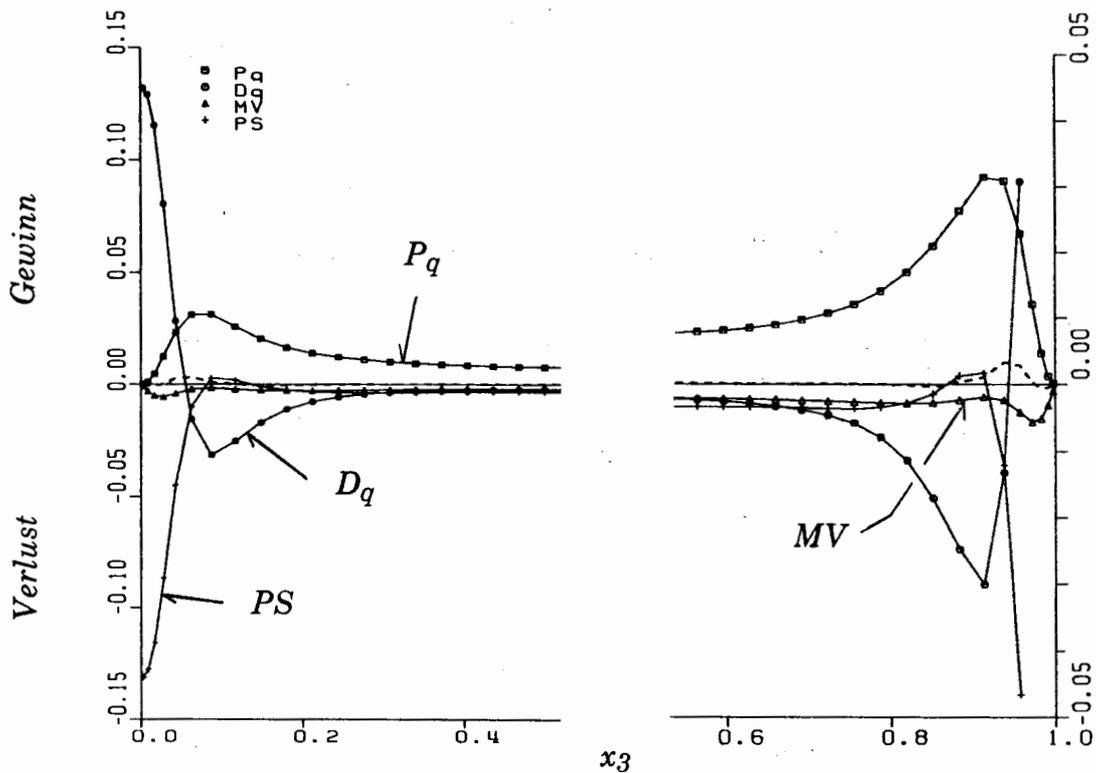


Abb. 5.53: Vertikale Profile von Termen der $\overline{u_3'T'}$ -Gleichung für Luft, $Ra = 630\,000$. P_q = Produktion, D_q = Diffusion, PS = Druck-Temperaturgradienten-Korrelation, MV = molekulare Vernichtung. Die unterbrochene Linie kennzeichnet die Bilanz-Differenz. Aus Darstellungsgründen wurde für die linke und rechte Bildhälfte ein unterschiedlicher Ordinatenmaßstab gewählt.

Demzufolge sollte die molekulare Vernichtung in Strömungen, in denen Auftriebseffekte eine Rolle spielen, nicht, wie es allgemein üblich ist, a priori vernachlässigt werden. Dies gilt insbesondere für Flüssigmetalle, bei denen die in dem molekularen Vernichtungsterm auftretenden Korrelationen wegen des Faktors $(1 + 1/Pr)$ besonders stark gewichtet werden.

Mit der in Reynoldsmodellen üblichen Annahme lokalisotroper Turbulenz verbleiben als Schließungsterme in Gl. (5.35) der Produktionsbeitrag durch Auftriebskräfte $\overline{T'^2}$, die Druck-Temperaturgradienten-Korrelation und der gesamte Diffusionsterm. Zur Modellierung der Druck-Temperaturgradienten-Korrelation wird diese im allgemeinen unter Verwendung einer Poissongleichung für die Druckfluktuationen in drei Anteile aufgespaltet, die jeweils einzeln modelliert werden [Launder (1976)]. Im Rahmen dieser Arbeit gehen wir auf die Analyse von Schließungsansätzen für die Druck-Temperaturgradienten-Korrelation nicht ein, befassen uns aber ausführlich mit Modellierungsansätzen für die Diffusion.

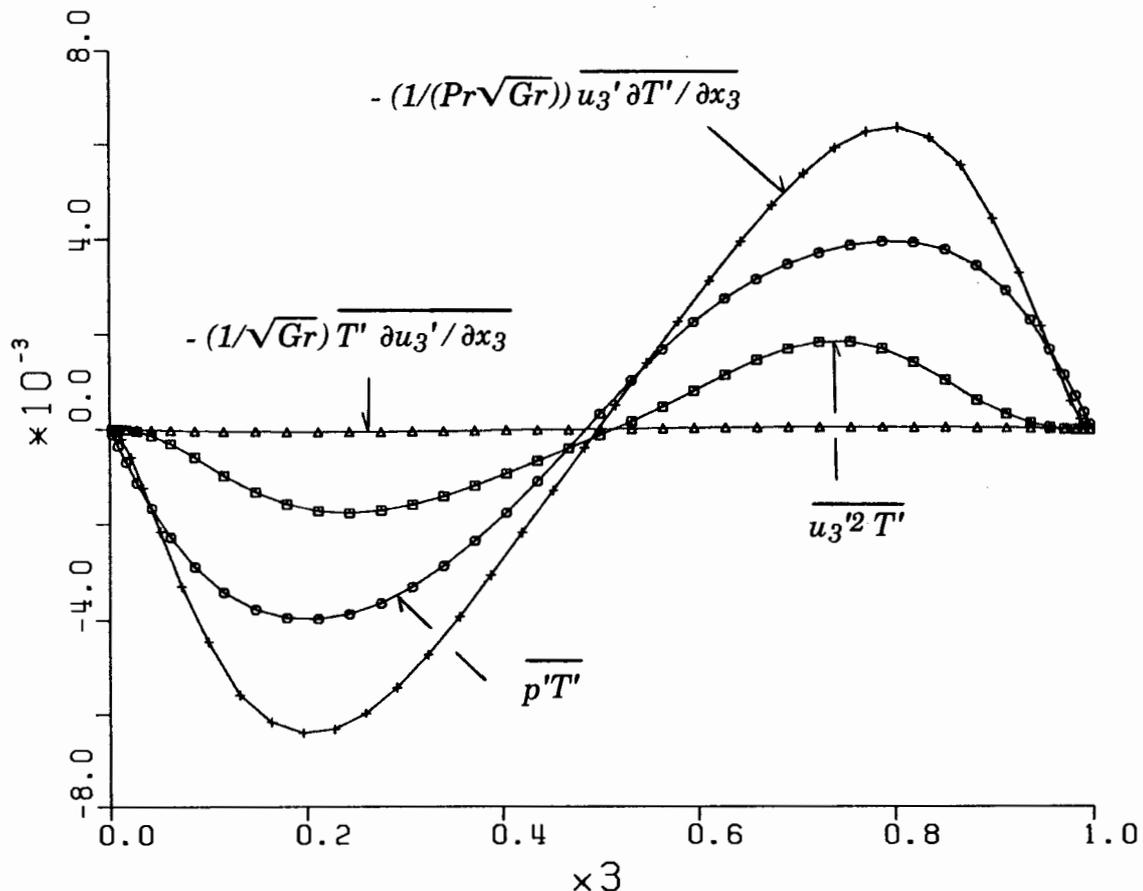


Abb. 5.54: Vertikale Profile der einzelnen Korrelationen im Diffusionsterm D_q der $u_3'T'$ -Gleichung für Natrium, $Ra = 24\,000$.

Üblicherweise wird bei der Modellierung der Diffusionsglieder in der turbulenten Wärmestrom-Transportgleichung sowohl die molekulare Diffusion als auch die Druckdiffusion vernachlässigt und lediglich dem Beitrag der Korrelation $\overline{u_3'^2 T'}$ Rechnung getragen [Launder (1976)]. In Abb. 5.54 sind für Natrium alle im Diffusionsterm D_q auftretenden Korrelationen mit ihren vertikalen Profilen, wie sie sich aus der Analyse der Simulationsdaten ergeben, dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, daß bis auf $-(1/\sqrt{Gr}) \overline{T' \partial u_3' / \partial x_3}$ alle Terme von Bedeutung sind und überdies das gleiche Vorzeichen haben. Für Flüssigmetalle leistet insbesondere die molekulare Diffusion über den Term $-(1/(Pr \sqrt{Gr})) \overline{u_3' \partial T' / \partial x_3}$ einen wesentlichen Beitrag zur vertikalen Umverteilung des turbulenten Wärmestroms. Bei der turbulenten Diffusion ist - ähnlich wie in der k -Gleichung - nicht die Dreifachkorrelation, sondern die Druck-Korrelation der dominierende Term.

Das konventionelle einfache Gradientenmodell zur Modellierung der turbulenten Diffusion hat die Form [Hossain & Rodi (1982)]

$$-\left(\overline{u_3'^2 T' + p' T'} \right) \approx -\overline{u_3'^2 T'} = 2 C_T \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_3'^2} \frac{\partial \overline{u_3' T'}}{\partial x_3} \quad (5.36)$$

Die Werte für C_T in der Literatur streuen etwas, liegen aber häufig im Bereich 0.1 - 0.2 [Chung et al. (1992)]. Das vertikale Profil des Koeffizienten C_T , das sich aus der Analyse der Simulationsergebnisse ergibt, zeigt Abb. 5.55. Dargestellt ist auch das vertikale Profil des Koeffizienten

$$C_{T'} = \frac{-\left(\overline{u_3'^2 T' + p' T'} \right)}{2 \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_3'^2} \frac{\partial \overline{u_3' T'}}{\partial x_3}}, \quad (5.37)$$

der einem Modell entspricht, bei dem für beide turbulenten Diffusionsanteile ein gemeinsamer Ansatz entsprechend der rechten Seite von Gleichung (5.36) gemacht wird. Der Knick beider Kurven bei $x_3 = 0.5$ ist auf den im Nenner auftre-

tenden Gradienten des turbulenten Wärmestroms zurückzuführen, der in Kanalmitte verschwindet.

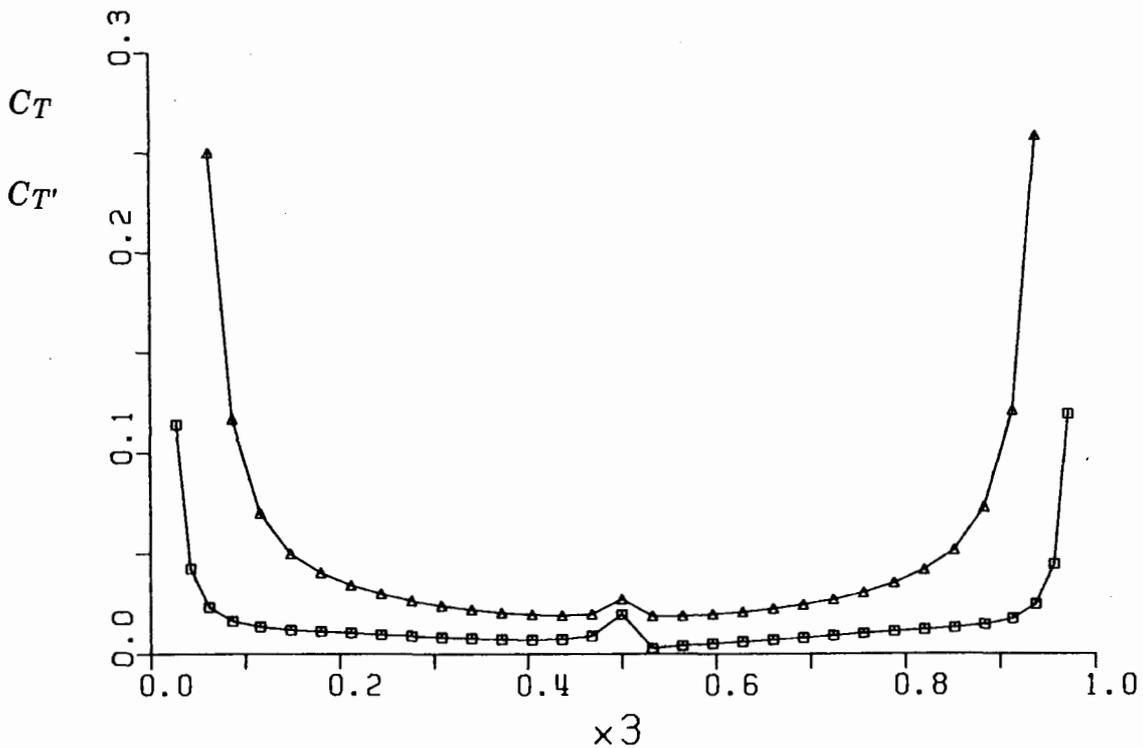


Abb. 5.55: Vertikale Profile von Modellkoeffizienten für die turbulente Diffusion von $u_3'T'$ für Natrium, $Ra = 24\,000$. (\square): C_T , Gl. (5.36); (Δ): C_T' , Gl. (5.37).

Für C_T ist insbesondere in der unteren Kanalhälfte (mit Ausnahme der viskosen Grenzschicht) ein nahezu konstanter Verlauf festzustellen. Der Modellansatz (5.36) scheint daher sinnvoll zu sein, auch wenn der Wert $C_T \approx 0.008$ über eine Größenordnung kleiner ist, als er in der Literatur üblicherweise angesetzt wird. Dieser wesentlich kleinere Wert von C_T ist darauf zurückzuführen, daß es bei der Analyse der Simulationsergebnisse gelingt, den Diffusionsbeitrag der Korrelation $\overline{u_3'^2 T'}$ wirklich zu separieren. Demgegenüber wird bei der experimentellen Bestimmung von C_T der Korrelation $\overline{u_3'^2 T'}$ praktisch immer die nicht meßbare Druckdiffusion und die molekulare Diffusion zugeschlagen. Der Wert von $C_T' \approx 0.02$ in Kanalmitte liegt demzufolge auch näher am Literaturwert von C_T . Der Bereich, in dem C_T' als näherungsweise konstant angesehen werden kann, ist nur relativ klein, da sich in der Korrelation $\overline{p'T'}$ die dicke Grenzschicht des Temperaturfeldes niederschlägt. Eine gemeinsame Modellierung der beiden turbulenten Diffusionsbeiträge nach Ansatz (5.37) erscheint daher nicht als sinnvoll. Vielmehr sollte der Korrelation $\overline{p'T'}$ mit einem eigenen Modell Rechnung getragen werden [siehe auch Wörner & Grötzbach (1993c)].

Zu dieser Schlußfolgerung gibt auch Abb. 5.56 Anlaß, in der die vertikalen Profile der Korrelationen $\overline{p'T'}$ und $\overline{u_3'^2 T'}$ für Luft angegeben sind. Die Dreifachkorrelation weist hier außerhalb der Grenzschichten ein der Korrelation $\overline{p'T'}$ entgegengesetztes Vorzeichen auf und ist um gut eine Größenordnung kleiner als letztere. Dies hat zur Folge, daß die Modellierungsansätze (5.36) und (5.37) versagen. Der Koeffizient C_T (dessen vertikales Profil hier nicht gezeigt ist) nimmt über weite Bereiche negative Werte an. Desweiteren treten, wie auch bei C_T , starke Variationen über der Kanalhöhe auf. Hier tritt wieder deutlich die Schwäche der Modellierung der turbulenten Diffusion mit einem Gradientenansatz zutage. Ein solcher Ansatz impliziert nämlich, daß für den Fall eines räumlich konstanten Wärmestroms keine Diffusion auftreten kann. Die Simulationsergebnisse für Luft zeigen jedoch, daß im Zentrum des Kanals ein Diffusionsbeitrag vorhanden ist (s. Abb. 5.53), obwohl der turbulente Wärmestrom in diesem Bereich konstant ist (s. Abb. 5.48).

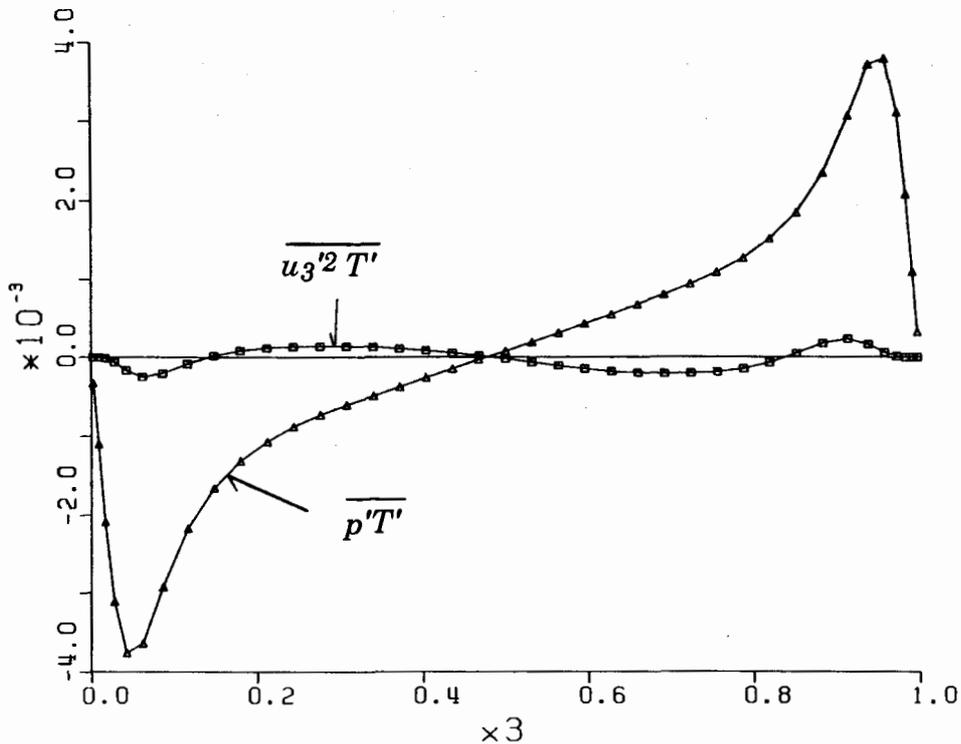


Abb. 5.56: Vertikale Profile von Korrelationen im Diffusionsterm D_q der $\overline{u_3'T'}$ -Gleichung für Luft, $Ra = 630\,000$.

Die große Bedeutung der molekularen Diffusion für die Umverteilung des turbulenten Wärmestromes macht eine Berücksichtigung dieses Beitrages für Flüssigmetallströmungen unumgänglich. Peeters & Henkes (1992) schreiben die molekularen Diffusionsterme um:

$$\frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{Pr} \overline{u_i' \frac{\partial T'}{\partial x_k}} + \overline{T' \frac{\partial u_i'}{\partial x_k}} \right) = \frac{1}{\sqrt{Gr}}$$

$$\left[\frac{\partial^2 \overline{u_i' T'}}{\partial x_k^2} + \left(\frac{1}{Pr} - 1 \right) \left(\overline{u_i' \frac{\partial^2 T'}{\partial x_k^2}} + \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial T'}{\partial x_k}} \right) \right]. \quad (5.38)$$

Der erste Term auf der rechten Seite ist im Rahmen eines Reynoldsspannungsmodells exakt. Den zweiten und dritten Term vernachlässigen die Autoren; eine Näherung, die für Fluide mit Prandtl-Zahlen um eins zulässig erscheint und für $Pr = 1$ exakt ist. Für Flüssigmetalle scheint die Identität (5.38) zunächst nicht weiterzuhelfen, da dann der zweite und dritte Term der rechten Seite dominant werden. Beachtenswert an der Darstellungsweise (5.38) für die molekulare Diffusion ist die Tatsache, daß als dritter Term der rechten Seite die Korrelation $\overline{\partial u_i' / \partial x_k \cdot \partial T' / \partial x_k}$ auftritt, welche ja den molekularen Vernichtungsprozeß darstellt. Da in Flüssigmetallen in der Bilanz des turbulenten Wärmestroms neben der molekularen Diffusion auch die molekulare Vernichtung von großer Bedeutung ist (vergl. Abb. 5.52), müssen beide in Turbulenzmodellen berücksichtigt werden. Aus der Identität (5.38) ergibt sich die Ansatzmöglichkeit, beide Prozesse in einem gemeinsamen Modell zusammenzufassen. So erhält man unter Heranziehung von Gleichung (5.38) die Darstellungsweise

$$\frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{Pr} \overline{u_i' \frac{\partial T'}{\partial x_k}} + \overline{T' \frac{\partial u_i'}{\partial x_k}} \right) - \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(1 + \frac{1}{Pr} \right) \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial T'}{\partial x_k}} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{Gr}} \frac{\partial^2 \overline{u_i' T'}}{\partial x_k^2} - \frac{2}{\sqrt{Gr}} \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial T'}{\partial x_k}} + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(\frac{1}{Pr} - 1 \right) \overline{u_i' \frac{\partial^2 T'}{\partial x_k^2}}. \quad (5.39)$$

Die ersten beiden Terme der rechten Seite stellen die auf die kinematische Viskosität zurückzuführenden Beiträge der molekularen Diffusion bzw. der molekularen Vernichtung (mit Faktor 2) dar. Der dritte Term beinhaltet die entsprechenden molekularen Vorgänge, die auf die thermische Diffusivität zurückzuführen sind. Der erste Term ist im Rahmen eines Reynoldsspannungsmodells exakt und braucht demzufolge nicht modelliert zu werden. Der zweite Term kann ohne weiteres vernachlässigt werden, da in Flüssigmetallen nur auf thermische Diffusionsmechanismen zurückzuführende molekulare Vorgänge relevant sind (vergl. Abb. 5.54). Die Berücksichtigung derselben kann über ein Modell des dritten Terms der rechten Seite von Gleichung (5.39) erfolgen. Ob das hier vorgeschlagene Konzept zur gemeinsamen Modellierung von molekularer Diffusion und molekularer Vernichtung brauchbar ist, muß sich im praktischen Einsatz in Rechenprogrammen mit statistischen Turbulenzmodellen erst herausstellen. Der Vorschlag ist hiermit zur Diskussion gestellt.

Nach Gl. (5.35) erfolgt die Produktion von turbulentem Wärmestrom in Rayleigh-Bénard-Konvektion zum einen durch das mittlere Temperaturfeld, zum anderen durch Auftriebseffekte. Abb. 5.57 zeigt das vertikale Profil beider Beiträge für die Simulation in Natrium mit $Ra = 24\,000$. Die Auftriebsproduktion aufgrund von $\overline{T'^2}$ ist demnach hier der wesentlich geringere Anteil. Dies ist auf den nur mäßi-

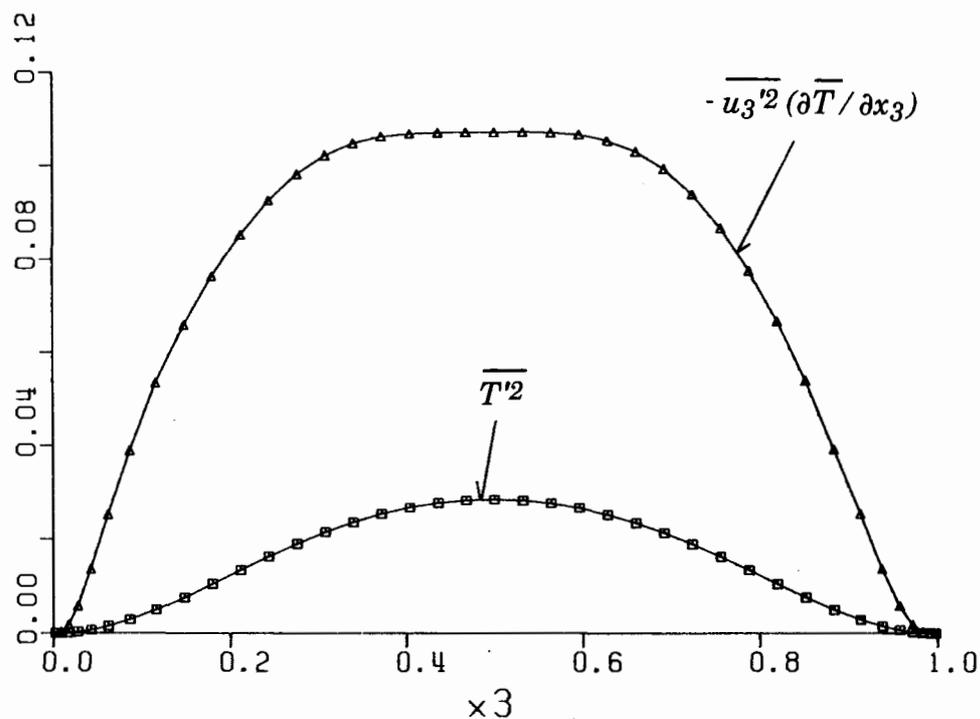


Abb. 5.57: Vertikale Profile der Beiträge zum Produktionsterm P_g in der $u_3''T'$ -Gleichung für Natrium, $Ra = 24\,000$. (□): $\overline{T'^2}$, (Δ): $-\overline{u_3'^2} \frac{\partial T'}{\partial x_3}$.

gen Turbulenzgrad des Temperaturfeldes zurückzuführen, der sich auch in den dicken thermischen Grenzschichten widerspiegelt. In Luft ist der Produktionsbeitrag des mittleren Temperaturfeldes wegen des isothermen Kerns im wesentlichen auf den Grenzschichttrand beschränkt und die Auftriebsproduktion im ganzen Kanal dominant, Abb. 5.58.

Die Schließung des Produktionsterms $\overline{T'^2}$ erfolgt üblicherweise, indem eine eigene Transportgleichung für die Temperaturschwankungsquadrate gelöst wird. Mit ihr und ihrer Modellierung beschäftigt sich der nächste Abschnitt.

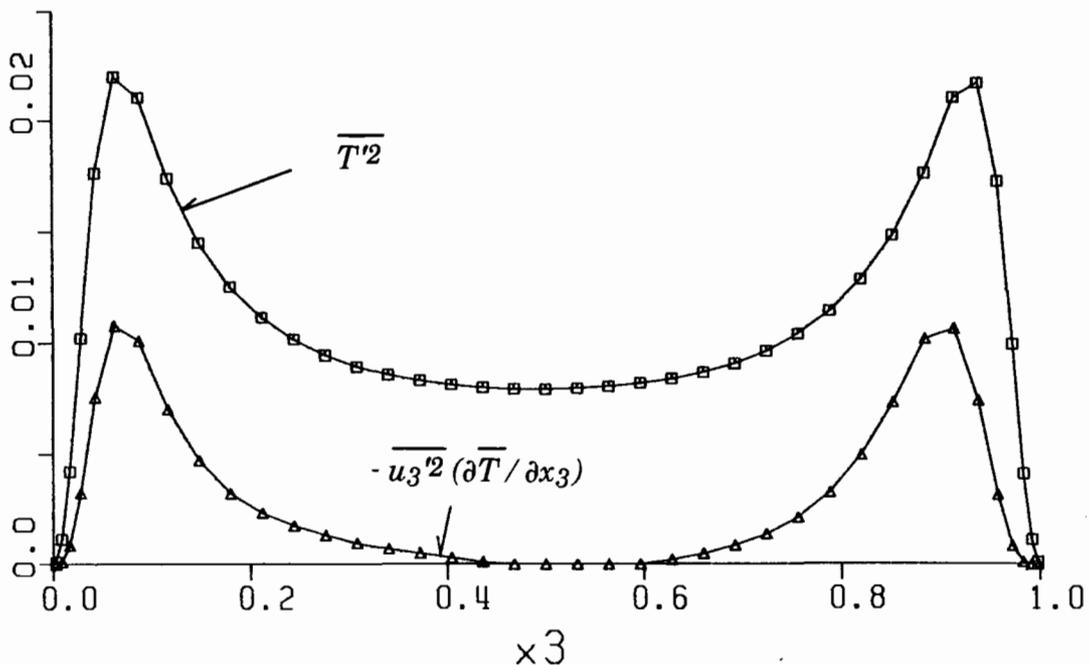


Abb. 5.58: Vertikale Profile der Beiträge zum Produktionsterm P_q in der $u_3 T'$ -Gleichung für Luft, $Ra = 630\,000$. (□): $\overline{T'^2}$, (Δ): $-\overline{u_3'^2} \partial \overline{T'}/\partial x_3$.

5.6.5 Transportgleichung für die Temperaturschwankungen

Aus der zeitabhängigen Energiegleichung und der gemittelten Energiegleichung (5.26) kann eine exakte Transportgleichung für $\overline{T'^2}/2$ hergeleitet werden [Corrsin (1952)]. Diese liefert ein charakteristisches Maß für die Temperaturfluktuationen. Sie kann damit als Gegenstück zur k -Gleichung, die ein Maß für die Geschwindigkeitsfluktuationen bereitstellt, aufgefaßt werden. Allerdings enthält die $\overline{T'^2}/2$ -Gleichung weder Druckfluktuationen, noch einen Auftriebsbeitrag. Für turbulente Rayleigh-Bénard-Konvektion und mit der in Abschnitt 3.1 eingeführ-

ten Normierung hat die $\overline{T'^2/2}$ -Gleichung die Form

$$0 = - \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\overline{u_3' T'^2/2} - \frac{1}{Pr \sqrt{Gr}} \frac{\partial \overline{T'^2/2}}{\partial x_3} \right) \quad D_g$$

$$- \overline{u_3' T'} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_3} - \frac{1}{Pr \sqrt{Gr}} \frac{\partial T'}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial T'}{\partial x_j} \quad P_g \quad \varepsilon_g \quad (5.40)$$

Die physikalische Bedeutung der einzelnen Terme ist entsprechend der k - und $\overline{u_3' T'}$ -Gleichung: D_g = Diffusion (mit einem turbulenten und einem molekularen Anteil), P_g = Produktion durch das mittlere Temperaturfeld, ε_g = Dissipation von $\overline{T'^2/2}$.

Die vertikalen Profile der einzelnen Terme für Natrium und $Ra = 24\,000$ zeigt Abb. 5.59 und für Luft Abb. 5.60. Die Bilanzen für beide Fluide sind wegen des ganz unterschiedlichen Turbulenzgrades des Temperaturfeldes sehr verschieden. In beiden spielt jedoch die Diffusion als Umverteilungsprozeß wieder eine wesentliche Rolle. Interessant ist insbesondere die Simulation für Luft. Hier erfolgt die Produktion von $\overline{T'^2/2}$ im wesentlichen im Übergangsbereich zwischen thermischer Grenzschicht und Kernströmung. Der Überschuß von P_g in diesem Bereich wird durch die Diffusion sowohl in die Grenzschicht als auch in den Zentralbereich des Kanals umverteilt. In Natrium erstrecken sich die thermischen Grenzschichten nahezu über den gesamten Kanal, so daß der Diffusionsterm D_g wesentlich durch den molekularen Beitrag bestimmt ist, Abb. 5.61. Für Flüssigmetalle ist es daher wichtig, die molekulare Diffusion von $\overline{T'^2/2}$ in der Transportgleichung zu berücksichtigen und sie nicht - wie es für konventionelle Fluide allgemein üblich und zulässig ist - einfach zu vernachlässigen.

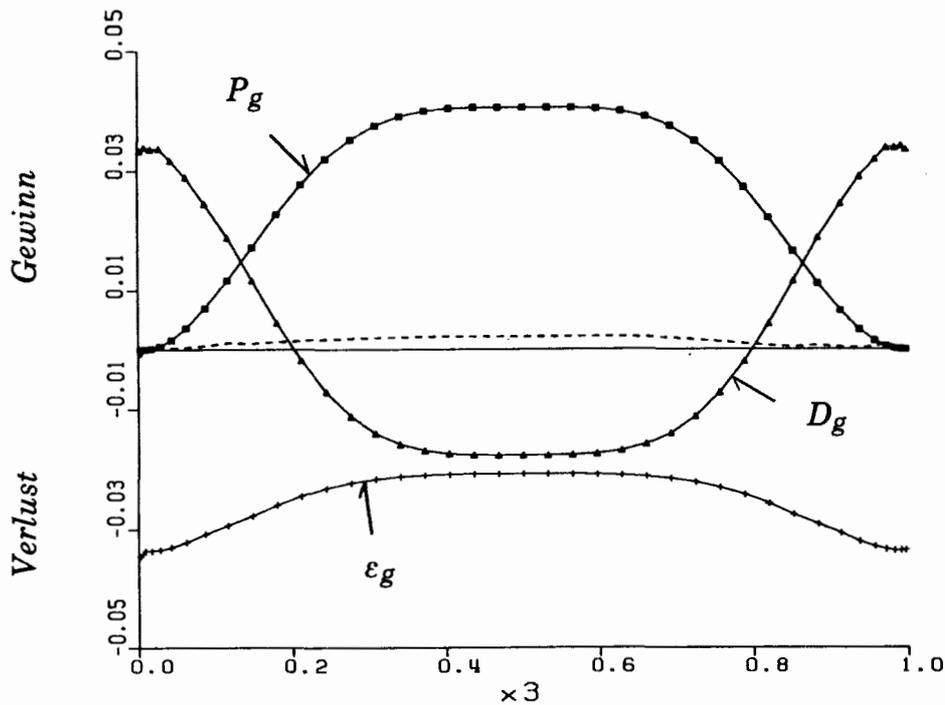


Abb. 5.59: Vertikale Profile von Termen der $\overline{T'^2/2}$ -Gleichung für Natrium, $Ra = 24\,000$. (\square): P_g , (Δ): D_g , (+): ϵ_g . Die unterbrochene Linie kennzeichnet die Bilanz-Differenz.

Das weithin verwendete Modell für die turbulente Diffusion von $\overline{T'^2/2}$ ist vom Gradiententyp [Spalding (1971)]:

$$-\overline{u_3' T'^2/2} = C_{TT} \frac{k^2}{\epsilon} \frac{\partial \overline{T'^2/2}}{\partial x_3} \quad (5.41)$$

Eine Analyse dieses Ansatzes macht für Natrium aufgrund des kleinen Turbulenzgrades des Temperaturfeldes nur wenig Sinn, so daß hier darauf verzichtet wird. Chung et al. (1992) kommen in einer vergleichenden Studie, in der sie verschiedene Modelle für $\overline{u_i' T'^2/2}$ anhand experimenteller Daten unterschiedlicher auftriebsbeeinflusster Strömungen testen, zu dem überraschenden Ergebnis, daß Ansatz (5.41) gegenüber komplexeren Modellen am besten abschneidet. Die Analyse des Koeffizienten für Luft in Abb. 5.62 kann dieses Ergebnis für Rayleigh-Bénard-Konvektion nicht bestätigen. Die Singularitäten in Kanalmitte belegen einmal mehr, daß die Schließung von Korrelationen mit Gradientenmodellen für Strömungen, bei denen die Gradienten mittlerer Größen bzw. von Turbulenzgrößen verschwinden, vermieden werden sollte. Die starke Ortsabhängigkeit des Koeffizienten C_{TT} deutet zudem auf grundsätzliche Mängel des Ansatzes hin.

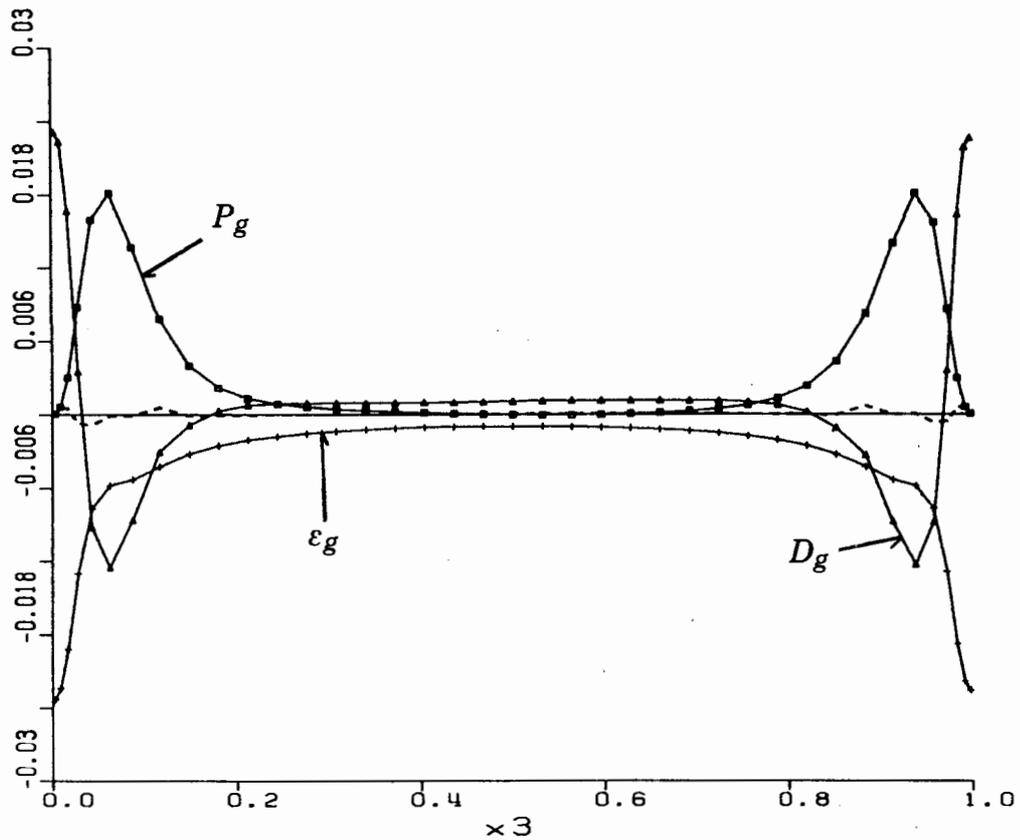


Abb. 5.60: Vertikale Profile von Termen der $\overline{T'^2/2}$ -Gleichung für Luft, $Ra = 630\,000$. (\square): P_g , (Δ): D_g , (+): ε_g . Die unterbrochene Linie kennzeichnet die Bilanz-Differenz.

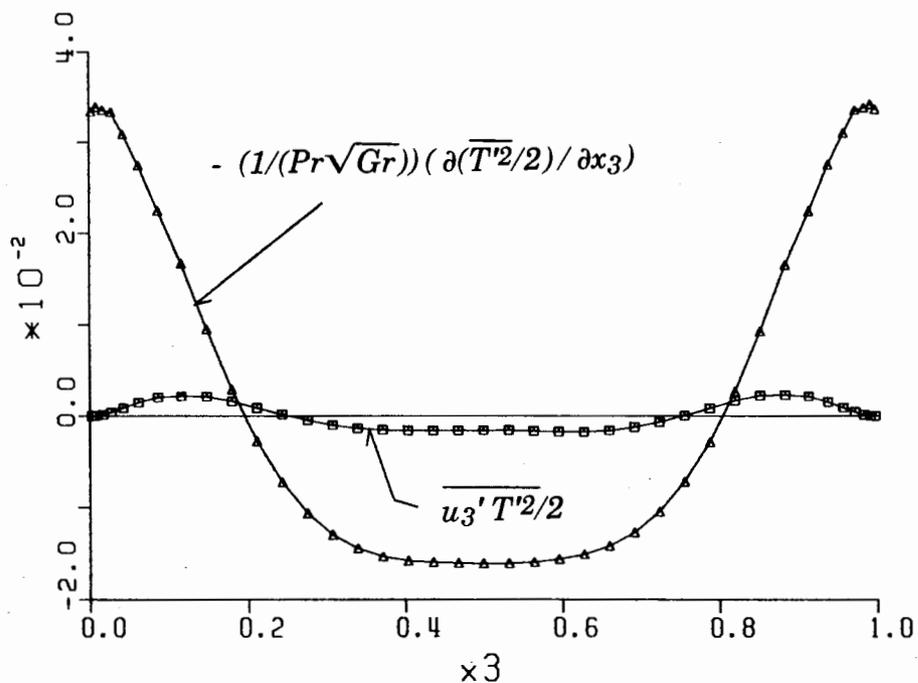


Abb. 5.61: Vertikale Profile der Beiträge zum Diffusionsterm D_g der $\overline{T'^2/2}$ -Gleichung für Natrium, $Ra = 24\,000$. (\square): $u_3'T'^2/2$ (turbulenter Anteil), (Δ): $-(1/(Pr\sqrt{Gr})) \cdot (\partial(\overline{T'^2/2})/\partial x_3)$ (molekularer Anteil).

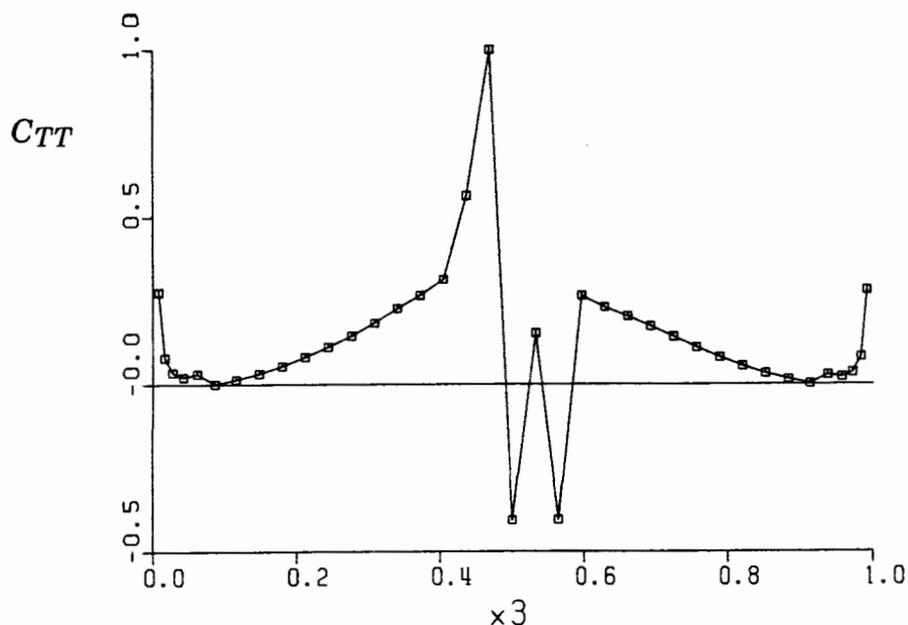


Abb. 5.62: Vertikales Profil des Modellkoeffizienten C_{TT} von Ansatz (5.41) für Luft, $Ra = 630\,000$.

Wenden wir uns nun der Dissipation ε_g zu. Für diese Größe kann (ebenso wie für ε) eine eigene Transportgleichung hergeleitet werden. Auf diese Erhaltungsgleichung sowie ihre Modellierung gehen wir hier nicht ein. Stattdessen befassen wir uns mit einem Schließungsansatz für ε_g , der häufig auch in Reynoldsmodellen verwendet wird. Er beruht auf der Annahme, daß die Dämpfung von Temperaturfluktuationen durch molekulare Vorgänge in enger Beziehung steht zur entsprechenden Dämpfung der Geschwindigkeitsfluktuationen. Die Dissipation von $\overline{T'^2}/2$ wird daher proportional zur Dissipation ε der kinetischen Turbulenzenergie angesetzt [Launder (1975)]:

$$\varepsilon_g = \frac{1}{R} \frac{\overline{T'^2}/2}{k} \varepsilon. \quad (5.42)$$

Dabei ist R ein als konstant angenommenes Verhältnis der charakteristischen Zeitskalen der Temperatur- und Geschwindigkeitsfluktuationen. Experimente zeigen jedoch, daß dieses Zeitskalenverhältnis stark von der Strömungssituation abhängt [Launder (1976)]. So finden Warhaft & Lumley (1978) für den Zerfall der Geschwindigkeits- und Temperaturfluktuationen hinter einem beheizten Gitter $R \approx 1$. Béguier et al. (1978) ermitteln aus verschiedenen Studien der thermischen

Turbulenz in dünnen Scherströmungen einen nahezu gleichförmigen Verlauf mit einem Wert $R \approx 0.5$. Die experimentellen Ergebnisse von Shabbir & Taulbee (1990) zeigen, daß der Wert von R wesentlich von der Stärke der vorhandenen Auftriebskräfte beeinflusst wird. Sie ermitteln für eine Auftriebsfahne in Luft $R \approx 0.25$ und stellen eine Variation des Zeitskalenverhältnisses über der Geometrie fest.

Die Auswertung des Zeitskalenverhältnisses aus den Simulationsergebnissen für Luft zeigt eine starke Variation von R über der Kanalhöhe, Abb. 5.63. Die Werte $0.4 \leq R \leq 0.9$ passen dabei recht gut zu dem in Experimenten beobachteten Streubereich. Für Natrium ist für R eine Abhängigkeit von der Rayleigh-Zahl und damit vor allem vom Turbulenzgrad des Temperaturfeldes festzustellen. Der Maximalwert von R in Kanalmitte für $Ra = 24\ 000$ liegt lediglich bei $R \approx 0.12$ und damit weit unterhalb der in Turbulenzmodellen praktisch verwendeten Werte.

Der sehr kleine Wert für R in Natrium ist angesichts der Ergebnisse des Abschnitts 5.5 nicht überraschend. Die Visualisierung der Simulationsergebnisse für die Rayleigh-Zahl $Ra = 12\ 000$ hat bereits gezeigt, daß in Flüssigmetallen turbulente Vorgänge im Temperaturfeld wesentlich langsamer ablaufen als im Geschwindigkeitsfeld und somit unterschiedliche Zeitskalen vorliegen. Während R

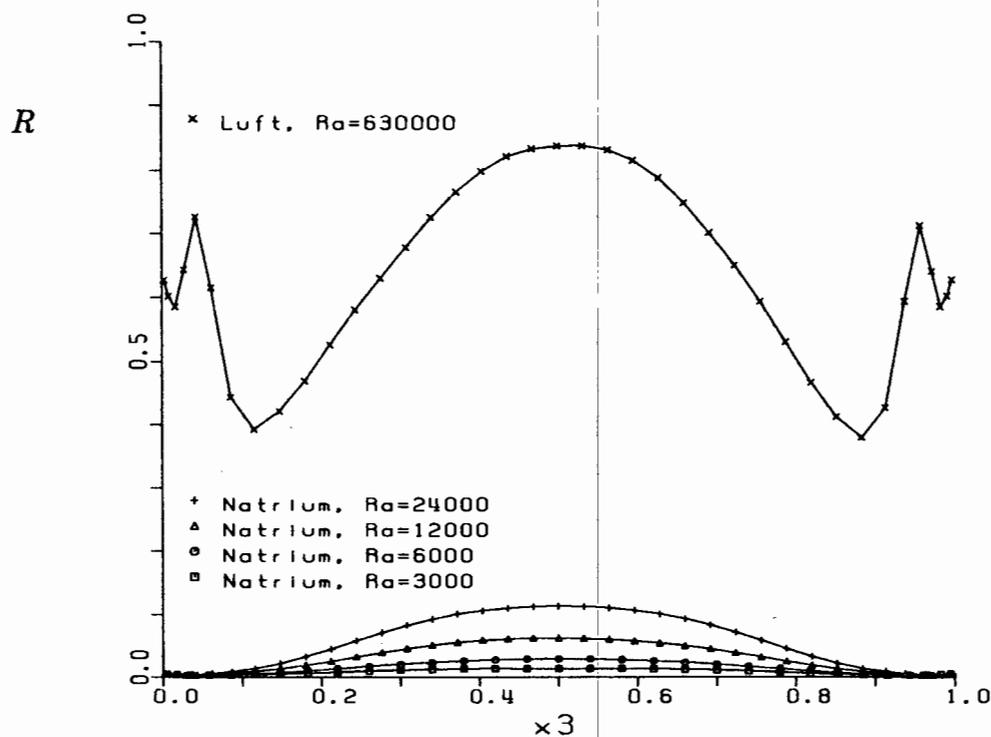


Abb. 5.63: Vertikale Profile des analysierten Zeitskalenverhältnisses R für Natrium und Luft.

für Natrium in Kanalmitte mit wachsender Rayleigh-Zahl ansteigt, bleibt der Wert in Wandnähe konstant und liegt bei $R \approx 0.005$ in der wandnächsten Masche. Dies bestätigt das aus einer Taylorreihenentwicklung abgeleitete Ergebnis, daß das Zeitskalenverhältnis R für isotherme Randbedingungen mit $x_3 \rightarrow 0$ gegen die molekulare Prandtl-Zahl strebt [Nagano et al. (1991)]. Ist als Randbedingung dagegen ein konstanter Wandwärmestrom vorgegeben, so liefert der Grenzübergang $x_3 \rightarrow 0$ das Resultat $R \rightarrow \infty$.

Zusammenfassend erscheint eine Modellierung der Dissipation ε_g über Ansatz (5.42) mit konstantem Zeitskalenverhältnis R wegen dessen Abhängigkeit vom Turbulenzgrad, der Prandtl-Zahl, den thermischen Randbedingungen und der Variation über der Geometrie als unbefriedigend. Stattdessen sollte, wie es Lumley & Khajeh-Nouri (1974) vorschlagen, in der Tat die Lösung einer Transportgleichung für ε_g in Betracht gezogen werden. Dies gilt ganz besonders für k - ε - $\overline{T'^2}$ Turbulenzmodelle. Erfolgt in einem solchen Modell die Berechnung des turbulenten Wärmestroms z.B. über den Ansatz von Meroney (1976)

$$\overline{u_3' T'} = C_H \frac{k \cdot \overline{T'^2}}{2 \varepsilon_g} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_3}, \quad (5.43)$$

so kommt daraus bei Verwendung des ε_g -Modells (5.42):

$$\overline{u_3' T'} = C_H R \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_3} = \frac{C_H R}{C_\mu} \nu_t \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_3}. \quad (5.44)$$

Das heißt, man endet wieder bei dem Konzept der turbulenten Prandtl-Zahl, wobei sich hier aus den Standardwerten $C_H = 0.1$, $C_\mu = 0.09$, $R = 0.8$ der Wert $Pr_t = 1.125$ ergeben würde. Dies bedeutet, sofern die Varianz der Temperaturfluktuationen nicht noch an anderer Stelle in Modellannahmen eingeht, daß eine Lösung der $\overline{T'^2}$ -Gleichung nur dann wirklich Sinn macht, wenn auch für ε_g eine Transportgleichung gelöst wird. So bewerten auch Chung & Sung (1984) die Einführung eines variablen, von der thermischen Schichtung abhängigen Zeitskalenverhältnisses R als den wesentlichen Vorteil eines k - ε - $\overline{T'^2}$ - ε_g -Turbulenzmodells.

6. Schlußbetrachtung

In dieser Arbeit wird die direkte Simulationsmethode herangezogen, um auf numerischem Wege Einblick in die grundlegenden strömungsmechanischen Vorgänge bei turbulenter Naturkonvektion in flüssigem Natrium zu erlangen. Die Simulationsergebnisse dienen darüber hinaus dazu, statistische Eigenschaften solcher Strömungen aufzuzeigen. Deren Kenntnis und Verständnis bildet die Voraussetzung, um für technische Anwendungen (mit i.a. wesentlich höheren Turbulenzgraden als derzeit mit der direkten Simulationsmethode erreichbar) mit Hilfe von statistischen Turbulenzmodellen realistische Vorhersagen der Wärmeübertragungsvorgänge in Naturkonvektionsströmungen allgemein und in Natrium im besonderen zu erhalten. Gegenstand der numerischen Untersuchungen ist die Rayleigh-Bénard-Konvektion. Sie kann als ein einfaches physikalisches Modellproblem für Wärmeübertragungsvorgänge durch Naturkonvektion angesehen werden.

6.1 Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse

6.1.1 Numerisches Verfahren

Die Ausgangsbasis für die Durchführung der numerischen Simulationen ist das Rechenprogramm TURBIT. Das ursprünglich zugrunde liegende vollexplizite Zeitintegrationsverfahren ist für die direkte Simulation von Naturkonvektion in Flüssigmetallen äußerst ineffizient. Dies liegt daran, daß aus Stabilitätsgründen die Auflösung der für solche Fluide sehr kleinen Zeitskala thermischer Diffusionsvorgänge notwendig ist, was eine starke Restriktion der Zeitschrittweite mit sich bringt. Wesentlich effizienter sind hier halbimplizite Zeitintegrationsverfahren für die Energiegleichung mit impliziter Behandlung der Diffusionsterme. Bei einem solchen Verfahren orientiert sich das Stabilitätskriterium zur Bestimmung der Zeitschrittweite wesentlich stärker an der für die Turbulenz relevanten und deutlich langsameren Zeitskala der konvektiven Vorgänge. Als geeignete halbimplizite Verfahren für die Implementierung in TURBIT erweisen sich das Leapfrog-Crank-Nicolson- und das Adams-Bashforth-Crank-Nicolson-Verfahren. Beide alternativ in TURBIT verwendbaren Methoden ermöglichen - je nach Anwendungsfall - eine Steigerung der Zeitschrittweite um einen Faktor von ca. 10-40. Von ähnlicher Größe ist auch die effektive Rechenzeiteinsparung, da der zusätzliche numerische Aufwand beider Verfahren für die Lösung einer Helmholtz-Gleichung für das Temperaturfeld bei Verwendung eines vorhandenen und ent-

sprechend modifizierten direkten Lösers auf lediglich 10-20% des expliziten Verfahrens beschränkt bleibt. Mit dieser methodischen Erweiterung von TURBIT sind die Voraussetzungen geschaffen, um die beabsichtigten Simulationen mit vertretbarem Rechenaufwand durchführen zu können. Zur Verifikation der neuen Simulationsmethode wurde erfolgreich ein Benchmark zur Konvektion eines Fluides mit kleiner Prandtl-Zahl sowie ein Experiment zur Rayleigh-Bénard-Konvektion in Luft ($Ra = 630\,000$) nachgerechnet.

6.1.2 Phänomenologie der Konvektion

Die durchgeführten Simulationen von Rayleigh-Bénard-Konvektion in flüssigem Natrium (Prandtl-Zahl $Pr = 0.006$) umfassen den Rayleigh-Zahlen-Bereich $3\,000 \leq Ra \leq 24\,000$. Im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen ist für die Nusselt-Zahl eine befriedigende, für den RMS-Wert der Temperaturfluktuationen eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen.

Die Analyse der räumlichen und zeitlichen Strukturen der Konvektion zeigt, daß das Temperaturfeld bei allen betrachteten Rayleigh-Zahlen durch großräumige Strukturen geprägt ist und nur relativ niederfrequente räumliche und zeitliche Fluktuationen auftreten. Demgegenüber laufen turbulente Vorgänge im Geschwindigkeitsfeld wesentlich rascher ab, und es finden sich neben den durch das Temperaturfeld aufgeprägten großräumigen Strukturen auch sehr kleinskalige Wirbel.

Als vorherrschende Konvektionsform bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 3\,000$ wird die Trägheitskonvektion identifiziert. Sie ist gekennzeichnet durch großräumige zweidimensionale Wirbel, in denen das Fluid wie ein Starrkörper rotiert. Auch für die Rayleigh-Zahlen $Ra = 6\,000$, $Ra = 12\,000$ und $Ra = 24\,000$ ist in bestimmten Bereichen und über kürzere Zeiträume die Trägheitskonvektion anzutreffen. Ihr Auftreten ist dabei gekoppelt an Strömungsbereiche, die durch ein ausgesprochen zweidimensional ausgerichtetes Temperaturfeld gekennzeichnet sind. Das Temperaturfeld selbst zeigt einen aperiodischen Wechsel zwischen einem mehr regelmäßigen und einem mehr ungeordneten Zustand. Dieses Verhalten und das mit dem mehr regelmäßigen Muster gekoppelte Auftreten der Trägheitskonvektion kann aus der unterschiedlichen Bedeutung der diffusiven und nichtlinearen Terme in der Energie- bzw. der Impulsgleichung erklärt werden.

Mit wachsender Rayleigh-Zahl wird der Charakter von Geschwindigkeits- und Temperaturfeld zunehmend dreidimensional. Die Konvektion ist dann nicht mehr geprägt durch Trägheitseffekte, sondern durch die Wechselwirkung von Ablösevorgängen, die aufgrund der instabilen thermischen Schichtung an den beiden Wänden einsetzen. Charakteristisch für diesen Übergang ist das Auftreten von Knoten und Speichenstrukturen am inneren Rand der viskosen Grenzschichten. Diese Strukturen, die in Natrium verstärkt ab $Ra = 12\,000$ zu beobachten sind, stellen auch das charakteristische Konvektionsmuster in Rayleigh-Bénard-Konvektion von Luft mit $Ra = 630\,000$ dar. Da beide Simulationen zwar eine ganz unterschiedliche Rayleigh-Zahl, aber eine vergleichbare Grashof-Zahl aufweisen, bestätigt diese Beobachtung anschaulich das aus dem Vergleich eindimensionaler Energiespektren abgeleitete Ergebnis, daß in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion für kleinräumige Strukturen im Geschwindigkeitsfeld eine Skalierung mit der Grashof-Zahl vorliegt.

6.1.3 Statistische Beschreibung der Turbulenz

Die Auswertung von Termen in der exakten Transportgleichung für die kinetische Turbulenzenergie k zeigt, daß in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion von Natrium und Luft ein lokales Gleichgewicht zwischen Produktion von k und Dissipation ε nicht gegeben ist. Die Umverteilung des Überschusses von k von der Zentralregion hin zu den Wänden erfolgt dabei durch diffusiven Transport. Im Verlauf der Produktion und der Diffusion von k ist für Natrium und Luft ein deutlicher Unterschied festzustellen. Demgegenüber führt die Analyse der Dissipation für beide Fluide auf ganz ähnliche Ergebnisse. Dies ist darauf zurückzuführen, daß das in Natrium und Luft ganz unterschiedliche Temperaturfeld - im Gegensatz zur Produktion - auf die Dissipation keinen direkten Einfluß hat, und diese nur durch die kleinskaligen Wirbel des Geschwindigkeitsfeldes bestimmt wird. Letztere skalieren aber mit der Grashof-Zahl, die für die betrachteten Simulationen von vergleichbarer Größenordnung ist. Aufgrund dieses Ergebnisses kann gefolgert werden, daß für die Schließung von Termen der ε -Gleichung bewährte Modellansätze für Flüssigmetallströmungen im wesentlichen übernommen werden können und keine spezielle Anpassung an Effekte der molekularen Prandtl-Zahl notwendig erscheint.

Bei der Modellierung des turbulenten Wärmetransportes erweist sich das im k - ϵ Turbulenzmodell verwendete Konzept der turbulenten Prandtl-Zahl für auftriebsdominierte Strömungen als ungeeignet, da es nicht in der Lage ist, den für diese Strömungen typischen Anisotropieeffekten Rechnung zu tragen. Realistische Vorhersagen des turbulenten Wärmetransportes in Naturkonvektionsströmungen erscheinen nur mit Modellen möglich, die auf der Transportgleichung des turbulenten Wärmestroms $\overline{u_3'T'}$ basieren. Die Analyse von Termen dieser Gleichung verdeutlicht, daß - ähnlich wie in der k -Gleichung - auch für die Bilanz des turbulenten Wärmestroms die Diffusion als Umverteilungsprozeß eine wichtige Rolle spielt. Darüber hinaus stellt neben der Druck-Temperaturgradienten-Korrelation der nur für den Fall isotroper Turbulenz verschwindende molekulare Vernichtungsterm in auftriebsdominierten Strömungen eine wichtige Senke dar. Insbesondere in Natrium sind in Transportgleichungen turbulenter Größen alle auf molekulare Vorgänge im Temperaturfeld zurückzuführenden Terme wesentlich. Bei der Modellierung der Wärmestrom-Transportgleichung sollte deshalb die molekulare Vernichtung und die molekulare Diffusion nicht, wie allgemein üblich, einfach vernachlässigt werden, sondern durch noch zu entwickelnde Schließungsansätze berücksichtigt werden. Ebenso sollte für Natrium in der Erhaltungsgleichung für die Temperaturschwankungsquadrate der molekulare Diffusionsterm berücksichtigt werden. Die Analyse des üblichen Schließungsansatzes für die Dissipation ϵ_g in der $\overline{T'^2}$ -Gleichung ergibt, daß das Verhältnis der charakteristischen Zeitskalen der Turbulenz von Impuls- und Temperaturfeld nicht - wie allgemein angesetzt - konstant ist, sondern vom Turbulenzgrad und in Wandnähe auch von den thermischen Randbedingungen und der molekularen Prandtl-Zahl abhängt.

Eine detaillierte Analyse der turbulenten Diffusionsterme in der k - und $\overline{u_3'T'}$ -Gleichung zeigt, daß sowohl in Natrium als auch in Luft Diffusion im wesentlichen auf Druckschwankungen und in weit geringerem Maße auf Geschwindigkeitsfluktuationen zurückzuführen ist. Dieses Ergebnis steht im Gegensatz zu Zwangsströmungen, in denen die Druckdiffusion nur von untergeordneter Bedeutung ist. Aus diesem Grund wird in üblichen Turbulenzmodellen die Diffusion aufgrund von Druckschwankungen vernachlässigt. Die hier vorgestellten Analyseergebnisse zeigen jedoch, daß eine adäquate Modellierung der Druckdiffusion Voraussetzung ist, um mit statistischen Turbulenzmodellen realistische Vorhersagen des Impuls- und Wärmetransportes in Naturkonvektion erhalten zu können.

6.2 Ausblick

Aus den Ergebnissen dieser Arbeit ergeben sich verschiedene Ansatzpunkte für weiterführende Untersuchungen zur Rayleigh-Bénard-Konvektion in Flüssigmetallen. So kann mit der direkten Simulationsmethode, insbesondere für den in dieser Arbeit nicht betrachteten Rayleigh-Zahlen-Bereich $1\,708 \leq Ra < 3\,000$, der Übergang von stationärer zu zeitabhängiger Konvektion in Natrium genauer untersucht werden. Darüber hinaus bietet es sich an, zu untersuchen, inwieweit die in flüssigem Natrium ($Pr = 0.006$) beobachteten Konvektionsformen auch in Quecksilber ($Pr \approx 0.02$) auftreten. Damit könnte ein wichtiger Beitrag zur Aufklärung des Einflusses der Prandtl-Zahl auf die Vorgänge beim Übergang zu turbulenter Konvektion geleistet werden.

Die Analyse von Termen in den exakten Transportgleichungen turbulenter Größen wie der kinetischen Turbulenzenergie und dem turbulenten Wärmestrom hat gezeigt, daß für Strömungen, die durch Auftriebseffekte dominiert sind, bei der Beschreibung mit statistischen Turbulenzmodellen Terme von Bedeutung sind, die für andere Strömungstypen vernachlässigt werden können. Da für einige dieser Terme in der Literatur keine Modellansätze existieren, sollte die Datenbasis herangezogen werden, um geeignete Schließungsansätze für diese Terme zu entwickeln. Darüber hinaus ist es sinnvoll, Analysemöglichkeiten für Wandfunktionen bereitzustellen, die in "low Reynolds-Modellen" verwendet werden.

Mit der Simulation von Rayleigh-Bénard-Konvektion in Natrium bei der Rayleigh-Zahl $Ra = 24\,000$ ist eine Grenze für den mit der zur Verfügung stehenden Rechenleistung derzeit mit der direkten Methode erreichbaren Turbulenzgrad abzusehen. Numerische Untersuchungen für Rayleigh-Zahlen jenseits $Ra \approx 10^5$ sind vorerst nur mit der Methode der Grobstruktursimulation möglich. Solche Simulationen durch die Entwicklung eines geeigneten Feinstrukturmodells sowie effektiver Randbedingungen zu ermöglichen und durchzuführen, ist der Gegenstand einer bereits laufenden Arbeit [Seiter (1993)]. Für die Analyse der Gültigkeit von Schließungshypothesen statistischer Turbulenzmodelle und deren Weiterentwicklung können die Ergebnisse von Grobstruktursimulationen für die Terme einen Beitrag leisten, die wesentlich durch großräumige Skalen bestimmt sind.

Auf der methodischen Seite erscheint eine Weiterentwicklung von TURBIT in Richtung eines halbimpliziten Zeitintegrationsverfahrens für die Impulsgleichung aufgrund des Diffusionszahlkriteriums nicht als sinnvoll. Ein solches Ver-

fahren bringt einen erheblichen numerischen Mehraufwand mit sich, da jetzt nicht mehr wie in der Energiegleichung nur eine, sondern drei Bestimmungsgleichungen für die drei Geschwindigkeitskomponenten zu lösen sind. Soll hierzu der hocheffiziente direkte Poisson-Löser verwendet werden, so ist das Verfahren auf direkte Simulationen beschränkt und läßt nur für Fluide sehr hoher Prandtl-Zahl einen effektiven Rechenzeitgewinn erwarten.

Literaturverzeichnis

D. Anderson, J.C. Tannehill, R.H. Pletcher:

"Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer",
Hemisphere Publishing Cooperation, 1984.

R.M. Beam, R.F. Warming:

"Implicit numerical methods for the compressible Navier-Stokes and Euler equations", Von Karman Institute Lecture Series 1982-04, Rhode Saint Genese, Belgium, 1982.

C. Béguier, I. Dekeyser, B.E. Launder:

"Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow turbulence",
Phys. Fluids **21** (3), 307-310, 1978.

M. Behnia, G. de Vahl Davis:

"Fine mesh solutions using stream function-vorticity formulation",
in: Notes on Numerical Fluid Mechanics **27**, 11-18, Ed.: B. Roux,
Vieweg Verlag, Braunschweig, 1990.

H.A. Borgwaldt:

"CRESOR, a robust vectorized Poisson solver implemented in the COMMIX-2(V) thermal-hydraulics code", 1st Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Applications, Mito, Japan, 346-351, 1990.

K. Bremhorst, L. Krebs:

"Experimentally determined turbulent Prandtl numbers in liquid sodium at low Reynolds numbers", Int. J. Heat Mass Transfer **35**, 351-359, 1992.

F.H. Busse, R.M. Clever:

"An asymptotic model of two-dimensional convection in the limit of low Prandtl number", J. Fluid Mech. **102**, 75-83, 1981.

T.F. Chan:

"Stability analysis of finite difference schemes for the advection-diffusion equation", SIAM J. Numer. Anal. **21** (2), 272-284, 1984.

S. Chandrasekhar:

"Hydrodynamic and hydromagnetic stability", Dover Public., New York, 1981.

A. Chiffaudel, S. Fauve, B. Perrin:

"Viscous and inertial convection at low Prandtl number: Experimental Study", Europhys. Lett. **4** (5), 555-560, 1987.

S.L. Christie, J.A. Domaradzki:

"Numerical evidence for nonuniversality of the soft/hard turbulence classification for thermal convection", Phys. Fluids A **5**, 412-421, 1993.

M.K. Chung, H.C. Park, N.H. Kyong:

"Comparative study of various computational models for triple moments of velocity and scalar in second moment closure", Int. J. Heat Mass Transfer **35**, 2563-2570, 1992.

M.K. Chung, H.J. Sung:

"Four equation turbulence model for prediction of the turbulent boundary layer affected by buoyancy force over a flat plate", Int. J. Heat Mass Transfer **27**, 2387-2395, 1984.

R.M. Clever, F.H. Busse:

"Transition to time-dependent convection", J. Fluid Mech. **65**, 625-645, 1974.

R.M. Clever, F.H. Busse:

"Low Prandtl-number convection in a layer heated from below", J. Fluid Mech. **102**, 61-74, 1981.

R.M. Clever, F.H. Busse:

"Nonlinear oscillatory convection", J. Fluid Mech. **176**, 403-417, 1987.

R.M. Clever, F.H. Busse:

"Convection at very low Prandtl numbers", Phys. Fluids A **2** (3), 334-339, 1990.

S. Corrsin:

"Heat Transfer in Isotropic Turbulence", J. Appl. Phys. **23**, 113-118, 1952.

S.H. Davis:

"Convection in a box: linear theory", J. Fluid Mech. **30**, 465-478, 1967.

J.W. Deardorff, G.E. Willis:

"Investigation of turbulent thermal convection between horizontal plates",
J. Fluid Mech. **28**, 675-704, 1967.

H. Fasel:

"Numerische Simulation inkompressibler viskoser Strömungen",
Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, 1979.

S. Fauve, A. Libchaber:

"Rayleigh-Bénard-Experiment in a low Prandtl number fluid, mercury",
in: "Chaos and Order in Nature", Ed.: H. Haken, Springer, 25-35, 1981.

J.H. Ferziger:

"Higher-level simulations of turbulent flows", in: "Computational Methods for
Turbulent Transonic and Viscous Flows", Ed.: J.A. Essers, Springer Verlag,
93-182, 1983.

J.H. Ferziger:

"Review: Simulation of incompressible turbulent flows",
J. Comp. Phys. **69**, 1-48, 1987.

W.K. George, D.B. Taulbee:

"Designing experiments to test closure hypotheses",
Exp. Thermal Fluid Sci. **5**, 249-259, 1992.

S. Globe, D. Dropkin:

"Natural convection heat transfer in liquids confined by two horizontal plates and
heated from below", ASME J. Heat Transfer, 24-28, **February** 1959.

I. Goldhirsch, R.B. Pelz, S.A. Orszag:

"Numerical simulation of thermal convection in a two-dimensional finite box",
J. Fluid Mech. **199**, 1-28, 1989.

D.D. Gray, A. Giorgini:

"The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases",
Int. J. Heat Mass Transfer **19**, 545-551, 1976.

G. Grötzbach:

"Direkte numerische Simulation turbulenter Geschwindigkeits-, Druck- und
Temperaturfelder bei Kanalströmungen", Dissertation, Universität Karlsruhe,
KfK 2426, 1977.

G. Grötzbach:

"Numerical simulation of turbulent temperature fluctuations in liquid metals",
Int. J. Heat Mass Transfer **24**, 475-490, 1981.

G. Grötzbach:

"Direct numerical simulation of laminar and turbulent Bénard convection",
J. Fluid Mech. **119**, 27-53, 1982.

G. Grötzbach:

"Spatial resolution requirements for direct numerical simulation of the Rayleigh-Bénard convection", *J. Comp. Phys.* **49**, 241-264, 1983.

G. Grötzbach:

"Direct numerical and large eddy simulation of turbulent channel flows",
in: "Encyclopedia of Fluid Mechanics", Vol. 6, 1337-1391,
Ed.: N.P. Cheremisinoff, Gulf Publ., Houston, 1987.

G. Grötzbach:

"Numerische Simulation turbulenter Konvektion in Kanälen",
in: Tagungsband anlässlich des Symposiums zur Vorstellung des Projektes
ODIN und zur Inbetriebnahme des Höchstleistungsrechners Siemens VP-400-EX,
Eds.: A. Schreiner, W. Ewinger, Universität Karlsruhe, 113-131, 1989.

G. Grötzbach:

"Simulation of turbulent flow and heat transfer for selected problems of nuclear thermal-hydraulics", 1st Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Applications,
Mito, Japan, 29-35, 1990a.

G. Grötzbach:

"Numerical simulation of oscillatory convection in low Prandtl-number fluids with the TURBIT code", in: *Notes on Numerical Fluid Mechanics* **27**, 57-64,
Ed.: B. Roux, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1990b.

G. Grötzbach, M. Wörner:

"Analysis of second order transport equations by numerical simulations of turbulent convection in liquid metals", 5th Int. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-5), Salt Lake City, USA, Vol. 2, 358-365, 1992.

G. Grötzbach, M. Wörner:

"Analysis of flow mechanisms in Rayleigh-Bénard Convection at small Prandtl-Numbers", Joint Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications, Karlsruhe, Germany, Vol. 1, 236-247, 1993.

J.E. Hart:

"Low Prandtl-number convection between differentially heated end walls", Int. J. Heat Mass Transfer **26**, 1069-1074, 1983.

I. Hiltner:

Unveröffentlichter Bericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1993.

J.O. Hinze:

"Turbulence", Mc Graw-Hill Series in Mechanical Engineering, 2nd edition, 1975.

C. Hirsch:

"Numerical computation of internal and external flows, Vol. 1: Fundamentals of numerical discretization", John Wiley & Sons, 1988.

H. Hoffmann, H. Kamide, K. Marten, H. Ohshima, D. Weinberg:

"Investigations on the transition from forced to natural convection for the pool type EFR in the 3d RAMONA model", Int. Conf. on Fast Reactors and Related Fuel Cycles, Kyoto, Japan, Vol. 3, 3.14.1-3.14.10, 1991.

M.S. Hossain, W. Rodi:

"A turbulence model for buoyant flows and its application to vertical buoyant jets", in: "Turbulent buoyant jets and plumes", Ed.: W. Rodi, Pergamon Press, 121-178, 1982.

D.T.J. Hurle, E. Jakemen, C.P. Johnson:

"Convective temperature oscillations in molten gallium", J. Fluid Mech. **64**, 565-576, 1974.

M. Jahn:

"Holographische Untersuchung der freien Konvektion in einer Kernschmelze", Dissertation, Universität Hannover, 1975.

C.A. Jones, D.R. Moore, N.O. Weiss:

"Axisymmetric convection in a cylinder", J. Fluid Mech. **73**, 353-388, 1976.

Z. Kawara, I. Kishiguchi, I. Michiyoshi:

"Characteristics of plumes in turbulent thermal convection in a horizontal fluid layer", 9th Int. Heat Transfer Conf., Jerusalem, Israel, Vol. 2, 537-542, Ed.: G. Hetsroni, 1990.

V. Kek:

"Bénard-Konvektion in flüssigen Natriumschichten", Dissertation, Universität Karlsruhe, KfK 4611, 1989.

V. Kek, L. Krebs, U. Müller:

"Bénard convection in liquid sodium layers", 9th Int. Heat Transfer Conf., Jerusalem, Israel, Vol. 2, 235-239, Ed.: G. Hetsroni, 1990.

V. Kek, U. Müller:

"Low Prandtl number convection in layers heated from below", Int. J. Heat Mass Transfer **36**, 2795-2804, 1993.

J. Kim, P. Moin:

"Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations", J. Comp. Phys. **59**, 308-323, 1985.

R. Kippenhahn:

"Der Stern von dem wir leben", Deutsche Verlags-Anstalt GmbH, Stuttgart, 1990.

L. Kleiser, U. Schumann:

"Treatment of incompressibility and boundary conditions in 3-D numerical spectral simulations of plane channel flows", in: Notes on Numerical Fluid Mechanics **2**, 165-173, Ed.: E.H. Hirschel, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1980.

J.U. Knebel:

"Experimentelle Untersuchungen in turbulenten Auftriebsstrahlen in Natrium", Dissertation, Universität Karlsruhe, KfK 5175, 1993.

E.L. Koschmieder:

"Bénard convection", Adv. Chem. Phys. **26**, 177-212, 1974.

R. Krishnamurti:

"Some further studies on the transition to turbulent convection", J. Fluid Mech. **60**, 285-303, 1973.

A.P. Kudryavtsev, D.M. Ovechkin, D.N. Sorokin, V.I. Subbotin, A.A. Tsyganok:
"Zhidkie Metally, a collection of papers of liquid metal technology", Atomizdat,
131-136, 1967.

S.S. Kutateladze et al.:

"Liquid metal coolants", Atomizdat, Moskau, 1958.

B.E. Launder:

"On the effects of a gravitational field on the turbulent transport of heat and momentum", J. Fluid Mech. **67**, 569-581, 1975.

B.E. Launder:

"Heat and Mass Transport", in: Topics in Applied Physics **12**, 231-287,
Ed.: P. Bradshaw, Springer, 1976.

B.E. Launder, D.B. Spalding:

"Numerical computation of turbulent flows", Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. **3**,
269-289, 1974.

S.P. Lawrence:

"Turbulence modelling in naturally convecting fluids",
Culham Lab., CLM-R 292, Sept. 1989.

M.J.S. de Lemos, A. Sesonske:

"Turbulence modelling in combined convection in mercury pipe flow",
Int. J. Heat Mass Transfer **28**, 1067-1088, 1985.

A. Leonard, A. Wray:

"A new numerical method for the simulation of three-dimensional flow in a pipe",
in: Lecture Notes in Physics **170**, 335-342, Ed.: E. Krause, Springer, 1982.

F.B. Lipps:

"Numerical simulation of three-dimensional Bénard convection in air",
J. Fluid Mech. **75**, 113-148, 1976.

F.B. Lipps, R.C.J. Sommerville:

"Dynamics of variable wavelength in finite-amplitude Bénard convection",
Phys. Fluids **14**, 759-765, 1971.

H.J. Lugt:

"Wirbelströmungen in Natur und Technik",
Verlag G. Braun, Karlsruhe, 1979.

J.L. Lumley:

"Computational modelling of turbulent flows", in: Adv. in Applied Mechanics **18**,
123-176, Ed.: C.-S. Yih, Academic Press, New York, 1978.

J.L. Lumley, B. Khajeh-Nouri:

"Computational modelling of turbulent transport",
Adv. in Geophys. A **18**, 169-192, 1974.

H. Mauch:

"Berechnung der 3-D Umströmung eines quaderförmigen Körpers im Kanal",
Dissertation, Universität Karlsruhe, 1991.

J.S. McDonald, T.J. Connolly:

"Investigation of natural convection heat transfer in liquid sodium",
Nucl. Sci. Eng. **8**, 369-377, 1960.

J.B. McLaughlin, S.A. Orszag:

"Transition from periodic to chaotic thermal convection",
J. Fluid Mech. **122**, 123-142, 1982.

M. Meneguzzi, C. Sulem, P.L. Sulem, O. Thual:

"Three-dimensional numerical simulation of convection in low Prandtl-number
fluids", J. Fluid Mech. **182**, 169-191, 1987.

R.N. Meroney:

"An algebraic stress model for stratified turbulent shear flows",
Computers and Fluids **4**, 93-107, 1976.

C.-H. Moeng, R. Rotunno:

"Vertical-velocity skewness in the buoyancy-driven boundary layer",
J. Atmos. Sci. **47**, 1149-1162, 1990.

P. Moin, J. Kim:

"On the numerical solution of time dependent viscous incompressible fluid flows
involving solid boundaries", J. Comp. Phys. **35**, 381-92, 1980.

P. Moin, J. Kim:

"Numerical investigation of turbulent channel flow",
J. Fluid Mech. **118**, 341-377, 1982.

Y. Nagano, M. Tagawa, T. Tsuji:

"An improved two-equation heat transfer model for wall turbulent shear flows",
ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference, Reno, USA, Vol. 3, 233-240,
1991.

A.C. Newell, J.A. Whitehead:

"Finite bandwidth, finite amplitude convection",
J. Fluid Mech. **38**, 279-303, 1969.

H. Ninokata:

"Advances in computer simulation of fast breeder reactor thermohydraulics",
1st Int. Conf. on Supercomputing in Nuclear Applications, Mito, Japan, 80-85,
1990.

S.A. Orszag, L.C. Kells:

"Transition to turbulence in plane Poiseuille and plane Couette flow",
J. Fluid Mech. **96**, 159-205, 1980.

S.V. Patankar:

"Numerical heat transfer and fluid flow",
Hemisphere, Washington D.C., 1980.

T.W.J. Peeters, R.A.W.M. Henkes:

"The Reynolds-stress model of turbulence applied to the natural convection
boundary layer along a heated vertical plate", Int. J. Heat Mass Transfer **35**,
403-420, 1992.

R. Peyret, T.D. Taylor:

"Computational methods for fluid flow", Springer Verlag, 1983.

M.R.E. Proctor:

"Inertial convection at low Prandtl-number", J. Fluid Mech. **82**, 97-114, 1977.

D. Reeder:

persönliche Information, University of California, Santa Barbara, 1986.

A.J. Reynolds:

"The prediction of turbulent Prandtl and Schmidt numbers",
Int. J. Heat Mass Transfer **18**, 1055-1069, 1975.

R.D. Richtmyer, K.W. Morton:

"Difference methods for initial-value problems", 2d ed., Interscience Publishers,
Wiley, New York, 1967.

W. Rodi:

"Turbulence models and their application in hydraulics - a state of the art review",
IAHR-publication, Delft, 1980.

H.T. Rossby:

"A study of Bénard convection with and without rotation",
J. Fluid Mech. **36**, 309-335, 1969.

J.C. Rotta:

"Turbulente Strömungen", B.G. Teubner-Verlag, Stuttgart, 1972.

B. Roux:

"Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr fluids", Notes on
Numerical Fluid Mechanics **27**, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1990a.

B. Roux:

"Report on workshop: Numerical simulation of oscillatory convection in low-Pr
fluids", in: Notes on Numerical Fluid Mechanics **29**, 613-618, Ed.: P. Wesseling,
Vieweg Verlag, Braunschweig, 1990b.

K. Satoh, H. Miyakoshi:

"Study of decay heat removal by natural circulation", 4th Int. Topical Meeting
on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-4), Karlsruhe, Germany,
Vol. 1, 378-383, 1989.

H. Schlichting:

"Grenzschichttheorie", Verlag G. Braun, Karlsruhe, 1958.

A. Schlüter, D. Lortz, F.H. Busse:

"On the stability of steady finite amplitude convection",
J. Fluid Mech. **23**, 129-144, 1965.

H. Schmidt, U. Schumann, H. Volkert, W. Ulrich:

"Three-dimensional, direct and vectorized elliptic solvers for various boundary conditions", DFVLR-Mitteilung 84-15, 1984.

U. Schumann:

"Ein Verfahren zur direkten Simulation turbulenter Strömungen in Platten- und Ringspaltkanälen und über seine Anwendung zur Untersuchung von Turbulenzmodellen", Dissertation, Universität Karlsruhe, KfK 1854, 1973.

U. Schumann:

"Effektive Berechnung dreidimensionaler Fluid-Struktur-Wechselwirkung beim Kühlmittelverluststörfall eines Druckwasserreaktors", Habilitationsschrift, Universität Karlsruhe, KfK 2645, 1979.

U. Schumann, T. Hauf, H. Möller, H. Schmidt, M. Volkert:

"A mesoscale model for the simulation of turbulence, clouds and flow over mountains: Formulation and validation examples", *Contr. Atmos. Phys.* **60**, 413-446, 1987.

U. Schumann, R.A. Sweet:

"A direct method for the solution of Poisson's equation with Neumann boundary conditions on a staggered grid of arbitrary size", *J. Comp. Phys.* **20**, 171-182, 1976.

C. Seiter:

Unveröffentlichter Bericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1993.

A. Shabbir, D.B. Taulbee:

"Evaluation of turbulence models for predicting buoyant flows", *ASME J. Heat Transfer* **112**, 945-951, 1990.

D.B. Spalding:

"Concentration fluctuations in a round turbulent free jet", *Chem. Eng. Sci.* **26**, 95-107, 1971.

K. Stork, U. Müller:

"Convection in boxes: experiments", *J. Fluid Mech.* **54**, 599-611, 1972.

K. Sugiyama, Y. Ma, R. Ishiguro:

"Laminar natural convection heat transfer from a horizontal circular cylinder to liquid metals", *ASME J. Heat Transfer* **113**, 91-96, 1991.

P.L. Sulem, C. Sulem, O. Thual:

"Direct numerical simulation of three-dimensional convection in liquid metals",
Prog. Astro. Aeronaut. **100**, 125-151, 1985.

R.A. Sweet:

"Direct methods for the solution of Poisson's equation on a staggered grid",
J. Comp. Phys. **12**, 422-428, 1973.

H. Tennekes, J.L. Lumley:

"A first course in turbulence", The MIT Press, London, 1972.

D.C. Threlfall:

"Free convection in low-temperature gaseous helium",
J. Fluid Mech. **67**, 17-28, 1975.

O. Thual:

"Zero-Prandtl-number convection", J. Fluid Mech. **240**, 229-258, 1992.

P.R. Voke, M.W. Collins:

"Large-eddy simulation: retrospect and prospect",
Physico Chemical Hydrodynamics **4**, 119-161, 1983.

C.Y. Wang:

"Exact solutions of the unsteady Navier-Stokes equations",
Appl. Mech. Rev. **42**, 269-282, 1989.

C.Y. Wang:

"Exact solutions of the steady-state Navier-Stokes equations",
Annu. Rev. Fluid Mech. **23**, 159-177, 1991.

Z. Warhaft, J.L. Lumley:

"An experimental study of the decay of temperature fluctuations in grid-generated turbulence", J. Fluid Mech. **88**, 659-684, 1978.

R.F. Warming, B.J. Hyett:

"The modified equation approach to the stability and accuracy of finite-difference methods", J. Comp. Phys. **14**, 159-179, 1974.

M. Wörner, G. Grötzbach:

"Analysis of semi-implicit time integration schemes for direct numerical simulation of turbulent convection in liquid metals", in: Notes on Numerical Fluid Mechanics **35**, 542-551, Eds.: J.B. Vos, A. Rizzi, I.L. Ryming, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1992.

M. Wörner, G. Grötzbach:

"Contributions to turbulence modelling of natural convection in liquid metals by direct numerical simulation", Joint Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications, Karlsruhe, Germany, Vol. 1, 224-235, 1993a.

M. Wörner, G. Grötzbach:

"Analysis of diffusion of turbulent kinetic energy by numerical simulations of natural convection in liquid metals", 6th Int. Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-6), Grenoble, France, Vol. 1, 186-193, 1993b.

M. Wörner, G. Grötzbach:

"Turbulent heat flux balance for natural convection in air and sodium analysed by direct numerical simulations", 5th Int. Symposium on Refined Flow Modelling and Turbulence Measurements, Paris, France, 335-342, 1993c.

Anhang A

Quantitative Analyse der numerischen Diffusion von LFCN- und ABCN-Verfahren

Die rechte Seite der in Abschnitt 4.4.2 für das ABCN- und LFCN-Verfahren angegebenen modifizierten Gleichung (4.9) bzw. (4.10) stellt den Abbruchfehler beider Verfahren dar. Mit der Courant-Zahl $C = u_o \Delta t / \Delta x$ und der Diffusionszahl $D = \kappa \Delta t / (\Delta x^2)$ ergibt sich für den jeweiligen Abbruchfehler die Schreibweise

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ABCN} = & \frac{1}{6} u_o (\Delta x)^2 \left(\frac{5}{2} C^2 - 1 \right) \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \\ & + \frac{1}{12} \frac{(\Delta x)^4}{\Delta t} \left[D \left(1 - 9 C^2 \right) + 3 C^4 \right] \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \dots \end{aligned} \quad (A.1)$$

$$\varepsilon_{LFCN} = \frac{1}{6} u_o (\Delta x)^2 \left(C^2 - 1 \right) \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{1}{12} \frac{(\Delta x)^4}{\Delta t} D \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \dots \quad (A.2)$$

Diese Darstellung ermöglicht einen quantitativen Vergleich der numerischen Diffusion von ABCN- und LFCN-Verfahren.

Die numerische Dispersion hängt bei beiden Verfahren nur von der Courant-Zahl, nicht aber von der Diffusionszahl ab. Abb. A.1(a) zeigt die Proportionalitätsfaktoren des Terms $\partial^3 T / \partial x^3$ im Abbruchfehler beider Verfahren als Funktion der Courant-Zahl. Für Courant-Zahlen $C < 0.75$ ist die numerische Dispersion des ABCN-Verfahrens geringer als die des LFCN-Verfahrens. Demgegenüber ist das LFCN-Verfahren für $C > 0.75$ genauer und weist insbesondere für $C = 1$ keine numerische Dispersion auf. Letzteres ist beim ABCN-Verfahren für $C = \sqrt{2/5} \approx 0.63$ der Fall.

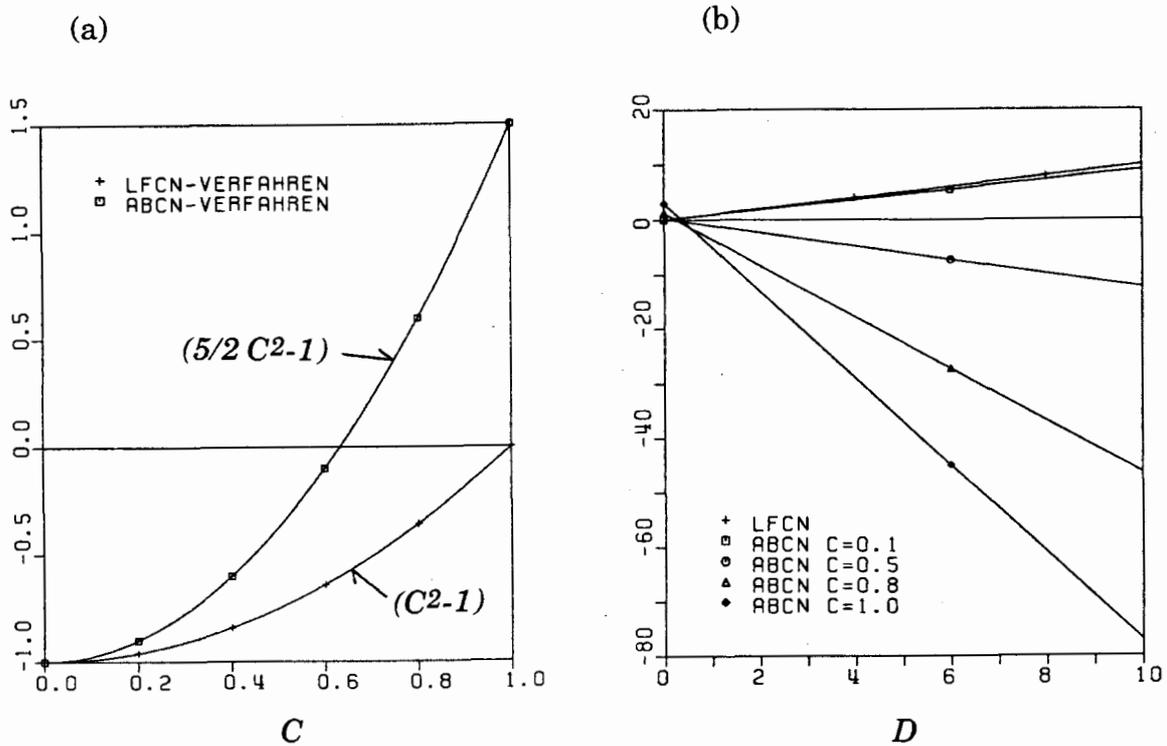


Abb. A.1: Numerische Diffusion von ABCN- und LFCN- Verfahren:
 (a) numerische Dispersion, (b) numerische Dissipation

Abb. A.1(b) zeigt den Proportionalitätsfaktor des Terms $\partial^4 T / \partial x^4$ im Abbruchfehler beider Verfahren als Funktion der Diffusionszahl. Die Größe der numerischen Dissipation des LFCN-Verfahrens ist unabhängig von der Courant-Zahl und wächst linear mit D . Demgegenüber hängt die numerische Dissipation beim ABCN-Verfahren in starker Weise von der Courant-Zahl ab. Sie bestimmt, mit welcher Steigung die Diffusionszahl in den numerischen Dissipationsfehler eingeht. Beim LFCN-Verfahren ist diese Steigung stets positiv. Betrachtet man ein harmonisches Signal $T(x) = \sin(mx)$, so bedeutet dies wegen $\partial^2 T / \partial x^2 = -m^2 \sin(mx)$ und $\partial^4 T / \partial x^4 = m^4 \sin(mx)$, daß der physikalische Diffusionseinfluß stets unterschätzt wird. Dies ist beim ABCN-Verfahren nur für kleine Courant-Zahlen der Fall. Für $C > 1/3$ wird der Proportionalitätsfaktor negativ, was eine Verstärkung des physikalischen Diffusionseinflusses durch das numerische Verfahren bedeutet. Dann ist die numerische Dissipation des LFCN-Verfahrens geringer als die des ABCN-Verfahrens.

Anhang B

Von Neumann-Stabilitätsanalyse von LFCN- und ABCN-Verfahren

B.1 LFCN-Verfahren

Die Verstärkungsmatrix des LFCN-Verfahrens hat mit der in Abschnitt 4.4.3 eingeführten Bezeichnungsweise die Gestalt

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \frac{-2 I C \sin \phi}{1 + 4 D \sin^2 \frac{\phi}{2}} & \frac{1 - 4 D \sin^2 \frac{\phi}{2}}{1 + 4 D \sin^2 \frac{\phi}{2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Hier ist I die imaginäre Einheit, $C = u_0 \Delta t / \Delta x$ die Courant-Zahl und $D = \kappa \Delta t / (\Delta x^2)$ die Diffusionszahl. Mit den Abkürzungen

$$C^* = C \sin \phi, \quad D^* = D \sin^2 \frac{\phi}{2} \quad (\text{B.2})$$

ergeben sich die beiden Eigenwerte der Matrix zu

$$\lambda_{1,2} = \frac{-I C^* \pm \sqrt{1 - C^{*2} - 16 D^{*2}}}{1 + 4 D^*} \quad (\text{B.3})$$

Ist der Ausdruck unter der Wurzel reell, so haben beide Eigenwerte den gleichen Betrag

$$|\lambda_{1,2}| = \frac{\sqrt{1 - 16 D^{*2}}}{1 + 4 D^*}, \quad (\text{B.4})$$

aber unterschiedliche Phase. Anderenfalls sind die beiden Eigenwerte rein imaginär, haben also diesselbe Phase, sind aber nicht betragsgleich:

$$|\lambda_{1,2}| = \frac{C^* \pm \sqrt{C^{*2} + 16 D^{*2} - 1}}{1 + 4 D^*} \quad (\text{B.5})$$

Die Stabilitätsbedingung

$$\text{Max} \left(|\lambda_1|, |\lambda_2| \right) \leq 1 \quad (\text{B.6})$$

führt auf das bekannte Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium

$$C = \frac{u_o \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (\text{B.7})$$

[siehe z.B. Chan (1984)].

B.2 ABCN-Verfahren

Für das ABCN-Verfahren hat die Verstärkungsmatrix die Form

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \frac{1 - 2 D^* - \frac{3}{2} I C^*}{1 + 2 D^*} & \frac{\frac{1}{2} I C^*}{1 + 2 D^*} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

Für die Eigenwerte folgt

$$\lambda_{1,2} = \frac{\left(1 - 2D^*\right) - \frac{3}{2} IC^*}{2\left(1 + 2D^*\right)} \pm \frac{\sqrt{\left[\left(1 - 2D^*\right)^2 - \frac{9}{4} C^{*2}\right] + IC^* \left(10D^* - 1\right)}}{2\left(1 + 2D^*\right)} \quad (\text{B.9})$$

Stellt man die Wurzel gemäß

$$\sqrt{Re + I \cdot Im} = \pm \left(X + I \frac{Im}{X} \right) \quad (\text{B.10})$$

mit

$$X = \sqrt{\frac{1}{2} \left(Re + \sqrt{Re^2 + Im^2} \right)} \quad (\text{B.11})$$

dar, so erhält man die Eigenwerte in der Form

$$\lambda_{1,2} = \frac{\left(1 - 2D^* \pm X\right) + I \left(-\frac{3}{2} C^* \pm \frac{Im}{X}\right)}{2\left(1 + 2D^*\right)} \quad (\text{B.12})$$

Hierbei ist der Realteil

$$Re = \left(1 - 2 D^* \right)^2 - \frac{9}{4} C^{*2} \quad (\text{B.13})$$

und der Imaginärteil

$$Im = C^* \left(10 D^* - 1 \right). \quad (\text{B.14})$$

Die beiden Eigenwerte sind so kompliziert, daß kein analytisches Stabilitätskriterium angegeben werden kann und nur eine numerische Auswertung der Forderung (B.6) in Betracht kommt. Das Ergebnis dieser numerischen Auswertung ist in Abb. 4.2 dargestellt.

Anhang C

Erweiterung des Poisson-Lösungs-Paketes

C.1 Programmpaket H3DCY2

Das Unterprogramm H3DCY2 löst das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} & \left(\phi_{(i-1,j,k)} - 2 \phi_{(i,j,k)} + \phi_{(i+1,j,k)} \right) / \Delta x_1^2 \\ & + \left(\phi_{(i,j-1,k)} - 2 \phi_{(i,j,k)} + \phi_{(i,j+1,k)} \right) / \Delta x_2^2 \\ & + A(k) \phi_{(i,j,k-1)} + B(k) \phi_{(i,j,k)} + C(k) \phi_{(i,j,k+1)} = f_{(i,j,k)} \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

mit

$$\begin{aligned} i &= 2, 3, \dots, IM+1 \\ j &= 1, 2, \dots, JM \\ k &= 1, 2, \dots, KM. \end{aligned}$$

Dabei sind $A(k)$, $B(k)$, $C(k)$ von der Geometrie abhängige Koeffizientenvektoren, die hier nicht weiter von Interesse sind. Sollen an den Wänden Neumannsche Randbedingungen (kurz: NS-RB) vorgeschrieben werden, so gilt

$$\begin{aligned} \phi_{(i,j,0)} &= \phi_{(i,j,1)}, \\ \phi_{(i,j,KM+1)} &= \phi_{(i,j,KM)}. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Realisiert werden diese Randbedingungen durch die Koeffizientenmodifikation

$$\begin{aligned} B(1) &= B(1) + A(1), \\ B(KM) &= B(KM) + C(KM) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

und daran anschließend

$$A(1) = 0, C(KM) = 0. \quad (C.4)$$

Für Dirichletsche Randbedingungen auf einem versetzten Maschennetz (kurz: DS-RB) wurde in Abschnitt 4.7 die Forderung

$$\begin{aligned} \phi_{(i,j,0)} &= -\phi_{(i,j,1)} \\ \phi_{(i,j,KM+1)} &= -\phi_{(i,j,KM)} \end{aligned} \quad (C.5)$$

abgeleitet. Dies läßt sich über die Koeffizientenmodifikation

$$\begin{aligned} B(1) &= B(1) - A(1) \\ B(KM) &= B(KM) - C(KM) \end{aligned} \quad (C.6)$$

und daran anschließend

$$A(1) = 0, C(KM) = 0 \quad (C.7)$$

in einfacher Weise realisieren, ohne daß an anderer Stelle in den Lösungsalgorithmus eingegriffen werden muß.

C.2 Programmpaket H3VNDC

Das Unterprogramm H3VNDC löst das Gleichungssystem (C.1) unter der Einschränkung, daß in x_3 -Richtung nur Neumannsche Randbedingungen vorgegeben werden können. In x_1 -Richtung ist an den Wänden die Spezifikation Neumannscher Randbedingungen sowie Dirichletscher Randbedingungen auf einem nicht-versetzten Maschennetz (kurz D-RB) möglich. Notwendig ist die Erweiterung auf Dirichletsche Randbedingungen auf einem versetzten Maschennetz. Für die x_2 -Richtung, in der periodische Randbedingungen vorliegen, führt die Durchführung einer schnellen Fouriertransformation auf JM blocktridiagonale Gleichungssysteme. Diese werden mit zyklischer Reduktion und Gaußscher Elimination direkt gelöst. Die bei der zyklischen Reduktion neu auftretenden Matrizen werden, um die tridiagonale Struktur nicht zu zerstören, nicht direkt berechnet, sondern mit Hilfe einer Faktorisierung als Polynome der Ausgangsmatrix dargestellt. Die Faktorisierung basiert auf den Eigenwerten der Matrizen und den Wurzeln der auftre-

tenden Polynome. Da diese von den spezifizierten Randbedingungen abhängen, hat eine Erweiterung des Programmpakets H3VNDC auf DS-Randbedingungen Auswirkungen bis auf die tiefste Ebene des zyklischen Reduktionsprozesses.

Im folgenden werden die Änderungen angegeben, die für die Erweiterung auf DS-Randbedingungen von Bedeutung sind. Dabei beziehen wir uns auf die in Schumann & Sweet (1976) und Schumann (1979) angegebenen Gleichungen und Notationen. Zur Spezifikation der Randbedingungen an der unteren und oberen Wand dienen die Parameter γ_u und γ_o . Für NS-Randbedingungen gilt

$$\gamma_u = 1 \text{ bzw. } \gamma_o = 1 \quad (\text{C.8})$$

und für DS-Randbedingungen

$$\gamma_u = -1 \text{ bzw. } \gamma_o = -1. \quad (\text{C.9})$$

Die erweiterten Gleichungen lauten:

Gl. (13):

$$K^{(r)} = \prod_{j=1}^{2^r} \left[A + 2 \cos \left(\frac{(2j-1)\pi}{2^{r+1} + 1} \right) \mathbf{I} \right], \gamma_u = -1 \quad (\text{C.10})$$

Gl. (16):

$$b_r = \frac{\sin \left[\left(k_r + \frac{1}{2} \right) \theta \right]}{\sin (\theta / 2)}, \gamma_o = -1 \quad (\text{C.11})$$

$$c_r = \frac{\sin \left[\left(l_r + \frac{1}{2} \right) \theta \right]}{\sin (\theta / 2)}, \gamma_o = -1 \quad (\text{C.12})$$

Gl. (17):

$$B^{(r)} = \prod_{j=1}^{k_r} \left[A + 2 \cos \left(\frac{(2j-1)}{2k_r+1} \pi \right) I \right], \gamma_o = -1 \quad (C.13)$$

Gl. (18) $l_r > 0$

$$C^{(r)} = \prod_{j=1}^{l_r} \left[A + 2 \cos \left(\frac{(2j-1)}{2l_r+1} \pi \right) I \right], \gamma_o = -1 \quad (C.14)$$

Gl. (26)

$$e_r = \frac{\sin \left[\left(k_r + 1 \right) \theta \right]}{\sin \theta} \cdot \frac{\sin (2^r \theta)}{\sin \theta} \cdot (2 + 2 \cos \theta), \gamma_u = \gamma_o = -1$$

$$e_r = 2 \cos \left[\left(k_r + 1 \right) \theta \right] \frac{\sin (2^r \theta)}{\sin \theta}, \begin{cases} \gamma_u = 1 \& \gamma_o = 1 \\ \text{oder} \\ \gamma_u = -1 \& \gamma_o = -1 \end{cases} \quad (C.15)$$

Gl. (27)

$$E^{(r)} = \prod_{j=1}^{k_r} \left[A - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{k_r+1} \right) I \right].$$

$$\prod_{j=1}^{2^r-1} \left[A - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{2^r} \right) I \right] (A+2I), \gamma_u = \gamma_o = -1 \quad (C.16a)$$

$$E^{(r)} = \prod_{j=1}^{k_r + 1} \left[A - 2 \cos \left(\frac{(2j-1)\pi}{2k_r + 2} \right) I \right].$$

$$\prod_{j=1}^{2^r - 1} \left[A - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{2^r} \right) I \right], \quad \begin{cases} \gamma_u = 1 & \& \gamma_o = 1 \\ \text{oder} \\ \gamma_u = 1 & \& \gamma_o = 1 \end{cases} \quad (\text{C.16b})$$

Gl. (33)

$$M^{(r)} = \prod_{j=1}^{2^r} \left[A + 2 \cos \left(\frac{2\pi j}{2^{r+1} + 1} \right) I \right].$$

$$\prod_{j=0}^{2^r - 1} \left[A + 2 \cos \left(\frac{j\pi}{2^r} \right) I \right], \quad \gamma_u = \gamma_o = -1 \quad (\text{C.17})$$

Gl. (38)

$$d_r = \frac{\sin \left[\left(2^r + k_r + 1 \right) \theta \right]}{\sin \theta} \cdot \frac{\sin \left(2^r \theta \right)}{\sin \theta} (2 + 2 \cos \theta), \quad \gamma_u = \gamma_o = -1 \quad (\text{C.18a})$$

$$d_r = 2 \cos \left[\left(2^r + k_r + 1 \right) \theta \right] \cdot \frac{\sin \left(2^r \theta \right)}{\sin \theta},$$

$$\begin{cases} \gamma_u = -1 & \& \gamma_o = 1 \\ \text{oder} \\ \gamma_u = 1 & \& \gamma_o = -1 \end{cases} \quad (\text{C.18b})$$

Gl. (39)

$$D^{(r)} = \prod_{j=1}^{k_r + 2^r} \left[A - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{2^r + k_r + 1} \right) \mathbf{I} \right].$$

$$\prod_{j=1}^{2^r - 1} \left[A - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{2^r} \right) \mathbf{I} \right] \cdot (\mathbf{A} + 2\mathbf{I}), \gamma_u = \gamma_o = -1 \quad (\text{C.19a})$$

$$D^{(r)} = \prod_{j=1}^{k_r + 2^r + 1} \left[A - 2 \cos \left(\frac{(2j-1)\pi}{2^{r+1} + 2k_r + 2} \right) \mathbf{I} \right].$$

$$\prod_{j=1}^{2^r - 1} \left[A - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{2^r} \right) \mathbf{I} \right], \begin{cases} \gamma_u = -1 & \& \gamma_o = 1 \\ \text{oder} \\ \gamma_u = 1 & \& \gamma_o = -1 \end{cases} \quad (\text{C.19b})$$

Anhang D

Untersuchungen zur Genauigkeit von LFCN- und ABCN-Verfahren

Zur Verifikation der korrekten programmtechnischen Umsetzung von LFCN- und ABCN-Verfahren wurden mit TURBIT umfangreiche Testrechnungen durchgeführt, in denen die Ergebnisse der beiden halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren denjenigen des expliziten Euler-Leapfrog-Verfahrens gegenübergestellt wurden. Ausgangsbasis dieser Rechnungen, die für verschiedene Geometrien und unterschiedliche Randbedingungskombinationen vorgenommen wurden, ist jeweils ein unter Verwendung des expliziten Zeitintegrationsverfahrens erhaltener Restart-File. Von diesem ausgehend wurden für jeden Mikrozeitschritt neben dem expliziten Zeitintegrationsverfahren auch beide halbimpliziten Verfahren angewandt und deren maximale und relative Abweichung von der Lösung des Euler-Leapfrog-Verfahrens zu jedem Zeitpunkt festgehalten.

Generell ist eine gute Übereinstimmung zwischen dem expliziten und den beiden halbimpliziten Zeitintegrationsverfahren festzustellen. Die Größe der maximalen absoluten Abweichung der mit dem Euler-Leapfrog- und ABCN- bzw. LFCN-Verfahren berechneten Temperaturen hängt in starker Weise vom Anwendungsfall ab, liegt aber im Bereich 10^{-6} bis 10^{-3} , wobei die Temperaturwerte selbst von der Größenordnung eins sind. Zwischen den Ergebnissen des ABCN- und LFCN-Verfahrens sind nur geringe Unterschiede festzustellen.

Die maximale absolute Abweichung der Ergebnisse des ABCN-Verfahrens von denen des expliziten Verfahrens zeigt zu Beginn der Integration deutliche $2\Delta t$ -Oszillationen. Zurückzuführen sind diese Oszillationen aber höchstwahrscheinlich nicht auf das ABCN-, sondern auf das Euler-Leapfrog-Verfahren. Die Größe der maximalen absoluten Abweichung der Ergebnisse des LFCN-Verfahrens von denen des Euler-Leapfrog-Verfahrens läßt demgegenüber keine zeitlichen Oszillationen erkennen. Aus diesem Sachverhalt kann geschlossen werden, daß bei Verwendung des Euler-Leapfrog-Verfahrens zur Lösung der Impulsgleichung für die Energiegleichung nicht das ABCN-, sondern das LFCN-Verfahren herangezogen werden sollte. Diese Vorgehensweise stellt sicher, daß "Phasenverschiebun-

gen" in den Lösungen für das Geschwindigkeits- und das Temperaturfeld weitgehend vermieden werden können.

Die numerischen Untersuchungen zeigen weiter, daß die Größe der Abweichung der Lösungen von expliziten und halbimpliziten Verfahren wesentlich von der Art der zeitlichen Entwicklung des Temperaturfeldes abhängt. Treten im zeitlichen Verlauf der Lösung starke Gradienten auf, so ist die Abweichung zwischen dem expliziten und den halbimpliziten Verfahren wesentlich größer als bei einem relativ glatten Verlauf der Lösung. Dieses unterschiedliche Einlaufverhalten ist z.B. bei der Integration aus den Anfangswerten hin zu einem eingelaufenen Strömungszustand von Bedeutung. Vergleicht man die Integrationsvorschrift des LFCN-Verfahrens

$$\frac{T^{n+1} - T^{n-1}}{2\Delta t} = -K_T^n + \frac{1}{2} \left(D_T^{n+1} + D_T^{n-1} \right) \quad (\text{D.1})$$

mit der des expliziten Leapfrog-Verfahrens

$$\frac{T^{n+1} - T^{n-1}}{2\Delta t} = -K_T^n + D_T^{n-1}, \quad (\text{D.2})$$

so wird klar, daß für den Fall eines eingelaufenen Strömungszustandes (bzw. Temperaturfeldes) wegen $D_T^{n+1} \approx D_T^{n-1}$ auch die neuen Temperaturwerte T^{n+1} für beide Verfahren kaum voneinander abweichen werden. Durchläuft das Temperaturfeld hingegen eine Transiente, so sind wegen $D_T^{n+1} \neq D_T^{n-1}$ für beide Verfahren merklich größere Unterschiede für T^{n+1} zu erwarten. Entsprechende Beobachtungen hinsichtlich der Abweichung der Ergebnisse von expliziten und halbimpliziten Verfahren wurden auch gemacht, wenn bei einem "eingelaufenen" Temperaturfeld zur Einleitung einer Transienten eine Änderung der Temperaturrandbedingungen vorgenommen wurde.

Anhang E

Abschätzung für einen zur räumlichen Mittelung äquivalenten Mittelungszeitraum

In TURBIT erfolgt die Auswertung statistischer Daten über eine räumliche Mittelung in Ebenen parallel zu den horizontalen Wänden (vergl. Abschnitt 5.2.2). Eine Obergrenzenabschätzung für einen dieser räumlichen Mittelung äquivalenten zeitlichen Mittelungsbereich erhält man, wenn man mit Hilfe einer charakteristischen Geschwindigkeit die Transportzeit über eine Periodenlänge abschätzt. Als charakteristische Geschwindigkeit bietet sich für Rayleigh-Bénard-Konvektion der RMS-Wert einer Horizontalgeschwindigkeitskomponente in Kanalmitte an. Für die Simulation in Natrium mit $Ra = 12\,000$ (bzw. $Gr = 2 \cdot 10^6$) kommt

$$\tau = \frac{X_1}{u_{1\,rms}} = \frac{8}{0.34} = 23.5. \quad (\text{E.1})$$

Die Umrechnung in eine dimensionsbehaftete Zeitdauer erfolgt über

$$\hat{\tau} = \frac{\hat{D}^2}{\hat{\nu}} \frac{\tau}{\sqrt{Gr}} \quad (\text{E.2})$$

und führt z.B. für das Experiment von Kek (1989) mit $\hat{D} = 0.0465$ m und $\hat{\nu} = 3.9 \cdot 10^{-7}$ m²/s auf das Ergebnis $\hat{\tau} \approx 92$ s. Da in TURBIT nicht nur ein, sondern bis zu 250 Linienmittelwerte berücksichtigt werden, entspricht die räumliche Mittelung über eine Ebene einer Meßdauer von ca. sechs Stunden. Da darüber hinaus in TURBIT noch eine zusätzliche Mittelung über typischerweise 10 verschiedene Zeitpunkte erfolgt, führt dies auf einen äquivalenten zeitlichen Mittelungsbereich im Experiment von ca. 60 Stunden.

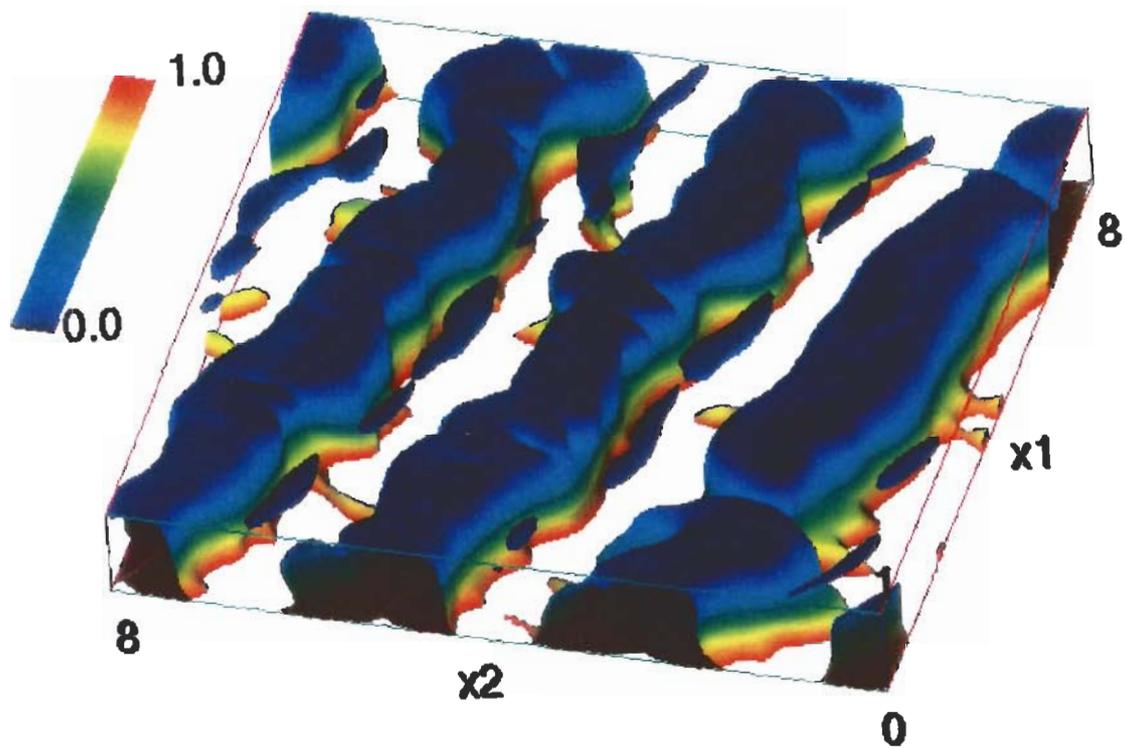


Abb. 5.34: (a): Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit für den Wert $u_3 = 0.001$ mit der Temperatur als Farbinformation (rot: $T = 1$, blau: $T=0$) für Natrium, $Ra = 3\,000$, $t = 855.24$.

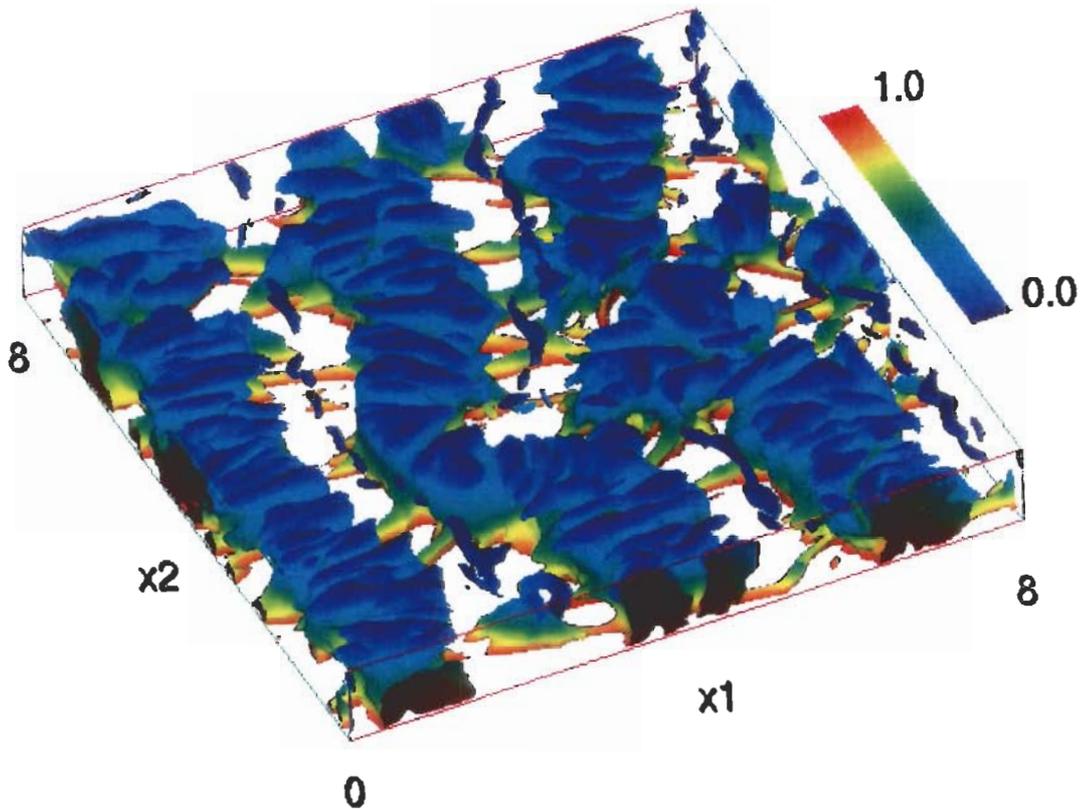


Abb. 5.35: Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit für den Wert $u_3 = 0.05$ mit der Temperatur als Farbinformation (rot: $T = 1$, blau: $T=0$) für Natrium, $Ra = 12\ 000$, $t = 429.5$.

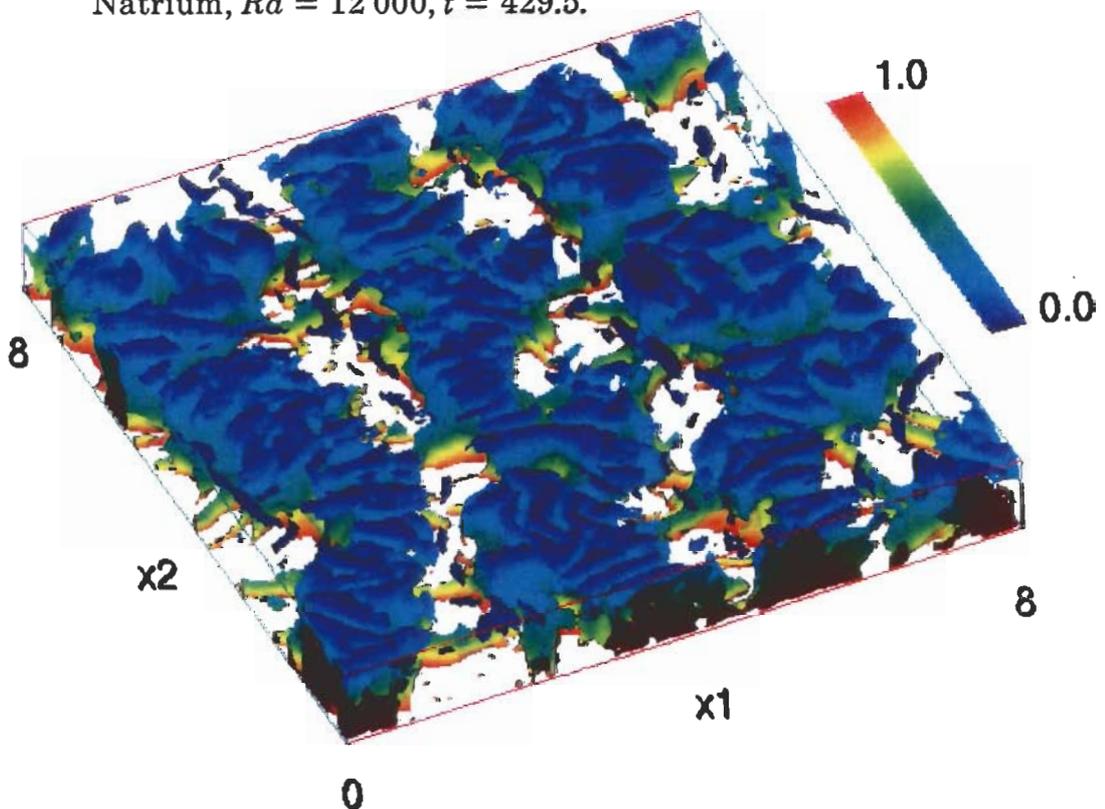


Abb. 5.36: Isofläche der Vertikalgeschwindigkeit für den Wert $u_3 = 0.05$ mit der Temperatur als Farbinformation (rot: $T = 1$, blau: $T=0$) für Natrium, $Ra = 24\ 000$, $t = 478.7$.

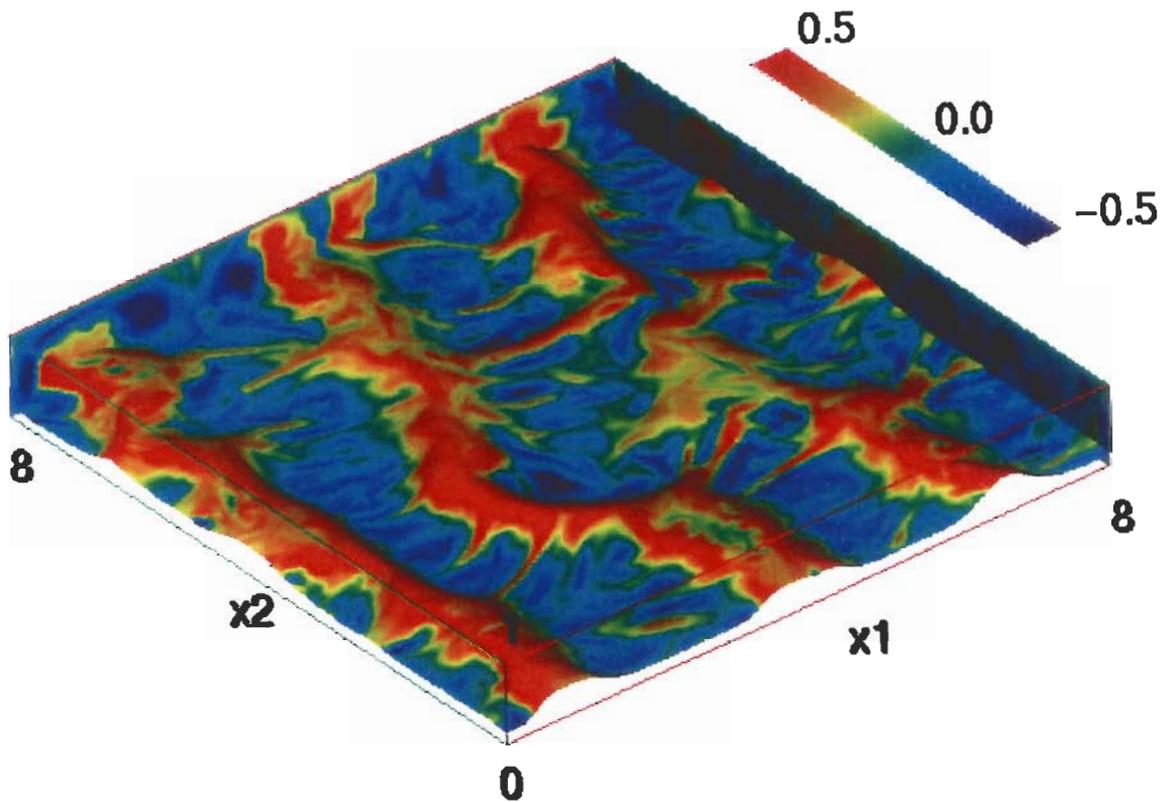


Abb. 5.37: Isofläche der Temperatur für den Wert $T = 0.75$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation (rot: aufwärts, blau: abwärts) für Natrium, $Ra = 12\,000$, $t = 429.5$.

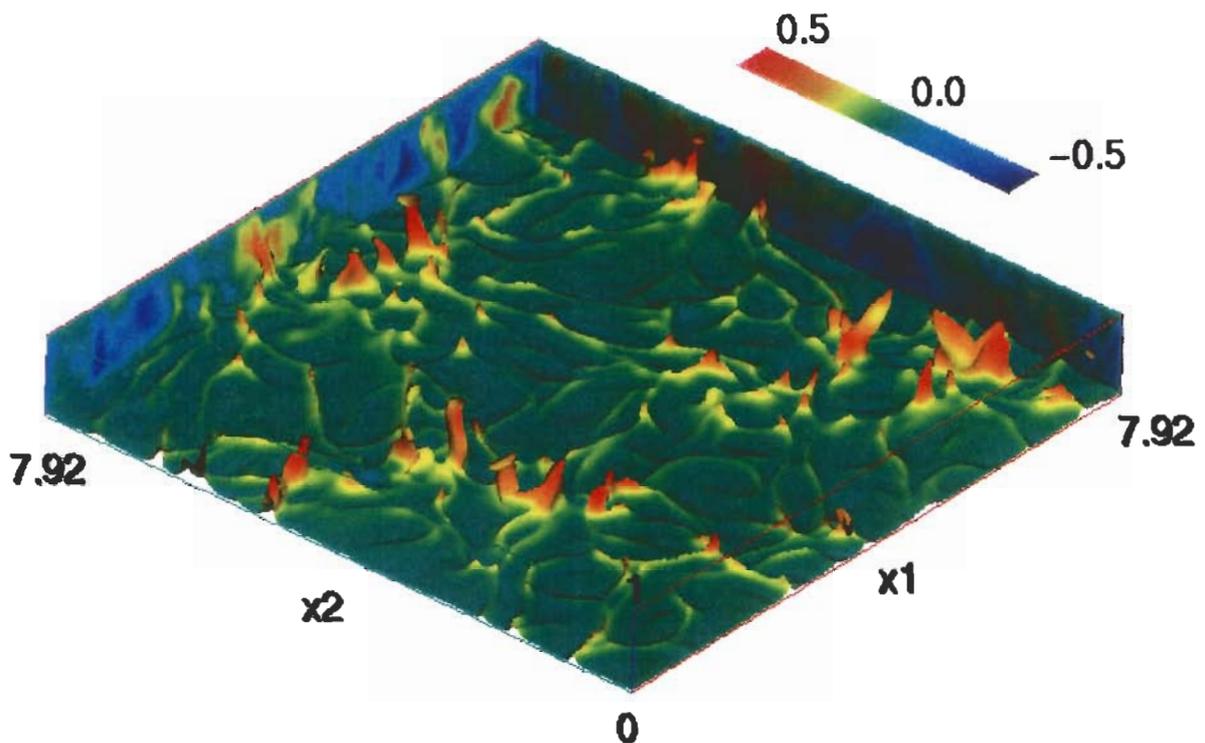


Abb. 5.38: Isofläche der Temperatur für den Wert $T = 0.75$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation (rot: aufwärts, blau: abwärts) für Luft, $Ra = 630\,000$, $t = 169.55$.

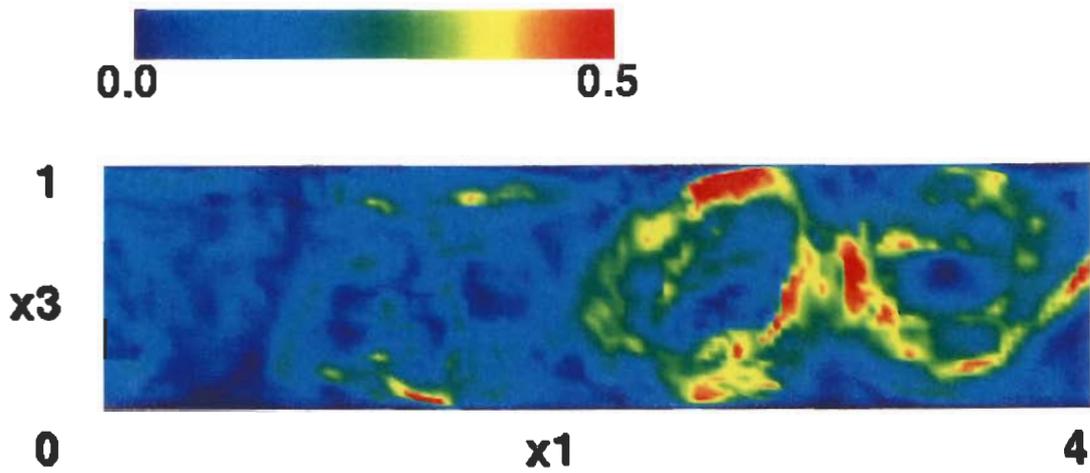


Abb. 5.42: Kinetische Turbulenzenergie in der Ebene $x_2 = 2.56$ und dem Bereich $0 \leq x_1 \leq 4$ für Natrium, $Ra = 12\,000$.

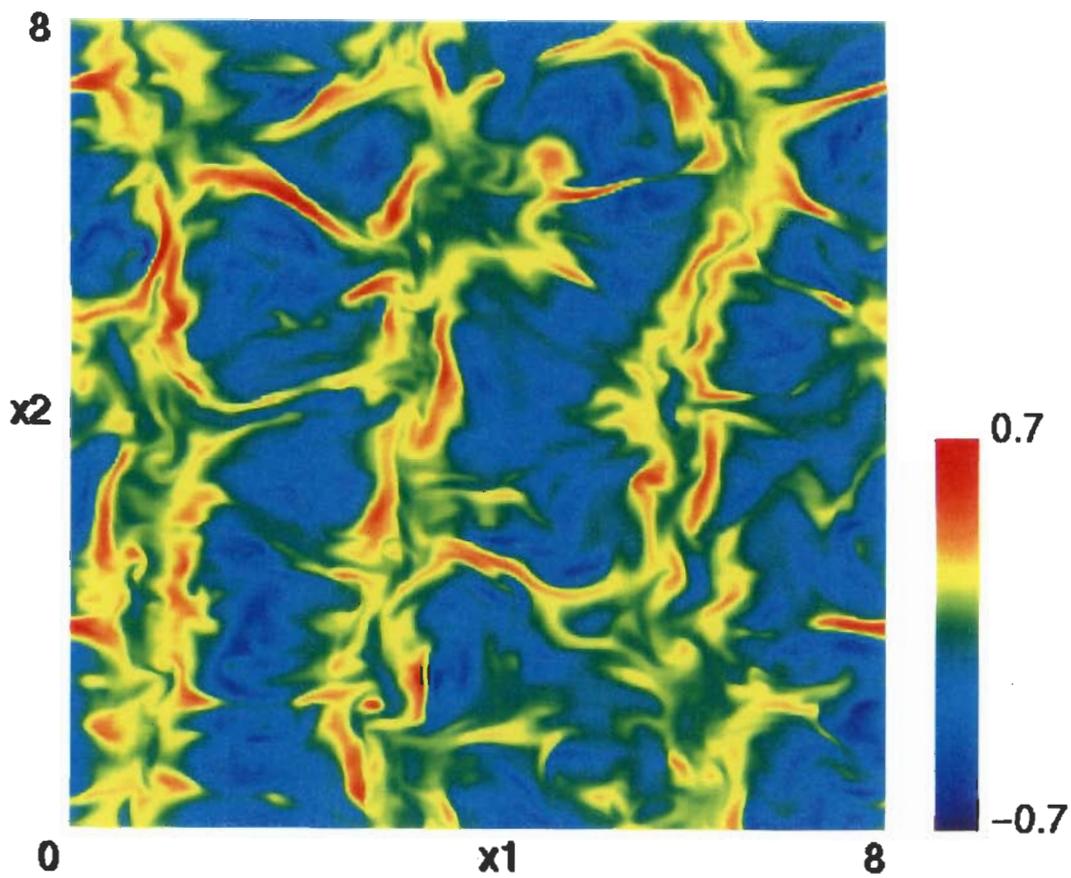


Abb. 5.43: Vertikalgeschwindigkeit in der Ebene $x_3 = 0.196$ für Natrium, $Ra = 12\,000$.

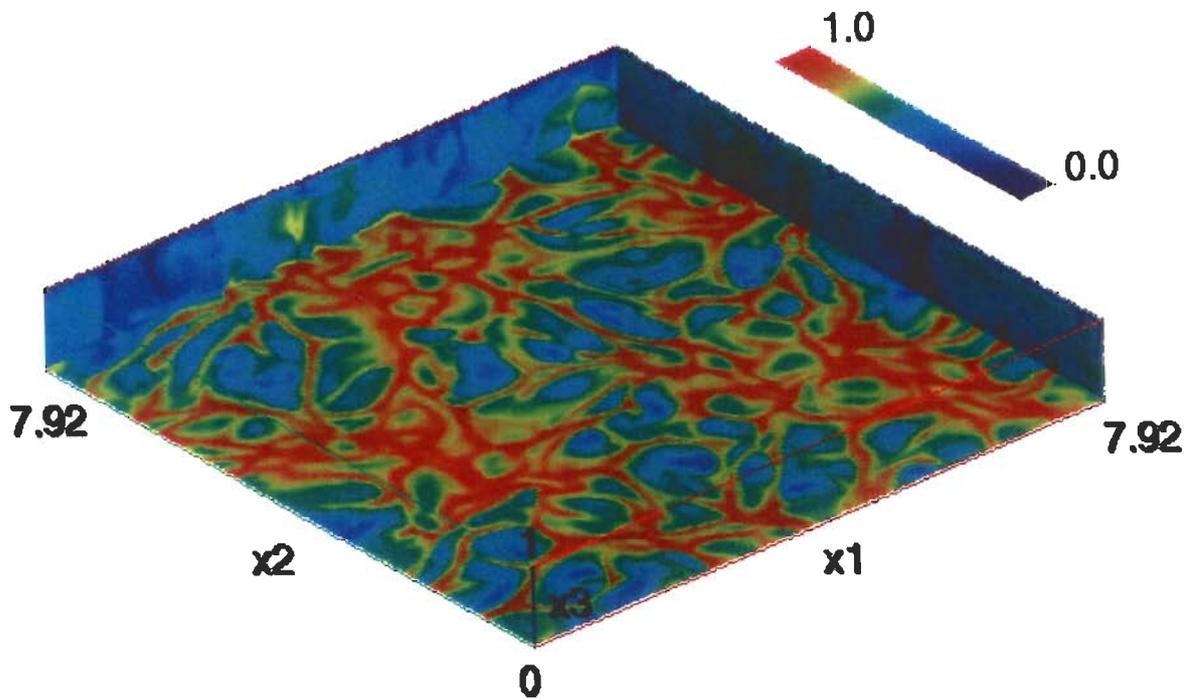


Abb. 5.44: Temperaturfeld in den Ebenen $x_1 = 7.92$, $x_2 = 7.92$ und $x_3 = 0.0425$ für Luft, $Ra = 630\,000$.

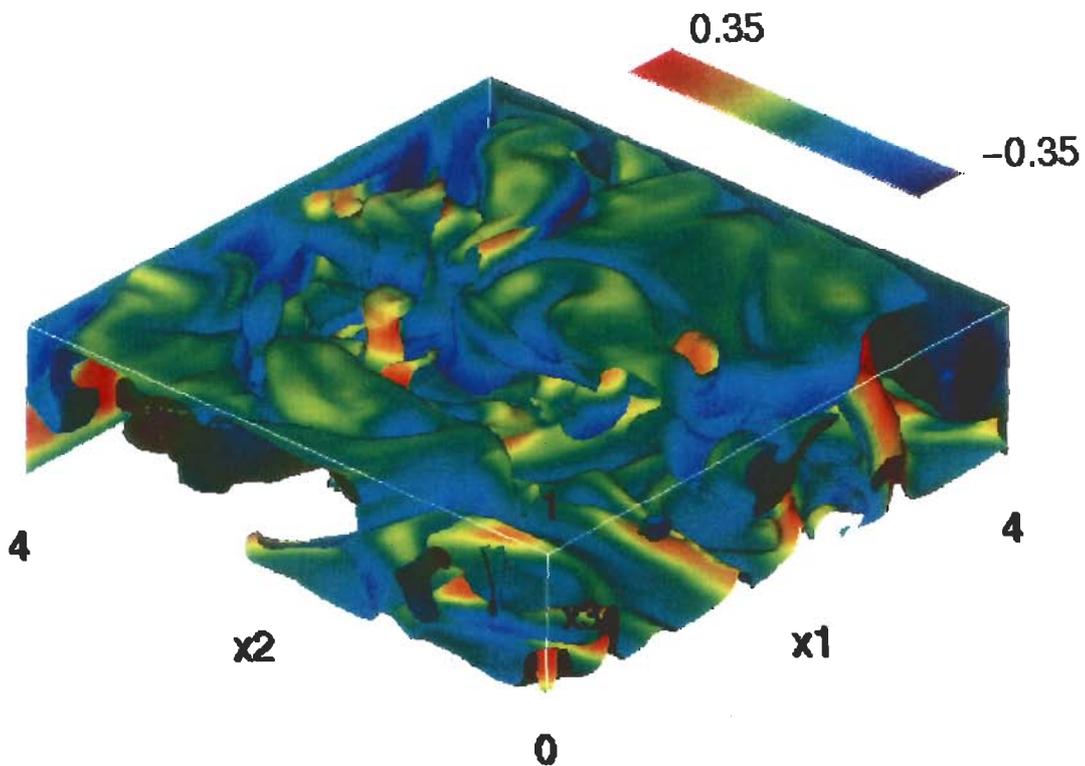


Abb. 5.45: Isofläche der Temperatur für den Wert $T = 0.5$ mit der Vertikalgeschwindigkeit als Farbinformation für Luft, $Ra = 630\,000$. Die Abbildung gibt nur ein Viertel des Kanals wieder.