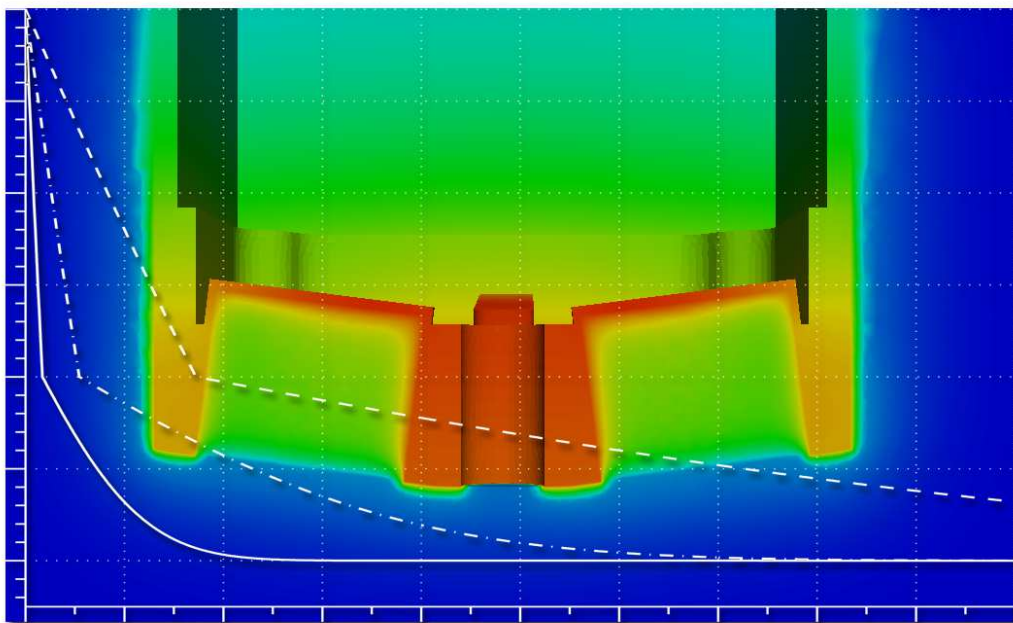


Fachhochschule Aachen
Fachbereich 6
Luft- und Raumfahrttechnik

Bachelorarbeit

Thermalsimulation des IceMole-Kopfes in Elmer

Kai Schüller
Matrikel-Nr. 356885



1. Betreuer: Prof. Dr.-Ing. Bernd Dachwald
2. Betreuer: Dr. Julia Kowalski

Aachen, im Februar 2013

Erklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die im Quellenverzeichnis angegebenen Quellen benutzt habe. Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten oder noch nicht veröffentlichten Quellen entnommen sind, sind als solche kenntlich gemacht. Die Zeichnungen oder Abbildungen in dieser Arbeit sind von mir selbst erstellt worden oder mit einem entsprechenden Quellennachweis versehen.

Aachen, Februar 2013

Kai Schüller

Kurzfassung

Bei der IceMole-Sonde handelt es sich um eine Einschmelzsonde für Gletschereis, die an der FH Aachen entwickelt wird. Da die Vorwärtsbewegung auf dem Schmelzen von Eis beruht, wird für die thermale Simulation des Prozesses eine Software benötigt, die eine Simulation von Wärmeleitung mit Phasenübergang ermöglicht. Diese Möglichkeit bietet das Softwarepaket *Elmer*. Um zu evaluieren, ob *Elmer* für die Thermalsimulation des IceMole-Gesamtsystems geeignet ist, wird die Software zunächst für ein Teilsystem getestet.

Im Rahmen dieser Arbeit werden dazu insgesamt drei verschiedene Simulationen in *Elmer* durchgeführt. Der Phasenübergang wird dabei jeweils unter Anwendung der Effective-Heat-Capacity-Methode simuliert. Zunächst werden zwei verschiedene Simulationen durchgeführt, deren Ergebnisse mit einer analytischen und einer empirischen Lösung verglichen werden, wobei sich eine gute Übereinstimmung zeigt. Anschließend wird eine Simulation mit einer vereinfachten Geometrie des IceMole-Kopfes durchgeführt, um einerseits zu zeigen, dass sich das Simulationsprinzip auch auf eine komplexe Geometrie anwenden lässt und um andererseits die thermale Auswirkung einer konstruktiven Änderung des Schmelzkopfes zur Verwendung von Phased-Array-Sensoren aufzuzeigen.

Die vorliegende Arbeit demonstriert, dass sich *Elmer* gut eignet, um im Entwicklungsprozess der IceMole-Sonde zur thermalen Simulation verwendet zu werden. Außerdem wird durch die Simulation des IceMole-Kopfes ersichtlich, dass durch die Verwendung von Phased-Array-Sensoren im Schmelzkopf das Einschmelzverhalten signifikant verschlechtert wird, weshalb eine Designoptimierung erforderlich ist. Dazu können in einem nächsten Schritt mehrere Simulationen mit verschiedenen Modifikationen des Schmelzkopfes in *Elmer* durchgeführt werden.

Abstract

The IceMole probe is a melting probe for glacial ice, which is developed by FH Aachen University of Applied Sciences. Since the forward movement is based on melting ice, there is a need for a software, which offers the ability to do thermal simulations including conduction with phase change. This possibility offers the software package *Elmer*. To evaluate whether *Elmer* is suitable for the thermal simulation of the overall system of the IceMole, the software is first tested for a subsystem.

Within this work, three different simulations are performed in *Elmer*. In each case the phase change is simulated using the Effective Heat Capacity Method. First, two different simulations are performed and the results are compared with an analytical and an empirical solution. The comparison shows a good agreement. Then a simulation using a simplified geometry of the IceMole head is performed in order to show on the one hand, that the principle can also be applied to simulate a complex geometry, and on the other hand to show the thermal effect of a design change of the melting head for the use of phased-array sensors.

The work shows that *Elmer* is well suited to be used in the development process of the IceMole probe for thermal simulation tasks. The simulation of the IceMole head shows, that the use of phased-array sensors in the melting head deteriorates the melting properties significantly. Therefore a design optimization is required. In a next step, this design optimization could be supported by several simulations, which are performed with various modifications of the melting head in *Elmer*.

Inhalt

Abbildungsverzeichnis	i
Tabellenverzeichnis	iii
Formelzeichen und Abkürzungen	iv
1 Einleitung	1
1.1 Problemstellung	2
1.2 Ziel und Überblick der Arbeit	2
2 Theoretische Grundlagen	4
2.1 Wärme und Wärmeübertragung	4
2.1.1 Definition der Wärme und der Wärmeübertragung	4
2.1.2 Arten der Wärmeübertragung	4
2.2 Wärmeleitungsgleichung	5
2.3 Mathematische Beschreibung von Schmelzvorgängen	5
2.3.1 Physikalischer Hintergrund	5
2.3.2 Definition des freien Randwertproblems	7
2.3.3 Definition des Stefan-Problems	7
2.3.4 Lösung des eindimensionalen Stefan-Problems	9
2.4 Finite-Elemente-Methode	10
2.4.1 Grundidee	11
2.4.2 Finite-Elemente-Methode der eindimensionalen, transienten Wärmeleitung	11
2.4.3 Zeit-Diskretisierung	13
2.4.4 Lösung des Gleichungssystems	13
2.5 Numerische Methoden zur Berechnung von Phasenübergängen	13
2.5.1 Front-Tracking-Methoden	14
2.5.2 Fixed-Grid-Methoden	14
2.5.2.1 Heat-Integration-Methode	15
2.5.2.2 Apparent- und Effective-Heat-Capacity-Methode	15
3 Verwendete Software	18
3.1 Elmer	18
3.2 Salome	19
3.3 Paraview	20
3.4 Simulation der Wärmeleitung mit Phasenübergang in Elmer	20
4 Verifizierung von Elmer	22
4.1 Phasenübergang - analytisch	22
4.1.1 Aufgabenstellung	22
4.1.2 Analytische Lösung	22
4.1.3 Simulation in Elmer	25

4.1.4 Vergleich und Diskussion der Simulationsergebnisse mit der analytischen Lösung	26
4.2 Phasenübergang - empirisch	29
4.2.1 Versuchsbeschreibung	29
4.2.2 Simulation in Elmer	30
4.2.3 Vergleich mit den Testergebnissen	32
5 Thermalsimulation des IceMole-Kopfes	36
5.1 Aufbau des IceMole-Kopfes	36
5.2 Simulation	37
5.3 Simulationsergebnisse	39
5.4 Plausibilitätskontrolle	42
5.5 Bewertung des Einflusses der Phased-Array-Sensoren auf das Einschmelzverhalten	43
6 Zusammenfassung und Ausblick	44
Literatur	46
Anhang	49
A Stoffwerte für Eis und Wasser	49
B Übersicht der Vereinfachungen zur Formulierung des Stefan-Problems . . .	50
C Mathematische Ergänzungen und Herleitungen	51
C.1 Gaußsche Fehlerfunktion	51
C.2 Herleitung der Stefan-Bedingung für den eindimensionalen Fall	52
D Fall-Definitionsdateien	54
D.1 Beschreibung der Fall-Definitionsdateien	54
D.2 Thermalsimulation des Eisblocks	55
D.3 Thermalsimulation des Testschmelzkopfes	58

Abbildungsverzeichnis

1.1	Foto des ersten IceMole Prototyps ohne Aluminiumhülle	1
2.1	Veranschaulichung des Schmelzvorgangs	6
2.2	Thermophysikalische Eigenschaften von Wasser in Abhängigkeit der Temperatur bei einem Druck von 1 bar	7
2.3	Darstellung der Lösung des Stefan-Problems für eine halbumendliche Platte . . .	10
2.4	Indizierung der Elemente und Knoten des eindimensionalen FE-Netzes	12
3.1	Verwendete Prozesskette für die Thermalsimulation des IceMole-Kopfes	18
4.1	Skizze der Aufgabenstellung	22
4.2	Darstellung der analytischen Lösung	24
4.3	Gewählte FE-Netze für die Simulationen	25
4.4	Vergleich der analytischen Lösung mit den Ergebnissen der ersten Simulation (Zeit-Schrittweite: 3600 s u. <i>Spatial 2</i>)	27
4.5	Vergleich der analytischen Lösung mit den Ergebnissen der zweiten Simulation (Zeit-Schrittweite: 3600 s u. <i>Temporal</i>)	28
4.6	Vergleich der analytischen Lösung mit den Ergebnissen der dritten Simulation (Zeit-Schrittweite: 360 s u. <i>Spatial 2</i>)	28
4.7	Aufbau des Testschmelzkopfes	29
4.8	Positionen der Messstellen im Testschmelzkopf	29
4.9	Versuchsergebnisse der Temperaturmessung	30
4.10	Darstellung des CAD-Modells, das für die Thermalsimulation verwendet wird . .	31
4.11	Ergebnis der Thermalsimulation des empirischen Versuches: Zeitliche Entwicklung des Temperaturfelds	33
4.12	Ergebnis der Thermalsimulation des empirischen Versuches: Vergleich der Versuchsergebnisse mit den Ergebnissen der Simulation	34
4.13	Ergebnis der Thermalsimulation des empirischen Versuches: Zeitlicher Verlauf der Phasengrenze	35
5.1	CAD-Modell des IceMole-Kopfes	36
5.2	CAD-Modell der Schmelzkopf-Baugruppe	37

5.3	Darstellung des vereinfachten CAD-Modells des IceMole-Kopfes, das für die Thermalsimulation verwendet wird	39
5.4	Ergebnis der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes: Darstellung der zeitlichen Änderung des Temperaturfelds (abgesetzter Schnitt) und der Knotenpositionen für die Plots in Abb. 5.5	40
5.5	Ergebnis der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes: Plots der zeitlichen Änderung von verschiedenen Knotentemperaturen	41
5.6	Ergebnis der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes: Position der Phasengrenze zum Zeitpunkt 75 s und 150 s	42
C.1	Graphen der Fehlerfunktion	51

Tabellenverzeichnis

3.1	Softwarevergleich Elmer-ANSYS	19
4.1	Thermophysikalische Eigenschaften, die für die Thermalsimulation des Testschmelzkopfes verwendet werden	32
5.1	Thermophysikalische Eigenschaften, die für die Thermalsimulation des IceMole-Kopfes verwendet werden	38
A.1	Stoffwerte für Eis und Wasser	49
B.1	Übersicht der Vereinfachungen zur Formulierung des Stefan-Problems	50
C.1	Werte der Gaußschen Fehlerfunktion	52
D.1	Beschreibung der Einträge in der Fall-Definitionsdatei	54

Formelzeichen und Abkürzungen

Formelzeichen

$\alpha = k/(\rho c)$	Temperaturleitfähigkeit	m^2/s
$\text{erf}(\square)$	Gaußsche Fehlerfunktion	
$\text{erfc}(\square)$	konjugierte Gaußsche Fehlerfunktion	
C	Wärmekapazitätsmatrix	
K	Wärmeleitungsmatrix	
Q	Knotenpunkt-Wärmestromdichte-Vektor	
T	Knotenpunkt-Temperatur-Vektor	
\dot{q}	Wärmequellendichte	W/m^3
$\dot{\square}$	$d\square/dt$	
ϵ	relativer Fehler	-
λ	Proportionalitätsfaktor der Phasengrenzenausbreitung	-
Φ	Anteil der festen Phase	-
ρ	Dichte	kg/m^3
ξ	Ähnlichkeitsvariable	$\text{m}/\text{s}^{-1/2}$
C	Wärmekapazität	J/K
c	spezifische Wärmekapazität	$\text{J}/(\text{kgK})$
H	volumenspezifische Enthalpie	J/m^3
h	spezifische Enthalpie	J/kg
k	Wärmeleitfähigkeit	$\text{W}/(\text{mK})$
L	latente Wärme (spez. Phasenumwandlungsenthalpie)	J/kg
N	Ansatzfunktion	
Q	Wärme	J
q	Wärmestrom	W
q''	Wärmestromdichte	W/m^2
St	Stefan-Zahl	-
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
X	Position der Phasengrenze	m

Indizes

\square_L	in der flüssigen Phase
\square_m	am Schmelzpunkt
\square_S	in der festen Phase

\square_{app} apparent

\square_{eff} effective

\square_{ref} referenz

Abkürzungen

AHC Apparent-Heat-Capacity

DGL Differentialgleichung

EHC Effective-Heat-Capacity

FEM Finite-Elemente-Methode

FE Finite-Elemente

PDGL Partielle Differentialgleichung

1 Einleitung

„IceMole“ ist die Bezeichnung einer Einschmelzsonde, die an der FH Aachen entwickelt wird. Die IceMole-Sonde stellt das Trägersystem für ein Verbundvorhaben namens „Enceladus Explorer“ dar. Ziel dieses Vorhabens ist die Entwicklung notwendiger Navigationstechnologien für eine mögliche Raumfahrtmission zum Saturnmond Enceladus. Die Entwicklung verläuft in drei Phasen, welche jeweils durch einen Feldversuch abgeschlossen werden. Der finale Test soll an den Blood Falls¹ in der Antarktis durchgeführt werden, wobei eine unkontaminierte Probe des eisenhaltigen hypersalinen Wassers entnommen werden soll [vgl. Dachwald u. a., 2011a]. Des Weiteren wird bereits an einer IceMole-Version für extraterrestrische Anwendungen gearbeitet, die den Namen MarsMole trägt. Das Einschmelzprinzip des IceMole wurde übernommen. Jedoch wurde die Größe und das Gewicht verringert, damit die Eignung für Raumfahrtanwendungen gewährleistet ist.

Bei dem verwendeten Einschmelzprinzip wird die Bewegung der Sonde durch eine Kombination aus Schmelzkopf und Eisschraube ermöglicht (siehe Abb. 1.1). Aufgrund der Eisschraube wird eine Anpresskraft vom Schmelzkopf auf das Eis aufgebracht, wodurch ein kontinuierlicher Kontakt gewährleistet wird. Das ist auch der Grund, warum das Einschmelzprinzip der IceMole-Sonde für Raumfahrtanwendungen in Betracht kommt, da durch dieses kombinierte Schmelzverfahren, keine Gravitation erforderlich ist, damit sich die Sonde durch das Eis bewegen kann.

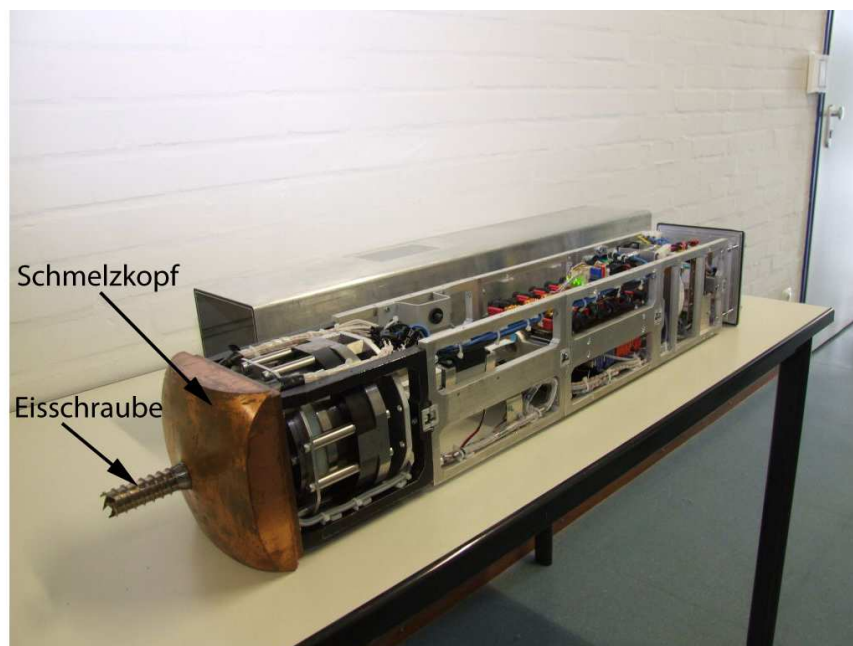


Abb. 1.1: Foto des ersten IceMole Prototyps ohne Aluminiumhülle
Quelle: [Dachwald u. a., 2011b]

¹Als Blood Falls werden die Gletscherspalten an der Zunge des Taylor-Gletschers in der Antarktis bezeichnet, an denen salzhaltiges Wasser austritt [vgl. Dachwald u. a., 2011a].

1.1 Problemstellung

Um eine möglichst große Effizienz zu erreichen, ist es notwendig das Design der IceMole-Sonde dahingehend zu optimieren, dass eine aufgabenspezifisch bestmögliche Wärmeabfuhr in das Eis gewährleistet wird.

Ein gegenwärtiges Problem, das solch eine Designoptimierung erfordern könnte, resultiert aus einer konstruktiven Änderung des IceMole-Kopfes zur frühzeitigen Erkennung von Hindernissen mittels Phased-Array-Sensoren. Dazu werden vier Phased-Array-Sensoren, die sich jeweils in einem Gehäuse befinden, das mit Epoxidharz gefüllt ist, auf der Schmelzseite des Schmelzkopfes angebracht. Dadurch ist eine Verschlechterung der Einschmelzgeschwindigkeit zu erwarten. Da der Grad dieser Verschlechterung jedoch nicht bekannt ist, müssen Tests durchgeführt werden, die zeigen, wie das Einschmelzverhalten aufgrund der Phased-Array-Sensoren beeinflusst wird.

Eine Möglichkeit ist das Testen mit Prototypen. Der große Nachteil dieses Verfahrens sind jedoch die Kosten, die für die Fertigung der Prototypen anfallen. Außerdem erfordern einige Entwicklungsstadien, eine große Testumgebung, die nur durch einen zeitintensiven Feldversuch gegeben ist.

Um die Anzahl von teuren Prototypen möglichst gering zu halten, können computergestützte Simulationen durchgeführt werden. Da es sich bei der thermalen Umgebung um schmelzendes Eis handelt, ist es bezogen auf die Thermalsimulation wünschenswert, eine Software zu verwenden, die Wärmeleitung mit Phasenübergang simulieren kann. Eine Software, die diese Möglichkeit bietet, ist *Elmer*. Um eine Entscheidung darüber treffen zu können, ob *Elmer* für die Thermalsimulation des IceMole-Sonde geeignet ist, muss die Software zunächst getestet werden.

1.2 Ziel und Überblick der Arbeit

Das Primärziel der vorliegenden Arbeit ist die erstmalige Durchführung von Thermalsimulationen mit Phasenübergang für das IceMole-System. Damit wird die Eignung der FEM-Software *Elmer* für die Thermalsimulation der IceMole-Sonde festgestellt. Im Rahmen dieser Arbeit werden daher Modell und Simulationen systematisch hergeleitet, durchgeführt und anhand von Vergleichen bewertet.

Das Sekundärziel besteht darin, eine Thermalsimulation des IceMole-Kopfes mit Phasenübergang durchzuführen, wodurch die Auswirkung der Phased-Array-Sensoren auf das Einschmelzverhalten ersichtlich wird. Dies ist erforderlich um eine Entscheidung über die Notwendigkeit einer Designoptimierung des Schmelzkopfes treffen zu können.

In Abschnitt 2 werden zunächst einige theoretische Grundlagen behandelt. Es wird gezeigt, wie Wärmeübertragung mathematisch beschrieben werden kann. Außerdem werden Methoden zur analytischen und numerischen Lösung von Schmelzvorgängen dargestellt. Da es sich bei *Elmer* um eine FEM-Software handelt, werden außerdem einige Grundlagen zur FEM für den eindimensionalen Fall aufgeführt.

Abschnitt 3 dient zur Beschreibung der verwendeten Software. Neben *Elmer* als Löser, wird auch die Software beschrieben, die in der vorliegenden Arbeit als Prä- und Post-Prozessor verwendet wird. Außerdem wird darauf eingegangen, wie Thermalsimulation in *Elmer* durchgeführt werden und welche Möglichkeiten es gibt, in *Elmer* Phasenübergänge zu beschreiben.

In Abschnitt 4 werden Simulationsergebnisse mit einer analytischen und einer empirischen Lösung verglichen. Zum Vergleich mit der analytischen Lösung wird als Geometrie ein einfacher dreidimensionaler Balken für die Simulation verwendet. Zum Vergleich mit der empirischen Lösung wird die Geometrie eines Testschmelzkopfes nachempfunden. Dieser besteht aus zwei verschiedenen Materialien, um die Einbettung von Sensoren zu repräsentieren und wird inklusive des umgebenden Eises simuliert.

In Abschnitt 5 werden die Ergebnisse der Simulation einer vereinfachten Geometrie des IceMole-Kopfes gezeigt und einer Plausibilitätskontrolle unterzogen. Außerdem wird der Einfluss der Phased-Array-Sensoren auf das Schmelzverhalten der IceMole-Sonde bewertet.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Wärme und Wärmeübertragung

2.1.1 Definition der Wärme und der Wärmeübertragung

Nach Polifke u. Kopitz [2009, S. 27] ist **Wärme** Q eine Energie, die einem System aufgrund von Temperaturunterschieden ohne Arbeitsleistung zugeführt oder abgeführt wird.

Wärmeübertragung bezeichnet den Transport von thermischer Energie aufgrund räumlicher Temperaturdifferenzen. Das bedeutet, dass Wärmeübertragung immer dann auftritt, wenn ein Temperaturunterschied in einem Stoff oder zwischen mehreren Stoffen vorliegt, wobei Wärme immer in Richtung abfallender Temperatur fließt [vgl. Incropera u. a., 2007, S. 2; Baehr u. Stephan, 2010, S. 1].

2.1.2 Arten der Wärmeübertragung

Die meisten Autoren unterscheiden drei² Arten der Wärmeübertragung. Somit werden, neben Wärmeleitung, auch Konvektion und Wärmestrahlung zu den Wärmeübertragungsarten gezählt.

Als **Wärmeleitung** wird der Transport von Energie innerhalb eines Festkörpers oder eines Fluids bezeichnet, der aufgrund eines vorhandenen Temperaturgradienten auftritt [vgl. Baehr u. Stephan, 2010, S. 2]. Mathematisch kann diese Art der Wärmeübertragung durch das Fouriersche Gesetz beschrieben werden, wobei k als Wärmeleitfähigkeit, und \mathbf{q}'' als Wärmestromdichte bezeichnet wird.

Das Fouriersche Gesetz lautet:

$$\mathbf{q}'' = -k\nabla T \quad (2.1)$$

Für den eindimensionalen Fall lautet Gl. (2.1):

$$q_x'' = -k \frac{dT}{dx} \quad (2.2)$$

Das negative Vorzeichen in Gl. (2.1) rührt daher, dass der Vektor der Wärmestromdichte in Richtung des Temperaturabfalls zeigen muss.

Die Überlagerung von Wärmeleitung und Energietransport durch ein strömendes Fluid wird als **Konvektion** bezeichnet. Es wird zwischen freier Konvektion und erzwungener Konvektion unterschieden. Wenn eine Strömung aufgrund von Temperatur- und den dadurch resultierenden Dichteunterschieden in einem Fluid entsteht, wird dies als freie Konvektion bezeichnet. Im Gegensatz dazu wird bei erzwungener Konvektion die Strömung durch einen äußeren Druckunterschied hervorgerufen [vgl. Baehr u. Stephan, 2010, S. 11; von Böckh u. Wetzel, 2011, S. 4].

²Im Gegensatz zu Nußelt, der die Wärmeübertragung lediglich in zwei Arten aufteilt, da Konvektion keine, von Wärmeleitung unabhängige, Erscheinung sei [vgl. Nußelt, 1915, zit. n. von Böckh u. Wetzel, 2011, S. 3].

Wärmestrahlung bezeichnet den trägerlosen Transfer von Wärme durch elektromagnetische Wellen von einer Oberfläche zu einer anderen [vgl. von Böckh u. Wetzels, 2011, S. 4].

2.2 Wärmeleitungsgleichung

Die Wärmeleitungsgleichung³ ist eine partielle Differentialgleichung (PDGL) zweiter Ordnung, die aus der Energieerhaltung resultiert. Ihre Lösung hängt von vorgeschriebenen Randbedingungen ab und ist das Temperaturfeld eines Körpers in Abhängigkeit der Zeit [vgl. Incropera u. a., 2007, S. 70 ff.]. Ist das Temperaturfeld erst einmal bekannt so kann die Wärmestromdichte im Anschluss mithilfe des Fourierschen Gesetzes Gl. (2.1) ermittelt werden.

Die Wärmeleitungsgleichung in kartesischen Koordinaten lautet [vgl. Lienhard, 2012]:

$$\nabla \cdot k \nabla T + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.3)$$

Oder ausgeschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}$$

mit der Wärmequellendichte \dot{q} , der Dichte ρ und Wärmekapazität c .

Wenn die Wärmeleitfähigkeit k innerhalb des Körpers konstant ist, so kann Gl. (2.3) wie folgt vereinfacht werden:

$$\nabla^2 T + \frac{\dot{q}}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.4)$$

mit der Temperaturleitfähigkeit $\alpha = k/(\rho c)$.

Die Temperaturleitfähigkeit ist also das Verhältnis zwischen Wärmeleitung und Wärmespeicherung. Aus Gl. (2.4) wird ersichtlich, dass eine große Temperaturleitfähigkeit zu einer schnelleren Antwort führt, wenn Temperaturänderungen in der thermalen Umgebung auftreten.

Betrachtet man den stationären Fall so kann die Zeitableitung von Gl. (2.3) vernachlässigt werden. Die Wärmeleitungsgleichung Gl. (2.3) vereinfacht sich zu:

$$\nabla \cdot k \nabla T + \dot{q} = 0 \quad (2.5)$$

2.3 Mathematische Beschreibung von Schmelzvorgängen

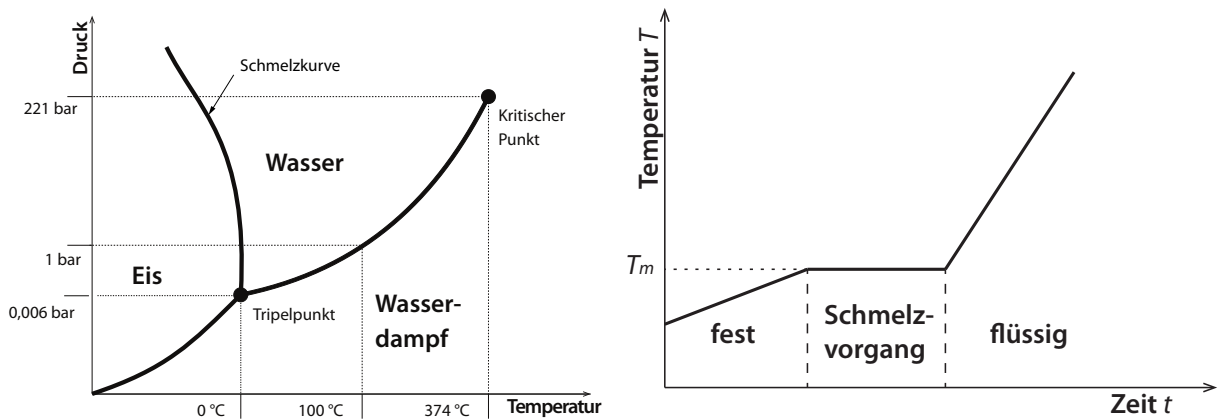
2.3.1 Physikalischer Hintergrund

Fügt man einem gefrorenen Körper Wärme zu, so wird sich sein Aggregatzustand (seine Phase) nach Erreichen einer material- und nur geringfügig⁴ druckabhängigen Schmelztemperatur T_m von fest auf flüssig ändern (siehe Abb. 2.1(a)). Trägt man für einen bestimmten Punkt eines

³Die Wärmeleitungsgleichung wird auch Diffusionsgleichung genannt.

⁴Anders als beim Sieden hat eine Erhöhung des umgebenden Druckes nur einen geringen Einfluss auf die Schmelztemperatur.

schmelzenden Körpers die Temperatur über die Zeit auf so wird ersichtlich, dass der Temperaturanstieg, nach Erreichen der Schmelztemperatur, für eine gewisse Zeit unterbrochen wird (siehe Abb. 2.1(b)). Die Umwandlung der zugeführten Energie in fühlbare Wärme (Temperaturanstieg) ist also nicht stetig. Das liegt daran, dass für den Schmelzvorgang Arbeit verrichtet werden muss, um die Teilchen so umzuordnen, dass eine flüssige Phase entsteht. Die dafür notwendige Energie wird als Phasenumwandlungsenthalpie oder latente Wärme L bezeichnet [vgl. Tipler u. Mosca, 2009, S. 699 f.]. Sie verbleibt als Beitrag zur inneren Energie⁵ in der flüssigen Phase, bis diese wieder gefriert. Erst dann wird die latente Wärme wieder freigesetzt. Der Wert der latenten Wärme entspricht dem Enthalpie-Sprung der beiden Phasen im Bereich der Schmelztemperatur ($L = h_L - h_S \Rightarrow$ Schmelzen, $L = h_S - h_L \Rightarrow$ Gefrieren) (siehe Abb. 2.2(d)).



(a) Phasendiagramm von Wasser, Quelle:[Wikipedia, 2012]

(b) Skizze des Temperatur-Zeit Diagramms eines Schmelzvorgangs (für Wasser bei $p > 0,006$ bar)

Abb. 2.1: Veranschaulichung des Schmelzvorgangs

Eine weitere wichtige Konsequenz eines Phasenübergangs ist die unstetige Änderung der thermophysikalischen Eigenschaften k , c und ρ über die Phasengrenze. Beispielsweise ändert sich die spezifische Wärmekapazität von Eis ungefähr um den Faktor 2 (von fest $c_S \approx 2,1 \text{ J}/(\text{kg K})$ zu flüssig $c_L \approx 4,2 \text{ J}/(\text{kg K})$), nachdem es geschmolzen ist (siehe Abb. 2.2(d)).

⁵Die innere Energie besteht aus einer fühlbaren, einer latenten, einer chemischen und einer nuklearen Komponente.

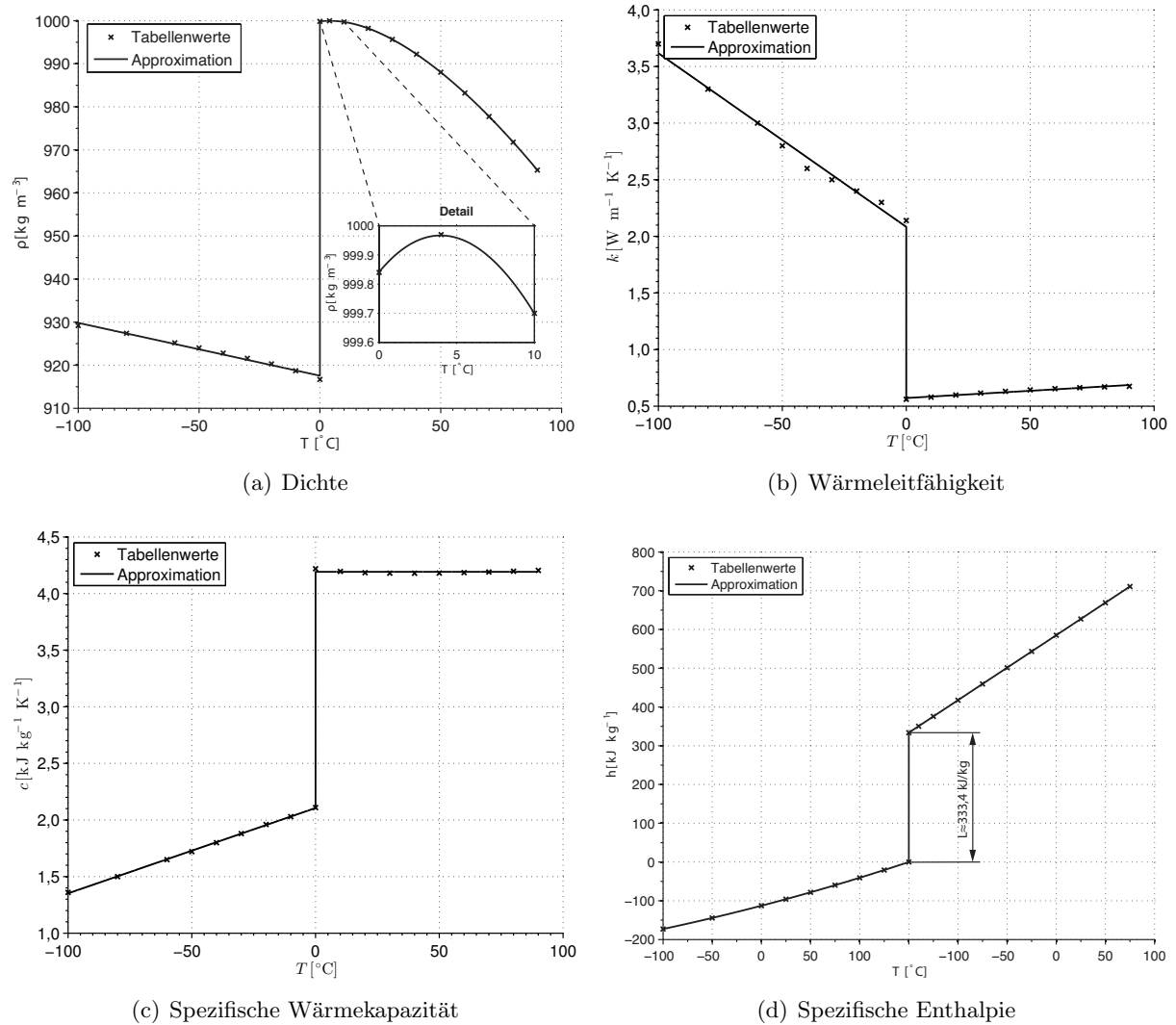


Abb. 2.2: Thermophysikalische Eigenschaften von Wasser in Abhängigkeit der Temperatur bei einem Druck von 1 bar (Werte aus Tabelle A.1)

2.3.2 Definition des freien Randwertproblems

Soll eine PDGL auf einem Gebiet gelöst werden, von welchem die Position des Randes unbekannt ist, so ist dies als eine zusätzliche Unbekannte des Systems zu behandeln. Es wird von einem Problem mit freiem Rand gesprochen [vgl. Eck u. Garcke, 2011, S. 431]. Dies ist auch bei einem Körper mit Phasenübergang der Fall. In einem solchen Zusammenhang wird von einem Stefan-Problem gesprochen.

2.3.3 Definition des Stefan-Problems

Zur Formulierung des Stefan-Problems werden einige Vereinfachungen getroffen, welche den hier betrachteten Fall hinreichend genau beschreiben. Damit ist auch eine analytische Lösung möglich. Es wird eine halbunendliche Platte betrachtet, die unabhängig vom Aggregatzustand räumlich, sowie zeitlich eine konstante Dichte ρ aufweist. Des Weiteren wird eine idealisierte

Phasengrenze vorausgesetzt, die keine Dicke aufweist und somit als Isotherme der Schmelztemperatur T_m aufgefasst werden kann. Die latente Wärme, die von der Phasengrenze aufgenommen bzw. abgegeben wird, ist konstant. Außerdem wird die spezifische Wärmekapazität c_L und die Wärmeleitfähigkeit k_L in der flüssigen Phase bzw. c_S und k_S in der festen Phase als konstant angenommen. Innerhalb beider Phasen soll Wärme isotrop und nur durch Wärmeleitung übertragen werden. Eine ausführliche Begründung zur Wahl dieser Annahmen listet Tabelle B.1 auf.

Mit diesen Vereinfachungen kann das physikalische Problem mit Phasenübergang beispielsweise wie folgt formuliert werden [vgl. Alexiades u. Solomon, 1993, S. 22]:

Ein anfänglich fester Stab ($0 \leq x \leq l$) mit der Anfangstemperatur $T_{\text{init}} < T_m$ wird dadurch geschmolzen, dass bei $x = 0$ eine Temperatur $T_L > T_m$ angelegt wird, wobei die andere Seite des Stabes bei $x = l$ isoliert ist. Die thermophysikalischen Eigenschaften ρ , c_L , k_L , c_S und k_S sind konstant. Die Phasen werden durch die Phasengrenze bei $x = X(t)$ getrennt.

Um das physikalische Problem komplett beschreiben zu können, müssen Randbedingungen für die Wärmeleitungsgleichung formuliert werden (z.B. Dirichlet- oder Neumann-Randbedingung). Außerdem muss eine weitere Bedingung gestellt werden, welche das physikalische Verhalten an der Phasengrenze beschreibt. Diese Bedingung ist wird als **Stefan Bedingung** bezeichnet (die Herleitung befindet sich in Anhang C.2). Sie lautet für den eindimensionalen Fall:

$$\rho L \frac{\partial}{\partial t} X(t) = -k_L \frac{\partial T(X(t)^-, t)}{\partial x} + k_S \frac{\partial T(X(t)^+, t)}{\partial x}, \quad (2.6)$$

mit der Position der Phasengrenze $X(t)$, dem Temperaturfeld $T(X(t)^-, t)$ in der flüssigen Phase und dem Temperaturfeld $T(X(t)^+, t)$ in der festen Phase.

Die Stefan-Bedingung stellt sicher, dass mit fortschreitender Phasengrenze, fühlbare Wärme in latente Wärme umgewandelt wird. Dies führt zu einem Sprung der Wärmestromdichte und somit zu einer Unstetigkeit der Temperatur über die Phasengrenze [vgl. Alexiades u. Solomon, 1993, S. 22].

Das eindimensionale Stefan-Problem ist somit durch das folgende PDGL System gegeben:

Wärmeleitungsgleichung in der flüssigen Phase

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \alpha_L \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < X(t), \quad t > 0 \quad (2.7)$$

Wärmeleitungsgleichung in der festen Phase

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \alpha_S \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad X(t) < x, \quad t > 0 \quad (2.8)$$

Temperatur der Phasengrenze (Schmelztemperatur)

$$T(X(t), t) = T_m, \quad t > 0 \quad (2.9)$$

Stefan Bedingung

$$\rho L \frac{\partial}{\partial t} X(t) = -k_L \frac{\partial T(X(t)^-, t)}{\partial x} + k_S \frac{\partial T(X(t)^+, t)}{\partial x}, \quad t > 0 \quad (2.10)$$

Anfangstemperatur

$$T(x, 0) = T_S < T_m, \quad x > 0 \quad (2.11)$$

Anfangsposition der Phasengrenze

$$X(0) = 0 \quad (2.12)$$

Randbedingungen

$$T(0, t) = T_L < T_m, \quad t > 0 \quad (2.13)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} T(x, t) = T_S, \quad t > 0 \quad (2.14)$$

2.3.4 Lösung des eindimensionalen Stefan-Problems

Im Folgenden wird kurz die eindimensionale Lösung für das Stefan-Problem skizziert. Eine ausführliche Darstellung findet sich in [Alexiades u. Solomon, 1993]

Es wird angenommen, dass die Lösung eine selbstähnliche Form hat. Daher wird die Ähnlichkeitsvariable wie folgt definiert:

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{t}}.$$

Entsprechend wird auch die Position der Phasengrenze als proportional zu \sqrt{t} angenommen:

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_L t}. \quad (2.15)$$

Die Skalierung des Proportionalitätsfaktors λ mit $2\sqrt{\alpha_L}$ ist dabei willkürlich, stellt sich aber im weiteren Verlauf der Rechnung als günstig heraus.

Nun können die PDGL (2.7) und (2.8) für $T(x, t)$ in gewöhnliche DGL für $F(\xi)$ transformiert werden. Zusammen mit den Randbedingungen Gl. (2.9), (2.13), (2.14) und der Anfangsbedingung Gl. (2.11) ergibt sich folgende (bereits rücktransformierte) Lösung:

Temperatur in der flüssigen Phase

$$T(x, t) = T_L - (T_L - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right)}{\operatorname{erf} \lambda}, \quad 0 < x < X(t), \quad t > 0 \quad (2.16)$$

Temperatur in der festen Phase

$$T(x, t) = T_S + (T_m - T_S) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_S t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\lambda\sqrt{\alpha_L/\alpha_S}\right)}, \quad X(t) < x, \quad t > 0 \quad (2.17)$$

Es stellt sich heraus, dass die Lösung lediglich vom Proportionalitätsfaktor der Phasengrenzenausbreitung λ abhängt. Aus der Stefan-Bedingung Gl. (2.6) leitet man für λ folgende transzendente Gleichung her:

$$\frac{St_L}{e^{\lambda^2} \operatorname{erf} \lambda} - \frac{St_S}{\nu e^{\nu^2 \lambda^2} \operatorname{erfc}(\nu \lambda)} = \lambda \sqrt{\pi} \quad (2.18)$$

mit

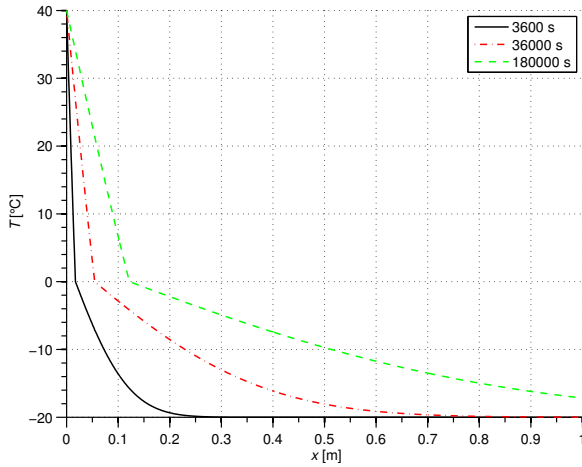
$$St_L = \frac{c_L(T_L - T_m)}{L} \quad (2.19)$$

$$St_S = \frac{c_S(T_m - T_S)}{L} \quad (2.20)$$

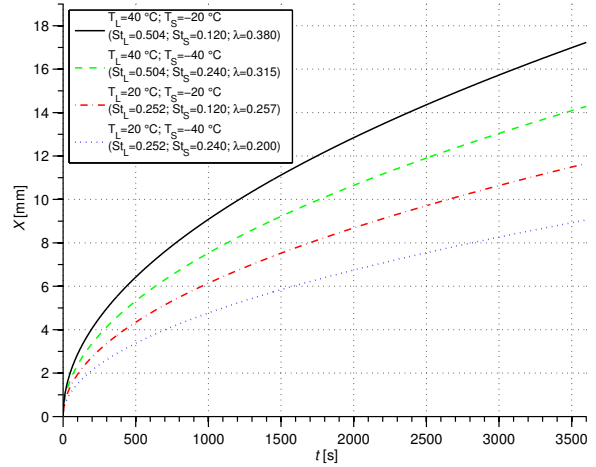
$$\nu = \sqrt{\frac{\alpha_L}{\alpha_S}} \quad (2.21)$$

Diese lässt sich nicht direkt nach λ auflösen und muss deshalb numerisch gelöst werden.

In Abb. 2.3(a) ist ein Temperaturfeld zu sehen, das sich mithilfe von Gl. (2.16) und (2.17) für verschiedene Zeitpunkte ergibt. Abb. 2.3(b) zeigt die zeitliche Entwicklung der Phasengrenzenposition für verschiedene T_L - T_S -Kombinationen. Es lässt sich erkennen, dass eine maximale Schmelzgeschwindigkeit erreicht wird, wenn St_L groß und St_S klein wird. Dies kann nach Gl. (2.19) und (2.20) durch eine Erhöhung der Temperatur in der flüssigen Phase und eine Verringerung der Temperatur in festen Phase erreicht werden.



(a) Darstellung des Temperaturfelds in der halbinendlichen Platte zu verschiedenen Zeitpunkten



(b) Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Phasengrenzenposition bei Variation der Temperatur in der flüssigen Phase T_L und der Temperatur in der festen Phase T_S

Abb. 2.3: Darstellung der Lösung des Stefan-Problems für eine halbinendliche Platte mit den thermophysikalischen Eigenschaften $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $k_L = 0,6 \text{ W/(m K)}$, $k_S = 2,3 \text{ W/(m K)}$, $c_L = 4200 \text{ J/(kg K)}$, $c_S = 2000 \text{ J/(kg K)}$, $L = 333400 \text{ J/kg}$

2.4 Finite-Elemente-Methode

Da es sich bei *Elmer* um eine Software handelt, die auf der Finite-Elemente-Methode (FEM) beruht, soll in diesem Abschnitt ein kleiner Einblick in diese Methode gegeben werden. Dazu wird zunächst die allgemeine Grundidee der FEM erläutert. Anschließend wird die FEM am Beispiel der eindimensionalen, transienten Wärmeleitung genauer betrachtet. Abschließend wird kurz auf das Lösen der resultierenden Gleichungssysteme und die Methoden zur Zeitdiskretisierung eingegangen.

2.4.1 Grundidee

Die FEM ist ein numerisches Verfahren zur Lösung von PDGL. Der Grundgedanke besteht darin, ein kontinuierliches mathematisches Modell in ein diskretes System zu überführen, welches mittels geeigneter Algorithmen berechnet werden kann. Die gesuchten Variablen werden dabei als Überlagerung einfacher Ansatzfunktionen ausgedrückt, wie beispielsweise Polynome verschiedener Ordnung. Es resultiert eine endliche Anzahl von Elementen, die über Knoten miteinander verbunden sind. Die Gesamtheit der Elemente wird Gitter genannt. Für jedes Element können relative Beziehungen der Knoten untereinander definiert werden. Da die Knoten mit angrenzenden Elementen geteilt werden, ergeben sich Abhängigkeiten. Durch diese Abhängigkeiten kann das Verhalten des Gesamtsystems beschrieben werden.

2.4.2 Finite-Elemente-Methode der eindimensionalen, transienten Wärmeleitung

Nachfolgend wird die Finite-Elemente-Methode für den eindimensionalen Fall skizziert. Eine ausführliche Beschreibung findet sich in [Polifke u. Kopitz, 2009, S. 576 - S. 589].

Ausgehend von der Wärmeleitungsgleichung Gl. (2.3) wird zunächst die finite Grundgleichung bestimmt. Nach Klein [2010, S. 27] gibt es zur näherungsweisen Verarbeitung einer Differentialgleichung zwei Möglichkeiten. So verwendet Bathe [1982, S. 407 ff.] beispielsweise das Variationsprinzip⁶, um eine Ersatzgleichgewichtsgleichung zu formulieren. Eine weitere Möglichkeit liefert die Methode von Galerkin, die zu den Methoden des gewichteten Restes zählt. Dabei wird die Wärmeleitungsgleichung mit einer Ansatzfunktion $N_i(x)$ (in der Mathematik auch Testfunktion genannt) multipliziert und über das Rechengebiet $0 \leq x \leq l$ integriert:

$$\int_0^l N_i(x) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-k(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) + \rho c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \right] dx = 0 \quad (2.22)$$

wobei die Anzahl der Funktionen $N_i(x)$ der Anzahl unbekannter Knotenwerte entspricht.

Nach der Wahl einer linearen Ansatzfunktion und einigen Umformungen [vgl. Polifke u. Kopitz, 2009, S. 576 - S. 589] ergeben sich die Elementmatrizen zu:

$$\frac{1}{\Delta x} k \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_i \\ T_{i+1} \end{bmatrix} + \Delta x \rho c \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{T}_i \\ \dot{T}_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -q''_{i(-)} \\ q''_{i+1(+)} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

wobei der Index i den betrachteten Knoten bezeichnet. $q''_{i(-)}$ und $q''_{i+1(+)}$ sind die Randbedingungen des Elements (siehe Abb. 2.4).

⁶Mit dem Variationsprinzip wird die finite Grundgleichung über das Minimum der potentiellen Energie berechnet.

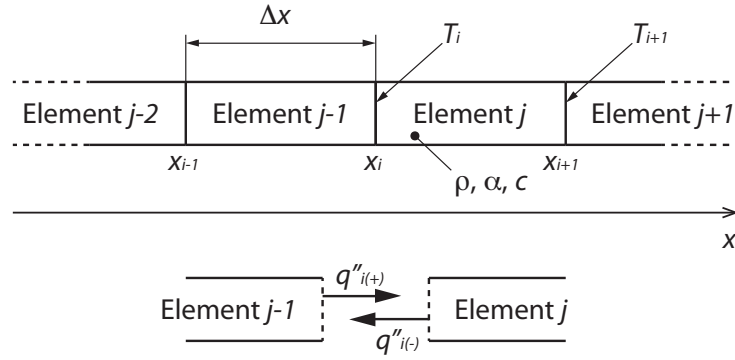


Abb. 2.4: Indizierung der Elemente und Knoten des eindimensionalen FE-Netzes

Anhand eines einfachen Beispiels soll im Folgenden gezeigt werden, wie sich die Gesamtmatrix aus den einzelnen Elementmatrizen Gl. (2.23) zusammensetzt.

Besteht ein eindimensionales FE-Netz nur aus zwei Elementen, so lauten die Elementmatrizen:

$$\frac{1}{\Delta x} k \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} + \Delta x \rho c \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{T}_1 \\ \dot{T}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -q''_{1(-)} \\ q''_{2(+)} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{\Delta x} k \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} + \Delta x \rho c \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{T}_2 \\ \dot{T}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -q''_{2(-)} \\ q''_{3(+)} \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Damit kann die Gesamtmatrix wie folgt aufgestellt werden:

$$\underbrace{\frac{1}{\Delta x} k \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1+1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}}_{:=\mathbf{K}} \underbrace{\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix}}_{:=\mathbf{T}} + \underbrace{\Delta x \rho c \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} + \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}}_{:=\mathbf{C}} \underbrace{\begin{bmatrix} \dot{T}_1 \\ \dot{T}_2 \\ \dot{T}_3 \end{bmatrix}}_{:=\dot{\mathbf{T}}} = \underbrace{\begin{bmatrix} -q''_{1(-)} \\ 0 \\ q''_{3(+)} \end{bmatrix}}_{:=\mathbf{Q}} \quad (2.26)$$

Die Gesamtmatrix hat also die folgende Form:

$$\mathbf{K} \mathbf{T} + \mathbf{C} \dot{\mathbf{T}} = \mathbf{Q} \quad (2.27)$$

mit

- \mathbf{K} Wärmeleitungsmatrix
- \mathbf{T} Knotenpunkt-Temperatur-Vektor
- \mathbf{C} Wärmekapazitätsmatrix
- \mathbf{Q} Knotenpunkt-Wärmestromdichte-Vektor

Für stationäre Berechnungen wird der transiente Anteil $\mathbf{C} \dot{\mathbf{T}}$ aus Gl. (2.27) entfernt. Damit vereinfacht sich Gl. (2.27) zu:

$$\mathbf{K} \mathbf{T} = \mathbf{Q} \quad (2.28)$$

2.4.3 Zeit-Diskretisierung

Bei der Zeit-Diskretisierung wird zwischen impliziten und expliziten Lösungsverfahren unterschieden. Für den eindimensionalen Fall Gl. (2.27) ergibt sich [vgl. Polifke u. Kopitz, 2009, S. 589]:

$$\begin{aligned} \text{explizit :} \quad & \mathbf{K} \mathbf{T}^j + \mathbf{C} \frac{\mathbf{T}^{j+1} - \mathbf{T}^j}{\Delta t} = \mathbf{Q} \\ & \Leftrightarrow \mathbf{C} \mathbf{T}^{j+1} = (\mathbf{C} - \Delta t \mathbf{K}) \mathbf{T}^j + \Delta t \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \text{implizit :} \quad & \mathbf{K} \mathbf{T}^{j+1} + \mathbf{C} \frac{\mathbf{T}^{j+1} - \mathbf{T}^j}{\Delta t} = \mathbf{Q} \\ & \Leftrightarrow (\mathbf{C} + \Delta t \mathbf{K}) \mathbf{T}^{j+1} = \mathbf{C} \mathbf{T}^j + \Delta t \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (2.30)$$

wobei der hochgestellte Index j den Zeitpunkt angibt.

Das explizite Lösungsverfahren Gl. (2.29) hat den Vorteil, dass der Berechnungsaufwand pro Zeitschritt geringer ist, als beim impliziten Lösungsverfahren Gl. (2.30). Allerdings werden viele Zeitschritte benötigt, wenn ein gegebener Zeitbereich berechnet werden soll, da das Verfahren sonst instabil wird. Beim impliziten Lösungsverfahren können größere Zeit-Schrittweiten gewählt werden. Allerdings ist der Berechnungsaufwand höher als beim expliziten Lösungsverfahren und der numerische Fehler wird durch die größeren Zeitschritte zunehmend größer [vgl. Polifke u. Kopitz, 2009, S. 550].

Um die Vorteile beider Lösungsverfahren nutzen können, gibt es weitere Varianten, wie beispielsweise das Crank-Nicholson-Verfahren. Bei diesem Verfahren wird die Gleichung zum Zeitpunkt $t+1/2 \Delta t$ betrachtet. Die Lösung des resultierenden Gleichungssystems benötigt allerdings weitaus mehr Rechenzeit [vgl. Polifke u. Kopitz, 2009, S. 590].

2.4.4 Lösung des Gleichungssystems

Zur Lösung der Gleichungssysteme können direkte oder iterative Verfahren verwendet werden. Direkte Verfahren, wie beispielsweise das Gaußsche Eliminationsverfahren, sind nur dann sinnvoll, wenn die Anzahl der Unbekannten gering ist, weil diese Verfahren viel Speicherplatz erfordern. Bei einer großen Anzahl von Unbekannten führen iterative Verfahren, wie beispielsweise Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) schneller und mit weniger Speicherplatzbedarf zu einer Lösung [vgl. Klein, 2010, S. 74].

2.5 Numerische Methoden zur Berechnung von Phasenübergängen

In diesem Abschnitt werden einige Methoden zur numerischen Lösung von Wärmeleitungsproblemen mit Phasenübergang beschrieben. Die Methoden lassen sich in zwei Gruppen unterteilen, den Front-Tracking-Methoden und den Fixed-Grid-Methoden.

2.5.1 Front-Tracking-Methoden

Bei den Front-Tracking-Methoden (auch Variable-Grid-Methoden genannt) ist die Phasengrenze als ein zuvor definierter Rand in der Simulation vorhanden. Während der Simulation wird die Position der Phasengrenze kontinuierlich verfolgt und verändert, sodass die zwei Phasen als zwei unterschiedliche Körper behandelt werden können. Die latente Wärme wird dann als Randbedingung behandelt. Nach Yang [2008, S. 122] können Front-Tracking Methoden in zwei Kategorien unterteilt werden. Bei der ersten Kategorie wird eine dynamische Zeit-Schrittweite gewählt und das FE-Netz bleibt statisch. Dadurch ist es möglich Zeit-Schrittweiten zu berechnen, in denen die Phasengrenze genau soweit wandert, dass durch die nächsten Knotenformationen die neue Phasengrenze beschrieben werden kann. Dieses Verfahren ist nur bei einfachen Phasengrenzen und einfachen FE-Netzen anwendbar, sodass es nur bei eindimensionalen Problemen Anwendung findet. In die zweite Kategorie fallen Methoden, bei denen die Zeit-Schrittweite statisch bleibt, aber das FE-Netz dynamisch so verschoben wird, dass die Knoten die Position der Phasengrenze wiedergeben. Die Knotenanzahl bleibt dabei konstant.

Nach Sres [vgl. 2010, S. 54] sind die Vorteile der Front-Tracking-Methoden, dass zum einen eine genaue Vorhersage über die Lage der Phasengrenze getroffen werden kann und zum anderen, dass eine sehr genaue Behandlung der Absorption oder Freisetzung latenter Wärme erfolgen kann. Durch die Kenntnis der Phasengrenzenposition ist es möglich, die Stefan-Bedingung Gl. (2.6) exakt anzuwenden. Ein Nachteil besteht darin, dass diese Methoden sehr rechenintensiv sind. Ein weiterer Nachteil ist, dass sich die Front-Tracking-Methoden nur für die Beschreibung von klar definierten Phasengrenzen eignen. Mit der Vergrößerung des Übergangsbereichs⁷, in dem sich die Phasen mischen, wird die Berechnung immer aufwendiger oder sogar unmöglich [vgl. Voller u. Swaminathan, 1990, S. 877].

2.5.2 Fixed-Grid-Methoden

Bei den Fixed-Grid-Methoden findet keine direkte Trennung der Phasen durch eine Phasengrenze statt. Stattdessen werden die Phasen durch eine Auswertung des Temperaturfeldes unterschieden.

Anders als bei den Front-Tracking-Methoden können mithilfe der Fixed-Grid-Methoden auch⁸ Übergangsbereiche beschrieben werden, in denen sich die Phasen mischen.

Weitere Vorteile sind nach Sres [vgl. 2010, S. 55]:

- einfache Implementation in bestehende Software
- weder ein Remeshing, noch eine Verfolgung der Phasengrenze ist notwendig, wodurch der Rechenaufwand reduziert wird
- komplexe multidimensionale Probleme können gerechnet werden

⁷Beispielsweise hat Glas keine klar definierte Phasengrenze. Der Phasenübergang findet innerhalb eines Übergangsbereichs statt, in dem sich die Phasen mischen.

⁸Eine klar definierte Phasengrenze kann nach Voller u. Swaminathan [1990, S. 877] als ein Sonderfall betrachtet werden.

Als Nachteil ergibt sich, dass die Position der Phasengrenze in einem Postprocessing-Schritt als Isotherme der Schmelztemperatur abgelesen werden muss und nicht, wie bei den Front-Tracking-Methoden, durch Ausgabe der Knotenpositionen des Randes, direkt bestimmt werden kann.

2.5.2.1 Heat-Integration-Methode

Bei der Heat-Integration-Methode werden die Temperaturen in den Kontrollvolumen überwacht. Wird die Schmelztemperatur nach einem Zeitschritt überschritten, so wird die Temperatur auf den Wert der Schmelztemperatur zurückgesetzt. Wenn allerdings die äquivalente Enthalpie des Zurücksetzens der Temperatur dem Wert der latenten Wärme entspricht, wird das Ansteigen der Temperatur zugelassen. Solange die notwendige latente Wärme für eine Änderung des Aggregatzustandes nicht erreicht ist, wird die Enthalpie akkumuliert und bei den nachfolgenden Zeitschritten mit berücksichtigt [vgl. Hu u. Argyropoulos, 1996, S. 383].

2.5.2.2 Apparent- und Effective-Heat-Capacity-Methode

Bei der Apparent-Heat-Capacity-Methode (AHC-Methode) und der Effective-Heat-Capacity-Methode (EHC-Methode) wird der Phasenübergang dadurch berücksichtigt, dass die Wärmekapazität erhöht wird, wenn eine Temperatur erreicht wird, die in einem bestimmten Phasenübergangs-Temperaturbereich liegt.

Ausgehend von der Betrachtung eines Kontrollvolumens, in dem der Anteil der festen Phase als Φ und der Anteil der flüssigen Phase als $(1 - \Phi)$ bezeichnet wird, kann nach Voller u. Swaminathan [1990, S. 878] die folgende Grundgleichung für die Beschreibung von Wärmeleitung mit Phasenübergang, unter Vernachlässigung der Konvektion, hergeleitet werden:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.31)$$

mit $k = \Phi k_S + (1 - \Phi) k_L$ und der volumenspezifische Enthalpie H (Einheit: J/m^3):

$$H = \Phi \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho_S c_S(\theta) d\theta + (1 - \Phi) \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho_L c_L(\theta) d\theta + (1 - \Phi) \rho_L L \quad (2.32)$$

$$\text{für } \Phi(T) = \begin{cases} 1 & \text{für } T \leq T_m - \eta & \text{(fest)} \\ \frac{T_m - T + \eta}{2\eta} & \text{für } T_m - \eta < T \leq T_m + \eta & \text{(Übergangsbereich)} \\ 0 & \text{für } T > T_m + \eta & \text{(flüssig)} \end{cases}$$

wobei T_{ref} eine willkürliche Referenztemperatur und 2η die Differenz zwischen oberer und unterer Temperatur des Übergangsbereiches ist.

Die Grundgleichung Gl. (2.31) beinhaltet die zwei Variablen H und T , die miteinander in Beziehung stehen. Für die numerische Lösung ist es vorteilhaft Gl. (2.31) umzuformulieren. Es resultiert die AHC-Gleichung [vgl. Voller u. Swaminathan, 1990, S. 879]:

$$\rho c_{\text{app}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.33)$$

Da die Form der AHC-Gleichung Gl. (2.33) identisch mit der Form der Wärmeleitungsgleichung Gl. (2.3) ist, kann die AHC-Methode sehr leicht in bereits bestehende Computer-Algorithmen eingebunden werden, da sich nur die Definition der Wärmekapazität ändert.

Zur Bestimmung der AHC können Gl. (2.31) und Gl. (2.33) gleichgesetzt werden. Es folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} H(T(t)) = \rho c_{app} \frac{\partial}{\partial t} T(t) \quad (2.34)$$

Durch Anwenden der Kettenregel folgt die Definition der AHC:

$$\boxed{c_{app} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial H}{\partial T}} \quad (2.35)$$

Wenn eine Enthalpiekurve gegeben ist, so kann mithilfe von Gl. (2.35) die AHC bestimmt werden, die in Gl. (2.33) dafür sorgt, dass die Auswirkung des Phasenübergangs berücksichtigt wird.

Die Verwendung der AHC Gl. (2.35) hat jedoch den Nachteil der numerischen Instabilität, wenn hohe Temperaturgradienten vorliegen. Werden keine optimalen Werte für den Temperaturbereich des Phasenübergangs, der Zeit-Schrittweite, sowie der Gitterweite gewählt, kann es passieren, dass Knoten innerhalb eines Zeitschrittes von unterhalb $T_m - \eta$ auf oberhalb $T_m + \eta$ angehoben werden, was sich durch einen Verlust von latenter Wärme äußert. Das führt zu einem zu hohen Betrag der fühlbaren Wärme im Gesamtsystem, es wird also zu warm.

Abhilfe schafft die EHC-Methode, in der die Wärmekapazität als Quotient von Ableitungen formuliert wird, wodurch eine Mittelwertbildung erreicht wird.

Eine Möglichkeit zur Formulierung der EHC ist die räumliche Mittelwertbildung. Dazu wird der Gradient der Enthalpie gebildet, sodass eine Vektorgleichung folgt:

$$\nabla H = \frac{\partial H}{\partial T} \cdot \nabla T \quad (2.36)$$

$$\Leftrightarrow |\nabla H| = \left| \frac{\partial H}{\partial T} \right| \cdot |\nabla T| \quad (2.37)$$

Weil $|\partial H/\partial T| > 0$ (siehe 2.2(d)), können die Betragsstriche entfernt werden. Es folgt:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{|\nabla H|}{|\nabla T|} \quad (2.38)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial H}{\partial T} = \frac{\sqrt{\nabla H \cdot \nabla H}}{\sqrt{\nabla T \cdot \nabla T}} \quad (2.39)$$

Gleichsetzen von Gl. (2.39) und (2.35) liefert die Gleichung zur Bestimmung der EHC bei räumlicher Mittelwertbildung:

$$\boxed{c_{eff} = \frac{1}{\rho} \sqrt{\frac{\nabla H \cdot \nabla H}{\nabla T \cdot \nabla T}}} \quad (2.40)$$

Eine weitere Möglichkeit zur Formulierung der EHC ist die zeitliche Mittelwertbildung:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.41)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial H}{\partial T} = \frac{\partial H / \partial t}{\partial T / \partial t} \quad (2.42)$$

Gleichsetzen von Gl. (2.42) und (2.35) liefert die Gleichung zur Bestimmung der EHC bei zeitlicher Mittelwertbildung:

$$\boxed{c_{\text{eff}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial H / \partial t}{\partial T / \partial t}} \quad (2.43)$$

Die analytische Berechnung von Gl. (2.40) und (2.43) würde zur Lösung der AHC Gl. (2.35) führen. Ein Unterschied wird erst durch das Lösen mit einem numerischen Verfahren erreicht.

3 Verwendete Software

Für die Thermalsimulation des Ice-Mole Kopfes wurde nach einer Software gesucht die es ermöglicht, Wärmeleitung mit Phasenübergang zu simulieren. Diese Anforderung wird von der Simulationssoftware *Elmer* erfüllt. *Elmer* ist darüber hinaus Open Source, wodurch die Software kostenlos verfügbar ist und flexibel auf Bedürfnisse angepasst werden kann, da der Quelltext zugänglich ist. Zusammen mit *Salome* und *Paraview* bilden diese drei Softwareprodukte die Prozesskette für die Thermalsimulation des IceMole Kopfes. Eine Übersicht der Prozesskette ist in Abb. 3.1 dargestellt.

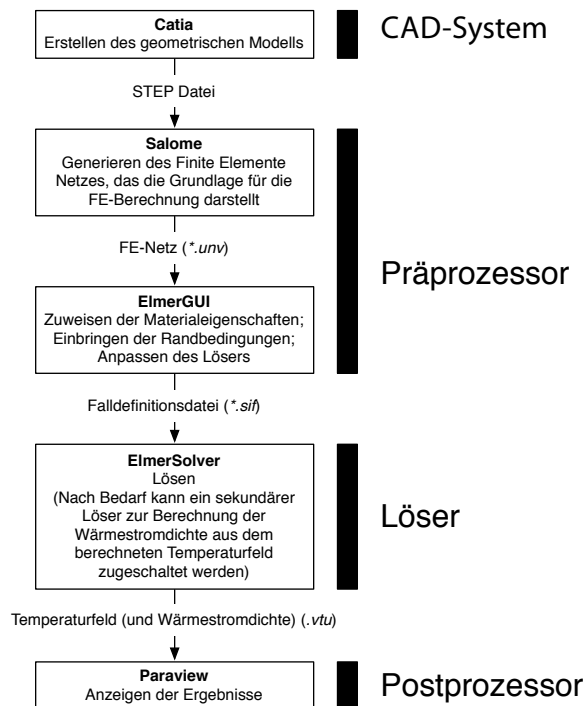


Abb. 3.1: Verwendete Prozesskette für die Thermalsimulation des IceMole-Kopfes

3.1 Elmer

Die Entwicklung von *Elmer* begann im Jahr 1995, im Rahmen eines finnischen CFD-Technologie-Programms, des finnischen Computerwissenschaftszentrums CSC, in Zusammenarbeit mit finnischen Universitäten und Unternehmen. Im Jahr 2005 wurde *Elmer* unter der GPL⁹ veröffentlicht [vgl. Raback u. Malinen, 2012, S. 2]. Mit *Elmer* können eine Vielzahl von unterschiedlichen PDGL gelöst werden. Dadurch ist es in der Lage physikalische Aufgabenstellungen wie z.B. Wärmetransport und Elastizität zu kombinieren (Multiphysik-Software).

Bei *Elmer* handelt es sich genau genommen um ein Softwarepaket, das mit seinen Bestandteilen *ElmerGrid*, *ElmerGUI*, *ElmerSolver* und *ElmerPost* auch in der Lage ist das FE-Netz zu generieren (Präprozessor), sowie die Ergebnisse anzuzeigen (Postprozessor). Für einfache Berechnungen

⁹Software, die unter der GNU General Public License (GPL) lizenziert wurde, darf von Privatpersonen, Organisationen und Firmen genutzt, studiert, verbreitet und geändert werden [vgl. <http://www.gnu.org/licenses/gpl.html>, abgerufen am 12.01.2013]

wird also keine Zusatzsoftware benötigt.¹⁰ Somit ist der Einsatz von *Elmer* eine Alternative zur weiter verbreiteten, jedoch kommerziellen, FEM-Software *ANSYS*. Vergleicht man beide Softwarelösungen miteinander (siehe Tabelle 3.1), so stellt sich heraus, dass *Elmer* zwar eine mehr Zeit für die Einarbeitung erfordert (unkomfortable Bedienung, geringe Dokumentation etc.), jedoch den großen Vorteil eines vollen Zugriffs auf den Quelltext bietet, was eine maximale Flexibilität ermöglicht.

Tabelle 3.1: Softwarevergleich Elmer-ANSYS

Eigenschaft	Elmer	ANSYS
kostenlos	ja (Open Source)	nein
Simulation von Phasenübergängen	ja	ja
kombinierte Aufgabenstellungen (Multiphysik)	ja	je nach Lizenz
Notwendigkeit zusätzlicher Software	nein (aber ratsam bei Verwendung einer komplexen Geometrie)	nein
Anzahl der Programmfehler	vergleichsweise hoch aber aktive Community	gering
Flexibilität/Zugriff	voller Zugriff auf Quelltext, da Open Source; Löser sind in FORTRAN geschrieben und können verändert werden	Software nicht veränderbar; Solver nur einstellbar, nicht veränderbar
grafische Benutzeroberfläche	nur ElmerGUI und ElmerPost	ja
Export der Ergebnisse	GiD, Gmsh, VTK legacy, XML kodierte VTK Datei (VTU) und Open DX; nach Import in Paraview durch VTU wird die Exportmöglichkeit zusätzlich erweitert	umfangreich, kann jedoch je nach Lizenz variieren
unterstützte Betriebssysteme	plattformunabhängig durch Qt4 Framework	Windows, Linux und Solaris
Dokumentationsgrad	gering und nur im Internet verfügbar	hoch
Verbreitung	sehr gering	hoch

3.2 Salome

Bei einer komplizierten dreidimensionalen Geometrie ist der Einsatz von Zusatzsoftware zu bevorzugen, um Prä- und Postprozessoraufgaben zu lösen. So wurde im Rahmen dieser Arbeit zur FE-Netzgenerierung die kostenfreie Software *Salome*¹¹ verwendet. Diese hat gegenüber *ElmerGrid* den Vorteil, dass das FE-Netz mithilfe einer grafischen Benutzeroberfläche erstellt werden kann. Außerdem bietet *Salome* die Möglichkeit, STEP-Dateien¹² zu importieren. Das hat den Vorteil, dass existierende Geometrien verwendet werden können, die bereits im Konstruktionsprozess erstellt wurden. Da *Salome*, anders als Alternativprodukte (z.B. *GMSH*¹³)

¹⁰Um eine komplexere Geometrie zu generieren und auswerten zu können, empfiehlt sich jedoch der Einsatz von Zusatzsoftware, wie beispielsweise *Salome* und *Paraview*.

¹¹<http://www.salome-platform.org>

¹²Standard for the Exchange of Product Model Data (STEP) ist ein in der ISO 10303 genormter Standard für die Beschreibung von Produktdaten, das von allen gängigen CAD-Programmen erstellt werden kann

¹³<http://geuz.org/gmsh/>

auch STEP-Dateien mit gekrümmter Geometrie vernetzen kann und eine solche Geometrie beim IceMole-Kopf vorliegt, wird in dieser Arbeit *Salome* verwendet, um das FE-Netz zu generieren.

3.3 Paraview

Als Postprozessor, also für die grafische Anzeige der Ergebnisse, kann *ElmerPost* verwendet werden. Allerdings ist die Handhabung der Software mühsam und der Funktionsumfang sehr gering. Eine gute Alternative bietet die kostenfreie Software *Paraview*¹⁴. Durch die zahlreichen Filter sind viele unterschiedliche Darstellungsarten möglich. Beispielsweise können zweidimensionale Plots, der Ergebnisse bestimmter Netzknoten, über die Zeit angezeigt oder exportiert werden. Außerdem können Ergebnisse mehrerer Simulationen nebeneinander angezeigt werden, um diese zu vergleichen.

3.4 Simulation der Wärmeleitung mit Phasenübergang in Elmer

Um eine Simulation in *Elmer* durchzuführen, muss eine Textdatei (Fall-Definitionsdatei) erstellt werden. Diese Datei enthält Anweisungen für den Löser (*ElmerSolver*) darüber, wie die Simulation durchzuführen ist. Zur Erstellung der Fall-Definitionsdatei gibt es zwei Möglichkeiten:

1. Die Erstellung mittels grafischer Benutzeroberfläche in *ElmerGUI*
2. Die direkte Erstellung mit einem Texteditor

Wenn FE-Netze mit vielen Elementen verwendet werden ist die Erstellung mit einem Texteditor zu bevorzugen, da *ElmerGUI* nur bei FE-Netzen mit einer geringen Anzahl von Elementen einwandfrei funktioniert. Der allgemeine Aufbau der Fall-Definitionsdatei ist in Anhang D.1 beschrieben.

Elmer besitzt Modelle zur Beschreibung von vielen physikalischen Phänomenen. Diese Modelle werden in [Raback u. a., 2013a] beschrieben. Soll ein bestimmtes Modell in der Simulation für einen oder mehrere Körper¹⁵ verwendet werden, so muss das entsprechende Modul, in dem dieses Modell definiert ist, in der Fall-Definitionsdatei angegeben werden.

Für die Simulation der Wärmeleitung muss das Modul *HeatSolve* verwendet werden. Wenn zusätzlich zum Temperaturfeld auch Wärmestromdichten berechnet werden sollen, so muss zusätzlich das Modul *FluxSolver* angegeben werden.

Zur Simulation von Phasenübergängen besitzt *Elmer* drei Modelle [vgl. elm]:

- nach Euler
- nach Lagrange und stationär
- nach Lagrange und transient (instationär)

¹⁴<http://www.paraview.org>

¹⁵Bauteile die im FE-Netz als Gruppe von Volumen-Elemente repräsentiert werden, werden in Elmer als Körper bezeichnet.

Das stationäre Modell nach Lagrange kommt für die weitere Betrachtung nicht in Frage, da es nach Raback u. a. [2013a, S. 137] nur auf den zweidimensionalen Fall angewendet werden kann. Bei dem transienten Modell nach Lagrange handelt es sich um eine Front-Tracking Methode (siehe Abschnitt 2.5.1), die nach jedem Zeitschritt eine Neuvernetzung des FE-Netzes erfordert. Für die Nutzung der Modelle nach Lagrange wird das zusätzliche Modul *PhaseChangeSolve* benötigt.

Da das Modell nach Euler Teil des Moduls *HeatSolve* ist und deshalb einfach eingebunden werden kann, wird in der vorliegenden Arbeit das Modell nach Euler verwendet. Bei diesem Modell kann der Phasenübergang entsprechend der APC- oder EHC-Methode (siehe 2.5.2.2) berechnet werden. Deshalb muss für einen Körper, in dem ein Phasenübergang stattfinden soll, eine volumenspezifische Enthalpiekurve¹⁶ definiert werden. Außerdem muss ein Temperaturbereich angegeben werden, in dem der Phasenübergang stattfinden soll.

Zur Berechnung der AHC und EHC gibt es in Elmer die folgenden Möglichkeiten [vgl. Raback u. a., 2013a, S. 11]:

$$\textbf{Spatial 1:} \quad C_{\text{app}} = \frac{\partial H}{\partial T} \quad (3.1)$$

$$\textbf{Spatial 2:} \quad C_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\nabla H \cdot \nabla H}{\nabla T \cdot \nabla T}} \quad (3.2)$$

$$\textbf{Temporal:} \quad C_{\text{eff}} = \frac{\partial H / \partial t}{\partial T / \partial t} \quad (3.3)$$

wobei $C_{\text{app/eff}} = \rho c_{\text{app/eff}}$.

Diese wurden bereits in Abschnitt 2.5.2.2 als Möglichkeiten der AHC- und EHC-Methode genannt (Gl. (2.35), (2.40), und (2.43)). In Abschnitt 2.5.2.2 wurde erwähnt, dass die AHC-Methode *Spatial 1* Gl. (3.1) numerisch instabil ist. Bei den EHC-Methoden *Spatial 2* Gl. (3.2) und *Temporal* Gl. (3.3), bei denen die Wärmekapazität durch eine Mittelwertbildung berechnet wird, ist dies jedoch nicht der Fall, sodass in der vorliegenden Arbeit nur *Spatial 2* und *Temporal* für die Simulationen verwendet werden.

¹⁶Die Enthalpiekurve kann entweder in Tabellenform oder als Funktion an *Elmer* übergeben werden.

4 Verifizierung von Elmer

In diesem Abschnitt wird die Güte der Simulationsergebnisse, die mit *Elmer* erzielt werden kann, untersucht. Im ersten Teil wird der Schmelzvorgang innerhalb einer einfachen, quaderförmigen Geometrie behandelt. Dazu wird zunächst basierend auf den Überlegungen aus Abschnitt 2.3.4 eine analytische Lösung berechnet. Es werden mehrere Simulationen mit unterschiedlichen FE-Netzen und unterschiedlichen Zeit-Schrittweiten durchgeführt. Die Ergebnisse werden im Anschluss mit der analytischen Lösung verglichen.

Im zweiten Teil wird eine Simulation durchgeführt, deren Ergebnisse mit den Messergebnissen eines Testschmelzkopfes verglichen werden.

4.1 Phasenübergang - analytisch

Damit bei der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes gute Ergebnisse erzielt werden können, wird zunächst untersucht, welchen Einfluss die Wahl des FE-Netzes auf die Simulationsergebnisse hat. Dazu werden mehrere transiente FEM Simulationen mit unterschiedlichen FE-Netzen in *Elmer* durchgeführt. Die Ergebnisse werden im Anschluss mit der analytischen Lösung verglichen.

4.1.1 Aufgabenstellung

Gegeben ist ein Eisblock mit den Abmessungen $l = 1$ m in Längsrichtung und $b = h = 0,1$ m in Querrichtung, der eine gleichmäßig verteilte Temperatur von $T_0 = -20^\circ\text{C}$ aufweist. Bei $t > 0$ wird dem Eisblock, an der Stelle $x = 0$, eine Temperatur von 40°C aufgezwungen, wodurch ein Phasenübergang eingeleitet wird.

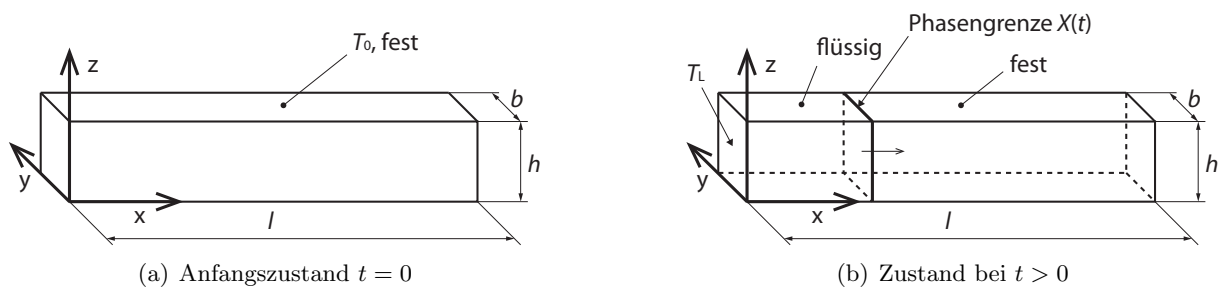


Abb. 4.1: Skizze der Aufgabenstellung

4.1.2 Analytische Lösung

Zur analytischen Lösung ist eine Idealisierung des Problems erforderlich. Aufgrund der einfachen Geometrie, reicht eine eindimensionale Betrachtung zur Berechnung des Temperaturfelds aus, da der Wärmestrom nur in Längsrichtung vorrückt. Somit können die Gleichungen zur Lösung

des Stefan-Problems aus Abschnitt 2.3.4 Gl. (2.7) und Gl. (2.8) verwendet werden. Allerdings müssen zunächst die thermophysikalischen Eigenschaften des Eisblocks idealisiert werden.

Die gewählten Werte der thermophysikalischen Eigenschaften lauten:

$$\begin{aligned} L &= 333400 \text{ J kg}^{-1}; \rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}; \\ k_L &= 0,6 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}; k_S = 2,3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}; \\ c_L &= 4200 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}; c_S = 2000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1} \end{aligned}$$

Nach Abschnitt 2.3.4 lautet die Temperaturfeldgleichung für die flüssige Phase,

$$T(x, t) = T_L - (T_L - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right)}{\operatorname{erf} \lambda}, \quad 0 < x < X(t), \quad t > 0, \quad (4.1)$$

und die Temperaturfeldgleichung für die feste Phase,

$$T(x, t) = T_s + (T_m - T_s) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_S t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\lambda\sqrt{\alpha_L/\alpha_S}\right)}, \quad X(t) < x, \quad t > 0. \quad (4.2)$$

Mit den oben genannten Werten für die thermophysikalischen Eigenschaften lassen sich die erforderlichen Größen für die Temperaturfeldgleichungen Gl. (4.1) und (4.2) berechnen:

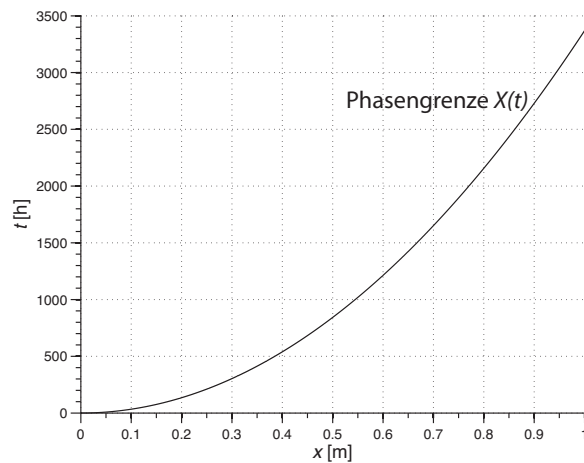
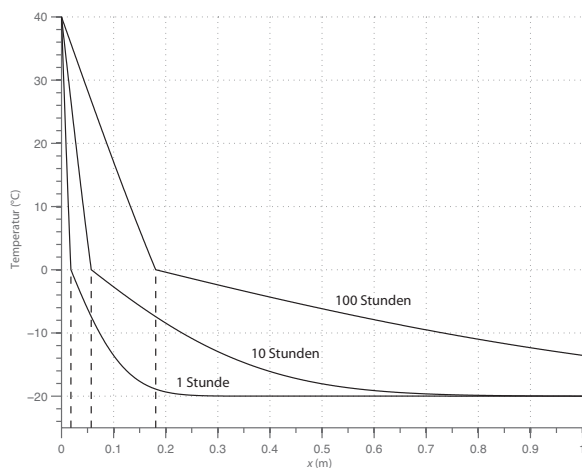
$$\begin{aligned} \alpha_L &= \frac{k_L}{\rho c_L} = \frac{0,6 \frac{\text{W}}{\text{mK}}}{1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 4200 \frac{\text{J}}{\text{kg K}}} \approx 0,1486 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \\ \alpha_S &= \frac{k_S}{\rho c_S} = \frac{2,3 \frac{\text{W}}{\text{mK}}}{1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 2000 \frac{\text{J}}{\text{kg K}}} = 1,15 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \\ \nu &= \sqrt{\frac{\alpha_L}{\alpha_S}} = \sqrt{\frac{0,1486 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}}{1,15 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}}} \approx 0,3525 \\ St_L &= \frac{c_L(T_L - T_m)}{L} = \frac{4200 \frac{\text{m}^2}{\text{s}} (40^\circ\text{C} - 0^\circ\text{C})}{333400 \frac{\text{J}}{\text{kg}}} \approx 0,6299 \\ St_S &= \frac{c_S(T_m - T_L)}{L} = \frac{1,15 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} (0^\circ\text{C} - (-20^\circ\text{C}))}{333400 \frac{\text{J}}{\text{kg}}} \approx 0,12 \end{aligned}$$

Mit diesen Werten kann die Wurzel der transzendenten Gleichung Gl. (2.18) z.B. mit einem Bisektionsverfahren ermittelt werden.

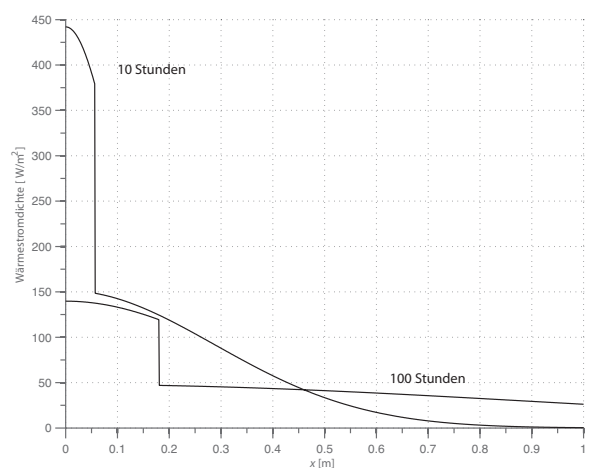
$$\frac{St_L}{e^{\lambda^2} \operatorname{erf} \lambda} - \frac{St_S}{\nu e^{\nu^2 \lambda^2} \operatorname{erfc}(\nu \lambda)} = \lambda \sqrt{\pi} \quad \Rightarrow \lambda \approx 0,3799$$

Die Position der Phasengrenze $X(t)$ ergibt sich entsprechend Gl. (2.15) zu $X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_L t}$ und ist in Abb. 4.2(a) dargestellt.

Es fällt auf, dass sich die Phasengrenze langsamer ausbreitet, als die tatsächlich angestrebte IceMole-Schmelzgeschwindigkeit. Der Grund dafür ist die konstante Position der Randbedingung. Dadurch verringert sich die effektive Wärmestromdichte an der Phasengrenze (vgl. Abb. 4.2(c)). Außerdem handelt es sich bei der Randbedingung um eine konstante Temperatur.

(a) Verlauf der der Phasengrenze $X(t)$ über die Zeit

(b) Temperaturfeld zu verschiedenen Zeitpunkten



(c) Wärmestromdichteverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten

Abb. 4.2: Darstellung der analytischen Lösung

In der Lösung des Stefan-Problems geht man von einer unendlichen Ausdehnung des Eisblocks aus. In der Aufgabenstellung ist die Länge des Eisblocks jedoch endlich. Die Lösung des Stefan-Problems ist daher nur auf den realen Eisblock anwendbar, so lange die Wärmestromdichte bei $x = 1$ m nahe bei 0 liegt. In Abb. 4.2(c) ist zu sehen, dass diese Bedingung ab einem Zeitpunkt von 100 Stunden nicht mehr erfüllt ist. Alexiades u. Solomon [1993, S. 50 f.] zeigen einige Möglichkeiten auf, um den Zeitbereich, in dem diese Bedingung annähernd erfüllt ist, einzugrenzen. Eine Möglichkeit besteht darin, zu fordern, dass der Quotient der Wärmestromdichte bei $x = l$ und bei $x = 0$ nicht über einen bestimmten Wert ϵ steigt:

$$\left| \frac{q''(l, t)}{q''(0, t)} \right| \leq \epsilon \quad (4.3)$$

Löst man diese Bedingung Gl. (4.3) nach der Zeit auf und approximiert die Gaußsche Fehlerfunktion, so ergibt sich:

$$t^* \leq \frac{l^2}{4\alpha_S \ln \frac{B}{\epsilon}} \quad \text{mit} \quad B = \nu \frac{k_S(T_m - T_S)}{k_L(T_L - T_m)} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\lambda - \frac{\lambda^2}{3} \right) \quad (4.4)$$

Für einen relativen Fehler von 1% ($\epsilon = 0,01$) ergibt sich mit dieser Gleichung, für den vorliegenden Fall, ein Wert von ca. 18 Stunden ($t^* = 67295$ s). Oberhalb dieses Zeitpunktes ist die Lösung für das Temperaturfeld des realen Eisblocks durch die Lösung des Stefan-Problems Gl. (2.16) und (2.17) nicht zulässig.

4.1.3 Simulation in Elmer

Für die Thermalsimulation in Elmer wird eine dreidimensionale Geometrie, mit den Abmaßen der Aufgabenstellung verwendet. Von dieser Geometrie werden vier verschiedene FE-Netze erstellt (siehe Abb. 4.3).

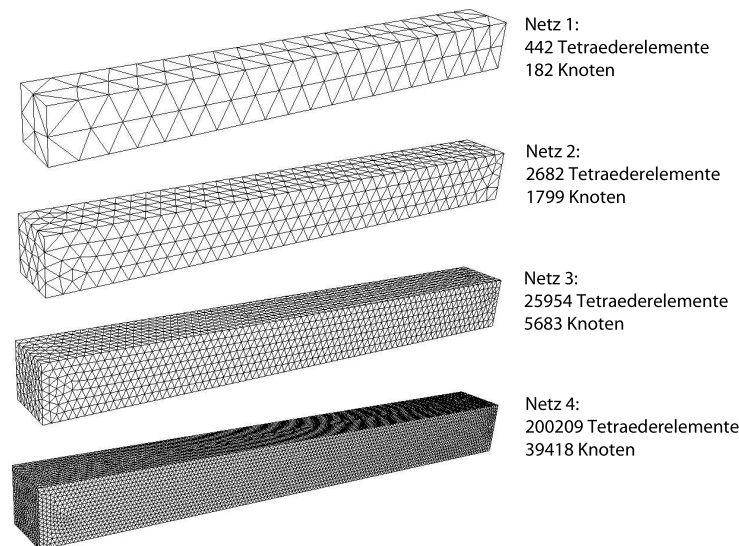


Abb. 4.3: Gewählte FE-Netze für die Simulationen

Mit den in Abb. 4.3 gezeigten FE-Netzen werden jeweils die drei folgenden Simulationen durchgeführt:

Simulation 1 (Fall-Definitionsdatei in Anhang D.2)

- Zeit-Schrittweite: 3600 Sekunden
- Phasenübergangs-Modell: *Spatial 2* nach Gl. (3.2)

Simulation 2

- Zeit-Schrittweite: 3600 Sekunden
- Phasenübergangs-Modell: *Temporal* nach Gl. (3.3)

Simulation 3

- Zeit-Schrittweite: 360 Sekunden
- Phasenübergangs-Modell: *Spatial 2* nach Gl. (3.2)

Auf die Stirnfläche, bei $x = 0$, wird eine Dirichlet-Randbedingung mit einem Wert von $40\text{ }^\circ\text{C}$ aufgezwungen. Zusätzlich wird eine Anfangsbedingung von $-20\text{ }^\circ\text{C}$, für den gesamten Körper, definiert.

Des Weiteren wird Wärmeleitfähigkeit der flüssigen und festen Phase wie folgt definiert:

$$k_L = 0,6 \frac{\text{W}}{\text{m K}} \quad \text{für } T \leq 0\text{ }^\circ\text{C}$$
$$k_S = 2,3 \frac{\text{W}}{\text{m K}} \quad \text{für } T \geq 0,01\text{ }^\circ\text{C}$$

Die Wärmeleitfähigkeit für den fehlenden Definitionsbereich von $0 < T < 0,01$ wird von *Elmer*, durch lineare Interpolation zwischen k_S und k_L , ermittelt.

Wenn ein Phasenübergang mithilfe der Methode der effektiven Wärmekapazität berechnet wird, ist eine Definition der Wärmekapazität nicht erforderlich, da diese mithilfe der Enthalpiekurve ermittelt wird. Diese Enthalpiekurve wird an Elmer in Tabellenform übergeben. Dabei werden die Werte aus Tabelle A.1 verwendet.

Der zu untersuchende Zeitbereich beträgt jeweils 7 Stunden.

4.1.4 Vergleich und Diskussion der Simulationsergebnisse mit der analytischen Lösung

Nachfolgend werden die Ergebnisse der durchgeführten Simulationen dargestellt. Bei der Simulation handelt es sich um eine dreidimensionale Geometrie, in welcher die Werte nur in Längsrichtung variieren. Daher werden nur Datenpunkte entlang einer Kante berücksichtigt.

Generell ist zu sagen, dass alle Simulationen die Eigenschaft teilen, dass sich weniger fühlbare Wärme im System befindet, als es bei der Simulation ohne Phasenübergang der Fall wäre. Es kommt also, unabhängig vom gewählten Phasenübergangsmodell und unabhängig vom gewählten FE-Netz, bei jeder Simulation zu einem Anstieg der Wärmekapazität und damit zu einer Berücksichtigung des Phasenübergangs. Außerdem führt ein feineres FE-Netz bei jedem Phasenübergangsmodell zu einer geringeren Abweichung zur analytischen Lösung.

Simulation 1 (Abb. 4.4):

Die Lösungen der ersten Simulation weisen anfänglich große Abweichungen zur analytischen Lösung auf. Die Abweichungen werden jedoch mit zunehmendem Zeitschritt immer geringer.

Simulation 2 (Abb. 4.5):

Die zweite Simulation, unter Anwendung des Phasenübergangsmodells *Temporal*, liefert bereits für den ersten Zeitschritt eine wesentlich geringere Abweichung zur analytischen Lösung, als die erste Simulation (*Spatial 2*). Auch ist zu erkennen, dass die Knotentemperaturen, die zuvor in der ersten Simulation zu niedrig waren, nun zu hoch sind. Die Simulation, unter Anwendung des Phasenübergangsmodells *Temporal* liefert also gegenüber der analytischen Lösung eine höhere Schmelzgeschwindigkeit. Für den Entwicklungsprozess der IceMole-Sonde ist dies problematisch, da die Simulation die Schmelzgeschwindigkeit überschätzt. Aus diesem Grund ist das Phasenübergangsmodell *Temporal* zur Thermalsimulation der IceMole-Sonde nicht geeignet.

Ein weiterer Nachteil ist die hohe Rechenzeit, die um ein vielfaches höher lag, als es bei der Simulation mit dem Phasenübergangsmodell *Spatial 2* der Fall war. Das Phasenübergangsmodell *Temporal* wird deshalb im weiteren Verlauf dieser Arbeit nicht mehr betrachtet.

Simulation 3 (Abb. 4.6):

Die Ergebnisse der dritten Simulation zeigen, dass eine Verringerung der Zeit-Schrittweite, eine weitere Reduzierung der Abweichungen bewirkt. Somit wurden durch diese Simulation die besten Ergebnisse erzielt.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird nur noch das Phasenübergangsmodell *Spatial 2* zur Simulation verwendet.

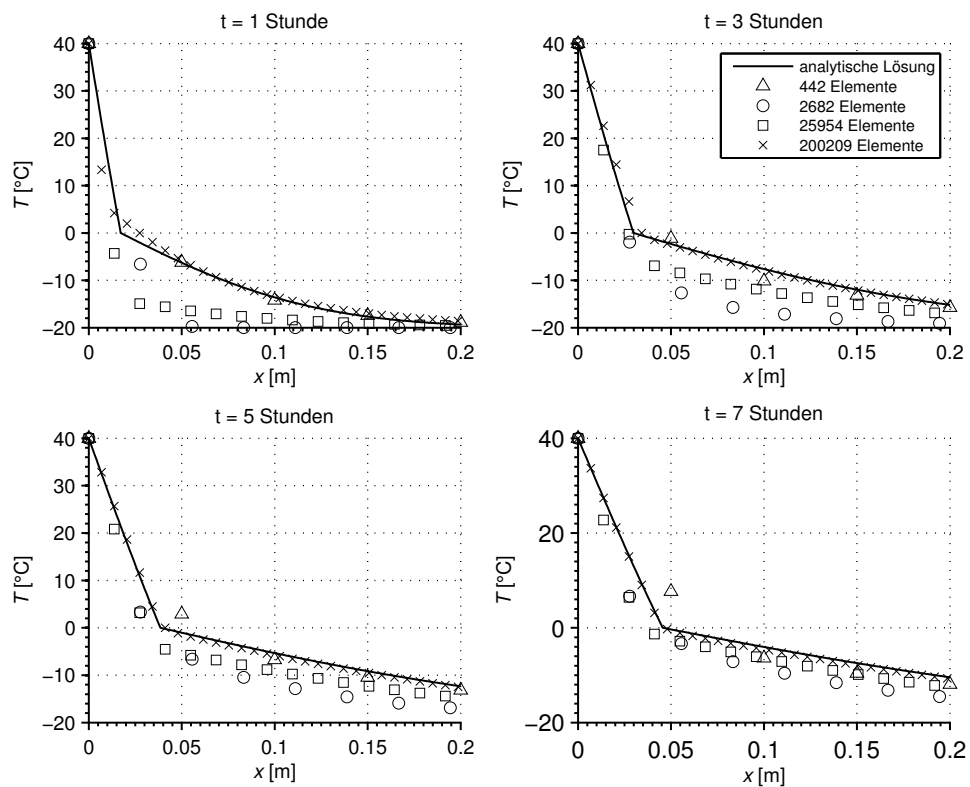


Abb. 4.4: Vergleich der analytischen Lösung mit den Ergebnissen der ersten Simulation (Zeit-Schrittweite: 3600 s u. *Spatial 2*)

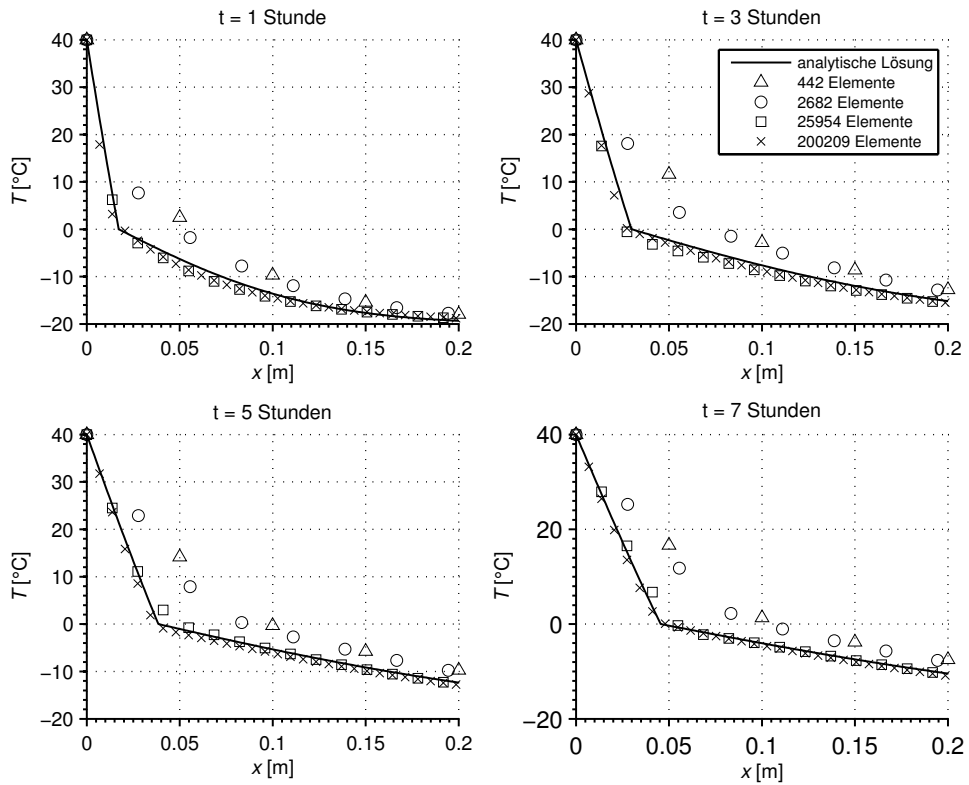


Abb. 4.5: Vergleich der analytischen Lösung mit den Ergebnissen der zweiten Simulation (Zeit-Schrittweite: 3600 s u. *Temporal*)

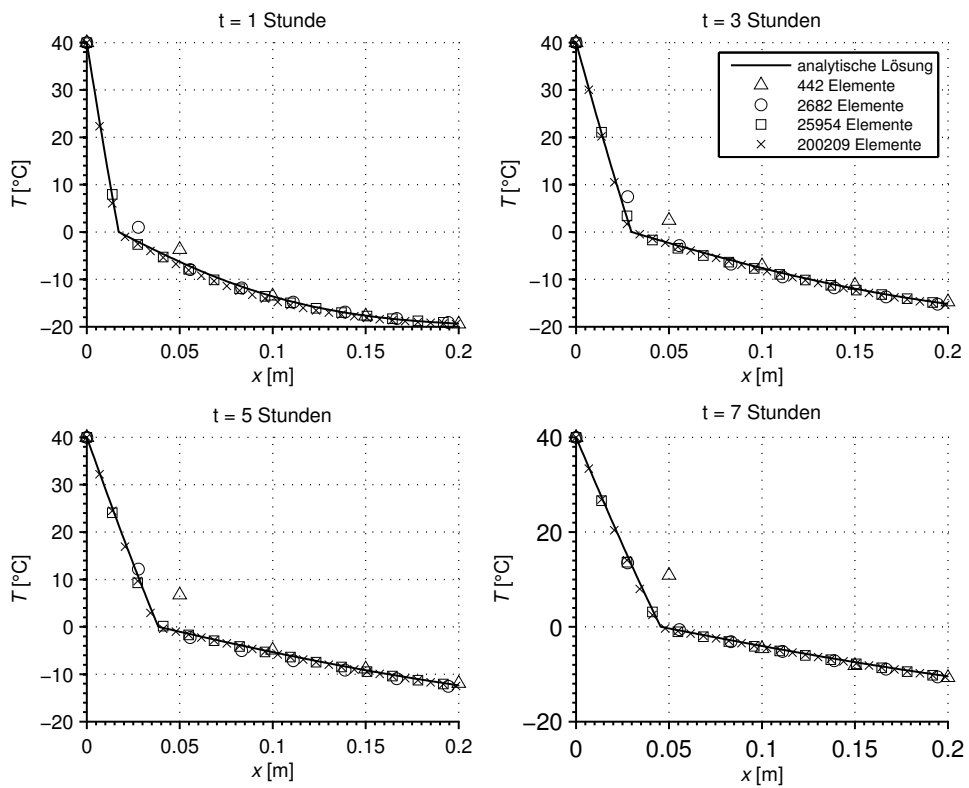


Abb. 4.6: Vergleich der analytischen Lösung mit den Ergebnissen der dritten Simulation (Zeit-Schrittweite: 360 s u. *Spatial 2*)

4.2 Phasenübergang - empirisch

4.2.1 Versuchsbeschreibung

In dem Versuch [vgl. Francke, 2012a] wird das Einschmelzen eines Testschmelzkopfes in einen Eisblock der Temperatur -20°C getestet. Bei dem Testschmelzkopf handelt es sich um einen Kupferblock mit den Maßen $60 \times 60 \times 50 \text{ mm}$, in dem sich eine Tasche befindet, die mit Epoxidharz gefüllt ist. Diese repräsentiert einen Phased-Array-Sensor. In dem Kupferblock befinden sich zwei Bohrungen, in denen jeweils eine Heizpatrone eingesetzt ist. Die Leistungsabgabe einer Heizpatrone beträgt 200 W . Zur Verringerung des Kontaktwiderstandes zwischen den Heizpatronen und dem Kupferblock wird Wärmeleitpaste verwendet. Zur Messung der Temperatur befinden sich vier Bohrungen im Kupferblock, in denen je ein Temperatursensor angebracht ist. Während des Versuches werden die vier Messpunkte in einem Zeitintervall von 10 Sekunden aufgezeichnet. Zusätzlich wird die Einschmelztiefe in einem Zeitintervall von 5 Minuten aufgezeichnet.

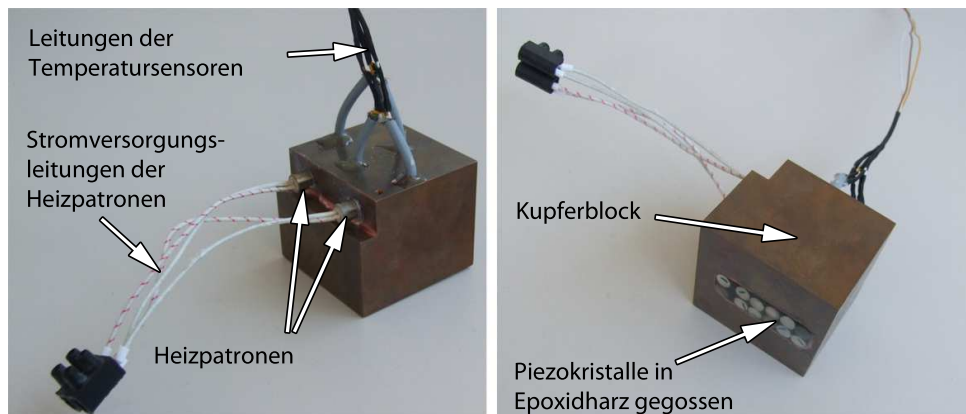


Abb. 4.7: Aufbau des Testschmelzkopfes

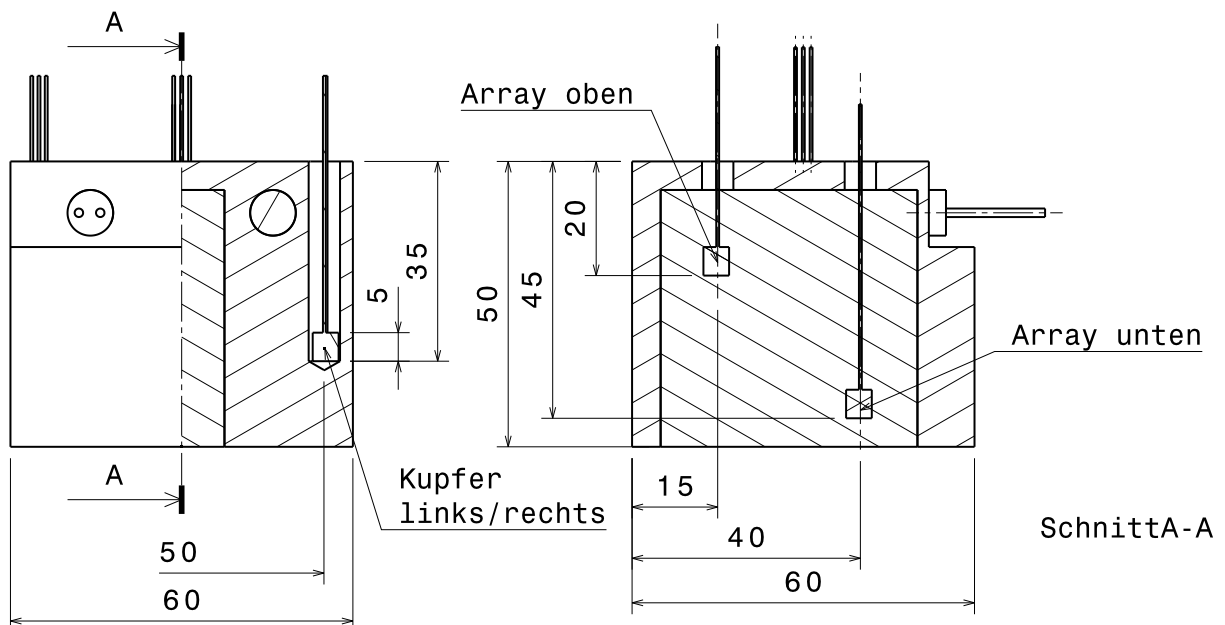


Abb. 4.8: Positionen der Messstellen im Testschmelzkopf

In Abb. 4.9 sind die Versuchsergebnisse der Temperaturmessung dargestellt. Um eine Beschädigung der Heizpatronen zu vermeiden werden die Heizpatronen abgeschaltet, sobald die Temperatur im Kupferblock über einen Wert von $90\text{ }^{\circ}\text{C}$ steigt. Erst wenn die Temperatur im Kupferblock auf einen Wert kleiner als $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ gesunken ist, werden die Heizpatronen wieder angeschaltet. Dadurch ergibt sich ein oszillierendes Verhalten der Temperatur über die Zeit. Des Weiteren ergab die Messung des Einschmelzweges eine annähernd konstante Einschmelzgeschwindigkeit von ca. 9 cm/h . Eine umfangreiche Darstellung der Ergebnisse kann in [Francke, 2012b] nachgelesen werden.

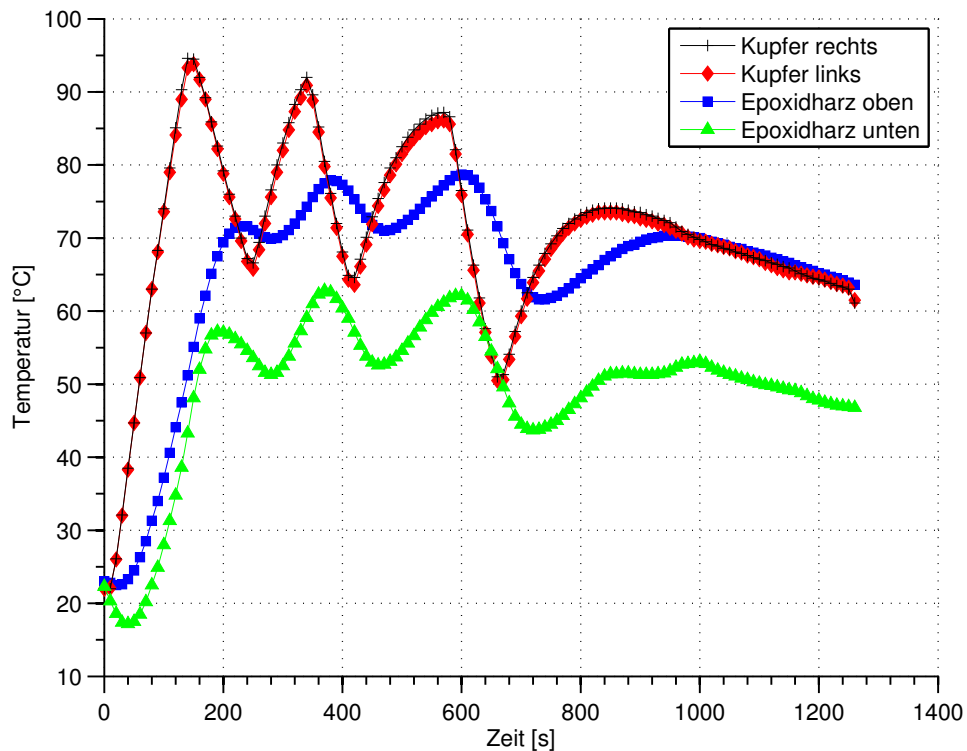


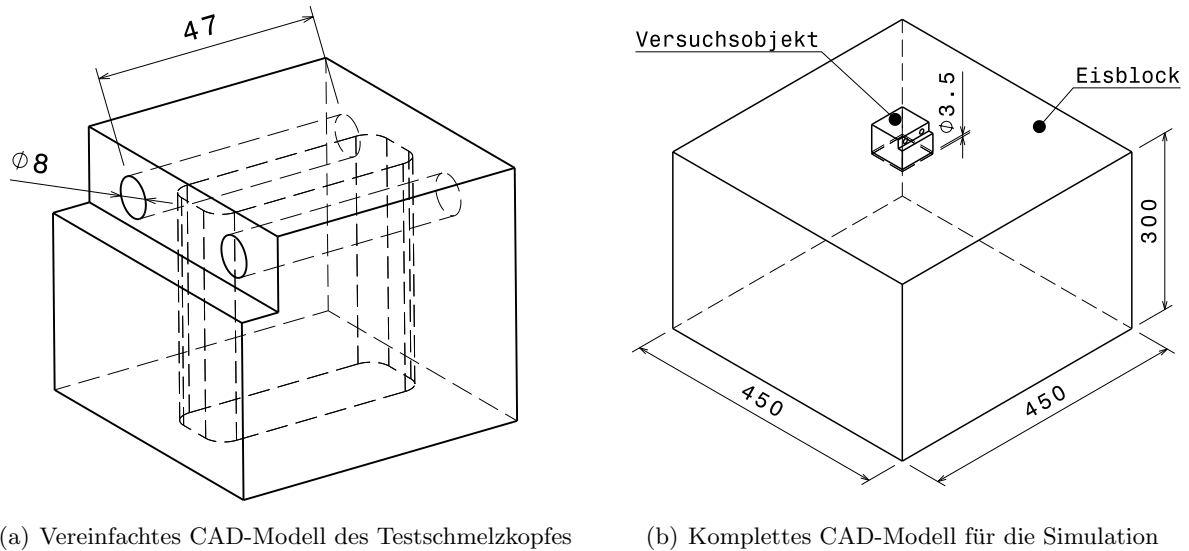
Abb. 4.9: Versuchsergebnisse der Temperaturmessung
Eigene Darstellung, Daten aus [Francke, 2012b]

4.2.2 Simulation in Elmer

Für den, in Abschnitt 4.2.1 dargestellten, Versuch wird eine transiente Thermalsimulation durchgeführt. Da mit dem gewählten Simulationsverfahren keine Bewegungen simuliert werden können, ist zu erwarten, dass die Abweichung der Ergebnisse mit zunehmender Zeit immer größer wird. Somit ist es sinnvoll den betrachteten Zeitbereich klein zu halten. Um das Verhalten bei Abschalten der Heizpatronen zu simulieren, wird ein Simulations-Zeitbereich von $0 \leq t \leq 200\text{ s}$ gewählt.

Zur Generierung des FE-Netzes wird zunächst ein vereinfachtes CAD-Modell erstellt. Das Modell besteht aus einem Kupferblock, Epoxidharz und einem Eisblock (siehe Abb. 4.10(b)). Zur Vereinfachung der Geometrie des Kupferblocks werden die Bohrungen entfernt, die für die Temperaturmessung im realen Versuch benötigt werden. In den verbliebenen zwei Bohrungen werden

die fertigungsbedingten Spitzenwinkel am Bohrgrund durch ebene Flächen ersetzt. Die Eisblockgröße des Simulationsmodells entspricht in etwa der Größe des realen Eisblocks. Aufgrund des betrachteten, kurzen Zeitbereiches könnte allerdings auch ein kleinerer Eisblock gewählt werden, ohne dass dies Einfluss auf die zu erwartenden Ergebnisse hätte.



(a) Vereinfachtes CAD-Modell des Testschmelzkopfes

(b) Komplettes CAD-Modell für die Simulation

Abb. 4.10: Darstellung des CAD-Modells, das für die Thermalsimulation verwendet wird

Das FE-Netz wird an mehreren Stellen lokal verfeinert. Die beiden wichtigsten Bereiche sind die Kupfer-Eis-Kontaktfläche und die Bohrungen, an denen die Wärmestromdichte eingeleitet wird. Die Bohrungen müssen so vernetzt werden, dass die runde Geometrie gut wieder gegeben wird, da sonst eine falsche Wärmestromdichte resultiert. Die Kupfer-Eis-Kontaktfläche wird so vernetzt, dass die Form der Phasengrenze gut abgebildet wird, damit die Schmelzgeschwindigkeit bestimmt werden kann. Dazu wird zusätzlich eine sehr geringe räumliche Wachstumsrate der Elementlängen gewählt. Es resultiert ein FE-Netz mit 3014140 Tetraederelementen und 528354 Knoten.

In Abschnitt 4.1.4 wurde gezeigt, dass mit einer Zeit-Schrittweite von 360 s für jedes FE-Netz sehr gute Ergebnisse erzielt werden konnten. Für die Thermalsimulation des Versuchs wird eine noch feinere Zeit-Schrittweite von 1 s gewählt.

Die Heizpatronen werden durch äquivalente Randbedingungen beschrieben. Dabei wird berücksichtigt, dass die Wärme überwiegend über die Mantelfläche abgegeben wird. Es ergibt sich folgende Wärmestromdichte als Randbedingung für die Mantelfläche der Bohrung:

$$q''_{\text{Heizpatrone}} = \frac{q_{\text{Heizpatrone}}}{A_{\text{Mantelfläche}}} = \frac{200 \text{ W}}{\pi \cdot 8 \text{ mm}} = 169313,7692 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}.$$

Ein Wärmeverlust durch Konvektion oder Wärmestrahlung an den freien Flächen des Kupferblocks wird vernachlässigt. Jedoch sollte berücksichtigt werden, dass dadurch, insbesondere bei hohen Temperaturen, große Unterschiede zu den Testergebnissen resultieren können.

Die getroffenen Anfangsbedingungen richten sich nach den aufgenommenen Messwerten zu Beginn des Versuchs. Zur Bestimmung der Anfangstemperatur des Epoxidharzes wird zwischen den Temperaturen der Messstellen im Epoxidharz gemittelt. Es ergeben sich die folgenden Anfangsbedingungen:

$$\begin{aligned} T_{\text{Kupfer,init}} &= 22,0\text{ }^\circ\text{C} \\ T_{\text{Epoxidharz,init}} &= \frac{23\text{ }^\circ\text{C} + 22,3\text{ }^\circ\text{C}}{2} = 22,65\text{ }^\circ\text{C} \\ T_{\text{Eis,init}} &= -20,0\text{ }^\circ\text{C} \end{aligned}$$

Die thermophysikalischen Eigenschaften sind in Tabelle 4.1 zusammengestellt. Dabei ist zu beachten, dass die Wärmeleitfähigkeit und die Dichte von Wasser aus Abschnitt 4.1.3 übernommen werden. Sie fließen also als phasenweise konstant in die Simulation ein.

Tabelle 4.1: Thermophysikalische Eigenschaften, die für die Thermalsimulation des Testschmelzkopfes verwendet werden

Material	Wärmeleitfähigkeit k	Wärmekapazität c_p	Dichte ρ
Kupfer	$401,0 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$385,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$8960,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Epoxidharz	$0,249 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$1000,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$1200,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Wasser (fest)	$2,3 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	variabel	$1000,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Wasser (flüssig)	$0,6 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	variabel	$1000,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

Werte für Epoxidharz aus: [Grieger u. a., 2006]; Werte für Kupfer aus Elmer-Materialdatenbank; Werte für Wasser aus Abschnitt 4.1.3 übernommen

Die Fall-Definitionsdatei der Simulation des Testschmelzkopfes befindet sich in Anhang D.3.

4.2.3 Vergleich mit den Testergebnissen

Die Ergebnisse der Simulation sind in Abb. 4.11 dargestellt. Ausgehend von einer gleichmäßigen Temperaturverteilung zum Zeitpunkt 0s, steigt die Temperatur im Kupferblock kontinuierlich an, bis ein Maximum von $110,139\text{ }^\circ\text{C}$ bei 140s erreicht wird. Danach sinkt die Temperatur im Kupferblock.

Dass die Temperatur im Epoxidharz langsamer steigt als die Temperatur im Kupfer, liegt an der Temperaturleitfähigkeit ($\alpha_{\text{Epoxidharz}} = 0,2075 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$), die im Vergleich zu Kupfer ($\alpha_{\text{Kupfer}} = 0,1162 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$) viel geringer ist. Das ist auch der Grund dafür, warum selbst nach Abschalten der Heizpatronen, die Temperatur im Epoxidharz noch weiter steigt.

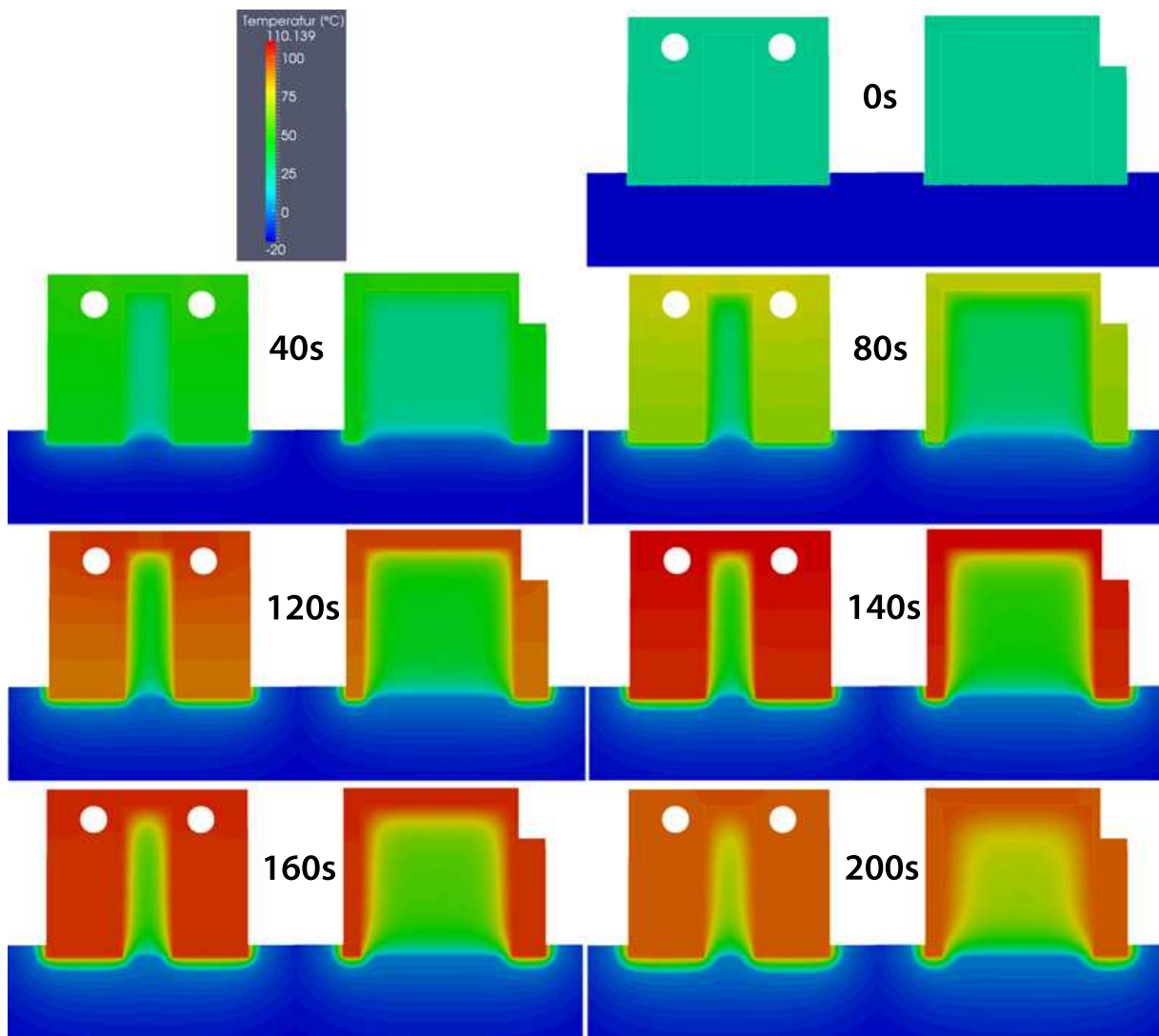


Abb. 4.11: Ergebnis der Thermalsimulation des empirischen Versuches: Zeitliche Entwicklung des Temperaturfelds

Zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Testergebnissen, werden 4 Knoten gewählt, die den kleinsten Abstand zu den Messpunkten des Versuchs aufweisen. Dabei wird vereinfacht angenommen, dass sich ein Messpunkt immer im Zentrum des Temperatursensors befindet. Da sich die Messwerte und die Simulationswerte für die zwei Messpunkte im Kupferblock kaum unterscheiden wird jeweils der arithmetische Mittelwert gebildet. Der Vergleich der Messpunkte ist in Abb. 4.12 dargestellt.

Es lässt sich erkennen, dass die Kurvenformen, zwischen Messung und Simulation, nur gering voneinander abweichen. Bis zu einer Zeit von etwa 80 s ist die Steigung der Temperatur im Kupfer identisch. Da die Kurven lediglich um einen Wert von ca. 10 s auf der Zeitachse verschoben sind, lässt sich vermuten, dass die Heizpatronen eine Anlaufzeit von etwa 10 s benötigen, bis die volle Leistung in das Kupfer geleitet wird. Ab einer Zeit von 80 s kann bei der Messung im Kupfer eine kontinuierliche Abnahme der Steigung festgestellt werden. Es ist anzunehmen, dass der wesentliche Grund dafür die freie Konvektion mit der umgebenden Luft ist, da die Steigungsabnahme mit steigender Temperatur zunimmt. Da in der Simulation keine Konvektion

auftritt, lässt sich dieses Verhalten bei den Simulationsergebnissen nicht erkennen.

Die Abweichung im unteren Bereich des Epoxidharzes ist dadurch zu erklären, dass in der Simulation angenommen wurde, dass vor dem Zeitpunkt 0 s kein Kontakt zwischen Epoxidharz und der Eisoberfläche bestand. Da die Messkurve jedoch zum Zeitpunkt 0 s eine negative Anfangssteigung aufweist, ist davon auszugehen, dass noch vor der ersten Messung Kontakt bestand. Eine weitere mögliche Fehlerquelle ist die geometrische Vereinfachung, dass sich keine Piezokristalle im Epoxidharz befinden.

Die Ergebnisse für den oberen Messpunkt im Epoxidharz passen am besten überein. Das liegt daran, dass aufgrund der hohen Wärmekapazität, Abweichungen nur sehr träge einfließen.

Außerdem ist zu beachten, dass die wahren Positionen der Messpunkte insbesondere im Epoxidharz von dem CAD-Modell abweichen können, da eine genaue Positionierung, fertigungsbedingt nur schwer möglich ist.

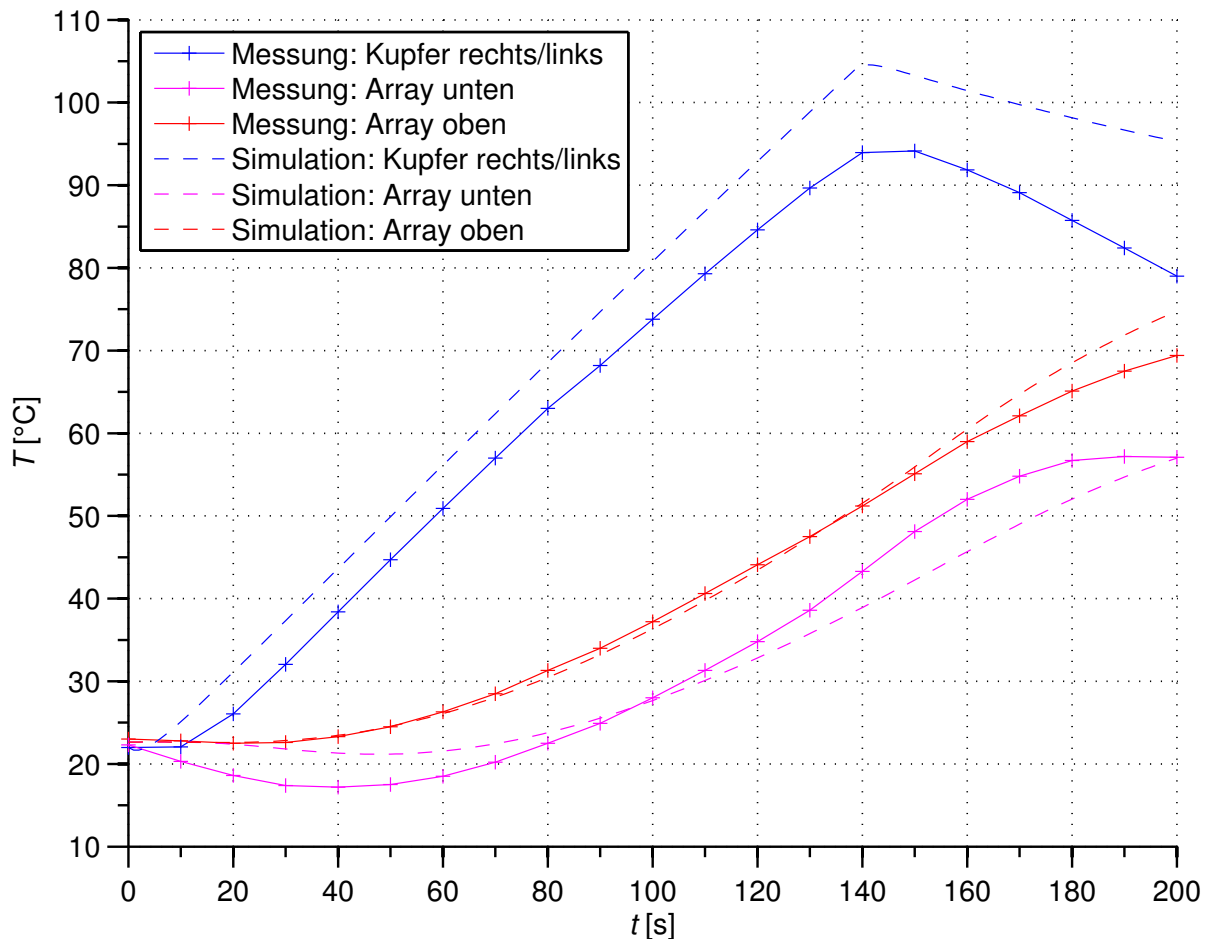


Abb. 4.12: Ergebnis der Thermalsimulation des empirischen Versuches: Vergleich der Versuchsergebnisse mit den Ergebnissen der Simulation

Der zeitliche Verlauf der Phasengrenze ist in Abb. 4.13 dargestellt. An der Kontaktfläche mit Kupfer kann eine Geschwindigkeit der Phasengrenze von 9 cm/h ermittelt werden ($5 \text{ mm}/200 \text{ s} = 9 \text{ cm/h}$). Dieser Wert stimmt mit der Einschmelzgeschwindigkeit des Versuchs überein. Im Bereich des Epoxidharzes ist dagegen kaum eine Bewegung der Phasengrenze festzustellen. Aus

diesem Grund ist es schwierig eine Aussage über die tatsächliche Einschmelzgeschwindigkeit treffen zu können. Klar ist aber, dass Sensoren eingebettet in eine Epoxidharzfüllung ein potentielles Problem für die Schmelzsonde darstellen.

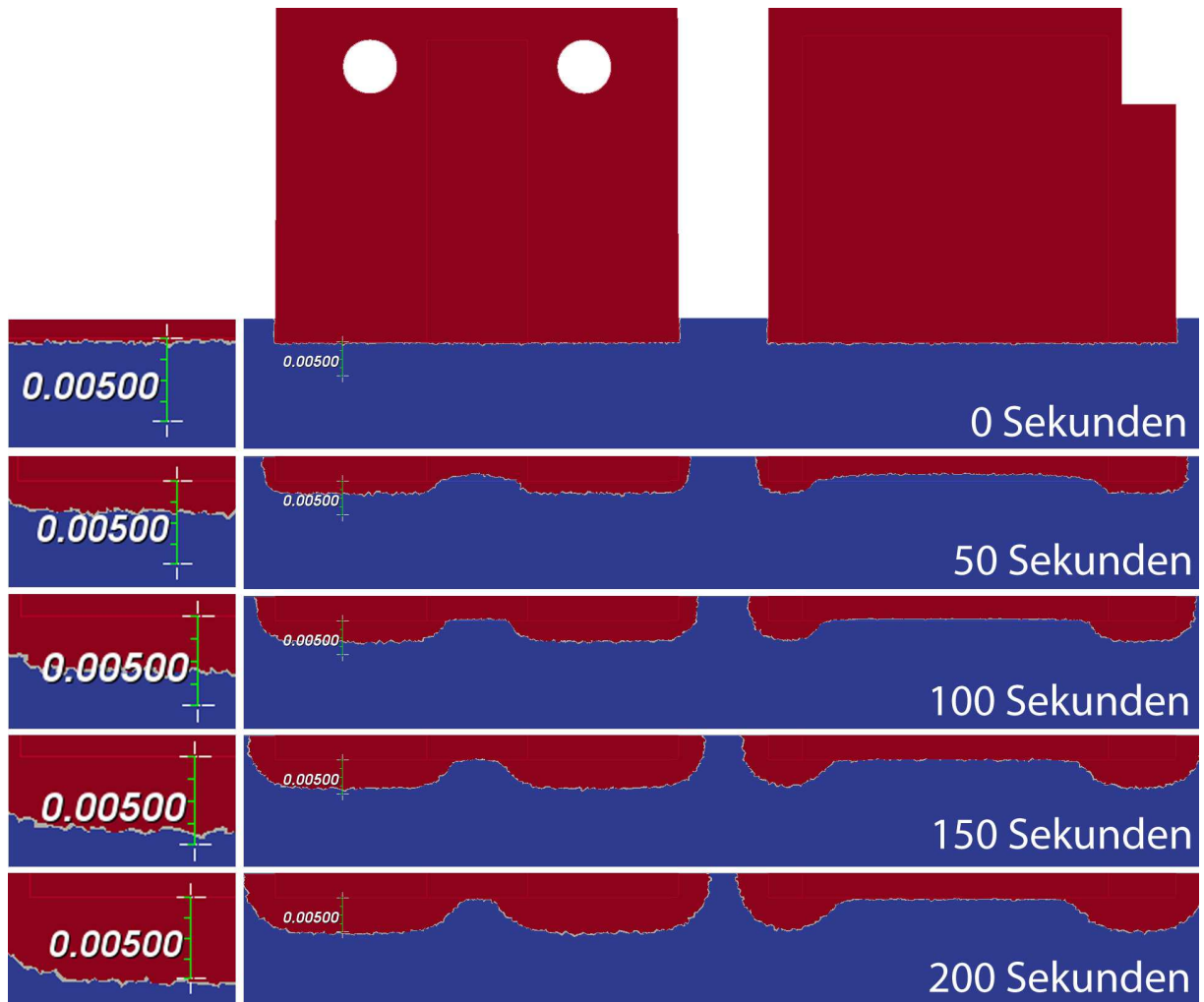


Abb. 4.13: Ergebnis der Thermalsimulation des empirischen Versuches: Zeitlicher Verlauf der Phasengrenze (Längenskala in Meter)

5 Thermalsimulation des IceMole-Kopfes

5.1 Aufbau des IceMole-Kopfes

Der Antrieb der IceMole-Sonde erfolgt durch eine Kombination aus Schmelzkopf und Eisschraube. Mithilfe der Eisschraube wird eine Anpresskraft vom Schmelzkopf auf das Eis aufgebracht, wodurch der Wärmetransport ins Eis begünstigt wird. Außerdem ermöglicht diese Kombination eine Bewegung entgegen der Schwerkraft, wodurch Kurvenfahrten, mit einem Radius von ca. 10 m, in allen Richtungen möglich sind [Dachwald u. a., 2011b, S. 5].

Das Drehmoment, welches zum Betrieb der Eisschraube erforderlich ist, wird durch zwei Schrittmotoren aufgebracht und über ein Getriebe in die Eisschraube geleitet (siehe Abb. 5.1(a)). Durch eine Baugruppe zur Kraft- und Drehmomentmessung werden die erforderlichen Größen für die Motorsteuerung erfasst. Damit während des Betriebs Wasser-Proben zur späteren Analyse entnommen werden können, befindet sich in der Mitte des IceMole-Kopfes eine Hohlneedle, die entlang der Achse ausgefahren werden kann (siehe Abb. 5.1(b)).

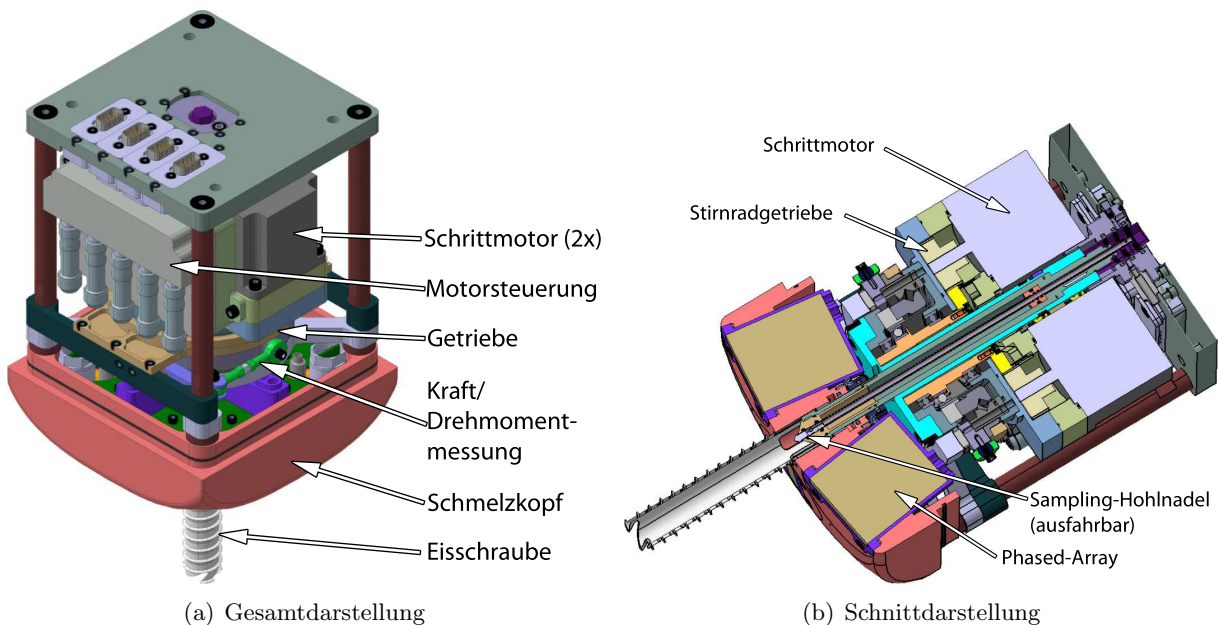


Abb. 5.1: CAD-Modell des IceMole-Kopfes (Entwicklungsstand: 15.10.2012)

Das Hauptbauteil der Schmelzkopf-Baugruppe ist der Schmelzkopf aus Kupfer. Auf der innen liegenden Seite des Schmelzkopfes sind 4 Heizblöcke aus Kupfer kreisförmig angeordnet, die jeweils 4 Heizpatronen (2x 200 W und 2x 160 W) und 4 Temperatursensoren beinhalten (siehe Abb. 5.2(a)). Die Temperatursensoren sind u.a. erforderlich, um ein Überhitzen der Heizpatronen zu verhindern. Zu diesem Zweck kann ein Temperaturbereich, bestehend aus Abschalt-Temperatur (z.B. 100 °C) und Einschalt-Temperatur (z.B. 95 °C), festgelegt werden.

Es befinden sich insgesamt 4 Phased-Array-Sensoren im Schmelzkopf. Diese dienen zur frühzeitigen Erfassung von Hindernissen (z.B. Gestein) durch Ultraschall. Die Phased-Array-Sensoren

befinden sich in Gehäusen, die mit Epoxidharz gefüllt sind und an der Schmelzseite des Schmelzkopfes angebracht sind.

An den Seiten des Schmelzkopfes befinden sich Aussparungen für Platten aus Teflon. Da Teflon eine geringe Wärmeleitfähigkeit besitzt wird dadurch verhindert, dass unnötige Wärme an den Seiten des Schmelzkopfes ins Eis geleitet wird.

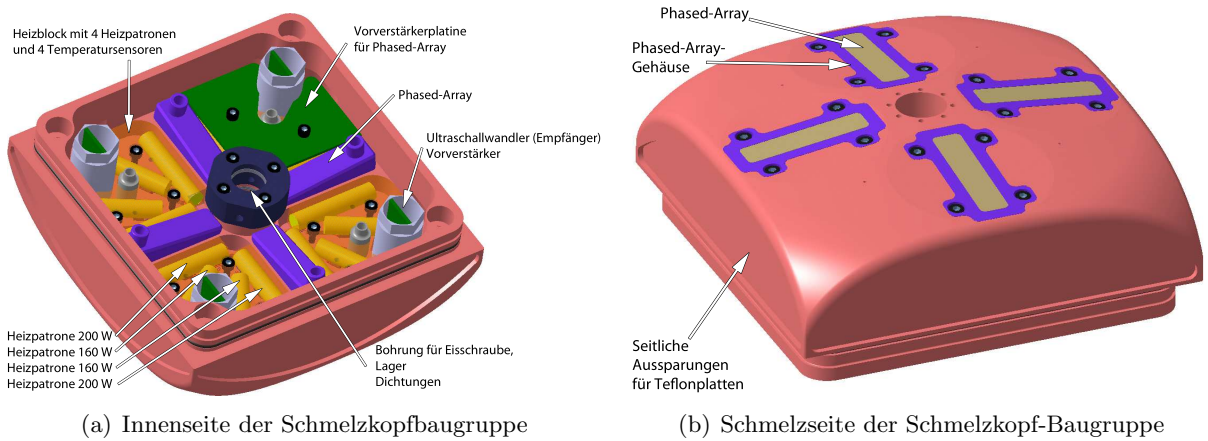


Abb. 5.2: CAD-Modell der Schmelzkopf-Baugruppe (Entwicklungsstand: 24.01.2013)

5.2 Simulation

Für den IceMole-Kopf wird eine transiente Thermalsimulation mit Phasenübergang in Elmer durchgeführt. Die Simulationszeit beträgt 150s, mit einer Zeit-Schrittweite von 1s. Als Anfangsbedingung wird für den IceMole-Kopf eine Temperatur von 20 °C und für das Eis eine Temperatur von -20 °C gewählt.

Zur Generierung des FE-Netzes wird das CAD-Modell des IceMole-Kopfes zunächst vereinfacht. Es werden einige Bauteile, Bohrungen und Nuten entfernt, sodass die Baugruppe des IceMole-Kopfes nur noch aus Schmelzkopf, Heizblöcken, Phased-Arrays, Phased-Array-Gehäuse, und einer auf 180 mm verkürzten Hülle besteht (siehe Abb. 5.3).

Die Heizpatronen werden entfernt, da diese, wie in Abschnitt 4.2.2, in der Simulation durch äquivalente Neumann-Randbedingungen (Wärmestromdichten) an den Mantelflächen der Bohrungen ersetzt werden. Für die Simulation werden die folgenden Wärmestromdichten verwendet:

$$q''_{200\text{ W}} = \frac{200\text{ W}}{A_{\text{Mantelfläche}}} = 176838,8275 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad \text{mit } A_{\text{Mantelfläche}} \approx 1131\text{ mm}^2$$

$$q''_{160\text{ W}} = \frac{160\text{ W}}{A_{\text{Mantelfläche}}} = 159154,9431 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \quad \text{mit } A_{\text{Mantelfläche}} \approx 1005\text{ mm}^2$$

Das umgebende Eis wird durch einen Würfel mit einer Seitenlänge von 0,5 m modelliert, der einen Schmelzkanal, in Form eines Negativabdrucks des IceMole-Kopfes, aufweist (siehe Abb. 5.3(d)). Die Tiefe des Schmelzkanals ist so gewählt, dass das CAD-Modell des IceMole-Kopfes komplett von Eis umgeben ist.

Die verwendeten thermophysikalischen Eigenschaften sind in Tabelle 5.1 zusammengestellt. Dabei ist zu beachten, dass die Wärmeleitfähigkeit und die Dichte von Wasser aus Abschnitt 4.1.3 übernommen werden. Sie fließen also als phasenweise konstant in die Simulation ein.

Tabelle 5.1: Thermophysikalische Eigenschaften, die für die Thermalsimulation des IceMole-Kopfes verwendet werden

Bauteil	Material	k	c_p	ρ
Schmelzkopf	Kupfer	$401,0 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$385,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$8960,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Heizblock	Kupfer	$401,0 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$385,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$8960,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Phased-Array	Epoxidharz	$0,249 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$1000,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$1200,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Phased-Array-Gehäuse	CuNi2SiCr	$160 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$420,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$8780 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Hülle	Aluminium	$236 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	$837,0 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	$2700 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Eisblock	Wasser (fest)	$2,3 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	variabel	$1000,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Eisblock	Wasser (flüssig)	$0,6 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$	variabel	$1000,0 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

k : Wärmeleitfähigkeit; c_p : Wärmekapazität; ρ : Dichte

Werte für Epoxidharz aus: [Grieger u. a., 2006]; Werte für Kupfer aus Elmer-Materialdatenbank; Werte für Cu-Ni2SiCr aus [GmbH, 2002]; Werte für Aluminium aus [VDI, 2006, Dea 4 Tabelle 1 „Stoffwerte von reinen Metallen“]; Werte für Wasser aus Abschnitt 4.1.3 übernommen

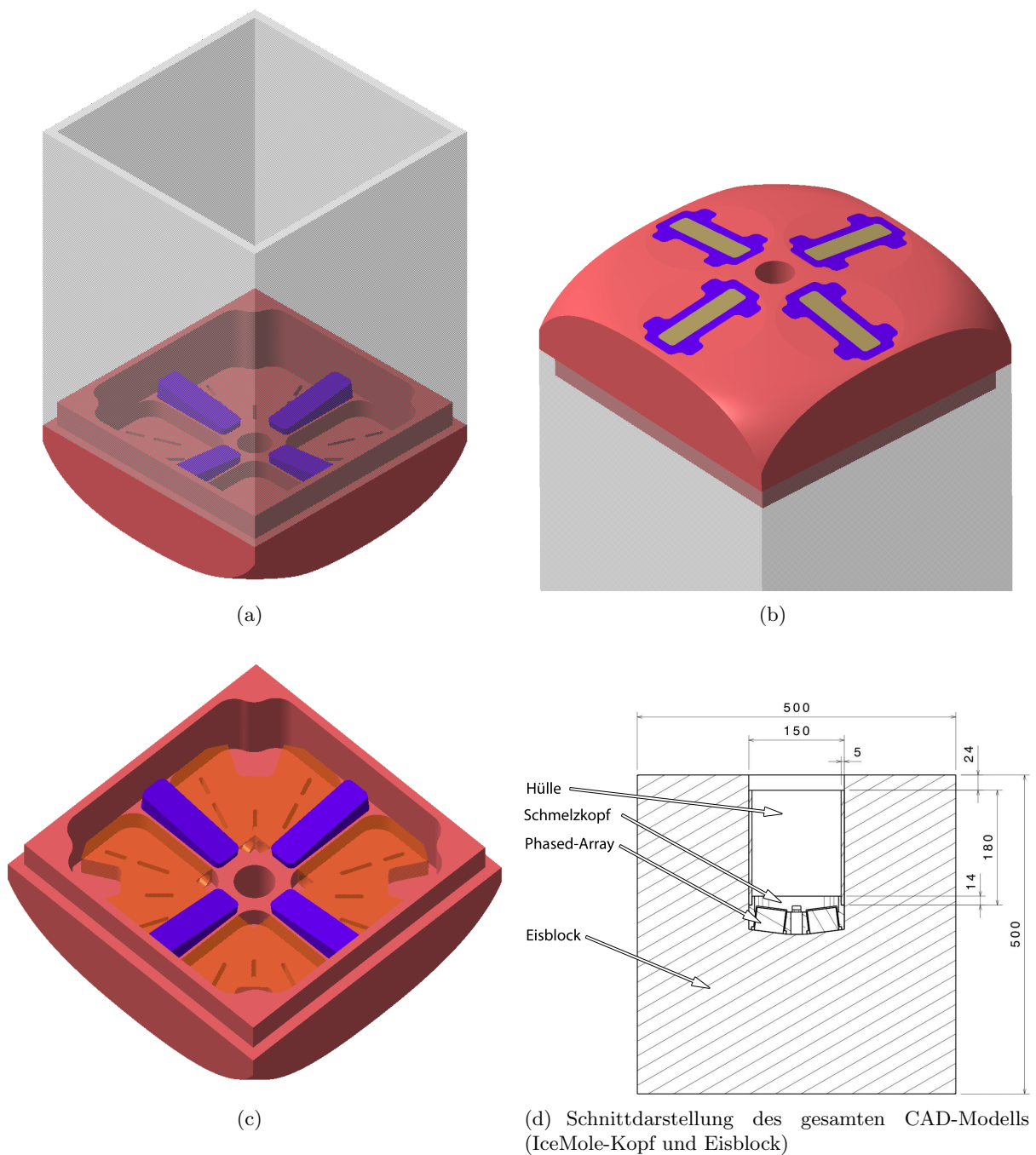


Abb. 5.3: Darstellung des vereinfachten CAD-Modells des IceMole-Kopfes, das für die Thermalsimulation verwendet wird

5.3 Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Simulation des IceMole-Kopfes dargestellt. Abb. 5.4 zeigt das simulierte Temperaturfeld des IceMole-Kopfes zu 4 unterschiedlichen Zeitpunkten (0s bis 150s). Damit das zeitliche Verhalten besser nachvollzogen werden kann, ist der zeitliche Temperaturverlauf von 8 frei gewählten Knoten, deren Positionen aus Abb. 5.4 zu entnehmen sind, in Abb. 5.5 dargestellt. Der Verlauf der Phasengrenze im Bereich der Phased-Array-Sensoren ist in Abb. 5.6 dargestellt.

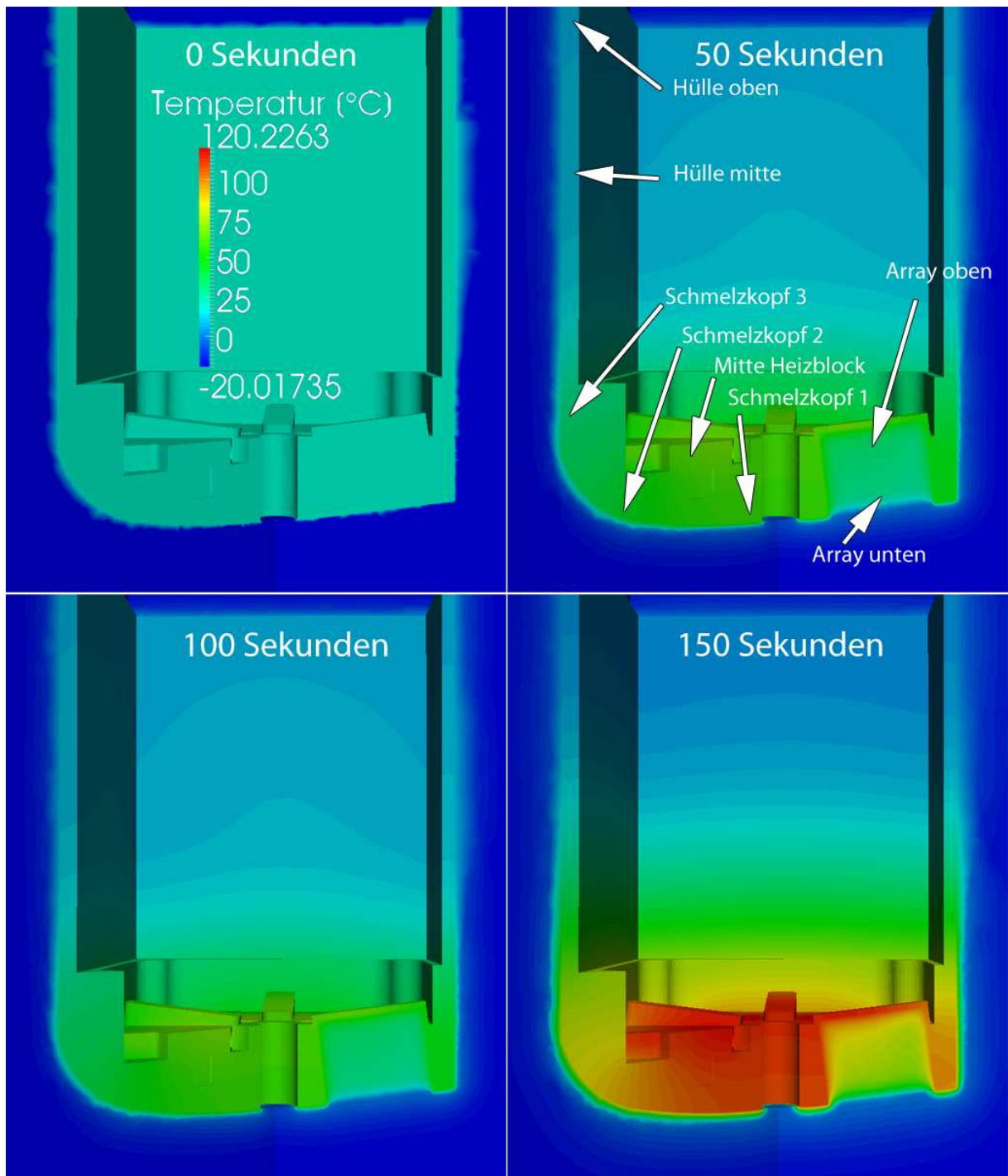


Abb. 5.4: Ergebnis der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes: Darstellung der zeitlichen Änderung des Temperaturfelds (abgesetzter Schnitt) und der Knotenpositionen für die Plots in Abb. 5.5

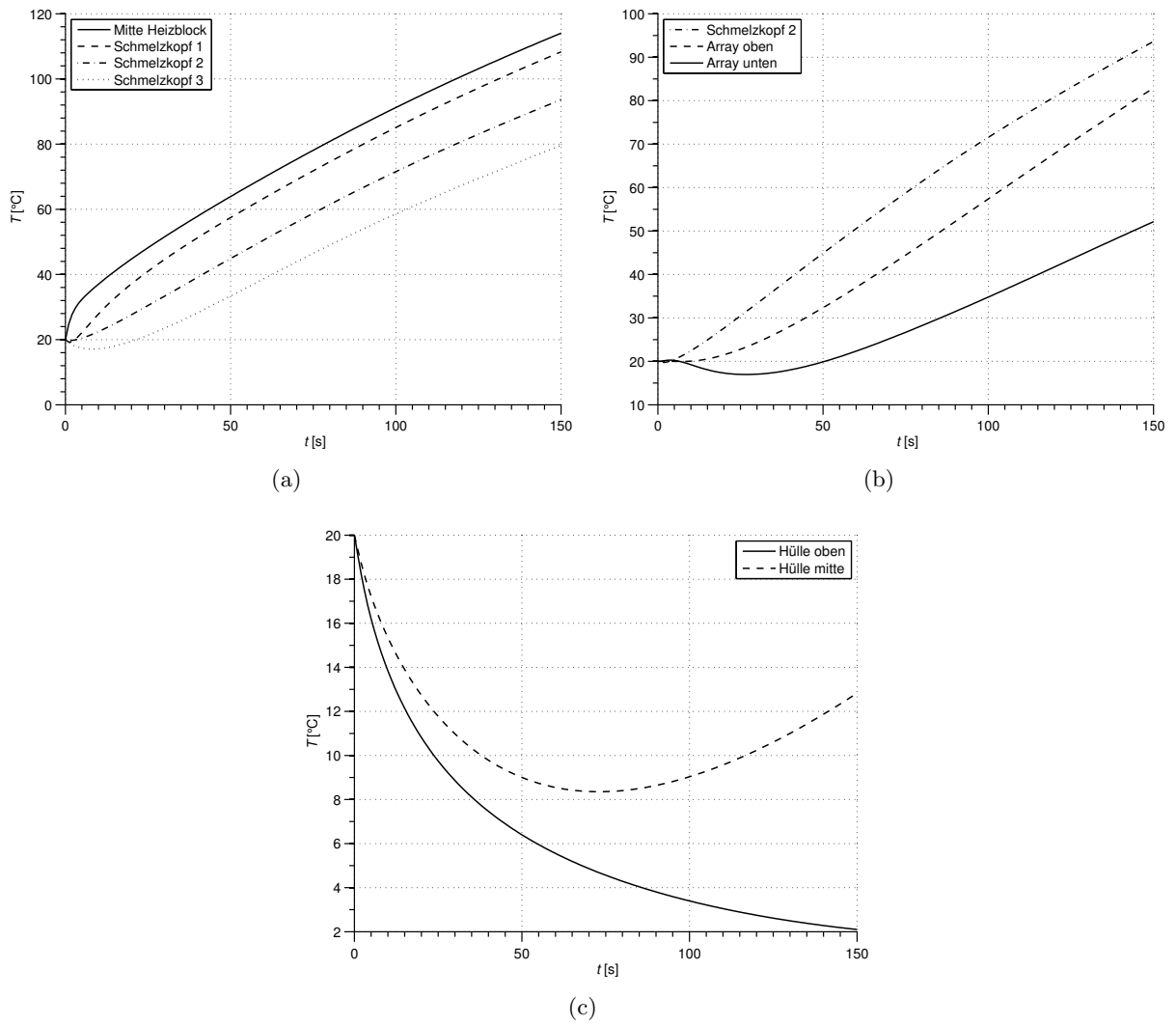


Abb. 5.5: Ergebnis der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes: Plots der zeitlichen Änderung von verschiedenen Knotentemperaturen (Positionen der Knoten sind aus Abb. 5.4 zu entnehmen)

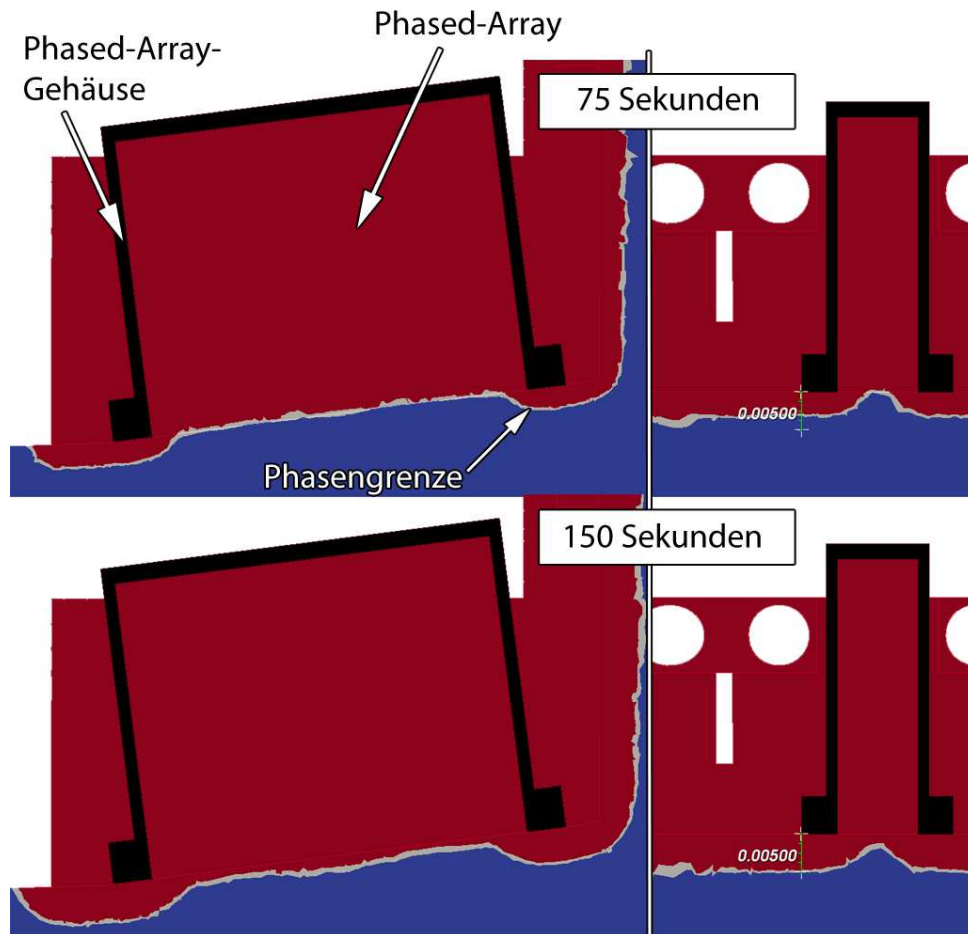


Abb. 5.6: Ergebnis der Thermalsimulation des IceMole-Kopfes: Position der Phasengrenze im Bereich eines Phased-Array-Sensors zum Zeitpunkt 75 s und 150 s (Längenskala in Meter)

5.4 Plausibilitätskontrolle

Eine Verifizierung der Ergebnisse ist im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich. Stattdessen wird die Plausibilität der Ergebnisse kontrolliert. Dazu werden im Folgenden Ist-Zustände genannt, die mit den Soll-Zuständen übereinstimmen.

Ausgehend von den Wärmequellen, die sich stellvertretend für die Heizpatronen, auf den Mantelflächen der Bohrungen befinden, nimmt die Temperatur in Richtung des Eises ab. Außerdem lassen sich die Materialien Kupfer und Epoxidharz für Zeiten > 0 s anhand der unterschiedlichen Temperatur direkt unterscheiden. Zwischen den Materialien Aluminium und Kupfer ist dieser Unterschied nicht so deutlich zu erkennen. Das liegt daran, dass sich die Materialeigenschaften nicht ausreichend stark unterscheiden.

Es sind Analogien zu den Ergebnissen aus Abschnitt 4.2.3 zu erkennen. Die zeitliche Temperaturänderung im Epoxidharz weist einen ähnlichen Verlauf auf. Außerdem steigt die Temperatur im Kupfer annähernd linear an. Des Weiteren wird an den Stellen, an denen das Epoxidharz Kontakt mit dem Eis hat, weniger Wärme ins Eis geleitet, wodurch an diesen Stellen eine nied-

rigere Eistemperatur resultiert. Bezüglich des Verlaufs der Phasengrenze zwischen Abb. 5.6 und Abb. 4.13 lässt sich kaum ein Unterschied feststellen.

Die Eistemperatur erhöht sich nur langsam in den Bereichen, die an dem IceMole-Kopf angrenzen, was für einen Phasenübergang spricht, weil der Temperaturanstieg ohne Phasenübergang deutlich größer wäre.

Aufgrund der großen Entfernung zur Wärmequelle kühlt die Hülle zunächst ab. Nach einiger Zeit ist der eingehende Wärmestrom (Schmelzkopf→Hülle) jedoch größer als der ausgehende Wärmestrom (Hülle→Eis), sodass ab diesem Zeitpunkt zu einem Temperaturanstieg kommt.

5.5 Bewertung des Einflusses der Phased-Array-Sensoren auf das Einschmelzverhalten

Da in Abschnitt 5.4 eine große Anzahl von Ist-Soll-Übereinstimmungen und keine Nichtübereinstimmung gefunden wurde, kann davon ausgegangen werden, dass die erzielten Simulationsergebnisse einen realen Prozess, mit den gleichen Rand- und Anfangsbedingungen, hinreichend genau wiedergeben. Da die Ergebnisse deutlich zeigen, dass es im Bereich der Phased-Array-Sensoren zu einem langsameren Fortschreiten der Phasengrenze kommt, sollte eine Designoptimierung am Schmelzkopf durchgeführt werden, damit die geforderte Einschmelzgeschwindigkeit der IceMole-Sonde erreicht werden kann.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Ausgehend von der Problemstellung, dass für die Entwicklung der IceMole-Sonde eine Thermalsimulationssoftware benötigt wird, mit der sich Phasenübergänge simulieren lassen, war das Ziel der vorliegenden Arbeit, die Eignung der FEM-Software *Elmer* für diesen Zweck festzustellen.

Es zeigte sich, dass *Elmer* zwei verschiedene Möglichkeiten bietet, Phasenübergänge zu simulieren. Bei der ersten Möglichkeit handelt es sich um eine Front-Tracking-Methode, die allerdings eine Neuvernetzung des FE-Netzes erfordert und dadurch schwer in der Anwendung ist. Die zweite Möglichkeit ist eine Fixed-Grid-Methode, bei der ein Phasenübergang dadurch simuliert wird, dass die Wärmekapazität mithilfe einer Enthalpiekurve ermittelt wird. Diese Methode wird als Apparent- und Effective-Heat-Capacity-Methode bezeichnet. Für die Thermalsimulationen, die in dieser Arbeit durchgeführt wurden, wurde die Fixed-Grid-Methode gewählt, da diese gegenüber der Front-Tracking-Methode den Vorteil einer einfacheren Bedienung aufweist.

Zur Ermittlung der Wärmekapazität können in *Elmer* drei unterschiedliche Phasenübergangsmo-
delle verwendet werden. Die Apparent-Heat-Capacity-Methode (*Spatial 1*), sowie zwei Effective-Heat-Capacity-Methoden (*Spatial 2* und *Temporal*). Aufgrund der numerischen Instabilität der Apparent-Heat-Capacity-Methode, wurden in der vorliegenden Arbeit nur die Effective-Heat-Capacity-Methoden *Spatial 2* und *Temporal* verwendet. Es wurden zunächst Simulationen durchgeführt deren Ergebnisse mit einer analytischen Lösung, der Lösung des Stefan-Problems, verglichen wurden. Dabei zeigte sich, dass sich *Spatial 2* für die Simulation der IceMole-Sonde besser eignet als *Temporal*. Außerdem ließ sich erkennen, dass die Güte der Ergebnisse sowohl von der Elementgröße, als auch von der Zeit-Schrittweite beeinflusst wird.

Da eine analytische Lösung nur für den eindimensionalen Fall existiert, wurde im Anschluss eine weitere Simulation durchgeführt, deren Ergebnisse mit den Messergebnissen eines Testschmelzkopfes verglichen wurden. Auch bei diesem Vergleich zeigte sich eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse.

In der letzten Simulation wurde eine vereinfachte Geometrie des IceMole-Kopfes verwendet. Dabei konnte nachgewiesen werden, dass sich das verwendete Simulationsprinzip auch auf komplizierte Geometrien anwenden lässt. Außerdem wurde gezeigt, dass die Phased-Array-Sensoren eine signifikante Verschlechterung des Einschmelzverhaltens hervorrufen.

Da alle Simulationsergebnisse einen hohen Grad an Übereinstimmung mit den verwendeten Vergleichsmethoden aufweisen ist damit ist die Eignung von *Elmer* als thermales Simulations-Werkzeug zur Entwicklung der IceMole-Sonde nachgewiesen.

Betrachtet man abschließend das Potential, dass in *Elmer* als FEM-Software steckt und die gewonnenen Ergebnisse, so lassen sich viele Anwendungsmöglichkeiten und Erweiterungen des verwendeten Simulationsprinzips von Schmelzvorgängen erkennen. Nachfolgend sind mögliche nächste Schritte zusammengefasst:

- Zur Lösung von aktuellen und zukünftigen Problemen, die im Entwicklungsprozess auftauchen, können Thermalsimulation mit Phasenübergang in *Elmer* eingesetzt werden. Dafür

sind sowohl Kopf-, als auch das Gesamtsystemsimulationen der Sonde angedacht. Momentan könnten dazu die folgenden Simulationsszenarien hilfreich sein:

- Simulationen zur Designoptimierung des Schmelzkopfes unter Verwendung verschiedener Modifikationen
 - Simulation mit starrer Eisschraube, um zu ermitteln, wie viel Wärme vom Schmelzkopf, durch das Lager, in die Eisschraube geleitet wird.
 - Simulation mit kompletter Hülle, um zu ermitteln, wie viel Wärme vom Schmelzkopf, in die Hülle geleitet wird, damit ggf. Maßnahmen getroffen werden können, um einen zu hohen Wärmeverlust zu unterbinden.
 - Simulationen zur Ermittlung der Einschmelzgeschwindigkeit
- Damit auch längere Zeiträume simuliert werden können, kann eine einfache Regelung der Heizpatronen in Form einer User-Defined-Function in *Elmer* realisiert werden.
 - Die Ergebnisse zukünftiger Feldversuche der IceMole-Sonde können dazu dienen, die Simulation des Gesamtsystems zu überprüfen und ggf. zu verbessern.
 - Realisieren von Thermalsimulationen mit Phasenübergang unter Verwendung der Front-Tracking Methode mit Neuvernetzung zur Simulation dynamischer Vorgänge, wie beispielsweise eine Kurvenfahrt. Unter Verwendung der Front-Tracking Methode können außerdem physikalische Vorgänge betrachtet werden, wie beispielsweise die Konvektion in der Schmelze.
 - Simulationen unter Berücksichtigung der Anpresskraft durch die Eisschraube.
 - Simulationen unter Nicht-Normalbedingungen, also Herabsetzung des Umgebungsdrucks, zur Anwendung auf die MarsMole-Sonde.

Literatur

- [elm] *Crystal growth and phase change*. http://www.elmerfem.org/elmerwiki/index.php/Crystal_growth_and_phase_change, Abruf: 07.02.2013
- [Alexiades u. Solomon 1993] ALEXIADES, Vasilios ; SOLOMON, Alan D.: *Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes*. Taylor & Francis Group, 1993
- [Baehr u. Stephan 2010] BAEHR, Hans D. ; STEPHAN, Karl: *Wärme- und Stoffübertragung*. 7. Auflage. Springer, Berlin, 2010
- [Bathe 1982] BATHE, K.J.: *Finite Element Procedures in Engineering Analysis*. Prentice Hall, 1982
- [von Böckh u. Wetzel 2011] BÖCKH, Peter von ; WETZEL, Thomas: *Wärmeübertragung: Grundlagen und Praxis*. 4. Auflage. Springer, 2011
- [Dachwald u. a. 2011a] DACHWALD, Bernd u. a.: Antrag zum Verbundvorhaben „Enceladus Explorer“ - Allgemeiner Teil. Rev. 1 (2011), Dezember
- [Dachwald u. a. 2011b] DACHWALD, Bernd u. a.: Antrag zum Verbundvorhaben „Enceladus Explorer“ - Technischer Teil. Rev. 1 (2011), Dezember
- [Eck u. Garcke 2011] ECK, Christof ; GARCKE, Harald: *Mathematische Modellierung*. 2. Auflage. Springer, 2011
- [Francke 2012a] FRANCKE, Gero: Einschmelzversuch: Array-Dummy / Enceladus Explorer. 2012 (1.0). – P-T-FHA-1600-0002-120815 ArrayDummy v1.0
- [Francke 2012b] FRANCKE, Gero: Testbericht / Enceladus Explorer. 2012 (1.0). – P-T-FHA-1600-0002-120817 ArrayDummy Testbericht v1.0
- [GmbH 2002] GMBH, Thyssen Duro M.: *Elmedur NCS Technisches Datenblatt*. 2002
- [Grieger u. a. 2006] GRIEGER, Ronald ; ACKERMANN, Dr. B. ; LOEF, Christoph: Thermische FEM – Simulation eines planaren Wicklungsstapels für Transformatoren. In: *Konstruktion - Zeitschrift für Produktentwicklung und Ingenieur-Werkstoffe* (2006), April
- [Hu u. Argyropoulos 1996] HU, Henry ; ARGYROPOULOS, Stavros A.: Mathematical modelling of solidification and melting: a review. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* (1996), Nr. 4, S. 371–396
- [Incropera u. a. 2007] INCROPERA, Frank P. ; DEWITT, David P. ; BERGMAN, Theodore L. ; LAVINE, Adrienne S.: *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 6th Edition. John Wiley, 2007
- [Klein 2010] KLEIN, Bernd: *FEM: Grundlagen und Anwendungen der Finite-Element-Methode im Maschinen- und Fahrzeugbau*. 8. Auflage. Vieweg+Teubner Verlag, 2010
- [Lide 2010] LIDE, David R.: *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 90th Edition (Internet Version 2010). Boca Raton, FL. : CRC Press/Taylor and Francis, 2010

- [Lienhard 2012] LIENHARD, John H.: *A Heat Transfer Textbook*. 4th Edition. Cambridge, Massachusetts, U.S.A. : Phlogiston Press, 2012
- [Nußelt 1915] NUSSELT, W.: Das Grundgesetz des Wärmeüberganges. In: *Gesundh.Ing.* Bd 38. 1915, S. 477–482 und 490–496
- [Polifke u. Kopitz 2009] POLIFKE, Wolfgang ; KOPITZ, Jan: *Wärmeübertragung: Grundlagen, analytische und numerische Methoden*. Addison-Wesley Verlag, 2009
- [Raback u. a. 2013a] RABACK, Peter u. a.: *Elmer Models Manual*. CSC – IT Center for Science, Februar 2013
- [Raback u. a. 2013b] RABACK, Peter u. a.: *Elmer Solver Manual*. CSC – IT Center for Science, Februar 2013
- [Raback u. Malinen 2012] RABACK, Peter ; MALINEN, Mika: *Overview of Elmer*. CSC – IT Center for Science, Oktober 2012
- [Sres 2010] SRES, Anton: *Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur künstlichen Bodenvereisung im strömenden Grundwasser*. Bd. 1. Auflage. Vdf Hochschulverlag, 2010
- [Thomas u. a. 1984] THOMAS, B. G. ; SAMARASEKERA, I. V. ; BRIMACOMBE: Comparison of Numerical Modeling Techniques for Complex, Two-Dimensional, Transient Heat-Conduction Problems. In: *Metallurgical Transactions B* 15B (1984), Juni
- [Tipler u. Mosca 2009] TIPLER, Paul A. ; MOSCA, Gene: *Physik: für Wissenschaftler und Ingenieure*. 6. Auflage. Spektrum Akademischer Verlag, 2009
- [VDI 2006] VDI: *VDI-Wärmeatlas*. 10. Auflage. Springer, 2006
- [Voller u. Swaminathan 1990] VOLLER, V. R. ; SWAMINATHAN, C. R.: Fixed Grid Techniques For Phase Change Problems: A Review. In: *International Journal For Numerical Methods In Engineering* vol. 30 (1990), S. 875–898
- [Wikipedia 2012] WIKIPEDIA, Die freie E.: *Phasendiagramm*. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Phasendiagramm&oldid=111216538>. Version: 2012
- [Yang 2008] YANG, Fengshan: *Progress in Applied Mathematical Modeling*. Nova Science Pub Inc, 2008

Anhang

A Stoffwerte für Eis und Wasser

Tabelle A.1: Stoffwerte für Eis und Wasser

Zustand	T °C	ρ $kg\ m^{-3}$	k $W\ m^{-1}\ K^{-1}$	c_p $kJ\ kg^{-1}\ K^{-1}$	h $kJ\ kg^{-1}$
Flüssig	90,00	965,3100	0,6753	4,2052	710,8467
	80,00	971,7900	0,6700	4,1968	668,9471
	70,00	977,7600	0,6631	4,1901	627,0434
	60,00	983,2000	0,6544	4,1850	585,1355
	50,00	988,0300	0,6436	4,1813	543,2234
	40,00	992,2200	0,6306	4,1794	501,3071
	30,00	995,6500	0,6155	4,1798	459,3866
	20,00	998,2100	0,5985	4,1841	417,4619
	10,00	999,7000	0,5800	4,1952	375,5330
	4,00	999,9700			350,3737
	0,01	999,8400	0,5611	4,2194	333,6419
Fest	0,00	916,7000	2,1400	2,1100	0,0000
	-10,00	918,7000	2,3000	2,0300	-20,6802
	-20,00	920,3000	2,4000	1,9600	-40,6062
	-30,00	921,6000	2,5000	1,8800	-59,7779
	-40,00	922,8000	2,6000	1,8000	-78,1953
	-50,00	924,0000	2,8000	1,7200	-95,8585
	-60,00	925,2000	3,0000	1,6500	-112,7674
	-80,00	927,4000	3,3000	1,5000	-144,3225
	-100,00	929,2000	3,7000	1,3600	-172,8605

Eigene Darstellung, Daten aus: ([Lide, 2010, „Thermophysical Properties of Water and Steam“], [Lide, 2010, „Properties of Ice and Supercooled Water“])

B Übersicht der Vereinfachungen zur Formulierung des Stefan-Problems

Tabelle B.1: Übersicht der Vereinfachungen zur Formulierung des Stefan-Problems

Mit verbundene Faktoren	Phasenübergang physikalische	Vereinfachte Annahmen für das Stefan Problem	Anmerkungen zu den Annahmen
1. Wärme- und Massentransfer durch Wärmeleitung, Konvektion, Radiation mit möglichen gravitativen, elastischen, chemischen, und elektromagnetischen Effekten		Isotroper Wärmeübergang nur durch Wärmeleitung, alle anderen Effekte werden als vernachlässigbar angenommen	Häufigster Fall. Angemessen für reine Metalle, kleine Behälter, mittelmäßige Temperaturgradienten
2. Freisetzung oder Aufnahme latenter Wärme		Latente Wärme ist konstant und wird freigesetzt oder aufgenommen mit Erreichen der Phasenübergangstemperatur	Angemessen und gut verträglich mit den anderen Annahmen
3. Variierende Temperatur des Phasenübergangs		Phasenübergangstemperatur ist konstant und bekannt	Häufigster Fall, verträglich mit den anderen Annahmen
4. Keimbildungs- und Unterkühlungseffekte		Effekte treten nicht auf	In den meisten Fällen angemessen
5. Dicke und Struktur der Phasengrenze		keine Dicke und eben (nur eine Fläche)	Angemessen für die meisten Metalle (kein Vorhandensein innerer Erwärmung)
6. Oberflächenspannung und Krümmungseffekte an der Phasengrenze		Als unbedeutend angenommen	Angemessen und gut verträglich mit den anderen Annahmen
7. Variation thermophysikalischer Eigenschaften		Konstant in jeder Phase ($c_L \neq c_S, k_L \neq k_S$)	Einzig zur Vereinfachung angenommen. Angemessen für die meisten Metalle für moderate Temperaturbereiche. Wesentlicher Aspekt ist die Unstetigkeit im Bereich der Phasengrenze
8. Dichteänderungen		konstant ($\rho_L = \rho_S$)	Notwendige Annahme um Bewegung des Materials zu vermeiden. Möglicherweise die unangemessenste Annahme

vgl. Alexiades u. Solomon 1993, S. 7 (Tabelle 1.1) - Übersetzung des Verfassers

C Mathematische Ergänzungen und Herleitungen

C.1 Gaußsche Fehlerfunktion

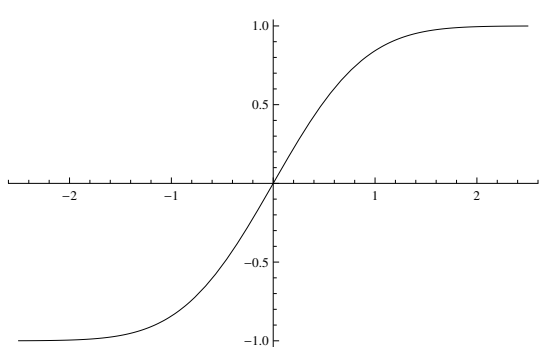
Bei der Lösung der transienten Wärmeleitungsgleichung entsteht ein Term, der als Gaußsche Fehlerfunktion bezeichnet wird. Die Gaußsche Fehlerfunktion ist somit auch in der Lösung für das Stefan-Problem Gl. (2.16), Gl. (2.17) vorzufinden.

Die Gaußsche Fehlerfunktion lautet:

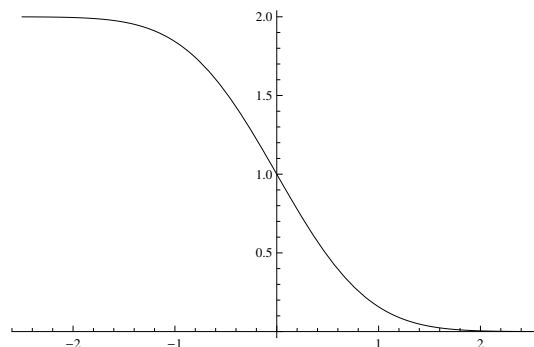
$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du \quad (\text{C.1})$$

Die konjugierte Gaußsche Fehlerfunktion lautet:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-u^2} du \quad (\text{C.2})$$



(a) Graph der Fehlerfunktion $y = \operatorname{erf}(x)$



(b) Graph der konjugierten Fehlerfunktion $y = \operatorname{erfc}(x)$

Abb. C.1: Graphen der Fehlerfunktion

Die Ableitung der Gaußschen Fehlerfunktion lautet:

$$\frac{d \operatorname{erf}(f(x))}{dx} = \frac{df(x)}{dx} \left(\frac{2e^{-f(x)^2}}{\sqrt{\pi}} \right) \quad (\text{C.3})$$

Die Ableitung der konjugierten Gaußschen Fehlerfunktion lautet:

$$\frac{d \operatorname{erfc}(f(x))}{dx} = 1 - \frac{d \operatorname{erf}(f(x))}{dx} = \frac{df(x)}{dx} \left(-\frac{2e^{-f(x)^2}}{\sqrt{\pi}} \right) \quad (\text{C.4})$$

Das Ergebnis der Gaußschen Fehlerfunktion kann nur näherungsweise bestimmt werden. Aus diesem Grund sind in Tabelle C.1 die Werte für Funktionsargumente von 0 bis 3 aufgeführt.

Tabelle C.1: Werte der Gaußschen Fehlerfunktion

x	$\operatorname{erf}(x)$	x	$\operatorname{erf}(x)$	x	$\operatorname{erf}(x)$
0,00	0,00000	0,36	0,38933	1,04	0,85865
0,02	0,02256	0,38	0,40901	1,08	0,87333
0,04	0,04511	0,40	0,42829	1,12	0,88679
0,06	0,06762	0,44	0,46622	1,16	0,89910
0,08	0,09008	0,48	0,50275	1,20	0,91031
0,10	0,11246	0,52	0,53790	1,30	0,93401
0,12	0,13476	0,56	0,57162	1,40	0,95228
0,14	0,15695	0,60	0,60386	1,50	0,96611
0,16	0,17901	0,64	0,63459	1,60	0,97635
0,18	0,20094	0,68	0,66378	1,70	0,98379
0,20	0,22270	0,72	0,69143	1,80	0,98909
0,22	0,24430	0,76	0,71754	1,90	0,99279
0,24	0,26570	0,80	0,74210	2,00	0,99532
0,26	0,28690	0,84	0,76514	2,20	0,99814
0,28	0,30788	0,88	0,78669	2,40	0,99931
0,30	0,32863	0,92	0,80677	2,60	0,99976
0,32	0,34913	0,96	0,82542	2,80	0,99992
0,34	0,36936	1,00	0,84270	3,00	0,99998

Übernommen von [Incropera u. a., 2007, S. 961]

C.2 Herleitung der Stefan-Bedingung für den eindimensionalen Fall

In Anlehnung an Alexiades u. Solomon [1993] wird nachfolgend die Herleitung der Stefan-Bedingung für den eindimensionalen Fall aufgeführt.

Der Energieerhaltungssatz lautet,

$$\dot{E}_{\text{st}} = \dot{E}_{\text{in}} - \dot{E}_{\text{out}} + \dot{E}_{\text{g}}, \quad (\text{C.5})$$

wobei hier $\dot{E}_{\text{g}} = 0$ ist.

Betrachtet wird ein Stab der Länge l ($0 \leq x \leq l$) mit konstanter Querschnittfläche A , konstanter Dichte ρ und den phasenweise konstanten thermophysikalischen Eigenschaften c_L , c_S , k_L , k_S . Bei $x = 0$ und $x = l$ wird in irgendeiner Weise Wärme zu- und abgeführt, sodass eine flüssige Phase bei $0 \leq x < X(t)$, sowie eine feste Phase bei $X(t) < x \leq l$ vorliegt. Die Phasen werden durch die Phasengrenze, die sich bei $x = X(t)$ befindet und die konstante Schmelztemperatur T_m aufweist, zu jeder Zeit $t > 0$ getrennt. Es wird gefordert, dass an der Phasengrenze eine konstante latente Wärme L abgegeben bzw. aufgenommen wird.

Bei $t > 0$ setzt sich die gespeicherte Energie E_{st} aus der fühlbaren und der latenten Wärme zusammen,

$$\begin{aligned} E_{\text{st}}(t) &= U_{\text{sens}} + U_{\text{lat}} \\ &= A \left[\int_0^{X(t)} (\rho c_L [T(x, t) - T_m] + \rho L) dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{X(t)}^l \rho c_S [T(x, t) - T_m] dx \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Der Energieerhaltungssatz Gl. (C.5), angewandt auf den vorliegenden Fall, verlangt

$$\frac{dE_{\text{st}}(t)}{dt} = A [q(0, t) - q(l, t)], \quad (\text{C.7})$$

wobei die rechte Seite der Gleichung der Wärmestromdichte in den Stab ($\dot{E}_{\text{in}} - \dot{E}_{\text{out}}$) entspricht. Die zeitliche Ableitung von Gl. (C.6) kann mithilfe der Leibnizregel,

$$\frac{d}{d\theta} \left(\int_{a(\theta)}^{b(\theta)} f(x, \theta) dx \right) = \int_{a(\theta)}^{b(\theta)} \frac{\partial f(x, \theta)}{\partial \theta} dx + f(b(\theta), \theta) b'(\theta) - f(a(\theta), \theta) a'(\theta), \quad (\text{C.8})$$

umgeschrieben werden zu,

$$\begin{aligned} \frac{dE_{\text{st}}(t)}{dt} &= \rho A \left[\int_0^{X(t)} \frac{\partial}{\partial t} (c_L [T(x, t) - T_m] + L) dx \right. \\ &\quad \left. + [c_L (T(X(t), t) - T_m) + L] \frac{\partial}{\partial t} X(t) \right. \\ &\quad \left. + \int_{X(t)}^l \frac{\partial}{\partial t} c_S (T(x, t) - T_m) dx - c_S (T(X(t), t) - T_m) \frac{\partial}{\partial t} X(t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Mit $T(X(t), t) = T_m$ folgt,

$$\frac{dE_{\text{st}}(t)}{dt} = A \left[\int_0^{X(t)} \rho c_L \frac{\partial}{\partial t} T(x, t) dx + L \frac{\partial}{\partial t} X(t) + \int_{X(t)}^l \rho c_S \frac{\partial}{\partial t} T(x, t) dx \right]. \quad (\text{C.10})$$

Die Wärmeleitungsgleichung Gl. (2.3) lautet für den vorliegenden Fall,

$$\rho c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right). \quad (\text{C.11})$$

Einsetzen von Gl. (C.11) in Gl. (C.10) liefert,

$$\begin{aligned} \frac{dE_{\text{st}}(t)}{dt} &= A \left[k_L \frac{\partial T(X(t)^-, t)}{\partial x} - k_S \frac{\partial T(X(t)^-, t)}{\partial x} + \rho L \frac{\partial}{\partial t} X(t) \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{k_S \frac{\partial T(l, t)}{\partial x}}_{=q(l, t)} - \underbrace{k_L \frac{\partial T(0, t)}{\partial x}}_{=q(0, t)} \right], \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

wobei $T(X(t)^-, t)$ das Temperaturfeld in der flüssigen Phase bezeichnet, und $T(X(t)^+, t)$ das

Temperaturfeld in der festen Phase bezeichnet.

Werden Gl. (C.12) und Gl. (C.7) gleichgesetzt, so resultiert nach Umformung die **Stefan Bedingung** für den eindimensionalen Fall.

$$\rho L \frac{\partial}{\partial t} X(t) = -k_L \frac{\partial T(X(t)^-, t)}{\partial x} + k_S \frac{\partial T(X(t)^+, t)}{\partial x}$$

D Fall-Definitionsdateien

D.1 Beschreibung der Fall-Definitionsdateien

Kommentare

Kommentare werden in den Fall-Definitionsdateien durch das Ausrufezeichen „!“ definiert.

Struktur

Die Fall-Definitionsdatei besteht aus mehreren Einträgen, die Befehle an *ElmerSolver* für das Lösen enthalten. In Tabelle D.1 sind diese Einträge aufgeführt. Eine ausführliche Beschreibung findet sich in [Raback u. a., 2013b, S. 10 - S. 17].

Tabelle D.1: Beschreibung der Einträge in der Fall-Definitionsdatei

Eintrag	Beschreibung/Zweck
1. Header	- Einbinden des FE-Netzes - Pfadangabe für die Ergebnisdatei
2. Constants	- Deklarieren von Konstanten für die Simulation
3. Simulation	- Festlegen der Simulationsart (stationär oder transient) - Auswahl der Methode zur Zeitdiskretisierung (BDF oder Crank-Nicholson) - Zeit-Schrittweite - Ausgabeintervall ...
4. Solver	- Angabe des Moduls und Einstellen des Löser (Lösungsverfahren, Abbruchkriterien, Ausführung ...)
5. Body	- Zuweisen von Anfangsbedingungen, Materialeigenschaften, Gleichungen (Löser)
6. Equation	- Zusammenfassen von Lösern
7. Body Force	- Angabe von Körper-„Lasten“, wie beispielsweise eine Wärmequelle
8. Material	- Definition von Materialeigenschaften
9. Initial Condition	- Definition von Anfangsbedingungen
10. Boundary Condition	- Definition von Randbedingungen

D.2 Thermalsimulation des Eisblocks

```
1 !-----!  
2 ! Thermalsimulation eines Eisblocks !  
3 ! Datum: 15.01.2013 !  
4 ! Autor: Kai Schueller !  
5 ! !  
6 ! Beschreibung: Thermalsimulation mit Phasenubergang !  
7 ! eines einfachen Eisblocks !  
8 ! !  
9 !-----!  
10 Header  
11 CHECK KEYWORDS Warn  
12 Mesh DB "." "."  
13 Include Path ""  
14 Results Directory ""  
15 End  
16  
17 Simulation  
18 Max Output Level = 5  
19 Coordinate System = Cartesian  
20 Coordinate Mapping(3) = 1 2 3  
21 Simulation Type = Transient  
22 Steady State Max Iterations = 1  
23  
24 ! Folgende Zeitpunkte werden gespeichert:  
25 ! 0 - 1Stunde - 2Stunden - 3 Stunden - 4Stunden - 5Stunden -  
26 ! 6 Stunden - 7 Stunden  
27 Output Intervals(2) = 1 7  
28  
29 Timestepping Method = BDF  
30 BDF Order = 1  
31 Timestep intervals(2) = 1 7  
32  
33 ! Ausgabe zum Zeitpunkt 0, danach Zeit-Schrittweite: 1 Stunde  
34 Timestep Sizes(2) = 0 3600  
35  
36 Solver Input File = case.sif  
37 Post File = case.ep  
38 End  
39  
40 Constants  
41 Gravity(4) = 0 -1 0 9.82  
42 Stefan Boltzmann = 5.67e-08  
43 Permittivity of Vacuum = 8.8542e-12  
44 Boltzmann Constant = 1.3807e-23  
45 Unit Charge = 1.602e-19  
46 End  
47  
48 Body 1  
49 ! FE-Netz ID des Eisblocks  
50 Target Bodies(1) = 1  
51  
52 Name = "Eisblock"  
53 Equation = 1  
54 Material = 1  
55 Initial condition = 1  
56 End  
57  
58 ! Berechnung des Temperaturfelds  
59 Solver 1
```

```
60 Equation = Heat Equation
61 Procedure = "HeatSolve" "HeatSolver"
62 Variable = -dofs 1 Temperature
63 Exec Solver = Always
64 Stabilize = True
65 Bubbles = False
66 Lumped Mass Matrix = False
67 Optimize Bandwidth = True
68 Steady State Convergence Tolerance = 1.0e-5
69 Nonlinear System Convergence Tolerance = 1.0e-5
70 Nonlinear System Max Iterations = 10
71 Nonlinear System Newton After Iterations = 3
72 Nonlinear System Newton After Tolerance = 1.0e-3
73 Nonlinear System Relaxation Factor = 1
74 Linear System Solver = Iterative
75 Linear System Iterative Method = BiCGStab
76 Linear System Max Iterations = 500
77 Linear System Convergence Tolerance = 1.0e-10
78 Linear System Preconditioning = ILU0
79 Linear System ILUT Tolerance = 1.0e-3
80 Linear System Abort Not Converged = True
81 Linear System Residual Output = 1
82 Linear System Precondition Recompute = 1
83 End
84
85 ! Berechnung des Waermestroms
86 Solver 2
87 Exec Solver = Always
88 Equation = "flux□compute"
89 Procedure = "FluxSolver" "FluxSolver"
90 Calculate Flux = Logical True
91 Flux Variable = String Temperature
92 Flux Coefficient = String "Heat□Conductivity"
93 Linear System Solver = "Iterative"
94 Linear System Iterative Method = "cg"
95 Linear System Preconditioning = ILU0
96 Linear System Residual Output = 10
97 Linear System Max Iterations = Integer 500
98 Linear System Convergence Tolerance = 1.0e-5
99 Linear System Abort Not Converged = True
100 End
101
102 ! Einstellen des Output-Formates (Paraview)
103 Solver 3
104 Equation = Result Output
105 Output Format = Vtu
106 Output File Name = case
107 Procedure = "ResultOutputSolve" "ResultOutputSolver"
108 Exec Solver = Always
109 End
110
111 Equation 1
112 Name = "HeatEq"
113 Phase Change Model = Spatial2 ! alternativ: Temporal
114 Active Solvers(2) = 1 2
115 End
116
117 Equation 2
118 Name = "Output"
119 Active Solvers(1) = 3
120 End
121
```

```
122 Material 1
123   Name = "WaterIce"
124
125 ! Temperaturintervall, in dem Phasenubergang stattfinden soll
126   Phase Change Intervals(2,1) = 0 0.01
127
128 ! Uebergabe der Enthalpiekurve
129   Enthalpy = Variable Temperature; Real; $ rho = 1000000;\
130     t = -60 -50 -40 -30 -20 -10 0 0.01 4 10 20 30 40 50 60;\
131     e = -112.7674 -95.8585 -78.1953 -59.7779 -40.6062 -20.6802\
132       0.0 333.6419 350.3737 375.5330 417.4619 459.3866\
133       501.3071 543.2234 585.1355;\
134     e=rho*e;\ ! Volumenspezifische Enthalpie
135     n=size(t)[1];\
136     for(i=0:n-1){t(i) e(i)}$; End
137
138 ! Definition der Waermeleitfaehigkeit
139   Heat Conductivity = Variable Temperature; Real; -20 2.3;\
140     0 2.3;\
141     0.1 0.6;\
142     40 0.6; End
143   Density = 1000.0
144 End
145
146 Initial Condition 1
147   Name = "Anfangstemperatur_des_Eisblocks"
148   Temperature = -20.0
149 End
150
151 Boundary Condition 1
152   Target Boundaries(1) = 1
153   Name = "Dirichlet-Randbedingung"
154   Temperature = 40.0
155 End
```

D.3 Thermalsimulation des Testschmelzkopfes

```
1 !-----!  
2 ! Thermalsimulation des Einschmelzversuches !  
3 ! Datum: 21.01.2013 !  
4 ! Autor: Kai Schueller !  
5 ! !  
6 ! Beschreibung: Thermalsimulation des Einschmelz- !  
7 ! versuchs mit einem Testdummy !  
8 ! !  
9 !-----!  
10 Header  
11 CHECK KEYWORDS Warn  
12 Mesh DB "." "."  
13 Include Path ""  
14 Results Directory ""  
15 End  
16  
17 Simulation  
18 Max Output Level = 5  
19 Coordinate System = Cartesian  
20 Coordinate Mapping(3) = 1 2 3  
21 Simulation Type = Transient  
22 Steady State Max Iterations = 1  
23 Output Intervals(2) = 1 200  
24 Timestepping Method = BDF  
25 BDF Order = 1  
26 Timestep intervals(2) = 1 200  
27 Timestep Sizes(2) = 0 1.0  
28 Solver Input File = case.sif  
29 Post File = case.ep  
30 End  
31  
32 Constants  
33 Gravity(4) = 0 -1 0 9.82  
34 Stefan Boltzmann = 5.67e-08  
35 Permittivity of Vacuum = 8.8542e-12  
36 Boltzmann Constant = 1.3807e-23  
37 Unit Charge = 1.602e-19  
38 End  
39  
40 Body 1  
41 Target Bodies(1) = 2  
42 Name = "ice"  
43 Equation = 1  
44 Material = 1  
45 Initial condition = 1  
46 End  
47  
48 Body 2  
49 Target Bodies(1) = 1  
50 Name = "array"  
51 Equation = 2  
52 Material = 3  
53 Initial condition = 3  
54 End  
55  
56 Body 3  
57 Target Bodies(1) = 3  
58 Name = "copper"  
59 Equation = 2
```

```
60 Material = 2
61 Initial condition = 2
62 End
63
64 Solver 1
65 Equation = Heat Equation
66 Procedure = "HeatSolve" "HeatSolver"
67 Variable = -dofs 1 Temperature
68 Exec Solver = Always
69 Stabilize = True
70 Bubbles = False
71 Lumped Mass Matrix = False
72 Optimize Bandwidth = True
73 Steady State Convergence Tolerance = 1.0e-3
74 Nonlinear System Convergence Tolerance = 1.0e-4
75 Nonlinear System Max Iterations = 10
76 Nonlinear System Newton After Iterations = 3
77 Nonlinear System Newton After Tolerance = 1.0e-3
78 Nonlinear System Relaxation Factor = 1
79 Linear System Solver = Iterative
80 Linear System Iterative Method = BiCGStab
81 Linear System Max Iterations = 500
82 Linear System Convergence Tolerance = 1.0e-10
83 Linear System Preconditioning = ILU0
84 Linear System ILUT Tolerance = 1.0e-3
85 Linear System Abort Not Converged = False
86 Linear System Residual Output = 1
87 Linear System Precondition Recompute = 1
88 End
89
90 Solver 2
91 Equation = Result Output
92 Output Format = Vtu
93 Output File Name = case
94 Procedure = "ResultOutputSolve" "ResultOutputSolver"
95 Exec Solver = Always
96 End
97
98 Equation 1
99 Name = "heatEq_withPhaseChange"
100 Phase Change Model = Spatial 2
101 Active Solvers(1) = 1
102 End
103
104 Equation 2
105 Name = "heatEq_withoutPhaseChange"
106 Active Solvers(1) = 1
107 End
108
109 Equation 3
110 Name = "Output"
111 Active Solvers(1) = 2
112 End
113
114 Material 1
115 Name = "ice"
116 Name = "WaterIce"
117 Phase Change Intervals(2,1) = 0 0.01
118 Enthalpy = Variable Temperature; Real; $ rho = 1000;\
119 t = -60 -50 -40 -30 -20 -10 0 0.01 4 10 20 30 40 50 60;\
120 e= -112.7674 -95.8585 -78.1953 -59.7779 -40.6062 -20.6802\
121 0.0 333.6419 350.3737 375.5330 417.4619 459.3866\
```

```

122     501.3071 543.2234 585.1355;\
123     e=rho*e*1000;\ ! Volumenspezifische Enthalpie
124     n=size(t)[1];\
125     for(i=0:n-1){t(i) e(i)}$; End
126
127 ! Definition der Waermeleitfaehigkeit
128 Heat Conductivity = Variable Temperature; Real; -20 2.3;\
129                                     0 2.3;\
130                                     0.1 0.6;\
131                                     40 0.6; End
132 Density = 1000.0
133 End
134
135 Material 2
136 Name = "Copper□(generic)"
137 Heat expansion Coefficient = 16.5e-6
138 Heat Conductivity = 401.0
139 Sound speed = 3810.0
140 Heat Capacity = 385.0
141 Mesh Poisson ratio = 0.34
142 Density = 8960.0
143 Poisson ratio = 0.34
144 Youngs modulus = 115.0e9
145 End
146
147 Material 3
148 Name = "epoxidHarz"
149 Heat Conductivity = 0.249
150 Heat Capacity = 1000.0
151 Density = 1200.0
152 End
153
154 Initial Condition 1
155 Name = "iceTemp"
156 Temperature = -20.0
157 End
158
159 Initial Condition 2
160 Name = "copperTemp"
161 Temperature = 22.0
162 End
163
164 Initial Condition 3
165 Name = "arrayTemp"
166 Temperature = 22.65
167 End
168
169 Boundary Condition 1
170 Target Boundaries(1) = 3
171 Name = "heatSource1"
172 Heat Flux = Variable Time; Real; 0 169313.7692;\
173                                     139.9 169313.7692;\
174                                     140 0;\
175                                     200 0; End
176 End
177
178 Boundary Condition 2
179 Target Boundaries(1) = 4
180 Name = "heatSource2"
181 Heat Flux = Variable Time; Real; 0 169313.7692;\
182                                     139.9 169313.7692;\
183                                     140 0;\

```

184

200

0; End

185 End