Gewinnung von Gashydraten

Numerische Modellierung einer dreidimensionalen Fluidströmung in einem Spiralkompensator

Abschlußbericht

Dr.-Ing. Wolfgang Schacht
Gasversorgung Thüringen GmbH,
Stotternheimer Straße 9a, 99086 Erfurt, Deutschland

Prof. Dr. habil. Evgenij V. Vorozhtsov
Institut für theoretische und angewandte Mechanik
der Sibirischen Abteilung der AdW Rußlands,
Institutskaja–Straße 4/1, 630090 Nowosibirsk, Rußland

Prof. Dr. habil. Anatolij F. Voevodin
Institut für Hydrodynamik
der Sibirischen Abteilung der AdW Russlands,
Lavrentiev– Straße 15, 630090 Nowosibirsk, Russland

Erfurt
Nowosibirsk

2003

Vorwort

Das drehschlagende Bohren, eine Kombination des Rotary- und des Schlagbohrverfahrens, ist ein hocheffektives Verfahren für den Aufschluss und für die Exploration von Lagestätten. Die in derartigen Anlagen entstehenden hydraulischen Druckstöße werden mit Hilfe von spiralförmigen Druckkompensatoren abgebaut. Trotz der großen Bedeutung dieser Kompensatoren für die Gewährleistung einer hohen Betriebssicherheit, Stabilität und Intensität des Bohrprozesses gab es bisher keine geeignete Berechnungsmethode für ihre optimale Auslegung und Konstruktion.

Die vorliegende Arbeit entstand im Ergebnis einer engen Zusammenarbeit mit dem „Institut für theoretische und angewandte Mechanik“ und dem „Institut für Hydrodynamik“ der Sibirischen Abteilung der Russischen Akademie der Wissenschaften in Novosibirsk.

In den Jahren 2000/2001 wurden die Strömungsprozesse im spiralförmigen Kanal des Kompensators mit Hilfe eines eindimensionalen mathematischen Modells beschrieben und untersucht. Die Ergebnisse dieser Arbeit wurden in dem Journal „Fluid Dynamics Research“ [3] veröffentlicht.

Gegenstand der wissenschaftlichen Zusammenarbeit in den Jahren 2001/2002 war die dreidimensionale mathematische Modellierung des Strömungsprozesses im spiralförmigen Kompensator. Mit den dazu entwickelten numerischen Rechenverfahren und Fortran - Programm wurden eine Vielzahl verschiedener Strömungsvarianten untersucht. Die Ergebnisse, einschließlich einer Reihe von Vorschlägen für die weitere Verbesserung des Dämpfungseffektes von spiralförmigen Druckkompensatoren, sind in dieser Arbeit ausführlich dargestellt.

Die vorliegende Arbeit wurde von Herrn Prof. em. Dr.-Ing. Claus Marx (Altrektor der TU Clausthal) inspiriert. Die Autoren danken ihm und dem Direktor des Instituts für Erdöl- und Erdgastechnik der TU Clausthal, Herrn Prof. Dr. Reichetseder, für die finanzielle und moralische Unterstützung bei der Lösung der sehr schwierigen und zeitaufwendigen wissenschaftlichen Arbeit.

Erfurt/Novosibirsk, Januar 2003

W. Schacht
E.V. Vorozhtsov
A.F. Voevodin

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein dreidimensionales numerisches Modell für die Berechnung des Dämpfungseffektes einer pulsierenden Strömung in einem spiralförmigen Kompensator mit rechteckigem Strömungsquerschnitt vorgestellt. Derartige Kompensatoren werden zum Beispiel in drehschlagenden Bohranlagen, eine Kombination des Rotary- und Schlagbohrverfahrens, zur Dämpfung der hydraulischen Druckstöße erfolgreich eingesetzt.
Die Lösung der Aufgabe erfolgt durch Adaption der Methode von Roe erster Ordnung zur Berechnung von dreidimensionalen Strömungen barotroper kompressibler Flüssigkeiten in einem räumlich gekrümmten Netz. Auf der Grundlage dieses Modells wurde die Druck- und Geschwindigkeitsverteilung sowohl im Kanal als auch an seiner oberen Austrittsöffnung berechnet. Ein Vergleich mit den Ergebnissen der eindimensionalen Berechnung auf der Grundlage der TVD - Methode (Total Variation Diminishing) zweiter Ordnung zeigt, dass die dreidimensionalen Berechnungen einen etwas größeren Dämpfungseffekt ergeben.

Inhaltsverzeichnis

Seite

1. Einleitung 5
2. Auswertung aktueller Fachliteratur 6
3. Herangehensweise an die Lösung der Aufgabe 7
4. Gleichungen für die Fluidströmung 11

4.1 Gleichungen für die Fluidströmung in kartesischen Koordinaten 11
4.2 Gleichungen für die Fluidströmung in krummlinigen Koordinaten 15
4.3 Einige Eigenschaften der Lösung 21
4.3.1 Eigenwerte der Jacobi-Matrix 21
4.3.2 Dichte- und Druckkonstanz im Gebiet vor der Stoßwellenfront 23
4.3.3 Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes 25

5. Krummliniges Gitter 26
6. Differenzen – Verfahren von Roe 27
6.1 Allgemeiner Aufbau des Differenzen – Verfahrens von Roe 28
6.2 Mittel nach dem Differenzen - Verfahren von Roe für barotrope Flüssigkeiten 37
6.3 Numerische Umsetzung der Randbedingungen 40

7. Numerische Ergebnisse 46
7.1 Validierung des Fortran – Programms 46
7.2 Strömungsprozesse im Spiralkompensator 49
7.2.1 Eingangsdaten für die dreidimensionalen Berechnungen 49
7.2.2 Stetige Lösung 51
7.2.3 Unstetige Lösung. 57

8. Zusammenfassung der Ergebnisse. 61
Anhang 1: Ausdrücke für die Matrizen R_1, R_2 und R_3 63
Anhang 2: Mathematica - Programm „Jacobi.nb“ für die Berechnung der metrischen Ableitungen und der Jacobi - Determinante 78
Bibliographie 80

1. Einleitung

Das schlagende Bohren ist eines der ältesten Bohrverfahren. Aufgrund seiner niedrigen Bohrgeschwindigkeit wird es zur Zeit nur noch in wenigen Fällen eingesetzt. Seit der Mitte des 19. Jahrhunderts haben sich drehende Bohrverfahren durchgesetzt, die hinsichtlich ihrer Produktivität und Effektivität ständig weiterentwickelt werden. Für die Erkundung und Erschließung von Erdöl- und Erdgaslagerstätten werden gegenwärtig im zunehmenden Maße drehschlagende Bohrverfahren eingesetzt. Das drehschlagende Bohren, eine Kombination des Rotary- und des Schlagbohrverfahrens, hat im Vergleich mit dem reinen Rotary – Verfahren folgende Vorteile:

- höhere Bohrgeschwindigkeit im mittelharten und harten Gestein;
- bessere Bohrlochrichtungsstabilität;
- geringerer Verschleiß auf Grund geringerer Drehfrequenzen und eines geringeren Bohrandruckes.

Das drehschlagende Bohren wurde mit hydraulischen Hämmern unterschiedlicher Konstruktion realisiert [1, 2]. Eine Besonderheit bei der Strömung der Antriebs- und Spülflüssigkeit in drehschlagenden Bohranlagen ist die Bildung von Druckstößen. Diese Druckstöße (auch Stoßwellen oder Wasserschläge genannt) können sehr hohe Werte annehmen und zu einer Zerstörung der Bohranlage führen. Sie entstehen durch den Aufschlag des Hammers auf den Amboss und breiten sich nach oben und unten in der strömenden Flüssigkeit aus. Durch den Einbau eines spiralförmigen Kompensators oberhalb des hydraulischen Hammers soll die Intensität der Druckstöße nach oben (entgegen der Strömung) verringert und nach unten in Richtung des Meißels für den Bohrprozess maximal genutzt werden. In [3] ist der Aufbau und die Funktion eines derartigen hydraulischen Bohrhammers im Zusammenwirken mit einem spiralförmigen Kompensator ausführlich beschrieben.

Für die optimale Auslegung und Dimensionierung derartiger Druckkompensatoren ist die mathematische Modellierung des instationären hydrodynamischen Prozesses in dem spiralförmigen Kanal von großer praktischer Bedeutung.

In [3] wurde ein eindimensionales mathematisches Modell für die Beschreibung des hydrodynamischen Prozesses in einem spiralförmigen Kompensator auf der Grundlage der Masse- und Impulserhaltungssätze für eine nichtviskose kompressible barotrope Flüssigkeit vorgestellt. Die Lösung der abgeleiteten Gleichungen erfolgte mit Hilfe von zwei verschiedenen Finite – Differenzen – Verfahren, dem Verfahren auf der Grundlage einer

Trennung der physikalischen Prozesse und dem bekannten TVD – Verfahren. Durch umfangreiche Berechnungen konnten optimale Parameter, die einen maximalen Dämpfungseffekt der Druckstöße gewährleisten, für eine verbesserte konstruktive Gestaltung von spiralförmigen Druckkompensatoren abgeleitet werden.
Die eindimensionale Beschreibung des instationären hydrodynamischen Prozesses in einem spiralförmigen Kanal berücksichtigt jedoch nicht den Einfluss der gekrümmten Wände, die damit verbundene komplizierte Ausbreitung und Reflektion der Stoßwellen und die sich bildenden Zentrifugalkräfte in der Flüssigkeit. Deshalb wurde von den Verfassern das entwickelte eindimensionale Berechnungsverfahren auf den Fall einer dreidimensionalen instationären Strömung kompressibler Flüssigkeiten in spiralförmigen Kompensatoren ausgedehnt.

2. Auswertung aktueller Fachliteratur

Die Ableitung und Lösung des dreidimensionalen Modells war von Anfang an mit der Aufgabe verbunden, ein geeignetes Finite - Differenzen - Verfahren für die Sicherung einer stabilen Lösung des oben beschriebenen komplizierten hydrodynamischen Strömungsprozesses in dem spiralförmigen Kanal zu finden. Auf eine Reihe wichtiger Arbeiten, in denen Verfahren für die numerische Modellierung zwei- und dreidimensionaler Strömungen kompressibler Gase und Flüssigkeiten in Kanälen mit gekrümmten Wänden vorgestellt werden, wird deshalb im folgenden Text kurz eingegangen.

In [4] wird das klassische TVD - Verfahren zweiter Ordnung für die numerische Modellierung der Ausbreitung ebener Stoßwellen im Medium Luft in einem zweidimensionalen Kanal mit 90°-Krümmer eingesetzt. Die Machzahl der Stoßwellen betrug M_S = 2,2. Die Ergebnisse der numerischen Berechnungen weisen einen ausgeprägt instationären Charakter der von den Kanalwänden reflektierten Stoßwellen aus, obwohl diese vor als auch nach dem Krümmer zunächst in völlig geradlinigen und zueinander parallelen Wänden verlaufen.
Verschiedene Finite - Volumen – Verfahren, z.B. das TVD - Verfahren von Godunov zweiter Ordnung, werden in den Arbeiten [5, 6] für die numerische Modellierung der Wechselwirkung von Stoßwellen (M_S = 2,1) in einem zweidimensionalen Kanal mit gekrümmten Wänden vorgestellt. In diesem Fall lagen die geradlinigen Wände des Kanals

nicht parallel zueinander. Außerdem wurde noch der äußerst komplizierte Fall „Gekrümmter Kanal mit zwei zylindrische Einbauten“ untersucht. Für die Lösung dieser Aufgaben wurden sowohl strukturierte als auch nichtstrukturierte räumliche Rechengitter eingesetzt.

In [7] sind die Ergebnisse der numerischen Lösung einer dreidimensionalen Strömung um einen Zylinder, der sich in einem geradlinigen Kanal mit quadratischem Querschnitt und in einer laminaren Strömung befindet, dargestellt.

Die numerische Berechnung einer stetigen zweidimensionalen Unterschallströmung von einer reibungsbehafteten kompressiblen Flüssigkeit im Stanitz Knie erfolgte in [8] mit dem Roe - Verfahren, ein approximierter Riemann-Löser für gesplittete Druckstöße. Die Diskretisierung des ebenen Gebietes innerhalb des Kanals mit gekrümmten Wänden erfolgte durch den Einsatz eines strukturiert gekrümmten Rechennetzes mit vierseitigen Elementen.

In [9] werden Verfahren erster und zweiter Ordnung für die numerische Modellierung einer dreidimensionalen Überschallströmung in einer Düse, bestehend aus einem flachen Kanal mit 10% sinusartigen Erhebungen auf den oberen und unteren Wänden, eingesetzt.

Ein implizites Differenzen - Verfahren für die Berechnung einer dreidimensionalen Strömung im Versuchskanal von ONERA (Organisation Nationale d’Études et Recherches Aérospatiales – Nationale Organisation für Luft- und Raumfahrt Frankreichs) , der aus drei ebenen Wänden und einer Wand mit einer Ausbuchtung besteht, wird in [10] beschrieben. Der Scheitel dieser Ausbuchtung bildet mit der Kanalachse einen Winkel von 60°. Ein charakteristisches Merkmal der betrachteten dreidimensionalen Strömung war das Auftreten schiefer Stoßwellen, die von den Kanalwänden reflektiert wurden.

Die Auswertung der Fachliteratur auf dem Gebiet der mathematischen Modellierung und numerischen Berechnung von dreidimensionalen Strömungen war in erster Linie auf die Gewinnung aktueller Kenntnisse über Strömungen in rechteckigen Kanälen orientiert. Eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen gibt es auf dem Gebiet der Reflektion von Druckstöße in gekrümmten Kanälen. Ein guter Überblick über diese Arbeiten ist ebenfalls in [4 – 6, 11] zu finden.

3. Herangehensweise an die Lösung der Aufgabe

Nach Auswertung der aktuellen Fachliteratur können zwei entscheidende Unterschiede zwischen den oben genannten Arbeiten [4 – 6, 11] und der Aufgabe über die Ausbreitung von Stoßwellen in einem spiralförmigen Kompensator abgeleitet werden:

- Die Machzahl M_S der Stoßwellen im spiralförmigen Kompensator ist nicht größer als 0,03 , d.h., die zu lösende dreidimensionale Strömungsaufgabe gehört zur Klasse der Strömungen mit kleinen Machzahlen.
- Die Wandkrümmung des spiralförmigen Kompensators besitzt keine Sprünge, d.h. sie ist im Vergleich mit den Aufgaben [4 – 11] überall gleich.

Wie bereits in [11] festgestellt, wird die durch Reflektion an den Wänden sich einstellende Stoßwellenkonfiguration in erster Linie von der Intensität der einfallenden Stoßwelle bestimmt. Ist der Winkel zwischen der Stoßwellenfront und der Reflektionsfläche größer als 90°, so erfolgt eine Diffraktion der Stoßwelle, die durch Bildung von Expansionswellen im Gasstrom hinter der Stoßwelle charakterisiert wird [11]. Genau diese Situation entsteht auch in den zweidimensionalen Aufgaben [4 – 11], wenn die erste ebene Stoßwellenfront den Berührungspunkt der geradlinigen und gekrümmten Rohrwand erreicht.

In der zu lösenden Aufgabe besitzt die vertikale Wand des Kanals überall ein und dieselbe Krümmung und der Winkel zwischen der ersten ebenen Stoßwellenfront und den Kanalwänden ist gleich 90°. Die Bedingung für die Diffraktion der Stoßwelle wird deshalb nicht erfüllt. Im Vergleich mit dem Fall der Diffraktion der Stoßwellen in den Aufgaben [4 – 11] vereinfacht sich damit das Bild der Strömung erheblich.
Trotz dieses Vorteils ist der Rechenaufwand für die zu lösende Aufgabe aus folgenden Gründen sehr hoch:

- Komplizierte Geometrie des räumlichen Rechengebietes;
- Notwendigkeit der Durchführung von mehreren Tausend Zeitschritten zur Gewährleistung einer hinreichenden Stabilität und zuverlässigen Aussage über den maximalen Druck der Flüssigkeit am oberen Ausgang des Spiralkompensators.

Ein möglicher Weg für die numerische Modellierung von Strömungen mit kleinen Machzahlen ist der Einsatz von expliziten Differenzen - Verfahren. Diese Verfahren haben den Nachteil, dass die Zeitschrittweite begrenzt ist. Nach Courant, Friedrichs und Lewy (CFL-Bedingung) gilt grundsätzlich, dass sich während der Dauer eines Zeitschrittes Δt keine Information weiter als eine Gitterzelle ausbreiten darf. Die CFL - Bedingung lautet daher:

$$\Delta t_{CFL} \leq \Delta t_{CFL}^{\max} = \frac{\Delta x}{\left|\vec{u}\right| + c_S}.$$

Selbst dann, wenn die Geschwindigkeit der Strömung im Vergleich mit der

Schallgeschwindigkeit praktisch vernachlässigt werden kann, müssen zur Einhaltung der CFL-Bedingung noch sehr kleine Zeitschritte gewählt werden. Aus diesem Grund gibt es für die effektive numerische Modellierung von Flüssigkeitsströmungen mit kleinen Machzahlen spezielle Lösungsansätze.
Wie im folgenden Text gezeigt wird, sind diese Lösungsansätze nur dann zulässig, wenn es sich um eine sogenannte glatte, d.h. um eine stetige Strömung handelt. Die in drehschlagenden Bohranlagen eingebauten Spiralkompensatoren sind jedoch einer stoßwellenartigen Strömung ausgesetzt. In [3] wurde von den Verfassern deshalb vorgeschlagen, diese Form der Strömung durch den Einbau eines zusätzlichen Ventils am unteren Ausgang des Spiralkompensators in eine glatte Strömung umzuwandeln. Die Biegesteifigkeit der Ventilfeder ist dabei so zu wählen, dass eine ausreichende Glättung des Druckprofils über die Zeit erreicht wird. Eine Glättung des Druckverlaufes am unteren Ausgang des Spiralkompensators würde auch zu einer Vergleichmäßigung der Strömung im gesamten Kompensator führen. Bei gleicher Druckamplitude ergäbe sich damit ein wesentlicher größerer Dämpfungseffekt des Spiralkompensators. Ohne Zweifel werden in Zukunft Spiralkompensatoren mit dem in [3] vorgeschlagenen Ventil zur Glättung der Strömung zum Einsatz kommen. Auf einige Verfahren zur numerischen Berechnung von instationären stetigen Strömungen kompressibler Flüssigkeiten mit kleinen Machzahlen wird deshalb im folgenden eingegangen.

Eine der grundlegenden Ideen bezüglich des Einsatzes größerer stabiler Zeitschritte bei der numerischen Berechnung von Strömungen mit kleinen Machzahlen besteht darin, den schlecht bestimmbaren Teil der Strömung herauszulösen und ihn implizit zu approximieren. Der verbleibende Teil der Strömung kann dann mit vertretbaren Zeitschritten durch den Einsatz einer wirtschaftlichen und genauen Methode bestimmt werden. Diese Herangehensweise wurde erstmals in [12] vorgeschlagen und später in einer Reihe von Arbeiten (siehe [13]) weiterentwickelt. Das gemeinsame Thema in allen diesen Arbeiten ist die Aufspaltung des zu lösenden Problems in zwei Teile: den Teil der Strömungsgleichung, der zweckmäßig implizit zu lösen ist und den Teil, in dem die CFL – Bedingung im starken Maße abgeschwächt werden kann. F. Harlow und A. Amsden [12] berechneten z.B. auf diese Art implizit die Dichte der Flüssigkeit. Später verstanden sie, dass auch der Druck implizit berechnet werden muss [14]. Die auf diesem Wege erhaltenen Differenzen - Gleichungen wurden mit entsprechenden Iterationsprozeduren gelöst.
G. Patnaik u.a. [15] verallgemeinerten die Arbeit von V. Casulli and D. Greenspan [14] durch

Einführung eines steuerbaren „Parameters der Explizitheit“. In [16] wurde eine Gleichung für die Korrektur des Druckes von [17] eingesetzt. R. Klein [18] schlägt eine numerische Methode vor, die auf einer asymptotischen Diffraktion basiert und eine Verallgemeinerung der numerischen Berechnung von Strömungen mit kleinen Machzahlen von S. Klainerman and A. Majda [19] darstellt.

In [13] wird die Diffraktion des Geschwindigkeitsfeldes von Hodge (beschrieben in [20]) eingesetzt, wobei der Geschwindigkeitsvektor **u** als Summe der zwei orthogonalen Komponenten $\mathbf{u} = \mathbf{U} + (1/\rho)\nabla\phi$ definiert ist. In dieser Gleichung ist div $\mathbf{U} = 0$ und $\nabla\phi$ - der Gradient des skalaren Feldes. Die Funktion ϕ ist die Lösung der elliptischen Gleichung $\nabla\cdot(1/\rho)\nabla\phi = \nabla\cdot\mathbf{u}$. Im Pkt. 4.4 wird gezeigt, dass im Fall der Strömung einer kompressiblen Flüssigkeit im Spiralkompensator die Geschwindigkeit $\mathbf{u}(x, y, z, t)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ die Bedingung div $\mathbf{u} = 0$ erfüllt. Deshalb kann die vorgeschlagene Methode, die in [13] für eine zweidimensionale Strömung eingesetzt wurde, im Prinzip verallgemeinert und für stetige Strömungsbereiche in der vorliegenden Arbeit eingesetzt werden.

In [21] wird gezeigt, dass durch Anhäufung von Rundungsfehlern bei der Berechnung von Strömungen mit kleinen Machzahlen erhebliche Fehler in der Lösung auftreten. Um den Einfluss dieser Fehler zu verringern, wurde in [21] vorgeschlagen, nach der Einführung eines charakteristischen Zustandes in der Zustandsgleichung diesen Störeffekt ohne jegliche Vereinfachung der Strömungsgleichungen zu berechnen. Mit diesem Verfahren ist es den Autoren gelungen, die Strömung einer Flüssigkeit bei der sehr kleinen Machzahl $M_S = 10^{-11}$ zu berechnen.

Traditionelle explizite Differenzen – Verfahren sind sowohl für die numerische Lösung stetiger als auch unstetiger Strömungen einsetzbar. In [22] werden Computerprogramme vorgestellt, die als Lösungsalgorithmus das Runge – Kutta – Verfahren [23] integriert haben, mit denen zweidimensionale ungestörte Strömungen auch bei kleinen Machzahlen (z.B. $M_S = 0,003$) erfolgreich berechnet wurden. Die offensichtliche Anwendbarkeit dieser Programme für kleine Machzahlen gab den Verfassern den Anstoß, ein gegenwärtig sehr populäres Differenzen – Verfahren, den Riemann - Löser von Roe [24, 25], für die Berechnung der dreidimensionalen Strömung der nicht reibungsbehafteten kompressiblen Flüssigkeit im Spiralkompensator einzusetzen. In der vorliegenden Arbeit wird die Adaption des Verfahrens von Roe zur Lösung der gestellten Aufgabe beschrieben. Der dazu ausgearbeitete Bericht ist wie folgt aufgebaut:

Im Pkt. 4 werden die erforderlichen Gleichungen für die Beschreibung einer kompressiblen

barotropen Flüssigkeitsströmung sowohl im kartesischen als auch in gekrümmten Koordinaten abgeleitet. Im Pkt. 5 wird der Algorithmus für den Aufbau des gekrümmten Raumgitternetzes für die Berechnung der Strömung innerhalb des Spiralkompensators beschrieben. Im Pkt. 6 wird die Anwendbarkeit des Riemann - Lösers von Roe für die numerische Berechnung einer dreidimensionalen Strömung von barotropen Flüssigkeiten nachgewiesen.

Da den Verfassern zum gegenwärtigen Zeitpunkt keine Ergebnisse von experimentellen Messungen an Spiralkompensatoren vorliegen, wurde für die Kontrolle des ausgearbeiteten numerischen Rechenverfahrens im Pkt. 7 die klassische Aufgabe über die Ausbreitung einer Stoßwelle in einem geradlinigen Kanal herangezogen. Dazu wird der ursprünglich spiralförmige Kanal mit seinen gekrümmten physikalischen Raumkoordinaten in ein rechtwinkliges kartesisches Koordinatensystem transformiert. Außerdem werden im Pkt. 7 die Ergebnisse der numerischen Modellierung des dreidimensionalen hydrodynamischen Strömungsprozesses in realen Spiralkompensatoren dargestellt. Im Pkt. 8 werden schließlich grundlegende Schlussfolgerungen aus den durchgeführten numerischen Untersuchungen und Berechnungen formuliert.

4. Gleichungen für die Fluidströmung

4.1 Gleichungen für die Fluidströmung in Kartesischen Koordinaten

Die Gleichungen, welche die dreidimensionale Strömung einer nicht reibungsbehafteten wärmeisolierten barotropen Flüssigkeit in einem rechtwinkligen Koordinatensystem x, y, z beschreiben, lauten [26, 27]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \, \vec{v} \right) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \left(\rho \, \vec{v} \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \, \vec{v} \, \vec{v} \right) + \nabla p = \rho \, \vec{g} - \rho \frac{\lambda}{2D} | \vec{v} | \cdot \vec{v}. \tag{2}$$

Diese Gleichungen stellen in differentieller Schreibweise die Erhaltungssätze für die Masse (1) und den Impuls (2) dar. Dabei sind ρ - die Dichte der Flüssigkeit, $\vec{v} = (u, v, w)$ - der Geschwindigkeitsvektor der strömenden Flüssigkeit, u, v, w - die resultierenden

Geschwindigkeitsvektoren längs der Achsen x, y, z, p – der Druck, $\vec{g}$ - die Erdbeschleunigung (9,81 m/s²) und $|\vec{v}|$ – der Modul des Geschwindigkeitsvektors, d.h. $|\vec{v}| = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$.

Der Term $-\rho\lambda|\vec{v}|\cdot\vec{v}/(2D)$ in Gleichung (2) berücksichtigt die Wandreibung im Kanal. In [28] werden für den Fall einer stationären Strömung verschiedene Berechnungsformeln für die Rohrreibungszahl λ in Abhängigkeit von der Reynoldszahl und der relativen Rohrrauhigkeit vorgeschlagen. Auf Grund der periodischen Druckstöße ist die Strömung in dem spiralförmig verlaufenden Kanal ausgeprägt instationär. Deshalb werden in dieser Arbeit die auf experimentellen Daten basierenden Beziehungen

$$D = \frac{B_1 H_1}{B_1 + H_1}, \qquad \lambda = \frac{0,021}{D^{0,3}} \tag{3}$$

für die Berechnung des Ersatzdurchmessers D und der Rohrreibungszahl λ zum Ansatz gebracht [29]. Hier sind B_1 und H_1 die entsprechenden inneren Abmessungen des Strömungskanals (siehe Bild 1) .

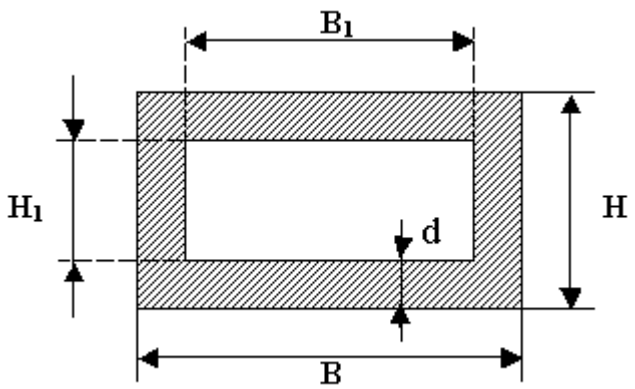


Bild 1: Rechteckiger Querschnitt des spiralförmigen Kanals

Für die Verknüpfung der Gleichungen (1) und (2) ist noch die Zustandsgleichung für Flüssigkeiten

$$P = K_{eff} \cdot \ln(\rho / \rho_0) \tag{4}$$

erforderlich. Die Konstante K_{eff}, in der Literatur auch als Bulk – Modulus bekannt, kann für einen rechtwinkligen Kanal wie folgt berechnet werden [30]:

$$K_{eff} = \frac{1}{\dfrac{1}{E_F} + \dfrac{(B/H)^4 R(\beta)}{15(d/H)^3 E_M}}, \tag{5}$$

wobei E_F – der Elastizitätsmodul der Flüssigkeit, E_M – der Elastizitätsmodul des Materials,

d – die Wandstärke und B bzw. H – die entsprechenden äußeren Abmessungen des Kanals sind. Die Größe $R(\beta)$ ist der sogenannte Rechteckfaktor:

$$R(\beta)=\frac{1}{2}(6-5\beta)+\frac{1}{2}\left(\frac{H}{B}\right)^5\left(6-5\beta\left(\frac{B}{H}\right)^2\right),\ \beta=1-\frac{H}{B}+\left(\frac{H}{B}\right)^2. \qquad (6)$$

Eine Überprüfung der Ableitung dieser Formeln durch die Verfasser ergab, dass der Ausdruck (5) leicht korrigiert werden muss. Er lautet für die zu lösende Aufgabe:

$$K_{eff}=\frac{1}{\frac{1}{E_F}+\frac{(B/H)^4R(\beta)}{10(d/H)^3E_M}}\ . \qquad (7)$$

Die numerische Berechnung des Gleichungssystems (32) – (37) wird mit normierten Größen für den Druck , die Dichte und die Geschwindigkeit durchgeführt, die mit den dimensionsbehafteten Größen wie folgt verknüpft sind:

$$\overline{p}=\frac{p}{K_{eff}},\ \overline{\rho}=\frac{\rho}{\rho_0},\ \overline{u}=\frac{u}{c_0},\ \overline{v}=\frac{v}{c_0},\ \overline{w}=\frac{w}{c_0},\ \overline{x}=\frac{x}{L},\ \overline{y}=\frac{y}{L},\ \overline{z}=\frac{z}{L},\ \overline{t}=\frac{t}{t_{ref}},\ c_0=\sqrt{\frac{K_{eff}}{\rho_0}}, \qquad (8)$$

Hier sind L – die Länge des spiralförmigen Kanals gemäß (23) und $t_{ref}=L/c_0$.

In normierter Form lautet die Zustandsgleichung (4)

$$\overline{p}=\ln\overline{\rho}. \qquad (9)$$

Aus der Gleichung (9) ist ersichtlich, dass der Druck in Gebieten, in denen die Dichte

$$\rho<\rho_0$$

wird, negativ werden kann.

Bezeichnen mit Ω ein Raumgebiet der Strömung innerhalb des Spiralkompensators. In jedem Punkt $(x,y,z)\in\Omega$ wird ein System rechtwinkliger kartesischer Koordinaten $\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}$ eingeführt, deren $\tilde{x}$ - Achse mit der Richtung der Tangente zur Zentrallinie der Spirale übereinstimmt und deren $\tilde{y}$ - und $\tilde{z}$ - Achsen so orientiert sind, dass das System $\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}$ ein rechtwinkliges Koordinatensystem bildet (siehe Bild 2) .

Bezeichnen mit $\vec{l}=(l_1,l_2,l_3)$ den Einheitsvektor der Tangente zur $\tilde{x}$-Achse mit den Koordinaten l_1, l_2, l_3 im System der ursprünglichen kartesischen Koordinaten x, y, z . Die Anfangsbedingungen in diesem System lauten:

$$\overline{p}(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z},0)=0;\ \overline{u}=q^0l_1,\ \overline{v}=q^0l_2,\ \overline{w}=q^0l_3;\overline{\rho}(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z},0)=1,\ (\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z})\in\Omega, \qquad (10)$$

wobei q^0 – die normierte Geschwindigkeit der Flüssigkeit ist, die sich aus dem geforderten Durchfluss Q_0 und dem freien Strömungsquerschnitt $A=B_1H_1$ ergibt:

$$q^0 = Q_0 / (A \cdot c_0). \tag{11}$$

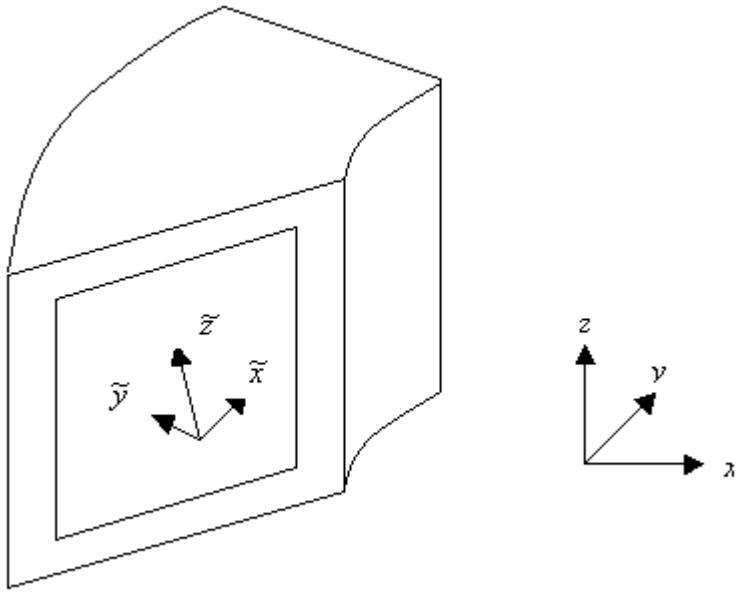


Bild 2: Örtliches Koordinatensystem $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ im Kanal

Als Randbedingungen am Eingang des spiralförmigen Kompensators, d.h. auf seiner unteren Seite in Richtung des drehschlagenden Bohrhammers, werden zwei Varianten für den Druckverlauf $P_0(t)$ betrachtet:

1. Glatte periodische Funktion

$$P_0(t) = \frac{1}{2}\left[p_{\min} + p_{\max} + \left(p_{\max} - p_{\min}\right) \sin\left(\overline{\omega}\, t - \frac{\pi}{2}\right)\right] . \tag{12}$$

2. Periodische Sprungfunktion

$$P_0(t) = \frac{1}{2}\left[p_{\min} + p_{\max} + \left(p_{\max} - p_{\min}\right) sign\left(\sin\left(\overline{\omega}\, t - \frac{\pi}{2}\right)\right)\right] . \tag{13}$$

Die Werte für $p_{\min}$ und $p_{\max}$ ($0 < p_{\min} < p_{\max}$), d.h. die minimalen und maximalen Werte des Druckes am Eingang des spiralförmigen Kanals, sind vom konkreten Typ des betrachteten drehschlagenden Bohrhammers abhängig (z.B. $p_{\min}$ = 0,2 MPa und $p_{\max}$ = 30 MPa). In diesen Gleichungen sind

$\overline{\omega}$ - die Winkelgeschwindigkeit, $\overline{\omega} = 2\pi f$, und

f - die Frequenz der Druckschwankungen (z.B. 30 Hz).

Die Randbedingungen am oberen Ende der Spirale werden, wie im Pkt. 6 noch gezeigt wird, in Abhängigkeit von den dort vorhanden Strömungsverhältnissen bestimmt.

Die Randbedingungen an den inneren Wänden des Spiralkompensators lauten:

$$v_n = 0, \quad \partial p/\partial n = 0, \tag{14}$$

wobei n – die Normale zur Wand und v_n – die resultierende Normale des Geschwindigkeitsvektors zur Wand sind.

In kompakter Schreibweise lauten die Gleichungen (1) und (2):

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F(U)}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G(U)}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H(U)}}{\partial z} = \mathbf{R(U)}, \tag{15}$$

wo

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \end{pmatrix}, \ \mathbf{F(U)} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \end{pmatrix}, \ \mathbf{G(U)} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \end{pmatrix}, \ \mathbf{H(U)} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R(U)} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\lambda\rho}{2D} |\vec{v}| u \\ -\frac{\lambda\rho}{2D} |\vec{v}| v \\ -\frac{\lambda\rho}{2D} |\vec{v}| w - \rho g \end{pmatrix} \tag{16}$$

sind.

4.2 Gleichungen für die Fluidströmung in krummlinigen Koordinaten

Weil die Wände des spiralförmigen Kanals im starken Maße gekrümmt sind, ist die Berechnung der Flüssigkeitsströmung im kartesischen Koordinatensystem x, y, z auf Grund des Auftretens unvollständiger Gitterelemente in Wandnähe mit großen Schwierigkeiten verbunden. Wird der Raum innerhalb des Kanals mit einem gleichförmigen rechteckigen Rechennetz diskretisiert, dessen Linien parallel zu den kartesischen Koordinaten x, y, z liegen, dann stimmen offensichtlich diese Linien nicht mit den gekrümmten Linien der Wände überein. Auf die damit verbundenen Probleme (Berechnung unvollständiger Gitterelemente und der Randbedingungen an den Wänden) wird in [7,32] ausdrücklich hingewiesen.

Aus diesen Gründen werden in dieser Arbeit die Gleichungen für die Beschreibung der Flüssigkeitsströmung in die gekrümmten Koordinaten ξ, η, ζ transformiert, und zwar so, dass der Ausgangsraum Ω in kartesischen Koordinaten x, y, z in ein Parallelepiped P im Raum mit den gekrümmten Koordinaten ξ, η, ζ umgewandelt wird.

Dabei wird zunächst unterstellt, das folgende sich gegenseitig entsprechenden eindeutigen Abbildungen existieren:

$$x = x(\xi, \eta, \zeta), y = y(\xi, \eta, \zeta), z = z(\xi, \eta, \zeta), \quad (\xi, \eta, \zeta) \in P. \tag{17}$$

Die Strömungsgleichungen (1) und (2) in den krummlinigen Koordinaten ξ, η, ζ lauten dann [32 – 35]:

$$\frac{\partial \mathbf{U}J}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{\mathbf{F}}}{\partial \xi} + \frac{\partial \widehat{\mathbf{G}}}{\partial \eta} + \frac{\partial \widehat{\mathbf{H}}}{\partial \zeta} = J\mathbf{R}(\mathbf{U}) \quad . \tag{18}$$

Hier ist J – die Jacobi – Matrix für die Transformation (17)

$$J = x_\xi (y_\eta z_\zeta - y_\zeta z_\eta) - y_\xi (x_\eta z_\zeta - x_\zeta z_\eta) + z_\xi (x_\eta y_\zeta - y_\eta x_\zeta), \tag{19}$$

mit den partiellen Ableitungen

$x_\xi, y_\xi, z_\xi, x_\eta, y_\eta, z_\eta, x_\zeta, y_\zeta, z_\zeta$, z.B. $z_\eta = \partial z(\xi, \eta, \zeta)/\partial\eta$ usw.;

$$\widehat{\mathbf{F}} = J\xi_x \mathbf{F} + J\xi_y \mathbf{G} + J\xi_z \mathbf{H},\ \widehat{\mathbf{G}} = J\eta_x \mathbf{F} + J\eta_y G + J\eta_z H,\ \widehat{\mathbf{H}} = J\zeta_x \mathbf{F} + J\zeta_y \mathbf{G} + J\zeta_z \mathbf{H}, \tag{20}$$

wobei **F, G, H**, die Spaltenvektoren sind, die aus den Formeln (16) bestimmt werden.

Die metrischen Größen $\xi_x, \xi_y, \ldots, \zeta_z$, welche in (20) eingehen, können aus den Ableitungen x_ξ, $x_\eta, \ldots, z_\xi$ mit Hilfe folgender Formeln [33-35] bestimmt werden:

$$\begin{aligned} &\xi_x = (y_\eta z_\zeta - y_\zeta z_\eta)/J, \quad \xi_y = (z_\eta x_\zeta - x_\eta z_\zeta)/J, \quad \xi_z = (x_\eta y_\zeta - y_\eta x_\zeta)/J, \\ &\eta_x = (z_\xi y_\zeta - y_\xi z_\zeta)/J, \quad \eta_y = (x_\xi z_\zeta - x_\zeta z_\xi)/J, \quad \eta_z = (y_\xi x_\zeta - x_\xi y_\zeta)/J, \\ &\zeta_x = (y_\xi z_\eta - z_\xi y_\eta)/J, \quad \zeta_y = (x_\eta z_\xi - x_\xi z_\eta)/J, \quad \zeta_z = (x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta)/J. \end{aligned} \tag{21}$$

Für die Gewährleistung einer eindeutigen Transformation (17) muss die Bedingung $J \neq 0$ für alle $(\xi, \eta, \zeta) \in P$ erfüllt sein.

Die expliziten Ausdrücke der Funktionen $x(\xi, \eta, \zeta)$, $y(\xi, \eta, \zeta)$, $z(\xi, \eta, \zeta)$, welche in die Transformationsgleichungen (17) eingehen, können nun für den Fall eines spiralförmigen Kanals abgeleitet werden.

Dazu wird eine schraubenförmige Linie betrachtet, die räumlich auf der Oberfläche eines kreisförmigen Zylinders verläuft. Die Parametergleichungen für diese Linie lauten [36]:

$$x_0(s) = a \cdot \cos(s),\ y_0(s) = -a \cdot \sin(s),\ z_0(s) = c_1 \cdot s,\ s_{\min} \le s \le s_{\max} \ , \tag{22}$$

wobei

- s - die Länge des Bogens der Kurve;
- a - der Radius der zylindrischen Kurve und
- c_1 - ein Koeffizient, der noch definiert wird,

sind.

Im folgenden wird diese Linie als zentrale Linie des Spiralkompensators mit einem rechtwinkligen Strömungsquerschnitt betrachtet. D.h. , die Linie (22) ist geometrischer

Schnittpunkt der Diagonalen des rechteckigen Querschnitts, der in der Ebene s = const erhalten wird. Die Größe für den Radius a muss deshalb die Bedingung $a > B/2$ erfüllen.

Bezeichnen α als den Winkel zwischen der Tangente der Linie (22) und der Achse *Oz*, α = const > 0, $0 < \alpha < \pi/2$ in positiver Richtung. Außerdem sei $\overline{H}$ die Größe des äußeren Querschnitts des spiralförmigen Kanals in Richtung der Achse *Oz* in der Ebene, durch welche die Achse *Oz* verläuft. Aus der einfachen geometrischen Struktur folgt dann:

$$\overline{H} = \frac{H}{\sin\alpha}.$$

In den praktischen dreidimensionalen Berechnungen der Flüssigkeitsströmung im spiralförmigen Kanal ist die Größe $\overline{H}$ gegeben. Aus der Gleichung $H = \overline{H}\sin\alpha.$ wird dann H bestimmt.

Die Ausdrücke für die konstanten Größen $s_{\min}$, $s_{\max}$ und c_1, welche in Gleichung (22) eingehen, wurden bereits in [3] unter Berücksichtigung der konstruktiven Grenzen des Spiralkompensators abgeleitet. Sie lauten:

$$c_1 = \frac{\Delta z}{2\pi}, \quad s_{\min} = \frac{\pi\overline{H}}{\Delta z}, \quad s_{\max} = \frac{(z_{\max} - 0{,}5\overline{H})}{c_1}, \quad \sin\alpha = \frac{a}{\sqrt{a^2 + c_1^2}}.$$

Hier ist $z_{\max}$ - die Höhe des Spiralkompensators längs der *z*-Achse (die *z*-Achse fällt mit der Achse des Zylinder mit dem Radius a zusammen, auf dem die Spirale (22) liegt), *B* – die äußere horizontale Abmessung des Querschnitts des spiralförmigen Kanals (siehe Bild 1) und Δz - der gegebene vertikale Abstand zwischen dem Anfang und dem Ende einer Windung, wobei $\Delta z \geq \overline{H}$ gilt.

Die Gesamtlänge *L* des spiralförmigen Kanals folgt aus Gleichung (22) mit

$$L = \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} \sqrt{\left[\frac{dx_0(s)}{ds}\right]^2 + \left[\frac{dy_0(s)}{ds}\right]^2 + \left[\frac{dz_0(s)}{ds}\right]^2}\, ds = \sqrt{a^2 + c_1^2} \cdot (s_{\max} - s_{\min}). \qquad (23)$$

Mit Hilfe von Methoden der analytischen Geometrie werden die gesuchten Transformationen (17) für den Fall eines spiralförmigen Kanals abgeleitet. Sie lauten:

$$x = \left(B_1\eta + a - \frac{B_1}{2}\right)\cos\xi, \; y = -\left(B_1\eta + a - \frac{B_1}{2}\right)\sin\xi, \; z = \overline{H}_1\zeta + c_1\xi - \frac{\overline{H}_1}{2},$$

$$s_{\min} \leq \xi \leq s_{\max}, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \zeta \leq 1. \qquad (24)$$

Die Jacobi – Matrix für die Transformation (17) und (24), die im Ergebnis des Einsetzens der Formel (24) in (19) erhalten wird, nimmt damit folgende Form an:

$$J = B_1\overline{H_1}\left[a + B_1\left(\eta - 0{,}5\right)\right]. \qquad (25)$$

Der Multiplikator $a + B_1(\eta - 0,5)$ erfüllt die Ungleichung

$$a - 0,5\,B_1 \le a + B_1(\eta - 0,5) \le a + 0,5\,B_1. \tag{26}$$

Wegen den Ungleichungen $a > B/2 > B_1/2,$

folgt aus (26), dass die Bedingung $J > 0$ stets erfüllt ist. Damit ist bewiesen, dass die Transformation von (17) zu (24) gegenseitig eindeutig ist.

Dank der analytischen Ausdrücke (24) für die Funktionen $x(\xi, \eta, \zeta)$, $y(\xi, \eta, \zeta)$, $z(\xi, \eta, \zeta)$ können auch die analytischen Ausdrücke für alle metrischen Ableitungen $\xi_x, \xi_y, \ldots, \zeta_z$, die in (20) eingehen, berechnet werden Die nachstehend aufgeführten metrischen Ableitungen wurden mit Hilfe des Programms *Mathematica* symbolisch berechnet (siehe Anlage 2):

$$\xi_x = -\frac{\sin\xi}{a + B_1(\eta - 0,5)}\ ,\ \xi_y = -\frac{\cos\xi}{a + B_1(\eta - 0,5)}\ ,\ \xi_z = 0;$$

$$\eta_x = \frac{\cos\xi}{B_1}\ ,\ \eta_y = -\frac{\sin\xi}{B_1}\ ,\ \eta_z = 0; \tag{27}$$

$$\zeta_x = \frac{c_1 \sin\xi}{\bar{H}_1\left[a + B_1(\eta - 0,5)\right]}\ ,\ \zeta_y = \frac{c_1 \cos\xi}{\bar{H}_1\left[a + B_1(\eta - 0,5)\right]}\ ,\ \zeta_z = \frac{1}{\bar{H}_1}\ .$$

Durch Einsetzen der Ergebnisse (27) in die Gleichungen

$$\xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi + \xi_z z_\xi = 1, \quad \eta_x x_\eta + \eta_y y_\eta + \eta_z z_\eta = 1, \quad \zeta_x x_\zeta + \zeta_y y_\zeta + \zeta_z z_\zeta = 1. \tag{28}$$

wird die Richtigkeit der Lösung für die Ableitungen $x_\xi, y_\xi, \ldots, z_\zeta$ nachgewiesen.

Abschließend werden noch die Randbedingungen an den Wänden des spiralförmigen Kanals in krummlinigen Koordinaten berechnet.

- ***Untere Wand des Kanals***

Dieser Wand entspricht der Wert $\zeta = 0$ der krummlinigen Koordinaten ζ in (24). Die Parametergleichungen für die untere Wand des Kanals lauten:

$$\begin{aligned} &x = \left(B_1\eta + a - \frac{B_1}{2}\right)\cos\xi,\ \ y = -\left(B_1\eta + a - \frac{B_1}{2}\right)\sin\xi, \\ &z = c_1\xi - \frac{\bar{H}_1}{2},\ \ s_{\min} \le \xi \le s_{\max},\ \ 0 \le \eta \le 1. \end{aligned} \tag{29}$$

Für die Berechnung der Randbedingung gemäß Gleichung (14) wird die Formel $v_n = \vec{v} \cdot \vec{n}$, wo $\vec{n}$ der Einheitsvektor zur unteren Wand ist, genutzt. Die Gleichung für diese Wand lautet nach (29) $x = x(\xi, \eta)$, $y = y(\xi, \eta)$, $z = z(\xi)$. Der Einheitsvektor zu dieser Wand berechnet sich aus der Formel [36]:

$$\vec{n} = \frac{\frac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\eta)}\vec{i} + \frac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\eta)}\vec{j} + \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)}\vec{k}}{\sqrt{\left[\frac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\eta)}\right]^2 + \left[\frac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\eta)}\right]^2 + \left[\frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)}\right]^2}},$$

wobei

$$\frac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\eta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \end{vmatrix}, \quad \frac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\eta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \\ \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \end{vmatrix}, \quad \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix}. \tag{30}$$

sind.

Die Berechnung der Determinante (30) auf dem Computer ergibt die Formeln:

$$\frac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\eta)} = B_1 c_1 \sin\xi, \ \frac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\eta)} = B_1 c_1 \cos\xi, \ \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} = B_1\left[a + B_1(\eta - 0{,}5)\right];$$

$$\sqrt{\left[\frac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\eta)}\right]^2 + \left[\frac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\eta)}\right]^2 + \left[\frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)}\right]^2} = \frac{1}{2} B_1 \sqrt{\left(B_1 - 2a - 2B_1\eta\right)^2 + 4c_1^2}.$$

Aus der Bedingung $v_n = 0$ folgt für die untere Wand:

$$uc_1 \sin\xi + vc_1 \cos\xi + w[a + B_1(\eta - 0{,}5)] = 0. \tag{31}$$

Die Randbedingung $\partial p/\partial n = 0$ auf der unteren Wand wird mit Hilfe der Formel $\partial p/\partial n = \nabla p \cdot \vec{n}$ abgeleitet und führt zu dem Ergebnis:

$$\frac{\partial p}{\partial x} c_1 \sin\xi + \frac{\partial p}{\partial y} c_1 \cos\xi + \frac{\partial p}{\partial z} \cdot \left[a + B_1(\eta - 0.5)\right] = 0. \tag{32}$$

Die Form der Formel (32) ist für die Berechnungen einer Flüssigkeitsströmung in krummlinigen Koordinaten nicht besonders bequem, weil sie noch Ableitungen des Druckes in kartesischen Koordinaten enthält. Deshalb werden die Ableitungen p_x, p_y, p_z in die Ableitungen p_ξ, p_η, p_ζ überführt. Wenn $\tilde{p}(\xi,\eta,\zeta) = p(x(\xi,\eta,\zeta), y(\xi,\eta,\zeta), z(\xi,\eta,\zeta), t)$ ist, dann gilt auf Grund der bereits nachgewiesenen Eindeutigkeit der Transformation (17) die Identität:

$$p(x,y,z,t) \equiv \tilde{p}(\xi(x,y,z), \eta(x,y,z), \zeta(x,y,z), t). \tag{33}$$

Beide Seiten dieser Identität nach x differenziert ergeben:

$$p_x = \tilde{p}_\xi + \tilde{p}_\eta \eta_x + \tilde{p}_\zeta \zeta_x = \tilde{p}_\xi \cdot \frac{-\sin\xi}{a + B_1(\eta - 0{,}5)}$$
$$+ \tilde{p}_\eta \cdot \frac{(2a - B_1 - 2B_1\eta)\cos\xi}{B_1\left[2a + B_1(2\eta - 1)\right]} + \tilde{p}_\zeta \frac{c_1 \cos\xi}{\overline{H}_1\left[a + B_1(\eta - 0{,}5)\right]}.$$

Mit Hilfe der Formel (27) erhält man analoge Ausdrücke für die Ableitungen p_y und p_z. In

Gleichung (32) eingesetzt folgt daraus

$$c_1 \bar{H}_1 p_\xi + p_\zeta [c_1^2 + (a + B_1(\eta - 0{,}5))^2] = 0, \tag{34}$$

bzw. nach p_ζ aufgelöst

$$p_\zeta = \frac{c_1 \bar{H}_1 p_\xi}{c_1^2 + \left[a + B_1(\eta - 0{,}5)\right]^2} \ . \tag{35}$$

Wird in Gleichung (24) $c_1 = 0$ gesetzt, so wächst das Gebiet im inneren Torus, das mit (24) beschrieben wird und dessen obere und untere Oberfläche parallel zur Ebene z = 0 liegen. In diesem Fall geht offensichtlich die Bedingung $\partial p/\partial n = 0$ auf dieser Oberfläche in die Bedingung $\partial p/\partial z = 0$ über. Aus Gleichung (24) folgt für $c_1 = 0$:

$$\frac{\partial p}{\partial \zeta} = \frac{\partial p}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \zeta} = \bar{H}_1 \frac{\partial p}{\partial z},$$

d.h. $\partial p/\partial \zeta = 0$ auf der oberen und unteren Oberfläche des Torus. Genau dieses Ergebnis folgt für $c_1 = 0$ aus Formel (35), was damit auch ihre Richtigkeit bestätigt.

- ***Obere Wand des Kanals***

Da die oberen und unteren Wände des Kanals zueinander parallel sind, müssen auch die Normalvektoren dieser Wände zueinander parallel sein. Deshalb gelten die oben erhaltenen Formeln (31) und (35) auch für die obere Wand, auf der natürlich $\zeta = 1$ anzusetzen ist.

- ***Vertikale Wand des Kanals in unmittelbarer Nähe zur z-Achse***

Dieser Wand des Kanals entspricht dem Wert $\eta = 0$ der krummlinigen Koordinate η in (24). Damit lauten die Parametergleichungen der vertikalen Wand in unmittelbarer Nähe zur z-Achse:

$$x = \left(a - \frac{B_1}{2}\right)\cos\xi,\ y = -\left(a - \frac{B_1}{2}\right)\sin\xi,\ z = \bar{H}_1\zeta + c_1\xi - \frac{\bar{H}_1}{2},\ s_{\min} \le \xi \le s_{\max},\ 0 \le \zeta \le 1.$$

Der Einheitsvektor $\vec{n}$ zu dieser Wand berechnet sich aus der Formel:

$$\vec{n} = \frac{\dfrac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\zeta)}\vec{i} + \dfrac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\zeta)}\vec{j} + \dfrac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\zeta)}\vec{k}}{\sqrt{\left[\dfrac{\partial(y,z)}{\partial(\xi,\zeta)}\right]^2 + \left[\dfrac{\partial(z,x)}{\partial(\xi,\zeta)}\right]^2 + \left[\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\zeta)}\right]^2}} = \cos\xi \cdot \vec{i} - \sin\xi \cdot \vec{j}.$$

Aus der Bedingung $v_n = 0$ folgt auf der Wand $\eta = 0$ die Gleichung

$$u \cos\xi - v \sin\xi = 0. \tag{36}$$

In Analogie zum Fall untere Wand kann auch die Randbedingung $\partial p/\partial n = 0$ auf der Wand

$\eta = 0$ abgeleitet werden. Sie lautet:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = \nabla p \cdot \vec{n} = \frac{\partial p}{\partial x}\cos\xi - \frac{\partial p}{\partial y}\sin\xi = \frac{1}{B_1}\frac{\partial p}{\partial \eta} = 0.$$

Daraus folgt schließlich dass für die Randbedingung $\partial p/\partial n = 0$ auf der vertikalen Wand $\eta = 0$ in krummlinigen Koordinaten gilt:

$$\frac{\partial p}{\partial \eta} = 0. \tag{37}$$

- ***Vertikale Wand des Kanals in der größten Entfernung zur z-Achse***

Auf dieser Wand ist $\eta = 1$. Weil diese Wand zur Wand $\eta = 0$ parallel ist, gelten für die Randbedingungen auf ihr ebenfalls die Formeln (36) und (37), wobei jedoch $\eta = 1$ zu setzen ist.

4.3 Einige Eigenschaften der Lösung

Das Gleichungssystem (18), welches die dreidimensionale instationäre Flüssigkeitsströmung beschreibt, besitzt einen komplizierten nichtlinearen Charakter. Unabhängig davon können für die betrachtete konkrete Aufgabe der Strömung einer barotropen Flüssigkeit einige Eigenschaften der Lösung dieses Systems abgeleitet werden. Für die erfolgreiche numerische

Lösung muss ein Differenzen – Verfahren eingesetzt werden, das sowohl dies Eigenschaften berücksichtigt als auch seine Ausführung gewährleistet.

4.3.1 Eigenwerte der Jacobi - Matrix

Im Bereich einer stetigen Strömung ist das System der Gleichungen (18) äquivalent zu dem folgenden nichtdivergenten System:

$$\frac{\partial \mathbf{U}J}{\partial t} + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{U},\xi,\eta,\zeta)\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \xi} + \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{U},\xi,\eta,\zeta)\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \eta} + \hat{\mathbf{C}}(\mathbf{U},\xi,\eta,\zeta)\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \zeta} = J\mathbf{R}(\mathbf{U}), \tag{38}$$

wobei

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{U},\xi,\eta,\zeta)=\frac{\partial\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{U})}{\partial\mathbf{U}}=J(\xi_x\mathbf{A}+\xi_y\mathbf{B});\quad \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{U},\xi,\eta,\zeta)=\frac{\partial\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{U})}{\partial\mathbf{U}}=J(\eta_x\mathbf{A}+\eta_y\mathbf{B});$$
$$\hat{\mathbf{C}}(\mathbf{U},\xi,\eta,\zeta)=\frac{\partial\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{U})}{\partial\mathbf{U}}=J(\zeta_x\mathbf{A}+\zeta_y\mathbf{B}+\zeta_z\mathbf{C}) \tag{39}$$

und

$$\mathbf{A}(\mathbf{U})=\frac{\partial\mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial\mathbf{U}},\quad \mathbf{B}(\mathbf{U})=\frac{\partial\mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial\mathbf{U}},\quad \mathbf{C}(\mathbf{U})=\frac{\partial\mathbf{H}(\mathbf{U})}{\partial\mathbf{U}}. \tag{40}$$

sind.

Für die weitere Betrachtung ist es zweckmäßig folgende Bezeichnungen einzuführen:

$$\hat{u}=\xi_x u+\xi_y v;\quad \hat{v}=\eta_x u+\eta_y v;\quad \hat{w}=\zeta_x u+\zeta_y v+\zeta_z w. \tag{41}$$

Da die Matrizen $\hat{\mathbf{A}}$, $\hat{\mathbf{B}}$ und $\hat{\mathbf{C}}$ in (39) lineare Kombinationen der Matrizen **A**, **B**, **C** (40) sind, können die Eigenwerte $\lambda_\mu^{(\nu)}$, $\nu = 1, 2, 3$, $\mu = 1, 2, 3, 4$, der Matrizen $\hat{\mathbf{A}}$ ($\nu = 1$), $\hat{\mathbf{B}}$ ($\nu = 2$), $\hat{\mathbf{C}}$ ($\nu = 3$) gemäß [37] durch folgende Formeln ausgedrückt werden:

Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$:

$$\lambda_1^{(1)}=\lambda_2^{(1)}=\hat{u},\quad \lambda_3^{(1)}=\lambda_1^{(1)}-c\,|\nabla\xi|,\quad \lambda_4^{(1)}=\lambda_1^{(1)}+c\,|\nabla\xi|, \tag{42}$$

wobei $|\nabla\xi|=\left(\xi_x^2+\xi_y^2\right)^{0.5}$ und c - die Schallgeschwindigkeit (in normierter Form wird sie unter Berücksichtigung von (9) mit der Formel $c=\rho^{-0.5}$ berechnet) sind.

Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{B}}$:

$$\lambda_1^{(2)}=\lambda_2^{(2)}=\hat{v},\quad \lambda_3^{(2)}=\lambda_1^{(2)}-c\,|\nabla\eta|,\quad \lambda_4^{(2)}=\lambda_1^{(2)}+c\,|\nabla\eta|, \tag{43}$$
$$|\nabla\eta|=\left(\eta_x^2+\eta_y^2\right)^{0,5}$$

Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{C}}$:

$$\lambda_1^{(3)}=\lambda_2^{(3)}=\hat{w},\quad \lambda_3^{(3)}=\lambda_1^{(3)}-c\,|\nabla\zeta|,\quad \lambda_4^{(3)}=\lambda_1^{(3)}+c\,|\nabla\zeta|, \tag{44}$$
$$|\nabla\zeta|=\left(\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2\right)^{0,5}.$$

Zunächst wird das Vorzeichen der Größe $\hat{u}$ analysiert. Es sei $U_0=\sqrt{u^2+v^2}$ und $q=\sqrt{u^2+v^2+w^2}$. Es ist klar, dass $U_0 \le q$ gilt. Damit kann u und v wie folgt geschrieben werden: $u = U_0 \cos\beta$, $v = U_0 \sin\beta$, wobei

$$\cos\beta=\frac{u}{\sqrt{u^2+v^2}}$$

ist. Außerdem gilt

$$\lambda_1^{(1)} = \lambda_2^{(1)} = \hat{u} = U_0(\xi_x \cos\beta + \xi_y \sin\beta) = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}\, U_0 \cos(\beta - \beta_1), \qquad (45)$$

mit $\cos\beta_1 = \xi_x / |\nabla\xi|$. Typische Spiralkompensatoren besitzen stets mehrere Spiralwindungen. Weil an den vertikalen Wänden die Strömung der Flüssigkeit tangential zur Richtung der Wand verläuft, folgt aus (44), dass die Eigenwerte $\lambda_1^{(1)}$ und $\lambda_2^{(1)}$ ihre Vorzeichen an den Rändern des räumlichen Rechengebietes ändern können. Zu den gleichen Schlussfolgerungen kann man auch kommen, wenn die analogen Eigenwerte $\lambda_1^{(2)}$, $\lambda_2^{(2)}$ und $\lambda_1^{(3)}$, $\lambda_2^{(3)}$ betrachtet werden.

Es lässt sich beweisen, dass die für $\nu = 1, 2, 3$ stets die Beziehung $\lambda_3^{(\nu)} < 0$ und $\lambda_4^{(\nu)} > 0$ gilt. Tatsächlich kann der Ausdruck für $\lambda_3^{(1)}$ wie folgt geschrieben werden:

$$\lambda_3^{(1)} = c\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}\left[\frac{U_0}{c}\cos(\beta - \beta_1) - 1\right] \le c\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}(M - 1) < 0,$$

wobei $M = q/c$ – die Machzahl ($M < 0.1$) in der betrachteten hydrodynamischen Aufgabe ist. Analog ist

$$\lambda_4^{(1)} = c\,|\nabla\xi|\left[\frac{U_0}{c}\cos(\beta - \beta_1) + 1\right] \ge c\,|\nabla\xi|\left(1 - \frac{U_0}{c}\right) \ge c\,|\nabla\xi|\,(1 - M) > 0.$$

4.3.2. Dichte- und Druckkonstanz im Gebiet vor der Stoßwellenfront

Mit Hilfe der Größen (41) können die Ausdrücke für die Stromfunktionen (20) wie folgt geschrieben werden (siehe auch [33 – 35]):

$$\hat{\mathbf{F}} = J\begin{pmatrix} \rho\hat{u} \\ \rho\hat{u}u + \xi_x p \\ \rho\hat{u}v + \xi_y p \\ \rho\hat{u}w + \xi_z p \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathbf{G}} = J\begin{pmatrix} \rho\hat{v} \\ \rho\hat{v}u + \eta_x p \\ \rho\hat{v}v + \eta_y p \\ \rho\hat{v}w + \eta_z p \end{pmatrix}; \quad \hat{H} = J\begin{pmatrix} \rho\hat{w} \\ \rho\hat{w}u + \zeta_x p \\ \rho\hat{w}v + \zeta_y p \\ \rho\hat{w}w + \zeta_z p \end{pmatrix}. \qquad (46)$$

Bezeichnen mit $\Lambda_{\xi\eta\zeta}$ die Differenzenapproximation des Operators für die räumlichen Differentiale in (18), d.h.

$$\Lambda_{\xi\eta\zeta}\mathbf{U}(\xi,\eta,\zeta,t) \approx -\frac{\partial\hat{\mathbf{F}}}{\partial\xi} - \frac{\partial\hat{\mathbf{G}}}{\partial\eta} - \frac{\partial\hat{\mathbf{H}}}{\partial\zeta}.$$

In den Berechnungen wird das explizite Differenzen – Verfahren

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\tau} = \Lambda_{\xi\eta\zeta}\mathbf{U}^n + J\mathbf{R}(\mathbf{U}^n), \qquad (47)$$

eingesetzt, wo τ – der Zeitschritt des Differenzen – Verfahrens und n – die Nummer des

Zeitschritts (n = 0,1,2,…) sind. Bestimmen den Ausdruck für $\hat{u}, \hat{v}, \hat{w}$ bei t = 0 mit Hilfe der Anfangsbedingungen (10) und der Formeln (41) und (27). Außerdem können die Komponenten l_1, l_2, l_3 des Einheitsvektors, der die Liniengruppen η = const, ζ = const leicht tangiert, mit folgenden Formeln (24) bestimmt werden:

$$l_1 = -(d_1/d_2)\sin\xi, \quad l_2 = -(d_1/d_2)\cos\xi, \quad l_3 = c_1/d_2,$$

wobei $d_1 = a + B_1(\eta - 0{,}5)$, $d_2 = (d_1^2 + c_1^2)^{0,5}$ sind. Mit (41) und (10) gilt dann :

$$\hat{u}(\xi,\eta,\zeta,0) = \xi_x u + \xi_y v = q^0(\xi_x l_1 + \xi_y l_2) = (q^0/d_2)(\sin^2\xi + \cos^2\xi) = q^0/d_2 .$$

Unter Beachtung der Formel für J (25) folgt schließlich:

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(J\rho\,\hat{u}\right) = \frac{\partial}{\partial\xi}\left[\frac{B_1\bar{H}_1 d_1 q^0}{d_2}\right] = 0.$$

In Analogie ist:

$$\hat{v}(\xi,\eta,\zeta,0) = \eta_x u + \eta_y v = q^0(\eta_x l_1 + \eta_y l_2) = [q^0 d_1/(B_1 d_2)](-\cos\xi\sin\xi + \sin\xi\cos\xi) = 0,$$

und deshalb

$$\frac{\partial}{\partial\eta}\left[J\rho\,\hat{v}(\xi,\eta,\zeta,0)\right] = 0.$$

Und schließlich ist

$$\hat{w}(\xi,\eta,\zeta,0) = \zeta_x u + \zeta_y v + \zeta_z w = [q^0 c_1/(\bar{H}_1 d_2)]\left(-\sin^2\xi - \cos^2\xi + 1\right) = 0,$$

sodass

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[J\rho\hat{w}(\xi,\eta,\zeta,0)\right] = 0$$

ist.

Aus den Formeln (46) und (47) folgt, dass im gesamten Raumgebiet vor der ersten Stoßwellenfront die Beziehung $\rho^1 = \rho^0 = 1$ gilt. Aufgrund dessen, dass die Flüssigkeit als barotrop angenommen wird, bleibt der Druck p bei $t = \tau$ im ausgewiesenen Raumgebiet konstant.

Unter der folgerichtigen Annahme von 1, 2, ... in (47) lässt sich ableiten, dass der Druck und die Dichte in den Punkten (ξ, η, ζ) vor der ersten Stoßwellenfront in einem bestimmten Zeitintervall bis zu dem Moment, an dem diese den gegeben Punkt erreicht, konstant sind.

Damit die erste Stoßwellenfront, die sich von unten nach oben im Spiralkompensator bewegt, den oberen Ausgang erreicht, ist es notwendig einige Zehntausend Rechenschritte mit dem expliziten Differenzen – Verfahren durchzuführen (siehe auch [3]). Dabei ist es äußerst wichtig, dass im Gebiet vor der ersten Stoßwellenfront das Differenzen – Verfahren folgende Eigenschaft besitzt:

$$\Lambda_{\xi\eta\zeta}\mathbf{U}^n = 0. \qquad (49)$$

Es sei an dieser Stelle ausdrücklich darauf hingewiesen, dass sogar dann, wenn das ausgewählte Differenzen – Verfahren theoretisch diese Eigenschaft besitzt, in den praktischen Berechnungen mit einfacher Genauigkeit die Gleichung (49) nicht erfüllt wird, weil es zu einer Anhäufung von Rundungsfehlern kommt. Schon beim ersten Zeitschritt t führen diese Fehler zum Auftreten eines falschen ungleichmäßigen Strömungsbildes vor der Stoßwellenfront. Diese Ungleichmäßigkeiten verstärken sich mit der Zunahme der Zeitschritte und führen schon nach 200 bis 400 Schritten zu einer völligen Verzerrung des Strömungsbildes. Es hat sich als sehr nützlich erwiesen, eine Maschinenarithmetik mit zweifacher Genauigkeit in den numerischen Berechnungen mit dem Fortran-Programm zu verwenden. Die Größe der angehäuften Rundungsfehler war in diesem Fall während des gesamten Rechenprozesses sehr klein, sogar nach Ausführung von einigen Zehntausend Schritten.

4.3.3 Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes

Es sei $\mathbf{u} = (u, v, w)$. Gemäß Definition ist außerdem div $\mathbf{u} = u_x + v_y + w_z$. Für die weitere Betrachtung ist es zweckmäßig, die Anfangsbedingungen (10) in krummlinige Koordinaten zu transformieren. Sie lauten:

$$\overline{p}(\xi,\eta,\zeta,0) = 0; \overline{u}(\xi,\eta,\zeta,0) = q^0 l_1, \overline{v}(\xi,\eta,\zeta,0) = q^0 l_2, \overline{w}(\xi,\eta,\zeta,0) = q^0 l_3,$$
$$\overline{\rho}(\xi,\eta,\zeta,0) = 1, (\xi,\eta,\zeta) \in P.$$

Hier sind $\overline{u}(\xi,\eta,\zeta,0) = u(x(\xi,\eta,\zeta), y(\xi,\eta,\zeta), z(\xi,\eta,\zeta), 0)$ usw. Außerdem wird der Ausdruck für die Divergenz der Geschwindigkeit in Ausdrücke umgewandelt, die unter Nutzung der Formeln $u_x = \overline{u}_\xi \xi_x + \overline{u}_\eta \eta_x + \overline{u}_\zeta \zeta_x$, usw. nach den krummlinigen Koordinaten abgeleitete werden:

$$\text{div } \mathbf{u} = q^0 (l_{1\xi}\xi_x + l_{1\eta}\eta_x + l_{2\xi}\xi_y + l_{2\eta}\eta_y).$$

Für die Berechnung der Ableitungen $l_{1\xi}$, $l_{1\eta}$, $l_{2\xi}$, $l_{2\eta}$ werden die expliziten Ausdrücke für l_1 und l_2 verwendet, die im Pkt. 4.3.2 definiert sind. Mit Hilfe der Formel (27) folgt schließlich div $\mathbf{u} = 0$.

5. Krummliniges Gitter

Mit Hilfe der analytischen Formeln (24) lässt sich sehr leicht ein räumlich krummliniges Rechengitter im Gebiet Ω aufbauen. Dafür wird im Parallelepiped P, welches im Gebiet

$$P = \{(\xi, \eta, \zeta) |\ s_{min} \le \xi \le s_{max},\ \ 0 \le \eta \le 1,\ \ 0 \le \zeta \le 1\},$$

eindeutig bestimmt ist, ein gleichmäßiges Gitter nach folgender Rechenregel aufgebaut:

$$\xi_i = s_{min} + (i-1)\Delta\xi,\quad i = 1,\ldots, N_1;\ = (j-1)\Delta\eta,\ \ \eta_j = 1,\ldots,N_2;\ \ \zeta_k = (k-1)\Delta\zeta,\ k = 1,\ldots,N_3\ ,$$

wo $N_1 > 1$, $N_2 > 1$, $N_3 > 1$ – die Anzahl der entsprechenden Netzknoten in Richtung der Achsen ξ, η, ζ und $\Delta\xi$, $\Delta\eta$, $\Delta\zeta$ – die Schritte des gleichmäßigen Netzes längs der entsprechenden Achsen sind. Dabei gilt:

$$\Delta\xi = (s_{max} - s_{min})/(N_1 - 1)\ ,\ \ \Delta\eta = 1/(N_2 - 1),\ \ \Delta\zeta = 1/(N_3 - 1).$$

Ein beliebiger Netzknoten, definiert in P ist ein Punkt mit den Koordinaten (ξ_i, η_j, ζ_k). Im Raum mit den physikalischen Koordinaten (x, y, z) entspricht dieser Punkt dem Knoten $(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk})$, wobei

$$x_{ijk} = \left(B_1\eta_j + a - \frac{B_1}{2}\right)\cos\xi_i\ ,\ \ y_{ijk} = -\left(B_1\eta_j + a - \frac{B_1}{2}\right)\sin\xi_i\ \ ,\ \ z_{ijk} = \bar{H}_1\zeta_k + c_1\xi_i - \frac{\bar{H}_1}{2}, \qquad (50)$$

sind.

Es ist anzumerken, dass das aufgebaute krummlinige Gitter orthogonal ist. Die Bedingungen dafür lauten: $x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta + z_\xi z_\eta = 0,\ \ x_\xi x_\zeta + y_\xi y_\zeta + z_\xi z_\zeta = 0,\ \ x_\eta x_\zeta + y_\eta y_\zeta + z_\eta z_\zeta = 0$.

Werden in diese Beziehungen die Ausdrücke für die metrischen Ableitungen aus (24) eingesetzt, so wird offensichtlich, dass die Orthogonalität erfüllt ist.

Bild 5 gibt eine Vorstellung über das krummlinige Netz, das nach Formel (50) berechnet wurde. Aus dem Bild ist ersichtlich, dass die dargestellte Spirale aus 12 Windungen mit 13 Netzknoten/Windung längs der Achse ξ besteht. Es ist zu erkennen, dass dieses Netz auf der Oberfläche unzureichend stetig ist. Es ist demnach wünschenswert längs der ξ - Achse eine größere Anzahl von Knoten (mehr als 161) für diesen Spiralkompensator zu wählen.

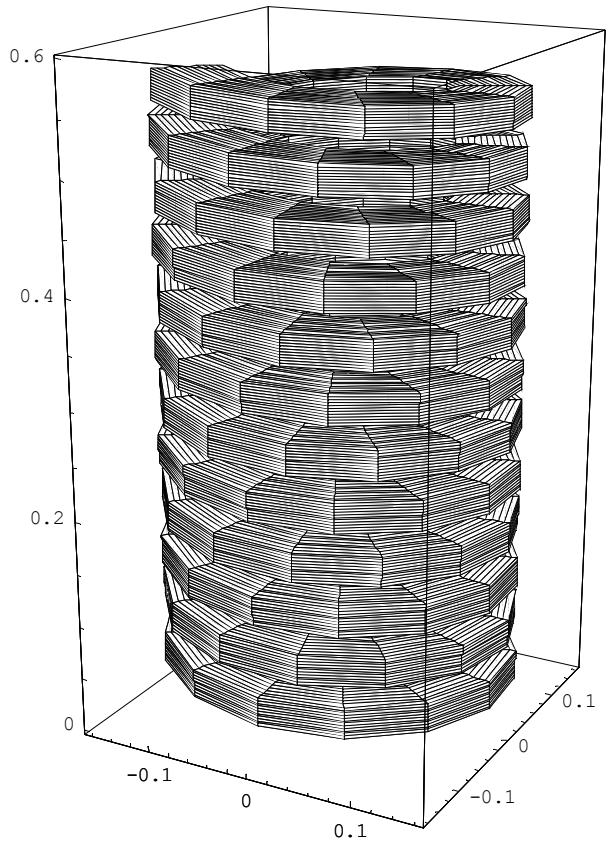


Bild 3: Krummliniges Netz auf der inneren Oberfläche der Spirale. Sichtbarer Bereich Ω bei $N_1 = 161$, $N_2 = 12$, $N_3 = 12$ (Größen in Meter)

6. Differenzen – Verfahren von Roe

Im Jahre 1959 wurde von S. K. Godunov [38] ein Differenzen – Verfahren für die numerische Integration von hyperbolischen Erhaltungssätzen vorgeschlagen. Das wesentlich Neue dieses Verfahrens ist die Lösung der Aufgabe durch Aufspaltung beliebiger Druckstöße, d.h. die Lösung der Riemannschen Aufgabe. Später hat P. L. Roe [24] eine etwas einfachere Variante für das Differenzen – Verfahrens von Godunov vorgeschlagen.

In der vorliegenden Arbeit wird die dreidimensionale numerische Berechnung der Flüssigkeitsströmung im Spiralkompensator mit einem an die konkreten Bedingungen angepassten Differenzen – Verfahren von Roe durchgeführt. Eine ausführliche Beschreibung dieses Verfahrens ist im Buch von E.F. Toro [25] zu finden. Im Pkt. 6.1 wird eine etwas einfachere Herleitung der Differenzengleichungen für das Roe - Verfahren gegeben als in [24, 25], im Pkt. 6.2 – die Formeln für die Berechnung der Mittel nach Roe auf einem beliebig krummlinigen Gitternetz.

6.1. Allgemeiner Aufbau des Differenzen – Verfahrens von Roe

Anhand des Systems von eindimensionalen partiellen hyperbolischen Differentialgleichung

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F(U)}}{\partial x} = 0, \tag{51}$$

wird gezeigt, wie das Differenzen – Verfahren von Roe abgeleitet wird.

Dabei wird angenommen, dass das Gleichungssystem (51) folgende Anfangs- und Randbedingungen erfüllt:

$$\mathbf{U}(x,0) = \mathbf{U}^{(0)}(x); \quad \mathbf{U}(0,t) = \mathbf{U}_l(t), \quad \mathbf{U}(L,t) = \mathbf{U}_r(t),$$

wo $[0,L]$ - das gegebene Integrationsintervall auf der x – Achse und $\mathbf{U}^{(0)}$, $\mathbf{U}_l$, $\mathbf{U}_r$ - die gegebenen Vektorfunktionen sind.

Die stetigen Lösungen des Systems (51) sind dem folgenden nichtdivergenten System äquivalent:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A(U)}\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \tag{52}$$

wobei **A(U)** – die Jacobi - Matrix,

$$\mathbf{A(U)} = \frac{\partial \mathbf{F(U)}}{\partial \mathbf{U}},$$

ist.

Aus der hyperbolischen Eigenschaft des Systems (51) folgt, dass die Matrix **A** m substantielle Eigenwerte λ_k und m linear unabhängige Richtungsvektoren $\mathbf{R}^{(k)}$, $k = 1,\ldots,m$ besitzt. Hier ist m die Anzahl der Gleichungen im System (51), wobei $m > 1$ ist.

Des weiteren wird angenommen, das die Matrix **A(U)** diagonalisierbar ist, d.h., wie folgt geschrieben werden kann:

$$\mathbf{A(U)} = \mathbf{R\Lambda R}^{-1}, \tag{53}$$

In (53) ist $\mathbf{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_m)$ und die Spalten $\mathbf{R}^{(k)}$ der Matrix **R** sind die o.g. Richtungsvektoren der Matrix **A**, die den Eigenwerten λ_k, d.h.

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_m \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \left(R^{(1)},\ldots,R^{(m)}\right).$$

entsprechen.

Die Existenz der invertierbaren Matrix $\mathbf{R}^{-1}$ macht die Einführung einer neuen Menge von

abhängigen Variablen $\mathbf{W} = (w_1, w_2, \ldots, w_m)^T$ durch die Bildung von

$$\mathbf{W} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{U} \quad \text{oder} \quad \mathbf{U} = \mathbf{R}\mathbf{W}. \tag{54}$$

möglich.

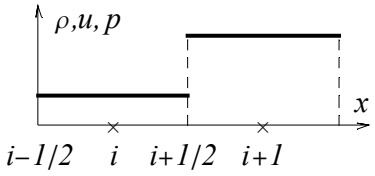


Bild 4: Berechnung der Aufspaltung von Druckstößen

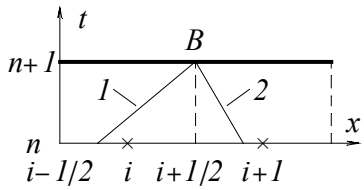


Bild 5: Charakteristik (66), welche durch den Punkt $(x_{i+1/2}, t_{n+1})$ läuft, für die Fälle 1 – positive Steigung und 2 – negative Steigung.

Die Idee des Differenzen – Verfahrens von Godunov [38] ist: Die Größen $\mathbf{U}_i^n$ werden im Zentrum jeder Gitterzelle auf der x – Achse unter der Annahme, dass $\mathbf{U}(x, t_n) = \mathbf{U}_i^n$ auf den Rändern jeder Zelle gilt, berechnet. (siehe Bild 4). Damit wird die Lösung auf der Zeitebene n stückweise als konstant angenommen. Die Lösung in der Ebene (n + 1) wird dann aus folgender Gleichung berechnet:

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\tau} + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1/2}^n) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i-1/2}^n)}{h} = 0, \tag{55}$$

wobei h – die Schrittweite im gleichförmigen Netz entlang der x-Achse und τ – die Zeitschrittweite sind. Für die Berechnung der Größen $\mathbf{U}^n_{i+1/2}$ und $\mathbf{U}^n_{i-1/2}$ auf den Rändern der i – ten Zelle hat S. K. Godunov [38] genaue Formeln für die Aufspaltung des Druckstoßes vorgeschlagen. Tatsächlich, am Rand $x_{i+1/2}$ der i – ten und $(i + 1)$ – ten Zelle des Netzes besitzt die Lösung durch den Druckstoß eine Unstetigkeitsstelle, aber links und rechts von ihr sind die Werte konstant. Die Lösung einer solchen Aufgabe für $t > t_n$ zu finden wird als Aufspaltung des Druckstoßes oder als Riemannsche Aufgabe bezeichnet.

Im numerischen Verfahren von Roe [24, 25] wird die Jacobi – Matrix **A(U)** in (52) durch eine konstante Jacobi – Matrix

$$\bar{\mathbf{A}} = \bar{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R), \tag{56}$$

ersetzt.

In (56) sind $\mathbf{U}_L$, $\mathbf{U}_R$ – konstante Vektoren, welche den Zustand der Flüssigkeit in der Umgebung des Punktes (x, t) charakterisieren (siehe im Bild 4 die Größen $\mathbf{U}_i^n$, $\mathbf{U}_{i+1}^n$). Auf diese Weise wird anstelle des Ausgangssystems (51) ein lineares hyperbolisches System mit konstanten Koeffizienten betrachtet:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \bar{\mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0. \tag{57}$$

Für dieses System wird folgende Riemannsche Aufgabe gelöst:

$$\mathbf{U}(x, t_n) = \begin{cases} \mathbf{U}_L, & x < x_{i+1/2} \\ \mathbf{U}_R, & x > x_{i+1/2} \end{cases}. \tag{58}$$

Die Aufgabe (57) und (58) wird exakt gelöst, d.h., die im Punkt $x = x_{i+1/2}$ gefundene Lösung wird für die Berechnung der Strömungsvektoren $\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i\pm 1/2}{}^n)$ im Schema (55) eingesetzt.

Die Diskussion und Berechnung der konstanten Matrix $\bar{\mathbf{A}}$ **(56)** erfolgt im Pkt. 6.2 . Hier wird zunächst angenommen, dass diese Matrix auf der Grundlage der bekannten Lösungen $\mathbf{U}^n{}_i$ und $\mathbf{U}^n{}_{i+1}$ bereits gelöst ist. In Übereinstimmung mit (53) ist dann:

$$\bar{\mathbf{A}} = \bar{\mathbf{R}} \bar{\mathbf{\Lambda}} \bar{\mathbf{R}}^{-1}. \tag{59}$$

Nach dem Einsetzen von $\mathbf{U} = \bar{\mathbf{R}}\,\mathbf{W}$ in (57) folgt unter Beachtung von (54) folgendes Gleichungssystem:

$$\bar{\mathbf{R}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{R}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0. \tag{60}$$

Werden beide Seiten von (60) mit $\bar{\mathbf{R}}^{-1}$ multipliziert, so erhält man

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \bar{\mathbf{\Lambda}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0. \tag{61}$$

Die Variablen $w_1, \ldots, w_m$, welche Komponenten des Vektors $\mathbf{W} = \bar{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{U}$ sind, werden als *charakteristische Variable* bezeichnet. Das System (61) wird als kanonische Form oder als charakteristische Form des Systems (57) bezeichnet. Es ist klar, dass die k – te Gleichung des Systems (61) lautet:

$$\frac{\partial w_k}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial w_k}{\partial x} = 0, \quad k = 1, \ldots, m. \tag{62}$$

Sie schließt in sich die einzige unabhängige Veränderliche $w_k(x, t)$ ein. Die Lösung $w_k(x, t_n)$ auf der n –ten Zeitebene wird damit als bekannt vorausgesetzt. Deshalb kann die Lösung bei $t \geq t_n$ leicht aus (61) bestimmt werden. Sie lautet (siehe auch [25]):

$$w_k(x, t) = w_k(x - \lambda_k(t - t_n)), \; k = 1, \ldots, m, \quad t_n \leq t \leq t_n + \tau. \tag{63}$$

In Analogie zum Schema (55) wird auch die Gleichung (62) aufgebaut:

$$\frac{w_{k,i}^{n+1} - w_{k,i}^{n}}{\tau} + \frac{f_k\left(w_{k,i+1/2}\right) - f_k\left(w_{k,i-1/2}\right)}{h} = 0, \tag{64}$$

wobei $f_k(w) = \lambda_k w$ gesetzt wurde. Weiterhin wird angenommen, dass der Zeitschritt τ in (64)

die CFL – Bedingung [25] erfüllt:

$$\frac{\tau}{h}\max_k|\lambda_k|\le 1. \tag{65}$$

Jetzt kann die genaue Lösung der Riemannschen Aufgabe für die Gleichung (62) im Punkt B mit den Koordinaten $(x_{i+1/2},\ t_{n+1})$, siehe Bild 5, bestimmt werden. Für $\lambda_k > 0$ lautet die Charakteristik:

$$\frac{dx}{dt}=\lambda_k \tag{66}$$

Sie schneidet die Linie $t = t_n$ unter Berücksichtigung von (65) in einem bestimmten Punkt x^*, der auf den Rändern der i – ten Zelle liegt, d.h. bei $x_{i-1/2} \le x_* \le x_{i+1/2}$. In dieser Zelle gilt überall $w_k(x,\ t_n) = w_{k,i}^n$, d.h. in Übereinstimmung mit der genauen Formel (63) ist $w_k(x_{i+1/2},\ t_{n+1}) = w_{k,i}^n$. Bei $\lambda_k < 0$ erfüllt die Charakteristik (66), welche aus dem Punkt B zur Linie $t = t_n$ verläuft und die x-Achse im Punkt x^* schneidet, die Ungleichung $x_{i+1/2} \le x_* \le x_{i+3/2}$. Damit ist $w_k(x_{i+1/2},\ t_{n+1}) = w_{k,i+1}^n$. Werden diese Ergebnisse summiert, so folgt:

$$f_k(w_{k,i+1/2})=\begin{cases}\lambda_k w_i^n, & \lambda_k>0\\ \lambda_k w_{i+1}^n, & \lambda_k<0\end{cases}. \tag{67}$$

Durch Einsetzen der Formel (67) in (64), erhält man für $\lambda_k > 0$ folgende Differenzengleichung:

$$\frac{w_{k,i}^{n+1}-w_{k,i}^n}{\tau}+\frac{f_k(w_{k,i}^n)-f_k(w_{k,i-1}^n)}{h}=0. \tag{68}$$

Analog folgt für $\lambda_k < 0$ aus (64) unter Berücksichtigung von (67):

$$\frac{w_{k,i}^{n+1}-w_{k,i}^n}{\tau}+\frac{f_k(w_{k,i+1}^n)-f_k(w_{k,i}^n)}{h}=0. \tag{69}$$

Diese beiden Differenzengleichungen lassen sich leicht in einer zusammenfassen, wenn die Stromfunktion $f_k(w_{k,\ i+1/2})$ in (64) aus folgender Gleichung berechnet wird:

$$f_k(w_{k,\ i+1/2})=(1/2)[\,f_k(w_{k,\ i}^n)+f_k(w_{k,\ i+1}^n)]-(1/2)|\lambda_k|(\,w_{k,\ i+1}^n-w_{k,\ i}^n). \tag{70}$$

Bei $\lambda_k > 0$ ergibt die Formel (64) mit den Stromvektoren (70), das Schema (68), bei $\lambda_k < 0$ – das Schema (69).

Für den Übergang von der Komponentenschreibweise zur Vektor – Matrizen –Schreibweise. wird die zu betrachtende Matrix $|\mathbf{\Lambda}| = \mathrm{diag}\ (|\lambda_1|,\ldots,|\lambda_m|)$ mit $\mathbf{f} = (f_1(w),\ldots,f_m(w))^T$, wobei $f_k(w) = \lambda_k w$ ist, eingeführt. Unter Beachtung von (70) kann dann geschrieben werden:

$$\mathbf{f}(\mathbf{W}_{i+1/2}) = (1/2)[\mathbf{f}(\mathbf{W}_i^n) + \mathbf{f}(\mathbf{W}_{i+1}^n)] - (1/2)|\mathbf{\Lambda}|(\mathbf{W}_{i+1}^n - \mathbf{W}_i^n). \tag{71}$$

Auf das System (61) angewandt, lautet das Schema von Godunov:

$$\frac{\mathbf{W}_i^{n+1}-\mathbf{W}_i^n}{\tau}+\frac{\mathbf{f}(\mathbf{W}_{i+1/2})-\mathbf{f}(\mathbf{W}_{i-1/2})}{h}=0. \tag{72}$$

Jetzt kann in (72) der Übergang zum Ausgangsvektor **U** mit Hilfe der Formel $\mathbf{W}=\bar{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{U}$ realisiert werden:

$$\bar{\mathbf{R}}^{-1}\frac{\mathbf{U}_i^{n+1}-\mathbf{U}_i^n}{\tau}+\frac{\varphi(\mathbf{U}_{i+1/2}^n)-\varphi(\mathbf{U}_{i-1/2}^n)}{h}=0, \tag{73}$$

wobei

$$\varphi(\mathbf{U}_{i+1/2}^n)=\frac{1}{2}\mathbf{\Lambda}\bar{\mathbf{R}}^{-1}\cdot(\mathbf{U}_i^n+\mathbf{U}_{i+1}^n)-\frac{1}{2}|\mathbf{\Lambda}|\bar{\mathbf{R}}^{-1}\left(\mathbf{U}_{i+1}^n-\mathbf{U}_i^n\right) \tag{74}$$

ist.

Werden beide Seiten der Gleichung(73) von links mit der Matrize $\bar{\mathbf{R}}$ multipliziert, so folgt daraus:

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1}-\mathbf{U}_i^n}{\tau}+\frac{\mathbf{\Phi}\left(\mathbf{U}_{i+1/2}^n\right)-\mathbf{\Phi}\left(\mathbf{U}_{i-1/2}^n\right)}{h}=0, \tag{75}$$

mit der eingeführten Größe

$$\mathbf{\Phi}\left(\mathbf{U}_{i+1/2}^n\right)=\frac{1}{2}\left[\mathbf{F}(\mathbf{U}_i^n)+\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1}^n)\right]-\frac{1}{2}\bar{\mathbf{R}}|\bar{\mathbf{\Lambda}}|\bar{\mathbf{R}}^{-1}\cdot\left(\mathbf{U}_{i+1}^n-\mathbf{U}_i^n\right) \tag{76}$$

und

$$\mathbf{F}(\mathbf{U})=\bar{\mathbf{A}}\mathbf{U}. \tag{77}$$

Die Differenzengleichung (75) mit der Stromfunktion $\mathbf{\Phi}(\mathbf{U}_{i\pm1/2}^n)$, welche mit den Formeln (76) berechnet wird, stimmt vollständig mit dem Differenzen – Verfahren von Roe überein [24].

Wie oben unter Pkt. 4.3 gezeigt wurde, können die Eigenwerte λ_1 und λ_2 der Jacobi – Matrix $\bar{\mathbf{A}}$ im Rechenraum ihr Vorzeichen ändern. Ist x_0 ein derartiger Punkt, in dem z.B. $\lambda_1 = 0$ ist, dann entartet die Matrix $\bar{\mathbf{A}}$ und das Schema (75), (76) verliert seine dissipativen Eigenschaften, welche die Monotonie des Profils des Differenzen – Verfahrens in der Umgebung der Stoßwelle gewährleistet [25]. Um diese dissipativen Eigenschaften zu erhalten, wird die Stromfunktion aus folgender Gleichung [39] berechnet:

$$\mathbf{\Phi}\left(\mathbf{U}_{i+1/2}^n\right)=\frac{1}{2}\left[\mathbf{F}(\mathbf{U}_i^n)+\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1}^n)\right]-\frac{1}{2}\bar{\mathbf{R}}\psi(\bar{\mathbf{\Lambda}})\bar{\mathbf{R}}^{-1}\cdot\left(\mathbf{U}_{i+1}^n-\mathbf{U}_i^n\right), \tag{78}$$

wo

$$\psi(\bar{\mathbf{\Lambda}})=\mathrm{diag}\left(\psi(\lambda_1),...,\psi(\lambda_m)\right), \tag{79}$$

$$\psi(z) = \begin{cases} |z|, & |z| \geq \delta \\ \dfrac{z^2 + \delta^2}{2\delta}, & |z| < \delta \end{cases} \tag{80}$$

und δ – Konstante, die vom Nutzer vorgegeben wird. Bei $z = 0$ folgt aus (80): $\psi(0) = 0{,}5\ \delta$. Mit der Funktion $\psi(z)$ (80) wird die Dissipation des Differenzen - Verfahrens auch in den Gebieten der Flüssigkeitsströmung gewährleistet, in denen irgendwelche Eigenwerte λ_k ihr Vorzeichen ändern.

Wie bereits im Pkt. 4.3 gezeigt wurde, können sich im System der Euler – Gleichungen bei krummlinigen Koordinaten nur die Vorzeichen der Eigenwerte λ_1 und λ_2 ändern, ansonsten ist $\lambda_3 < 0$ und $\lambda_4 > 0$. Unter Beachtung des konkreten Verhaltens der Eigenwerte kann die Matrix $\psi(\overline{\mathbf{\Lambda}})$ wie folgt geschrieben werden:

$$\psi(\overline{\mathbf{\Lambda}}) = \mathrm{diag}\left(\psi(\lambda_1), \psi(\lambda_2), -\lambda_3, \lambda_4\right).$$

Zur Vereinfachung der Programmierung des Differenzen – Verfahrens nach Roe wurde jedoch die Form der diagonalen Matrix $\psi(\overline{\mathbf{\Lambda}})$ (79) eingesetzt.

Die Verallgemeinerung des Verfahrens von Roe (75) auf den Fall von zwei- und dreidimensionale Variable, fordert die Kenntnis der genauen Lösung der mehrdimensionalen Riemannschen Aufgabe. Diese Aufgabe wurde jedoch bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht gelöst. Die Verallgemeinerung des Schemas von Godunov auf den mehr-dimensionalen Fall wird durch die Aufspaltung des mehrdimensionalen Operators auf eindimensionale Operatoren verwirklicht [24]. Die oben dargelegte numerische Methode von Roe kann demnach auf jeden Operator angewendet werden. Mit anderen Worten, in jeder Raumrichtung wird die Lösung der eindimensionalen Aufgabe durch Aufspaltung des Drucksstoßes angewandt. Diese Herangehensweise wurde erstmals von S. K. Godunov bei seinem zweidimensionalen Schema der Aufspaltung von Druckstößen eingesetzt [40]. Wie in [24] gezeigt, ergibt die Aufspaltung des mehrdimensionalen Operators in aufeinander folgende eindimensionale Operatoren gute Ergebnisse in den Fällen, in denen die Orientierung der Stoßwellenfront mit der Orientierung der Linien des Rechennetzes übereinstimmt. Solche Stoßwellen werden genau erkannt und berechnet. In der zur lösenden Aufgabe, wie weiter unten an Hand von Beispielen noch gezeigt wird, bewegen sich die Stoßwellen vorrangig in Richtung der ξ - Achse, d.h. in Richtung der zentralen Linie des spiralförmigen Kanals. Dieser Sachverhalt ist für die genaue Berechnung des Stoßwellenverlaufs mit der Methode von Roe von Vorteil.

Für die Verallgemeinerung des Schemas von Roe (75) und (76) auf den dreidimensionalen Fall ist folgende Zerlegung notwendig:

$$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{R}_1\mathbf{\Lambda}_1\mathbf{R}_1^{-1}; \quad \hat{\mathbf{B}} = \mathbf{R}_2\mathbf{\Lambda}_2\mathbf{R}_2^{-1}; \quad \hat{\mathbf{C}} = \mathbf{R}_3\mathbf{\Lambda}_3\mathbf{R}_3^{-1}. \tag{81}$$

Die Ausdrücke für die Matrizen $\mathbf{R}_\nu$, $\mathbf{\Lambda}_\nu$, $\nu = 1, 2, 3$ sind in der Anlage 1 zusammengestellt.

In Analogie zum eindimensionalen Fall (siehe Bilder 4 und 5) wird angenommen, dass die Komponenten des Vektors $\mathbf{U}^n_{ijk}$ im Zentrum der Zelle im Raumpunkt (ξ, η, ζ), d.h. im Punkt mit den Koordinaten ($\xi_{i+1/2}$, $\eta_{j+1/2}$, $\zeta_{k+1/2}$) liegen, wo gilt:

$$\xi_{i+1/2} = s_{min} + (i - 0{,}5)\Delta\xi, \quad i = 1,\ldots, N_1 - 1; \quad \eta_{j+1/2} = (j-0{,}5)\Delta\eta, \quad j = 1,\ldots,N_2 - 1;$$

$$\zeta_{k+1/2} = (k - 0{,}5)\Delta\zeta, \; k = 1,\ldots,N_3-1.$$

Das Schema von Roe, angewendet auf das System (18), kann dann wie folgt definiert werden:

$$\frac{\left(\mathbf{U}^{n+1}_{ijk} - \mathbf{U}^n_{ijk}\right)J_{ijk}}{\tau} + \frac{\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k} - \mathbf{\Phi}^n_{i-1/2,j,k}}{\Delta\xi} + \frac{\mathbf{\Psi}^n_{i,j+1/2,k} - \mathbf{\Psi}^n_{i,j-1/2,k}}{\Delta\eta} + \frac{\mathbf{\Gamma}^n_{i,j,k+1/2} - \mathbf{\Gamma}^n_{i,j,k-1/2}}{\Delta\zeta} = J_{ijk}\mathbf{R}^n_{ijk}, \tag{82}$$

wobei die Stromvektoren $\mathbf{\Phi}^n_{i\pm1/2,j,k}$, $\mathbf{\Psi}^n_{i\pm1/2,j,k}$, $\mathbf{\Gamma}^n_{i\pm 1/2,j,k}$ aus folgenden Formeln berechnet werden:

$$\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k} = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}^n_{ijk}\right) + \hat{\mathbf{F}}\left(\mathbf{U}^n_{i+1,j,k}\right)\right] - \frac{1}{2}\left(\mathbf{R}_1\psi\left(\mathbf{\Lambda}_1\right)\mathbf{R}_1^{-1}\right)\left(\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}\right)\left(\mathbf{U}^n_{i+1,j,k} - \mathbf{U}^n_{ijk}\right), \tag{83}$$

$$\mathbf{\Psi}^n_{i,j+1/2,k} = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{G}}\left(\mathbf{U}^n_{ijk}\right) + \hat{\mathbf{G}}\left(\mathbf{U}^n_{i,j+1,k}\right)\right] - \frac{1}{2}\left(\mathbf{R}_2\psi\left(\mathbf{\Lambda}_2\right)\mathbf{R}_2^{-1}\right)\left(\bar{\mathbf{U}}_{j+1/2}\right)\left(\mathbf{U}^n_{i,j+1,k} - \mathbf{U}^n_{ijk}\right), \tag{84}$$

$$\mathbf{\Gamma}^n_{i,j+1/2,k} = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{H}}\left(\mathbf{U}^n_{ijk}\right) + \hat{\mathbf{H}}\left(\mathbf{U}^n_{i+1,j,k}\right)\right] - \frac{1}{2}\left(\mathbf{R}_3\psi\left(\mathbf{\Lambda}_3\right)\mathbf{R}_3^{-1}\right)\left(\bar{\mathbf{U}}_{k+1/2}\right)\left(\mathbf{U}^n_{i,j,k+1} - \mathbf{U}^n_{ijk}\right). \tag{85}$$

In (83) - (85) sind:

$$\psi(\mathbf{\Lambda}_m) = \mathrm{diag}\left(\psi\left(\lambda_1^{(m)}\right), \psi\left(\lambda_2^{(m)}\right), \psi\left(\lambda_3^{(m)}\right), \psi\left(\lambda_4^{(m)}\right)\right), \quad m = 1,2,3.$$

Aus dem aufgebauten Schema von Roe (82) – (85) ist deutlich zu erkennen, dass in Abhängigkeit von den Vorzeichen der Eigenwerte in den Jacobi – Matrizen $\hat{\mathbf{A}}$, $\hat{\mathbf{B}}$, $\hat{\mathbf{C}}$, die Differentialoperatoren nach ξ, η, ζ im Differenzen - Verfahren mit Hilfe einseitiger Differenzen approximiert werden. Die Ableitung nach t wird im Schema von Roe ebenfalls als einseitige Differenz nach der Zeit approximiert. Deshalb ist das Schema von Roe (82) – (85) ein Approximationsverfahren erster Ordnung nach t und nach den Raumvariablen.

Zur Gewährleistung eines stabilen Differenzen – Verfahrens ist im Schema von Roe die Berechnung des maximal zulässigen Zeitschrittes τ erforderlich. Die Stabilität von

Differenzen – Verfahren wird mit Hilfe der Fourier – Methode analysiert. Diese Methode ist jedoch nur für Differenzen – Verfahren mit konstanten Koeffizienten anwendbar. Für den Einsatz im Schema (82) – (85) muss deshalb zunächst eine Linearisierung der Differenzengleichungen durchgeführt werden. Anstelle von $\mathbf{U}^n_{mlq}$ wird deshalb

$$\mathbf{U}^n_{mlq} = \mathbf{U}_0 + \delta\mathbf{U}^n_{mlq}\,, \tag{86}$$

wo $\mathbf{U}_0$ – ein bestimmter konstanter Vektor und $\delta\mathbf{U}^n_{mlq}$ – sehr kleine Größen sind, in die Gleichungen (82) – (85) eingesetzt.

Die unteren Indizes *m, l, q* kennzeichnen beliebige Punkte aus der Schablone des Schemas von Roe (82) – (85). Nach dem Einsetzen der Formel (86) in (82) – (85) folgt unter Vernachlässigung aller Glieder der Größenordnung $O(\delta\mathbf{U}^n)^v)$ für alle $v > 1$ folgendes lineare Differenzenschema:

$$\begin{aligned}
&J_0 \cdot \frac{\delta\mathbf{U}^{n+1}_{ijk} - \delta\mathbf{U}^n_{ijk}}{\tau} + J_0\mathbf{A}_0 \frac{\delta\mathbf{U}^n_{i+1,j,k} - \delta\mathbf{U}^n_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi} - \frac{1}{2}J_0\,|\,\mathbf{A}_0\,|\,\frac{\delta\mathbf{U}^n_{i+1,j,k} - 2\delta\mathbf{U}^n_{ijk} + \delta\mathbf{U}^n_{i-1,j,k}}{\Delta\xi} \\
&+J_0\mathbf{B}_0 \frac{\delta\mathbf{U}^n_{i,j+1,k} - \delta\mathbf{U}^n_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta} - \frac{1}{2}J_0\,|\,\mathbf{B}_0\,|\,\frac{\delta\mathbf{U}^n_{i,j+1,k} - 2\delta\mathbf{U}^n_{ijk} + \delta\mathbf{U}^n_{i,j-1,k}}{\Delta\eta} \\
&+J_0\mathbf{C}_0 \frac{\delta\mathbf{U}^n_{i,j,k+1} - \delta\mathbf{U}^n_{i,j,k-1}}{2\Delta\zeta} - \frac{1}{2}J_0\,|\,\mathbf{C}_0\,|\,\frac{\delta\mathbf{U}^n_{i,j,k+1} - 2\delta\mathbf{U}^n_{ijk} + \delta\mathbf{U}^n_{i,j,k-1}}{\Delta\zeta} = J_0 R(U_0 + \delta U^n_{ijk}),
\end{aligned} \tag{87}$$

mit den Bestimmungsgleichungen:

$$\mathbf{A}_0 = \xi_x\mathbf{A}(\mathbf{U}_0) + \xi_y\mathbf{B}(\mathbf{U}_0), \qquad |\mathbf{A}_0| = (\mathbf{R}_1\psi(\mathbf{\Lambda}_1)J_0^{-1}\mathbf{R}_1^{-1})(\mathbf{U}_0), \tag{88}$$

$$\mathbf{B}_0 = \eta_x\mathbf{A}(\mathbf{U}_0) + \eta_y\mathbf{B}(\mathbf{U}_0), \qquad |\mathbf{B}_0| = (\mathbf{R}_2\psi(\mathbf{\Lambda}_2)J_0^{-1}\mathbf{R}_2^{-1})(\mathbf{U}_0), \tag{89}$$

$$\mathbf{C}_0 = \zeta_x\mathbf{A}(\mathbf{U}_0) + \zeta_y\mathbf{B}(\mathbf{U}_0) + \zeta_z\mathbf{C}(\mathbf{U}_0), \quad |\mathbf{C}_0| = (\mathbf{R}_3\psi(\mathbf{\Lambda}_3)J_0^{-1}\mathbf{R}_3^{-1})(\mathbf{U}_0), \tag{90}$$

$$J_0 = J_{ijk}.$$

Wird unterstellt, dass in einem bestimmten Teilgebiet des Rechenraumes die Flüssigkeitsströmung parallel zur ξ - Achse verläuft, dann lautet das Kriterium für die Stabilität der CFL – Bedingung:

$$\tau \le \Delta\xi / |\,\lambda_{A_0\max}\,|, \tag{91}$$

wobei $|\,\lambda_{A_0\max}\,|$ — der Modul des maximalen Eigenwertes der Matrix $\mathbf{A}_0$ in (88) ist. Gemäß (42) gilt:

$$|\,\lambda_{A_0\max}\,| = |\,\xi_x u + \xi_y v\,| + c\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}.$$

Analog, im Fall einer Flüssigkeitsströmung parallel zu den η- und ζ- Achsen, führt die CFL – Bedingung zu folgender Beschränkung des Zeitschrittes:

$$\tau \le \Delta\eta / |\lambda_{B_0 \max}|, \quad \tau \le \Delta\zeta / |\lambda_{C_0 \max}|. \tag{92}$$

mit

$$|\lambda_{B_0 \max}| = |\eta_x u + \eta_y v| + c\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}, \quad |\lambda_{C_0 \max}| = |\zeta_x u + \zeta_y v + \zeta_z w| + c\sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}.$$

Die drei Ungleichungen (91) – (92) können zu folgender Ungleichung zusammengefaßt werden:

$$\tau \le \min(\Delta\xi / |\lambda_{A_0 \max}|, \Delta\eta / |\lambda_{B_0 \max}|, \Delta\zeta / |\lambda_{C_0 \max}|).$$

In praktischen Berechnungen wird der Zeitschritt τ aus folgender Formel berechnet:

$$\tau = C \cdot \min_{i,j,k}[\min(\Delta\xi / |\lambda_{A_0 \max}|, \Delta\eta / |\lambda_{B_0 \max}|, \Delta\zeta / |\lambda_{C_0 \max}|)]. \tag{93}$$

Die Größe C in (93) ist die Courant – Zahl. Sie liegt im Bereich $0 < C < 1$.

Weil in der betrachteten Flüssigkeitsströmung die Stoßwellen nicht sehr stark sind, kann die numerische Lösung $\mathbf{U}^n_{ijk}$ in jedem Punkt *(i, j, k)* in Form der Gleichung (86) dargestellt werden. Unter $\mathbf{U}_0$ wird dabei die Lösung im Punkt *(i, j, k)* zum Zeitpunkt $t = 0$ verstanden: $\mathbf{U}_0 = \mathbf{U}^0_{ijk}$.

Angesichts dieser Vereinfachung braucht die Zeitschrittweite τ gemäß Formel (93) auf der Grundlage der Anfangsbedingungen (10) nur einmal vor Beginn des Rechenzyklus berechnet werden.

Die richtige Organisation der numerischen Berechnung des Differenzen – Schemas von Roe (82) ist von entscheidender Bedeutung für den dafür erforderlichen Zeitaufwand [41]. Zur Bestimmung der Vektorkomponenten von $\mathbf{U}^{n+1}_{ijk}$, müssen zunächst die Stromvektoren von Roe $\mathbf{\Phi}^n_{i\pm1/2,j,k}$, $\mathbf{\Psi}^n_{i\pm1/2,j,k}$ und $\mathbf{\Gamma}^n_{i\pm1/2,j,k}$, d.h. insgesamt 6 Funktionen, berechnet werden. Dafür bieten sich in erster Linie die folgenden Verfahren an:

1. Berechnung aller sechs Ströme unabhängig für jede Zelle.
2. Einsatz der Lösung der $(n + 1)$ – ten Zeitebene in der Zelle *(i, j, k)* des Stromes, die bereits vorher in den benachbarten Zellen berechnet wurde.

Für die Bewertung der Rechenzeit des ersten Verfahrens wird angenommen, dass der Zeitaufwand für die Berechnung jedes Stromvektors ($\mathbf{\Phi}^n_{i\pm1/2,j,k}$, $\mathbf{\Psi}^n_{i,j\pm1/2,k}$ und $\mathbf{\Gamma}^n_{i,j,k\pm1/2}$) gleich T_c ist. Mit $(N_1 - 1)(N_2 - 1)(N_3 - 1)$ Zellen im Rechenraum, ergibt sich damit eine

Gesamtrechenzeit $T_\Sigma^{(1)}$ für das erste Verfahren von

$$T_\Sigma^{(1)} = 6T_c(N_1 - 1)(N_2 - 1)(N_3 - 1).$$

Beim zweiten Verfahren wird in Analogie zu [41] zunächst nur eine Schicht von Zellen (*i,j,k*) betrachtet, die in der Ebene k = const liegt. Aus dieser Schicht werden jene Zellen ausgewählt, für die j = const ist. Wie Bild 4 zeigt, ist der Strom $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ durch den rechten Rand i + ½ der Zelle (*i, j, k*) gleich dem Strom durch den linken Rand der Zelle (*i + 1,j,k*). Gleiches gilt auch für den Strom $\mathbf{\Psi}^n_{i,j+1/2,k}$ durch den oberen Rand j + ½ der Zelle (*i, j, k*). Deshalb können die berechneten Werte von vier Komponenten des Stromvektors $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ auf vier Rechenschritte beschränkt werden. Wie bereits bei $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ werden auch die Komponenten des Vektors $\mathbf{\Psi}^n_{i,j+1/2,k}$ in vier eindimensionalen Massiven gespeichert. Bei der Berechnung der Stromvektoren $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ und $\mathbf{\Phi}^n_{i+3/2,j,k}$ in der Zelle (*i + 1,j,k*) wird der Wert von $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ schon nicht mehr berechnet, sondern aus dem gespeicherten Daten von $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ der davor liegendenden Zelle (*i, j, k*) entnommen. Das bedeutet, dass für die Berechnung von $\mathbf{U}^{n+1}_{ijk}$ in der Reihe der Zellen j = const und k = const nur N_1 der Stromvektoren $\mathbf{\Phi}^n_{i+1/2,j,k}$ berechnet werden. Folglich beträgt der zeitliche Rechenaufwand $T_\Sigma^{(2)}$ für die Bestimmung der Stromvektoren $\mathbf{U}^{n+1}_{ijk}$, $\mathbf{\Psi}^n_{i,j\pm1/2,k}$ und $\mathbf{\Gamma}^n_{i,j,k\pm1/2}$ auf der Grundlage des zweiten Verfahren

$$T_\Sigma^{(2)} = T_c[N_1(N_2 - 1)(N_3 - 1) + (N_1 - 1)N_2(N_3 - 1) + (N_1 - 1)(N_2 - 1)N_3].$$

Ein Vergleich mit dem ersten Verfahren werden demnach 50 % der Rechenzeit eingespart.

6.2. Mittel nach dem Differenzen – Verfahren von Roe für barotrope Flüssigkeiten

Für die Berechnung des Mittels nach dem Differenzen – Verfahren von Roe muss die Jacobi – Matrix $\overline{\mathbf{A}}$ folgende Eigenschaften besitzen:

a) Hyperbolisches System

Es wird gefordert, dass $\overline{\mathbf{A}}$ reelle Eigenwerte $\overline{\lambda}_k = \overline{\lambda}_k(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$ besitzt, welche in folgender Reihenfolge geordnet sind:

$$\overline{\lambda}_1 \le \overline{\lambda}_2 \le \ldots \le \overline{\lambda}_m .$$

Außerdem wird verlangt, dass die Matrix $\overline{\mathbf{A}}$ einen vollständigen Satz unabhängiger Eigenvektoren $\overline{\mathbf{R}}^{(1)}, \overline{\mathbf{R}}^{(2)}, ..., \overline{\mathbf{R}}^{(m)}$ besitzt.

b) Übereinstimmung mit dem genauen Jacobian

$$\overline{\mathbf{A}}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbf{A}(\mathbf{U}).$$

c) Erhaltungssatz an den Sprungstellen

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}_R) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_L) = \overline{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L). \tag{94}$$

Die Eigenschaft c) gewährleistet die Übereinstimmung mit den Erhaltungssätzen. Sie gewährleistet außerdem das Erkennen der isolierten Sprünge, d.h. wenn $\mathbf{U}_L$ und $\mathbf{U}_R$ mit einem isolierten Sprung verbunden sind, dann erkennt der angenäherte Riemann – Löser diese Unstetigkeit genau.

In [24] wird eine Prozedur für die Berechnung des Mittels der Vektorkomponenten $\overline{\mathbf{U}}$ von Roe für den Fall eines idealen Gases mit Hilfe der Zustandsgleichung $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$, wo γ – das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten und ε - die spezifische innere Energie ist, vorgeschlagen. Diese Prozedur beruht auf der Einführung des Vektorparameters **Q**.

In [25] wir ihre Anwendung am Beispiel einer isothermen Gasströmung mit der Zustandsgleichung $p = \rho a^2$, wo $a > 0$ die konstante Schallgeschwindigkeit ist, demonstriert. Aus dem Vergleich der Ausdrücke für die Mittel der Flüssigkeitsdichte $\overline{\rho}$, der Geschwindigkeit $\overline{u}$ und der Schallgeschwindigkeit $\overline{c}$ für die Fälle eines idealen Gases mit der Zustandsgleichung $p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon$ und einer isothermen Gasströmung mit der Zustandsgleichung $p = \rho a^2$ folgt, dass die Ausdrücke für $\overline{\rho}$ und $\overline{u}$ in beiden Fällen übereinstimmen:

$$\overline{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R}, \quad \overline{u} = \frac{\sqrt{\rho_L} u_L + \sqrt{\rho_R} u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}. \tag{95}$$

Das System partieller Differentialgleichungen für die Beschreibung einer eindimensionalen Strömung einer barotropen Flüssigkeit ohne Reibung lautet [3]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \left(p + \rho u^2\right)}{\partial x} = 0. \tag{96}$$

Aus (96) folgt [3]:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c^2 - u^2 & 2u \end{pmatrix}, \tag{97}$$

mit $c^2 = dp(\rho)/d\rho = 1/\rho$.

Mit Hilfe dieser Gleichungen wird das Mittel nach Roe für die Schallgeschwindigkeit direkt aus (94), d.h. ohne Einführung des Vektorparameters **Q**, bestimmt. Dazu wird $\overline{u}$ in der Matrix

$\overline{\mathbf{A}}$ berechnet, die Größe $\overline{c}$ jedoch als Unbekannte betrachtet, die aus (94) zu bestimmen ist. Aus der Gleichung (94) in Komponentenschreibweise sowie (96) und (97) folgt für den Fall einer barotropen Flüssigkeit :

$$\rho_R u_R - \rho_L u_L = \rho_R u_R - \rho_L u_L; \tag{98}$$

$$p_R + \rho_R u_R^2 - p_L - \rho_L u_L^2 = \left(\overline{c}^2 - \overline{u}^2\right)\left(\rho_R - \rho_R\right) + 2\overline{u}\left(\rho_R u_R - \rho_L u_L\right). \tag{99}$$

Die Gleichung (98) ist offensichtlich identisch. Wird in (99) der Ausdruck (95) für $\overline{u}$ eingesetzt, so folgt schließlich:

$$p_R - p_L = \overline{c}^2\left(\rho_R - \rho_L\right),$$

und daraus für $\overline{c}^2$:

$$\overline{c}^2 = \frac{p_R - p_L}{\rho_R - \rho_L}. \tag{100}$$

Gleichung (100) stellt das Quadrat des Mittels von Roe für die Schallgeschwindigkeit einer barotropen Flüssigkeit dar.

Für den Fall $\rho_R = \rho_L$, d.h. auch $p_R = \ln \rho_R = p_L = ln\ \rho_L$, folgt aus (100) die Unbestimmtheit 0/0. Für ihre Lösung wird die Regel von I'Hospital genutzt:

$$\lim_{\rho_R \to \rho_L} \frac{p_R - p_L}{\rho_R - \rho_L} = \frac{dp(\rho_L)}{d\rho} = \frac{1}{\rho_L}.$$

Damit berechnet sich das Quadrat des Mittels von Roe für die Schallgeschwindigkeit in einer barotropen Flüssigkeit mit der Zustandsgleichung $p = \ln \rho$ aus der Formel:

$$\overline{c}^2 = \begin{cases} \dfrac{p_R - p_L}{\rho_R - \rho_L}, & \rho_R - \rho_L \neq 0 \\ \dfrac{1}{\rho_L}, & \rho_R = \rho_L \end{cases}.$$

Die Mittel von Roe für die Vektorkomponenten $\overline{\mathbf{U}}_{i+1/2}$, welche in Formel (83) für $\mathbf{\Phi}^n{}_{i+1/2,j,k}$ eingehen lauten (der Index n wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit weggelassen):

$$\bar{u}_{i+1/2} = \frac{\sqrt{\rho_{ijk}}u_{ijk} + \sqrt{\rho_{i+1,j,k}}u_{i+1,j,k}}{\sqrt{\rho_{ijk}} + \sqrt{\rho_{i+1,j,k}}}; \quad \bar{v}_{i+1/2} = \frac{\sqrt{\rho_{ijk}}v_{ijk} + \sqrt{\rho_{i+1,j,k}}v_{i+1,j,k}}{\sqrt{\rho_{ijk}} + \sqrt{\rho_{i+1,j,k}}};$$

$$\bar{w}_{i+1/2} = \frac{\sqrt{\rho_{ijk}}w_{ijk} + \sqrt{\rho_{i+1,j,k}}w_{i+1,j,k}}{\sqrt{\rho_{ijk}} + \sqrt{\rho_{i+1,j,k}}}; \quad \bar{c}_{i+1/2} = \begin{cases} \left(\dfrac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\rho_{i+1,j,k} - \rho_{i,j,k}}\right)^{0.5}, & \left|\rho_{i+1,j,k} - \rho_{i,j,k}\right| > 10^{-12} \\ \dfrac{1}{\sqrt{\rho_{i,j,k}}}, & \left|\rho_{i+1,j,k} - \rho_{i,j,k}\right| < 10^{-12} \end{cases}; \quad (101)$$

$$\bar{\rho}_{i+1/2} = \sqrt{\rho_{i,j,k}\rho_{i+1,j,k}}.$$

In die Ausdrücke für die Elemente der Matrix $\bar{\hat{\mathbf{A}}}$ gehen außerdem die Größen $\hat{u}, \hat{v}, \hat{w}$ (41) ein. Den Hinweisen von [42] folgend, wurden auch die Mittelwerte $\bar{\hat{u}}_{i+1/2}, \bar{\hat{v}}_{i+1/2}, \bar{\hat{w}}_{i+1/2}$ in der Matrix $\bar{\hat{\mathbf{A}}}$ berechnet. Die Formeln dazu lauten:

$$\begin{aligned} &\bar{\hat{u}}_{i+1/2} = \xi_{x,i+1/2}\bar{u}_{i+1/2} + \xi_{y,i+1/2}\bar{v}_{i+1/2}; \quad \bar{\hat{v}}_{i+1/2} = \eta_{x,i+1/2}\bar{u}_{i+1/2} + \eta_{y,i+1/2}\bar{v}_{i+1/2}; \\ &\bar{\hat{w}}_{i+1/2} = \zeta_{x,i+1/2}\bar{u}_{i+1/2} + \zeta_{y,i+1/2}\bar{v}_{i+1/2} + \zeta_{z,i+1/2}\bar{w}_{i+1/2}. \end{aligned} \quad (102)$$

Die Größen $\xi_{x,i+1/2}, \xi_{y,i+1/2}$ in (102) wurden aus dem arithmetischen Mittel:

$$\xi_{x,i+1/2} = (1/2)[(\xi_x)_{ijk} + (\xi_x)_{i+1,j,k}]; \quad \xi_{y,i+1/2} = (1/2)[(\xi_y)_{ijk} + (\xi_y)_{i+1,j,k}], \quad (103)$$

$\eta_{x,i+1/2}$, $\eta_{y,i+1/2}$, $\zeta_{x,i+1/2}$, $\zeta_{y,i+1/2}$, $\zeta_{z,i+1/2}$ – aus dem entsprechenden arithmetischen Mittel dieser Größen im Zentrum der Zellen *(i,j,k)* und *(i+1,j,k)* bestimmt.

Die Komponenten der Mittel von Roe für die Vektoren $\bar{\mathbf{U}}_{j+1/2}$ und $\bar{\mathbf{U}}_{k+1/2}$ in den Formeln (84) und (85) für die Stromfunktionen $\mathbf{\Psi}^{n}_{i,j+1/2,k}$ und $\mathbf{\Gamma}^{n}_{i,j,k+1/2}$ von Roe wurden analog zu den Formeln (101) – (103) berechnet.

6.3 Numerische Umsetzung der Randbedingungen

Die oben dargestellten Differenzengleichungen gelten nur für die inneren Knoten des räumlichen Rechengebietes. Für die Berechnung der Komponenten des Vektors $\mathbf{U}^n$ an den Rändern dieses Gebietes müssen die Differenzengleichungen zur Bestimmung von $\mathbf{\Phi}^{n}_{i+1/2,j,k}$, $\mathbf{\Psi}^{n}_{i,j+1/2,k}$ und $\mathbf{\Gamma}^{n}_{i,j,k+1/2}$ noch abgeleitet werden.

1) Ebene $\xi = s_{\min}$ ($i+1/2 = ½$, d.h. $i = 0$)

In Übereinstimmung mit Formel (83) werden für die Berechnung der Stromfunktion $\mathbf{\Phi}^{n}_{i\pm1/2,j,k}$

folgende Werte benötigt:

$$u^{n}_{0,j,k}, v^{n}_{0,j,k}, \rho^{n}_{0,j,k}, \quad \overline{u}_{1/2}, \overline{v}_{1/2}, \overline{\rho}_{1/2}, \overline{c}_{1/2}.$$

Die Geschwindigkeitskomponenten $u^n_{0,j,k}$, $v^n_{0,j,k}$ wurden durch eine Extrapolation 0 – ten Grades bestimmt: $u^n_{0,j,k} = u^n_{1,j,k}$, $v^n_{0,j,k} = v^n_{1,j,k}$. Für die Berechnung von $\overline{p}^n_{1/2}$ wurde die Randbedingung (12) oder (13) verwendet: $\overline{p}^n_{1/2} = P_0(t_n)$. Mit Hilfe der Zustandsgleichung $p = \ln \rho$ ergibt sich somit:

$$\overline{\rho}^{n}_{1/2} = \exp\left(\overline{p}^{n}_{1/2}\right), \quad \overline{c}^{n}_{1/2} = 1/\sqrt{\overline{\rho}^{n}_{1/2}}.$$

Aus der Formel für das arithmetische Mittel folgt außerdem:

$$\rho^{n}_{0,j,k} = 2\overline{\rho}^{n}_{1/2} - \rho^{n}_{1,j,k}.$$

2) Ebene $\xi = s_{max}$ $(i = N_1)$

Im Zusammenhang mit der technologisch bedingten Begrenzung der Ausdehnung des spiralförmigen Kanals längs der z – Achse, kann der Rand $\xi = s_{max}$ einen beliebigen Winkel in Beziehung zur x- Achse des kartesischen Koordinatensystems annehmen. Deshalb wurde für diesen Rand ein Algorithmus ausgearbeitet, der in zwei Stufen realisiert wird.

In der ersten Etappe erfolgt der Übergang in die Ebene $\xi = s_{max}$ zum lokalen kartesischen rechtwinkligen System, dessen $\tilde{x}$ - Achse längs des Kanals verläuft.

In der zweiten Etappe, im System der Koordinaten $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$, erweisen sich die Bedingungen des Algorithmus anwendbar, der in [23] beschrieben, die Theorie der eindimensionalen Invarianten von Riemann benutzt. Durch Anwendung dieses Algorithmus wird zunächst die resultierende Geschwindigkeit $\tilde{u}$ im Koordinatensystem $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ und nach anschließender Transformation die resultierenden Geschwindigkeiten u,v,w im Ausgangssystem der kartesischen Koordinaten x,y,z bestimmt.

Bezeichnen mit $\vec{a}$ den Einheitsvektor der Tangente zur Zentrallinie des spiralförmigen Kanals (22) bei $N_1 - 1$ $(\xi = s_{max} - 05\Delta\xi)$, d.h. $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$, wobei

$$a_1 = \frac{\left(x_\xi\right)_{N_1-1/2}}{d_1}, \; a_2 = \frac{\left(y_\xi\right)_{N_1-1/2}}{d_1}, \; a_3 = \frac{\left(z_\xi\right)_{N_1-1/2}}{d_1},$$

$$d_1 = \left\{\left[\left(x_\xi\right)_{N_1-1/2}\right]^2 + \left[\left(y_\xi\right)_{N_1-1/2}\right]^2 + \left[\left(z_\xi\right)_{N_1-1/2}\right]^2\right\}^{0.5},$$

ist. Weiterhin bezeichnen mit $\vec{b}$ den Einheitsvektor der Tangente zur Linienschar $\xi = \text{const}$,

ζ = const bei $\xi = s_{max} - 05\Delta\xi$: $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$,

$$b_1 = \frac{\left(x_\eta\right)_{N_1-1/2}}{d_2},\ b_2 = \frac{\left(y_\eta\right)_{N_1-1/2}}{d_2},\ b_3 = \frac{\left(z_\eta\right)_{N_1-1/2}}{d_2} = 0,$$

$$d_2 = \left\{\left[\left(x_\eta\right)_{N_1-1/2}\right]^2 + \left[\left(y_\eta\right)_{N_1-1/2}\right]^2 + \left[\left(z_\eta\right)_{N_1-1/2}\right]^2\right\}^{0,5}.$$

Mit Hilfe der Formel (24) läßt sich beweisen, dass die Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$ orthogonal sind. Der dritte Einheitsvektor ist so zu bestimmen, dass er senkrecht auf der Fläche steht, die von den beiden Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$ gebildet wird. Damit ist $\vec{c} = \vec{a} \times \vec{b}$, d.h., $\vec{c}$ ist das Kreuzprodukt der Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$. Wenn $\vec{c} = (c_1, c_2, c_3)$, dann ist

$$c_1 = a_2b_3 - b_2a_3,\quad c_2 = b_1a_3 - a_1b_3,\quad c_3 = a_1b_2 - a_2b_1.$$

Für die Lösung der oben gestellten Aufgabe wird ein neues kartesisches Koordinatensystem mit den Achsen $\tilde{O}\tilde{x}, \tilde{O}\tilde{y}, \tilde{O}\tilde{z}$, in Richtung der entsprechenden Vektoren $\vec{a}, \vec{b}$ und $\vec{c}$, eingeführt. Hier ist $\tilde{O}$ der Ursprung des neuen Koordinatensystems, d.h. der Punkt mit den Koordinaten $(x_0(s_{max}), y_0(s_{max}), z_0(s_{max}))$. Bezeichnen mit $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors $\vec{v}$ längs der entsprechenden Richtungen von $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Dann gilt

$$\tilde{u} = (\vec{u}, \vec{a}) = a_1u + a_2v + a_3w,\ \tilde{v} = (\vec{u}, \vec{b}) = b_1u + b_2v + b_3w,\ \tilde{w} = (\vec{u}, \vec{c}) = c_1u + c_2v + c_3w. \quad (104)$$

Außerdem werden noch die Ausdrücke für die Darstellung der Funktionalität zwischen den Komponenten u,v,w und $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ benötigt. Die Auflösung des Systems (104) bezüglich u,v,w ergibt:

$$\begin{aligned} &u = (b_2c_3 - c_2b_3)\tilde{u} + (a_3c_2 - a_2c_3)\tilde{v} + c_1\tilde{w};\quad v = (b_3c_1 - b_1c_3)\tilde{u} + (a_1c_3 - a_3c_1)\tilde{v} + c_2\tilde{w};\\ &w = (b_1c_2 - b_2c_1)\tilde{u} + (a_2c_1 - a_1c_2)\tilde{v} + c_3\tilde{w}. \end{aligned} \quad (105)$$

Es ist bekannt, dass die Euler – Gleichungen bezüglich der Transformationsübertragung und der Drehung der kartesischen Koordinaten invariant sind [43]. Die Euler - Gleichungen im Koordinatensystem $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, t$ lauten:

$$\frac{\partial\tilde{\mathbf{U}}}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}})}{\partial\tilde{x}} + \frac{\partial\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{U}})}{\partial\tilde{y}} + \frac{\partial\mathbf{H}(\tilde{\mathbf{U}})}{\partial\tilde{z}} = \tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{U}}). \quad (106)$$

Den Vektor $\tilde{\mathbf{U}}$ erhält man aus dem Vektor $\mathbf{U}$ in (15) durch den entsprechenden Austausch von u,v,w durch $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$.

$$\tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{U}}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\lambda\rho}{2D}|\vec{v}|u - \rho a_3 g \\ -\frac{\lambda\rho}{2D}|\vec{v}|v - \rho b_3 g \\ -\frac{\lambda\rho}{2D}|\vec{v}|w - \rho c_3 g \end{pmatrix}. \tag{107}$$

In (107) sind die Elemente $-\rho a_3 g$, $-\rho b_3 g$, $-\rho c_3 g$ Komponenten des Vektors $-\rho\,\vec{g}$ im neuen Koordinatensystem $\tilde{O}\tilde{x}\tilde{y}\tilde{z}$. Tatsächlich, in den Ausgangskoordinaten x, y, z besitzt der Vektor $\vec{g}$ die Koordinaten $\vec{g} = (0,0,-g)$. Wenn $\vec{g} = (\tilde{g}_1, \tilde{g}_2, \tilde{g}_3)$ die Zerlegung des Vektors $\vec{g}$ in den neuen Koordinaten ist, dann ist $\tilde{g}_1 = (\vec{g}, \vec{a}) = -g a_3$ usw.

Im neuen Koordinatensystem $\tilde{O}\,\tilde{x}\,\tilde{y}\,\tilde{z}$ liegt Richtung der Hauptströmung in Richtung der Achse $\tilde{O}\tilde{x}$. Damit ist die folgende Prozedur für die Berechnung der Randbedingungen anwendbar [23]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\,\rho\tilde{u}}{\partial\,\tilde{x}} = 0,\ \frac{\partial\,\rho\,\tilde{u}}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho\,\tilde{u}^2)}{\partial\,\tilde{x}} = -\frac{\lambda\,\rho}{2D}|\,\vec{v}\,|\,\tilde{u} - \rho\,a_3\,g. \tag{108}$$

Weil in der betrachteten Aufgabe die Machzahl $M < 1$ ist, wird nur der Fall $|\,\tilde{u}\,| < c$ genau betrachtet.

Die Riemannschen Invarianten W_1, W_2, die dem System (108) entsprechen, sind in [3] abgeleitet und haben folgende Form: $W_1 = \tilde{u} + 2c$, $W_2 = \tilde{u} - 2c$. Hier sind c – die Schallgeschwindigkeit , wobei $c = \sqrt{1/\rho}$ ist. Wird mit W_1^0 der Wert der Riemannschen Invarianten W_1, berechnet für die Anfangsbedingung, definiert, so ist $W_1^0 = \tilde{u}_0 + 2c_0$. Unter der Annahme, dass die Bedingung $\tilde{x} = +\infty$ längs der Charakteristik $d\tilde{x}/dt = \tilde{u} - c$ im Punkt $\xi = s_{\max}$ bei $t \geq 0$ Gültigkeit hat, erhält man für $\xi = s_{max}$ folgende Beziehung:

$$\tilde{u}^{n+1}_{N_1-1/2,j,k} + 2c^{n+1}_{N_1-1/2,j,k} = W_1^0. \tag{109}$$

Die Riemannsche Invariante $W_2 = \tilde{u} - 2c$ ist längs der Charakteristik $d\tilde{x}/dt = \tilde{u} + c$ konstant. Unter der Annahme, dass der Wert der Größe $\tilde{u}$ auch in der Zelle $(N_1 - 1, j, k)$ konstant ist, folgt, dass die Riemannsche Invariante W_2 im Punkt mit den Koordinaten $(s_{max}, \eta_j, \zeta_k)$ folgenden Wert annimmt:

$$W_2^0 \equiv \tilde{u}^n_{N_1-1,j,k} - 2c^n_{N_1-1,j,k} = \tilde{u}^{n+1}_{N_1-1/2,j,k} - 2c^{n+1}_{N_1-1/2,j,k}. \tag{110}$$

Die Auflösung der Gleichungen (109) und (110) bezüglich $\tilde{u}^{n+1}_{N_1-1/2,j,k}$, $c^{n+1}_{N_1-1/2,j,k}$ ergibt:

$$\tilde{u}^{n+1}_{N_1-1/2,j,k} = 0,5\left(W_1^0 + W_2^0\right); \tag{111}$$

$$\overline{c}_{N_1-1/2} = c^{n+1}_{N_1-1/2,j,k} = 0,25\left(W_1^0 - W_2^0\right).$$

Damit ist

$$\overline{\rho}_{N_1-1/2} = \left(1/\overline{c}_{N_1-1/2}\right)^2, \quad \overline{p}_{N_1-1/2} = \ln\left(\overline{\rho}_{N_1-1/2}\right). \tag{112}$$

Aus dem Querschnitt $i = N_1 - 1$ werden in Analogie mit [23] die Größen $\tilde{v}^n$, $\tilde{w}^n$ in den Querschnitt $i = N_1 - 1/2$ übertragen:

$$\tilde{v}^n_{N_1-1/2,j,k} = \tilde{v}^n_{N_1-1,j,k}; \quad \tilde{w}^n_{N_1-1/2,j,k} = \tilde{w}^n_{N_1-1,j,k}. \tag{113}$$

Anschließend werden die Werte (111) und (113) in Form von $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ in die Formeln (105) eingesetzt und die Werte der Größen u,v,w am Rand $\xi = s_{\max}$ bestimmt. Diese Werte, aber auch die Schallgeschwindigkeit $\overline{c}_{N_1-1/2}$ werden für die Berechnung der Stromfunktion $\mathbf{\Phi}^n_{N_1-1/2,j,k}$ von Roe (83) benutzt.

3) Untere Wand des Kanals (Ebene $\zeta = 0$)

Für die Berechnung Stromfunktion $\mathbf{\Gamma}^n_{i,j,1/2}$ durch diese Wand ist es zweckmäßig die Formel für $\hat{\mathbf{H}}$ aus (46) zu nutzen. In diese Formel geht die Größe $\hat{w}$ ein, die aus (41) bestimmt wird. Mit (27) folgt daraus für $\zeta = 0$:

$$\hat{w} = \frac{c_1\left(u\sin\xi + v\cos\xi\right) + w\left[a + B_1\left(\eta - 0,5\right)\right]}{\overline{H}_1\left[a + B_1\left(\eta - 0,5\right)\right]} = 0,$$

d.h., an der Wand $\zeta = 0$ wird die Undurchlässigkeitsbedingung (31) erfüllt. Damit ist

$$\hat{\mathbf{H}}^n_{i,j,1/2} = J \cdot \left(0, \zeta_x p, \zeta_y p, \zeta_z p\right)^T. \tag{114}$$

Für die Berechnung des Druckwertes $p^n_{i,j,1/2}$ wird der Ausdruck (35) mit folgender Formel approximiert:

$$\frac{p^n_{i,j,1} - p^n_{i,j,1/2}}{0,5\Delta\xi} = \frac{c_1\overline{H}_1\left(p_\xi\right)_{i,j,1}}{c_1^2 + \left[a + B_1\left(\left(j - 0,5\right)\Delta\eta - 0,5\right)\right]^2}. \tag{115}$$

Hier ist $(p_\xi)_{i,j,1}$ die Approximation der Ableitung $\partial p/\partial\xi$ im Punkt $(i, j, 1)$:

$$\left(p_\xi\right)_{i,j,1} = \begin{cases} \left(p^n_{i+1,j,1} - p^n_{i,j,1}\right)/\Delta\xi, & i = 1 \\ \left(p^n_{i+1,j,1} - p^n_{i-1,j,1}\right)/(2\Delta\xi), & 1 < i < N_1 - 1 \\ \left(p^n_{i,j,1} - p^n_{i-1,j,1}\right)/\Delta\xi, & i = N_1 - 1. \end{cases}$$

Die Gleichung (115) ist bezüglich $p^n_{i,j,1/2}$ sofort lösbar. Mit den erhaltenen Ergebnissen kann die Stromfunktion $\hat{\mathbf{H}}^n_{i,j,1/2}$ nach Formel (114) berechnet werden.

4) Obere Wand des Kanals (Ebene $\zeta = 1$)

Da die oberen und unteren Wände des Kanals zueinander parallel sind, müssen auch die Normalvektoren dieser Wände zueinander parallel sein. Deshalb gelten die oben erhaltenen Formeln analog auch für die obere Wand.

5) Vertikale Wand des Kanals (Ebene $\eta = 0$, $\eta = 1$)

Für die Berechnung wird die Formel für $\hat{\mathbf{G}}$ (46) eingesetzt. Nach der Bestimmung von $\hat{v}$ am Rand $\eta = 0$, folgt mit der Undurchlässigkeitsbedingung (36), dass $\hat{v} = 0$ für $\eta = 0$ ist.

Damit kann für die Berechnung der Stromfunktion $\hat{\mathbf{G}}^n_{i,1/2,k}$ folgende Formel angesetzt werden:

$$\hat{G}^n_{i,1/2,k} = J \cdot \left(0, \eta_x p^n_{i,1,k}, \eta_y p^n_{i,1,k}, 0\right)^T.$$

Hier wurde die Randbedingung für den Druck (37) bereits eingesetzt. Nach Approximation

der Ableitung $\partial p/\partial \eta$ am Rand $\eta = 0$ folgt: $p^n_{i,1/2,k} = p^n_{i,1,k}$.

Am Rand $\eta = 0$ muss außerdem noch das Mittel von Roe für die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors $\overline{u}_{j+1/2}, \overline{v}_{j+1/2}, \overline{w}_{j+1/2}, j = 0$ bestimmt werden. Ihrer Berechnung wird folgender Algorithmus zu Grunde gelegt. Die Größen v_n und v_τ seien die Normale und die Tangente zur Wand $\eta = 0$ der Komponente des Geschwindigkeitsvektors. Außerdem werden noch folgende Größen eingeführt:

$$v_{n,0} = [(x_\eta)_0 u_0 + (y_\eta)_0 v_0 + (z_\eta)_0 w_0]/d_{1,0}; \quad v_{\tau,0} = [(x_\xi)_0 u_0 + (y_\xi)_0 v_0 + (z_\xi)_0 w_0]/d_{2,0},$$

wobei $v_{n,0} = v_n(\xi, -0{,}5\Delta\eta, \zeta, t)$, $(x_\eta)_0 = \partial x(\xi, -0{,}5\Delta\eta, \zeta)/\partial\eta$ usw.,

und

$$d_{1,0} = \sqrt{\left(x_\eta\right)_0^2 + \left(y_\eta\right)_0^2 + \left(z_\eta\right)_0^2}, \quad d_{2,0} = \sqrt{\left(x_\xi\right)_0^2 + \left(y_\xi\right)_0^2 + \left(z_\xi\right)_0^2},$$

sind.

Bei $\eta = \Delta\eta/2$ sei:

$$v_{n,1} = [(x_\eta)_1 u_1 + (y_\eta)_1 v_1 + (z_\eta)_1 w_1]/d_{1,1}; \quad v_{\tau,1} = [(x_\xi)_1 u_1 + (y_\xi)_1 v_1 + (z_\xi)_1 w_1]/d_{2,1}.$$

Unter Berücksichtigung der Formel (29) gilt $d_{1,0} = d_{1,1}$; $|d_{2,1} - d_{2,0}| = O(\Delta\eta/2)$. In der weiteren Ableitung wird mit dem Ziel einer weitgehenden Vereinfachung angenommen, dass in erster Näherung die Gleichung $d_{2,1} = d_{2,0}$ erfüllt ist. Weil $v_n = 0$ an der Wand $\eta = 0$ erfüllt ist, folgt daraus nach Anwendung der Formel für das arithmetische Mittel:

$$v_{n,0} + v_{n,1} = 0. \tag{116}$$

Die Größe $v_{\tau,0}$ wird mit der einfachsten Extrapolationsformel [8] berechnet:

$$v_{\tau,0} = v_{\tau,1}. \tag{117}$$

Die Gleichungen (116) und (117) ergeben ein System von zwei algebraischen Gleichungen für die Bestimmung der gesuchten Größen u_0 und v_0:

$$(x_\eta)_0\, u_0 + (y_\eta)_0\, v_0 = -v_{n,1}\, d_{1,1}; \quad (x_\xi)_0\, u_0 + (y_\xi)_0\, v_0 = v_{\tau,1}\, d_{2,1}. \tag{118}$$

Hier wurde berücksichtigt, dass gemäß (24) $z_\eta = 0$ ist. Die Determinante Δ dieses Systems ist ungleich Null:

$$\Delta = \begin{vmatrix} (x_\xi)_0 & (y_\xi)_0 \\ (x_\eta)_0 & (y_\eta)_0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\sigma \sin\xi & -\sigma\cos\xi \\ B_1 \cos\xi & -B_1 \sin\xi \end{vmatrix} = \sigma B_1 ,$$

mit $\sigma = a + B_1(-0{,}5\Delta\eta - 0{,}5) > 0$. Die Lösung des Systems (118) ergibt:

$$u_0 = \frac{1}{\sigma B_1}\left\{\left[v_{\tau,1} d_{2,1} - (z_\xi)_0\, w_0\right](y_\eta)_0 + v_{n,1} d_{1,1} (y_\xi)_0\right\};$$

$$v_0 = -\frac{1}{\sigma B_1}\left\{\left[v_{\tau,1} d_{2,1} - (z_\xi)_0\, w_0\right](x_\eta)_0 + v_{n,1} d_{1,1} (x_\xi)_0\right\}.$$

Anschließend werden die Größen $\overline{u}_{1/2}$ und $\overline{v}_{1/2}$, welche in die Mittel von Roe für den Vektor

$\overline{U}_{j+1/2}$ eingehen, mit folgenden Formeln berechnet:

$$\overline{u}_{1/2} = (1/2)\left(u^n_{i,1,k} + u_0\right); \quad \overline{v}_{1/2} = (1/2)\left(v^n_{i,1,k} + v_0\right); \quad \overline{w}_{1/2} = w^n_{i,1,k}.$$

Weil die vertikalen Wände zueinander parallel sind, gelten für $\eta = 1$ die gleichen Formeln wie für den oben betrachteten Fall $\eta = 0$.

7. Numerische Ergebnisse

7.1 Validierung des Fortran - Programms

Zur Validierung des ausgearbeiteten Rechenprogramms wurden die numerischen Ergebnisse mit der exakten analytischen Lösung für den Fall der Ausbreitung einer Stoßwelle in einem Kanal verglichen. Für diesen Fall waren die Anfangsbedingungen von ρ, u, v, w gegeben und nur abhängig von x. Außerdem sind die Geschwindigkeitskomponenten $v(x,y,z,0)$ und $w(x,y,z,0)$ gleich Null. Die exakte Lösung lässt sich aus den folgenden Bedingungen von Rankine – Hugoniot ableiten:

$$U_s(\rho_1 - \rho_0) = q_1 - q_0; \quad q_1(U_s - u_1) - q_0(U_s - u_0) = p_1 - p_0. \tag{119}$$

In diesen Gleichungen ist U_s die stationäre Geschwindigkeit der Stoßwelle. Die Größen mit

dem Index „1“ beziehen sich auf den Zustand des Gases hinter der Front, die Größen mit dem Index „0“ – vor der Front der Stoßwelle. Es wird der Fall betrachtet, dass sich das Medium vor der Stoßwelle im Ruhezustand befindet, d.h. $u_0 = q_0 = 0$. Aus (119) folgt dann

$$U_s(\rho_1 - \rho_0) = q_1; \qquad U_s\, q_1 = q_1 u_1 + p_1 - p_0. \tag{120}$$

Wird die erste Gleichung von (120) auf beiden Seiten mit U_s multipliziert, so folgt

$$U_s^2(\rho_1 - \rho_0) = U_s q_1. \tag{121}$$

Weil außerdem gilt $u_1 = q_1 / \rho_1$ und damit $q_1 u_1 = q_1^2 / \rho_1 = U_s^2(\rho_1 - \rho_0)^2 / \rho_1$, kann die zweite Gleichung von (120) auch in der Form

$$U_s^2(\rho_1 - \rho_0) = U_s^2(\rho_1 - \rho_0)^2 / \rho_1 + p_1 - p_0. \tag{122}$$

geschrieben werden. Aus (121) und (122) ergibt sich folgende Formel für das Quadrat der Geschwindigkeit der Stoßwelle ableiten

$$U_S^{\ 2} = (\rho_1 / \rho_0)\left[\ln(\rho_1) - \ln(\rho_0)\right] / (\rho_1 - \rho_0). \tag{123}$$

Sind die Werte von ρ_0 und $\rho_1 > \rho_0$ gegeben, so kann mit (123) die Geschwindigkeit der stationären Stoßwelle, mit $u_1 = U_s(\rho_1 - \rho_0)/\rho_1$ und (20) auch die Geschwindigkeit und der Druck hinter ihr berechnet werden.

Um die Richtigkeit der Programmierung der im Pkt. 6 abgeleiteten Differenzengleichungen auf dem krummlinigen Gitter zu prüfen, wurde ein Fortran – Programm für einen rechteckigen Kanal mit konstantem Querschnitt entwickelt. Für diesen konkreten Fall wurde folgende Transformation von den kartesischen Koordinaten x, y, z zu den krummlinigen Koordinaten ξ, η, ς: $x = \xi$, $y = B_1\eta$, $z = H_1\varsigma$ durchgeführt, wobei B_1 und H_1 die inneren Abmessungen des Kanalquerschnitts sind (siehe Bild 1). Die metrischen Ableitungen vereinfachen sich dabei zu folgenden Ausdrücken:

$$\xi_x = 1,\ \xi_y = \xi_z = 0;\ \ \eta_x = \eta_z = 0,\ \eta_y = 1/B_1;\ \ \varsigma_x = \varsigma_y = 0,\ \varsigma_z = 1/H_1. \tag{124}$$

Bei dem durchgeführten Test des Programms wurden folgende Größen für den Kanal angesetzt: $B_1 = H_1 = 0{,}04$ m., Länge des Kanals entlang der x – Achse, $L = 1$ m.

In den Berechnungen, dessen Ergebnisse im Bild 6 dargestellt sind, wurden die Quellterme auf der rechten Seite der Impulserhaltungsgleichung (2) gleich Null gesetzt, um die numerischen mit den genauen Ergebnisse zu vergleichen. Die Bilder 6 zeigen die Ergebnisse der numerischen Berechnung und die exakte Lösung (gestrichelte Linie) für den Moment $t = t_n$, wenn die Schockwelle den Kanal noch nicht verlassen hat. Für die numerische Berechnung wurde ein Rechengitter, bestehend aus 100×10×10 Zellen verwendet. Aus den Bildern 6(e)

und 6(f) ist ersichtlich, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schockwelle von Schema Roe richtig reproduziert wird. Das Profil der mit dem Differenzen – Verfahrens erhaltenen Lösung ist monoton.

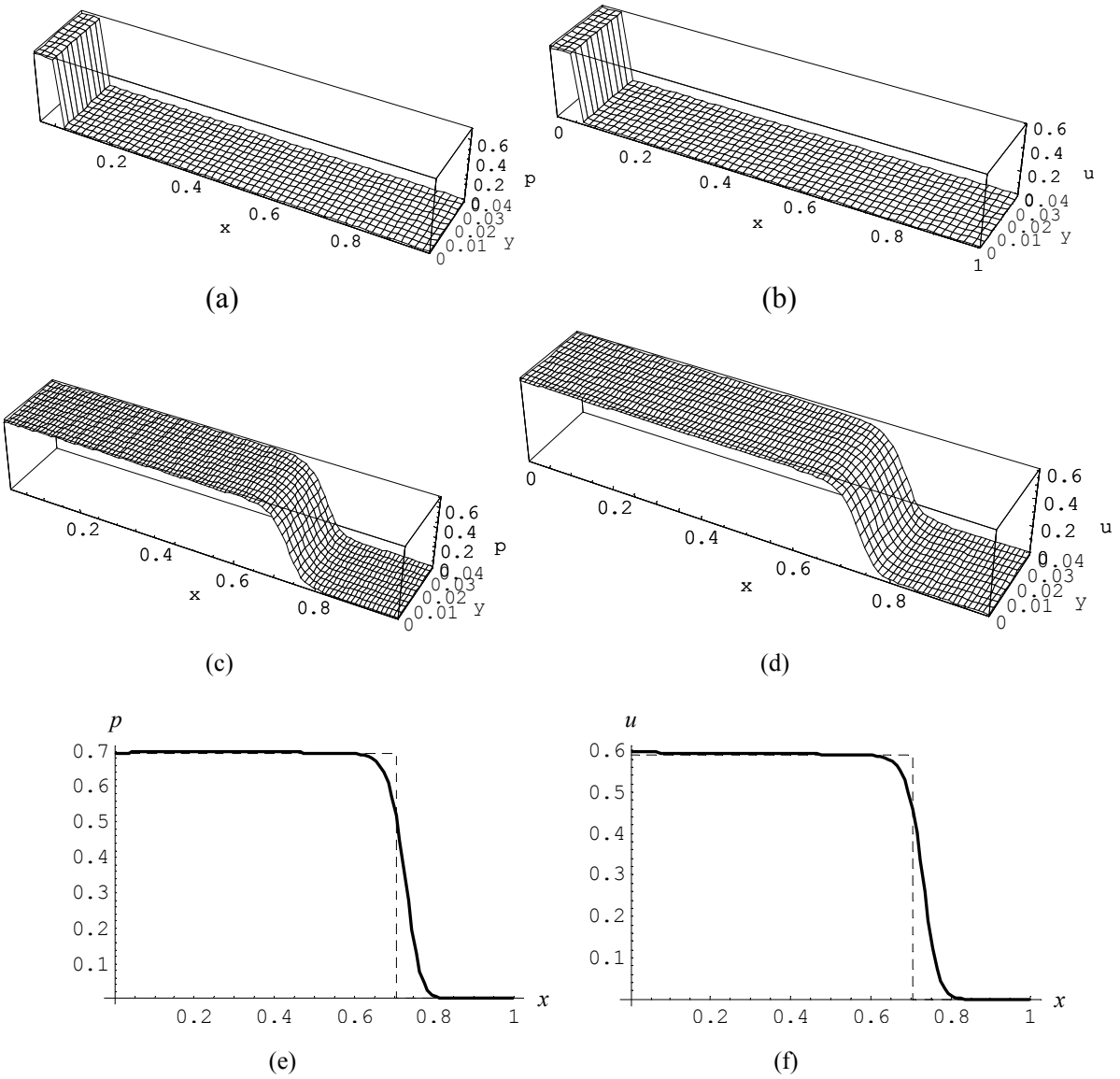


Bild 6: Stationäre Schockwelle in einem Kanal bei einer Courant – Zahl C = 0,5: der Druckverlauf $p = p(x,y,0,t)$ (a) und der Geschwindigkeitsverlauf $u = u(x,y,0,t)$ (b) bei $t = 0$; der Druckverlauf $p = p(x,y,0,t)$ (c) und der Geschwindigkeitsverlauf $u = u(x,y,0,t)$ (d) nach 150 Zeitschritten; der Druckverlauf $p(x,0,02,0,02,t)$ (e) und die Geschwindigkeit der Komponente $u(x,0,02,0,02,t)$ (f) nach 150 Zeitschritten.

7.2 Strömungsprozesse im Spiralkompensator

7.2.1 Eingangsdaten für die dreidimensionalen Berechnungen

Nach erfolgreicher Prüfung des ausgearbeiteten Fortran – Programms kann dieses für die Untersuchung der dreidimensionalen Flüssigkeitsströmung in realen Spiralkompensatoren

von drehschlagenden Bohranlagen eingesetzt werden. Ziel dieser Untersuchungen ist es, solche geometrischen Parameter des spiralförmigen Kanals zu bestimmen, die einen maximal möglichen Dämpfungseffekt der periodischen Druckstöße, welche sich im Kanal nach oben und unten ausbreiten, zu erreichen.

Die Aufgabe der optimalen Konstruktion von Spiralkompensatoren wurde numerisch in [3] mit Hilfe eines eindimensionalen mathematischen Modells der Flüssigkeitsströmung gelöst. Insbesondere wurde gezeigt, dass der Dämpfungseffekt des Kompensators mit wachsender Länge des spiralförmigen Kanals zunimmt. Diese wird auch durch eine dichte Packung der Windungen erreicht, d.h., wenn die Wandstärke zwischen den Windungen gegen Null geht. Andererseits kann bei einer gegebenen Höhe des Spiralkompensators die Anzahl der Windungen dadurch erhöht werden, dass die Breite B_1 des hydraulischen Querschnittes größer als seine Höhe H_1 gewählt wird. In [3] wurde für eine gegebene Höhe des Spiralkompensators und einen konkreten Volumenstrom Q_0 der Flüssigkeit die optimalen Werte für die Innenabmessungen B_1 und H_1 des Kanals bestimmt, die den größten Dämpfungseffekt gewährleisten.

Unter Berücksichtigung der Arbeitsergebnisse [3] wurden folgende Ziele für die dreidimensionale numerische Berechnung der Flüssigkeitsströmung im Spiralkompensator formuliert:

- Kotrolle und Präzisierung des Dämpfungseffektes des Spiralkompensators;
- Information über das Bild der Flüssigkeitsströmung in verschieden Momenten der Zeit und in verschiedenen Querschnitten des hydrodynamischen spiralförmigen Kanals;
- Vergleich der Ergebnisse der eindimensionalen mit den dreidimensionalen Berechnungen des Druckes am oberen Ausgang des Kanals.

In [3] wurde bereits darauf hingewiesen, dass die Geometrie des spiralförmigen Kanals mit rechtwinkligem Querschnitt gemäß (23) und (24) eine Funktion der Parameter $a, b, H, d, z_{\max}$, Δz ist. Unter Berücksichtigung der Empfehlungen [3] wird in den dreidimensionalen Berechnungen (siehe unten) nur der Fall einer dichten Packung der Windungen, welche dem Wert $\Delta z / \overline{H} = 1$ entspricht, betrachtet.

Bezeichnen mit p_{out} den maximalen Druck der Flüssigkeit am oberen Ausgang des Querschnittes $\xi = s_{\max}$ vom Spiralkompensator. Wie in [3] gezeigt wurde, hängt die Höhe des Druckes stark vom Volumenstrom Q_0 der Flüssigkeit ab. Außerdem hängt der Wert von p_{out}, wie in den Zustandsgleichungen (14), (16) und (17) gezeigt wird, auch von den Elastizitätsmodulen E_{F} und E_{M} ab. Und schließlich hängt der Dämpfungseffekt, wie die Berechnungen [3] zeigen, von der Höhe der Drücke $p_{\min}$ und $p_{\max}$ am unteren Eintritt (siehe

Gleichungen (12) und (13) des Kompensators $\xi = 0$ ab. Die Größe des Druckes p_{out} am oberen Ausgang des Spiralkompensators ist damit eine Funktion folgender Parameter:

$$p_{out}t = F(a, B, H, d, z_{max}, p_{min}, p_{max}, Q_0, E_F, E_M). \tag{125}$$

In den numerischen Untersuchungen wurden , wie bereits in [3], folgende Parameter fixiert:

$E_F = 20{,}5 \cdot 10^8$ N/m²; $E_M = 200 \cdot 10^9$ N/m²;

$d = 1$ cm; $z_{max} = 0{,}6$ m;

$a = 13$ cm; $\rho_0 = 1100$ kg /m³;

$p_{min} = 1$ MPa; $p_{max} = 16$ Mpa;

Frequenz f = 25 Hz.

Im Ergebnis reduziert sich die Funktion (125) auf eine Funktion von nur drei Variablen:

$$p_{out} = F_1(B, H, Q_0). \tag{126}$$

Die Werte für den Elastizitätsmodul der Flüssigkeit E_F (Wasser) und für das Material des spiralförmigen Kanals E_M (Stahl) wurden [15] entnommen. Für die Berücksichtigung der konkreten Stahlmarke, die für die Fertigung des Spiralkompensators eingesetzt wird, muss der Wert für E_M aus den entsprechenden Handbüchern entnommen werden.

Es sei darauf hingewiesen, dass den dreidimensionalen Berechnungen ein kürzerer Kompensator, als in [3] zu Grunde gelegt wurde (anstelle von $z_{max} = 0{,}9$ m wurde $z_{max} = 0{,}6$ m gewählt). Dies ist damit verbunden, dass in Übereinstimmung mit Formel (29) die Anzahl der Windungen proportional zu z_{max} ist. Zur Gewährleistung einer ausreichend hohen Genauigkeit der Ergebnisse ist mit zunehmenden z_{max} eine sehr hohe Anzahl von Knoten längs der ξ – Achse erforderlich. Ist z.B. N_1 die Anzahl der Knoten des Rechennetzes, welche eine ausreichende Genauigkeit bei $z_{max} = 0{,}6$ m gewährleistet, so ist für die Berechnung der Strömung in einem Kompensator mit einer Höhe von $z'_{max} = 0{,}9$ m eine Knotenzahl von N'_1 notwendig, wobei gilt:

$$N'_1 = \left[(z'_{max} / z_{max})N_1\right], \tag{127}$$

Der größte Teil der Rechenzeit ist für die Berechnung der Funktionen $\mathbf{U}^{n+1}$ auf der Grundlage der Lösung $\mathbf{U}^n$ mit Hilfe des Differenzen – Verfahrens erforderlich. Sie ist damit direkt proportional zur allgemeinen Anzahl der Knoten des Netzes $N_1N_2N_3$. Zur Verringerung der Rechenzeit wurde deshalb die Höhe des Spiralkompensators mit $z_{max} = 0{,}6$ m gewählt.

Die dreidimensionalen Berechnungen, die nachstehend näher beschrieben werden, wurden mit einer Courant – Zahl $C = 0{,}5$ in der Formel (93) für die Berechnung des Zeitschrittes durchgeführt.

7.2.2. Stetige Lösung

Es wird der Fall betrachtet, das am unteren Ende $\xi = s_{\min}$ des Spiralkompensators eine glatte, d.h. stetige Randbedingung (12) vorgegeben ist. Wie bereits in [3] gezeigt wurde, bleibt in diesem Fall die Flüssigkeitsströmung während der gesamten Berechnung stetig und stellt ein ständig wechselndes Gebiet von Verdichtung und Entspannung dar. Außerdem wurde in [3] gezeigt, dass bei gleicher Geometrie des spiralförmigen Kanals stetige Randbedingungen (12) am oberen Ausgang des Kompensators zu einem größeren Dämpfungseffekt führen als unstetige Randbedingungen (13).

Weil die lineare Ausdehnung des betrachteten spiralförmigen Kanals längs der ξ - Achse ungefähr 100-mal größer als die Abmessungen seines rechteckigen Querschnitts B_1 und H_1 sind, ist der entscheidende Faktor für die Genauigkeit der numerischen Berechnungen nach dem Schema von Roe die Größe des Schrittes $\Delta\xi = (s_{max} - s_{min})/(N_1 - 1)$. Wenn beispielsweise $\Delta\eta = \Delta\zeta = 0{,}1$ ist, dann muss zur Gewährleistung eines dreidimensionalen gleichmäßigen Gitternetzes in den Punkten (ξ, η, ζ) eine Schritweite von $\Delta\xi \cong 0{,}001$, oder $N_1 \cong 1000$, vorgegeben werden. Die Berechnung jeder Variante für die Flüssigkeitsströmung im Spiralkompensator erfordert bei einem Gitter, bestehend aus 1000×10×10 Zellen, auf einem Personalcomputer (Pentium III mit einer Taktfrequenz von 1 GHz) eine Rechenzeit von 20 bis 25 Stunden.

Mit dem Ziel, die Rechenzeit/Variante bei Einhaltung einer noch zulässigen Genauigkeit zu senken, wurden eine Reihe von Berechnungen mit stetigen Randbedingungen (12) und zunehmenden Werten für N_1 (Anzahl der Knoten längs der ξ –Achse) durchgeführt. Mit $(p_{\text{out}})_1$ und $(p_{\text{out}})_2$ werden die am oberen Ende des Spiralkompensators erhaltenen maximalen Druckwerte bezeichnet, die bei der Knotenanzahl $N_1 = N_1^{(1)}$ $N_1 = N_1^{(2)}$, $N_1^{(2)} > N_1^{(1)}$ erhalten werden. Es wird angenommen, dass mit dem Wert $N_1^{(2)}$ eine ausreichende Genauigkeit erreicht ist, wenn folgende Bedingung erfüllt wird:

$$\delta p_{\text{out}} = |(p_{\text{out}})_1 - (p_{\text{out}})2|/(p_{\text{out}})_2 \cong 0{,}01 \ . \qquad (128)$$

N_1	161	241	321
p_{out}, bar	143,60	147,28	148,93
δp_{out}	–	0,025	0,011

Tabelle 1: Druckwerte p_{out} beim Einsatz der Randbedingungen (12) für eine leicht erhöhte Anzahl von Netzknoten N_1 entlang der ξ - Achse

In der Tabelle 1 sind die Werte p_{out} dargestellt, die für einige Werte N_1 bei $N_2 = N_3 = 12$ zum

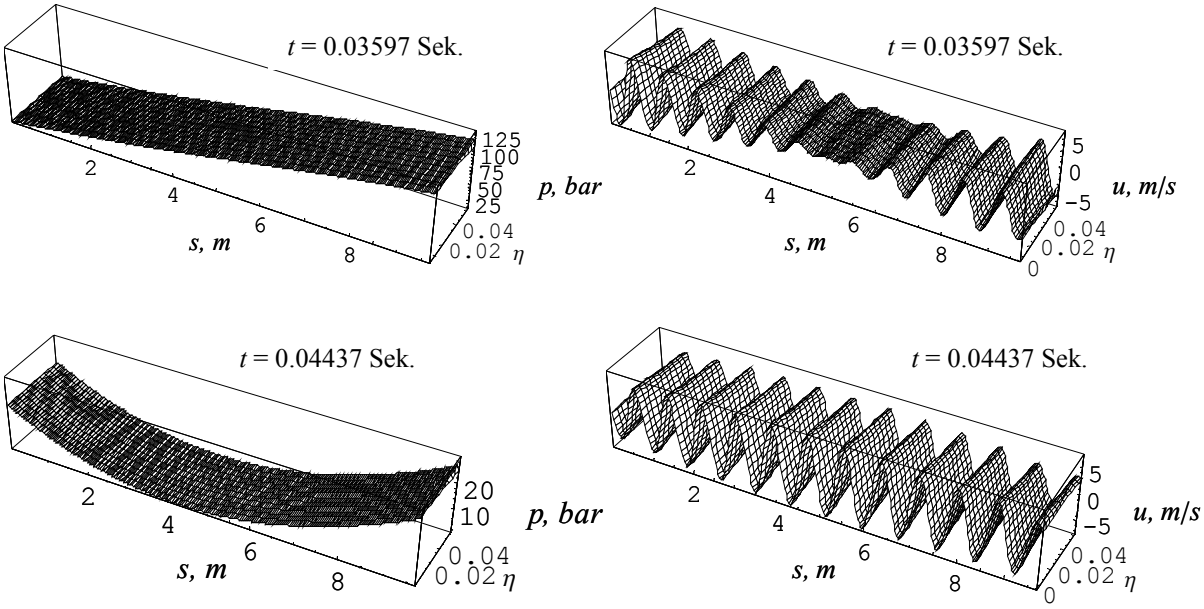
Zeitpunkt t = 0,03597 s erhalten wurden. Der Durchfluss der Flüssigkeit beträgt bei diesen Berechnungen Q_0 = 600 Liter/min. Die bei diesem Flusswert Q_0 in [3] gefundenen optimale Abmessungen des rechteckigen Kanals (B = 0,08 m und H = 0,0466 m), wurden in diesen Berechnungen ebenfalls verwendet. Aus Tabelle 1 folgt, dass der Wert N_1 = 321 aus der Sicht des gewählten Genauigkeitskriteriums (128) hinreichend genau ist. Bei allen in Tabelle 1 genannten N_1 – Werten waren 30.000 Zeitschritte bis zum Zeitpunkt t = 0,03597 s erforderlich. Das Rechennetz für den Fall N_1 = 161, $N_2 = N_3$ = 12 ist im Bild 5 dargestellt. Für die graphische Darstellung der Ergebnisse längs des spiralförmigen Kanals wurde der Kanal längs einer geraden Linie ausgerichtet.

In den Bildern 9 sind die Oberflächen für den Druckverlauf p und für die resultierende Geschwindigkeit u im Querschnitt $\zeta = 0.5$ in den zwei Zeitpunkten $t = 30000\tau$ = 0,03597s und $t = 37000\tau$ = 0,04437 s dargestellt. Es ist offensichtlich, dass die Lösung bis zu diesen Zeitpunkten stetig ist. Die Bilder 10 zeigen die Isolinien einiger Parameter des Strömungsfeldes in verschiedenen Querschnitten des Kanals. Es sei angemerkt, dass in den Bildern 10 (a), wie auch in 16 (a), ein lokales kartesisches Koordinatensystem verwendet wurde, dessen Ursprung (0, 0) in der unteren Ecke des Querschnitts ξ = const, d.h. in der Nähe von der z - Achse liegt. Die Koordinaten von $\overline{r}$ und $\overline{z}$ ändern sich gemäß $\overline{r} = \sqrt{x^2 + y^2} - (a - 0,5B_1)$ und $\overline{z} = z - (c_1\xi_i - 0,5\overline{H}_1)$ an den Rändern $0 \le \overline{r} \le B_1$ und $0 \le \overline{z} \le \overline{H}_1$. In den Bildern 10 (b) und 10 (c), wie auch in 16 (b) und 16 (c), ist die horizontale Koordinate die dimensionsbehaftete Bogenlänge des Kanals, welche längs der ξ – Achse in Meter gemessen wird. In vertikaler Richtung verläuft die Koordinate $\overline{r}$. Es ist zu erkennen, dass längs der $\overline{r}$ - Achse, d.h. faktisch längs der η – Achse, sich die Größen p und ρ nur schwach ändern. Dies ist auch unmittelbar aus dem Bild 9 (a) sichtbar.

Das Profil der resultierenden Geschwindigkeiten u, v, w längs der ξ – Achse unterscheidet sich zu den Zeitpunkten t = 0,03597 s und t = 0,04437 s im starken Maße voneinander (siehe Bild 11): bei t = 0,03597 s gibt es ungefähr in der Mitte des spiralförmigen Kanals ein Gebiet

mit einer stehenden Strömung (siehe auch Bild 12 (b)). Unterhalb dieses Strömungsgebietes bewegen sich die Flüssigkeitsteilchen im Kanal von oben nach unten in Richtung des unteren Ausgangs vom Kanal, oberhalb dieses Gebietes – von unten nach oben in Richtung des oberen Ausgangs vom Kanal. Dieser Effekt ist damit verbunden, dass jede Verdichtungswelle, die zu einem bestimmten Zeitpunkt am unteren Ende des Kompensators entsteht, sich nach oben ausbreitet und dabei Flüssigkeit aus dem Kompensator verdrängt. Weil jedoch jeder Verdichtungswelle eine Verdünnungswelle folgt, streben die Flüssigkeitsteilchen gleich wieder zum unteren Ausgang des Kompensators.

Es ist klar, dass die stehende Zone im Laufe der Zeit in Richtung der oberen Öffnung des Kompensators wandert. Zum Zeitpunkt t = 0,04437 s (siehe Bilder 11 (b) und 12 (c)) hat sie offensichtlich den Kompensator verlassen, wobei in diesem Moment der Modul des Geschwindigkeitsvektors in der Mitte des Kompensators seinen größten Wert erreicht.



(a) (b)

Bild 9: Oberfläche des Drucks $p = p(\xi, \eta, 0{,}5, t)$ (a) und der resultierenden Geschwindigkeit $u = u(\xi, \eta, 0{,}5, t)$ (b) in verschiedenen Zeitpunkten t. Volumenstrom Q_0 = 600 Liter/min., B = 0,08 m., H = 0,0466 m.

Im Bild 13 sind einige numerische Ergebnisse dargestellt, die für den Fall eines stetigen Druckverlaufes (12) am Eingang des Kanals erhalten wurden. Aus Bild 13 (b) ist zu erkennen, dass die dreidimensionale Strömung im spiralförmigen Kanal zu verschiedenen Zeitpunkten stetig bleibt.

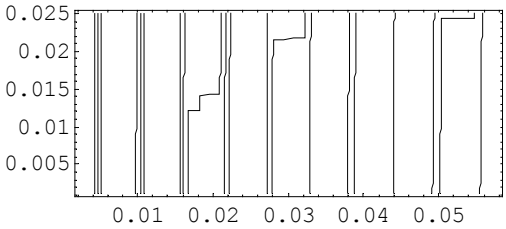
Bild 14 zeigt einen Vergleich der dreidimensionalen Berechnungen des mittleren Druckes p und der mittleren resultierenden Geschwindigkeit u_t am oberen Ausgang des spiralförmigen Kanals $\xi = s_{max}$ mit den Ergebnissen der eindimensionalen Berechnung auf der Grundlage des

TVD – Schemas zweiter Ordnung von [3]. Der mittlere Druck zu jedem Zeitpunkt t_n wurde aus dem mittleren arithmetischen Mittel der Druckwerte $p^n_{N_1-1/2,j,k}$ bestimmt. Die mittlere resultierende Geschwindigkeitstangente u_t im Querschnitt $\xi = s_{max}$ wurde aus dem entsprechenden arithmetischen Mittelwert

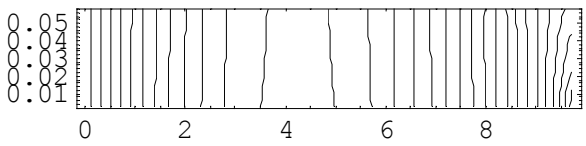
$$(u_t)^n_{N_1-1/2,j,k} = \frac{(x_\xi)_{N_1-1/2} u^n_{N_1-1/2,j,k} + (y_\xi)_{N_1-1/2} v^n_{N_1-1/2,j,k} + (z_\xi)_{N_1-1/2} w^n_{N_1-1/2,j,k}}{\sqrt{(x_\xi)^2_{N_1-1/2} + (y_\xi)^2_{N_1-1/2} + (z_\xi)^2_{N_1-1/2}}}, \qquad \text{berechnet.}$$

Wie aus Bild 14 zu erkennen ist, stimmen die dreidimensionalen Berechnungen mit den eindimensionalen gut überein. Der maximale Druck p_{out}, am Ausgang des Kompensators beträgt bei der eindimensionalen Berechnung 152,245 bar, bei der dreidimensionalen Berechnung – 148,93 bar (Tabelle 1). Damit ergibt das mathematische Modell der dreidimensionalen Strömung einen etwas niedrigeren maximalen Druck p_{out} als das eindimensionale Modell. Außerdem kann aus Bild 14 (b) abgeleitet werden, dass sich die Flüssigkeit im spiralförmigen Kanal vorrangig tangential zu seinen vertikalen Wänden bewegt.

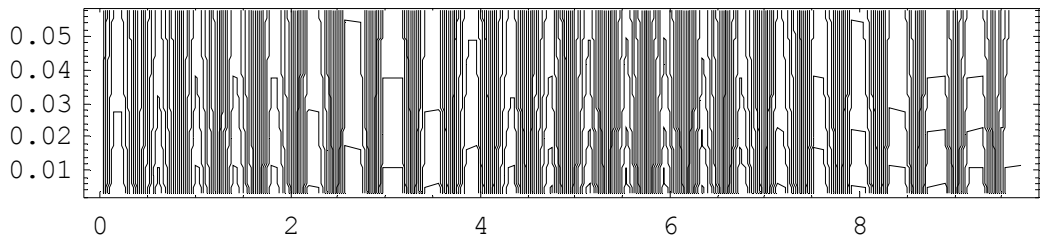
Sowohl im Falle einer stetigen als auch unstetigen dreidimensionalen Strömung entstanden im Gegensatz zu den eindimensionalen Berechnungen (siehe [3]) im spiralförmigen Kanal keine negativen Drücke. Ein möglicher Grund wird im folgenden Sachverhalt gesehen: Es wird angenommen, dass in einem bestimmten Punkt *P(x,y,z)* der Druck sein Minimum erreicht hat. Das bedeutet, dass überall in der unmittelbaren Umgebung des Punktes *P* der Druck höher ist als in diesem Punkt. Diese führt zu einem Druckgradienten in alle drei Richtungen ξ, η, ζ und damit zu einem Zufluss von Flüssigkeit zum Punkt *P*. Im Ergebnis erhöht sich die Masse und mit ihr die Dichte in der Zelle des Punktes *P*. Mit anderen Worten, gewährleistet das drei-



(a)

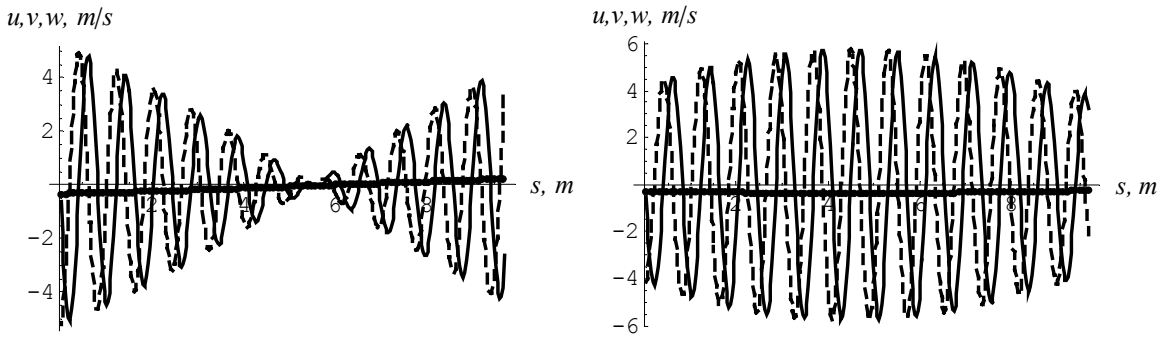


(b)



(c)

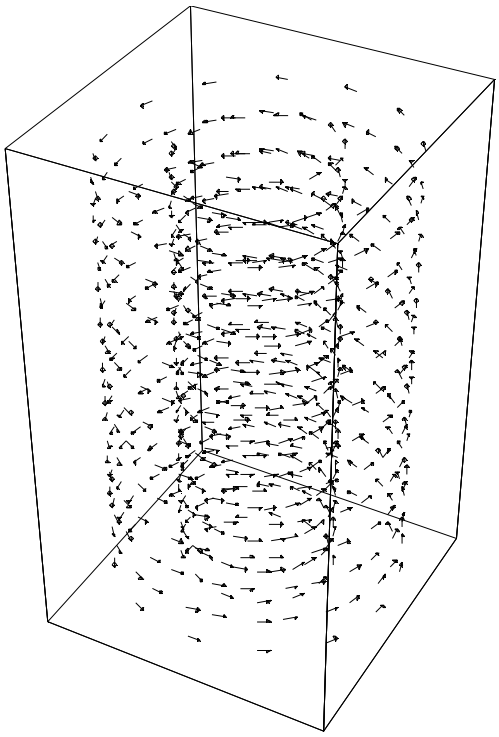
Bild 10: Verteilung der Strömungsfeldgrößen zum Zeitpunkt t = 0,04437 s; (a) Isolinien der Dichte im Querschnitt ξ = 159,5$\Delta\xi$; (b) Isobaren im Querschnitt ζ = 0,5; Isolinien der resultierenden Geschwindigkeit im Querschnitt ζ = 0,5 .



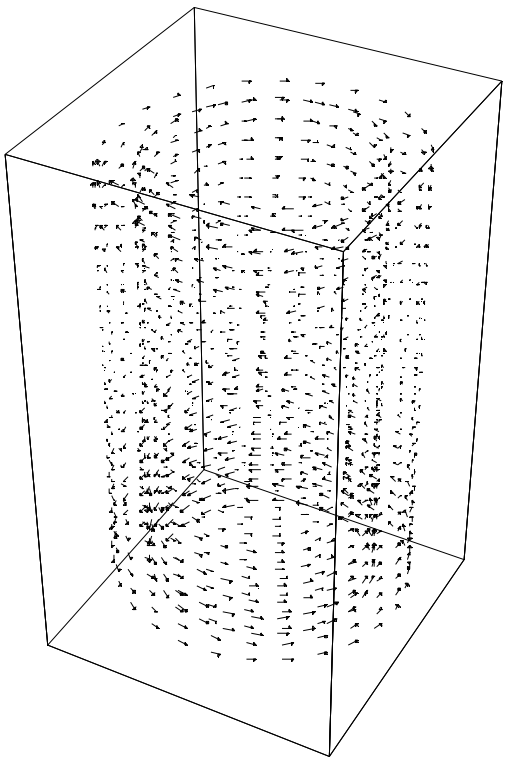
(a) (b)

Bild 11: Profil der resultierenden Geschwindigkeit u, v, w längs der Achse $s = \xi$ im Querschnitt η = 0,5, ζ = 0,5 bei t =0,03597 s; (a) bei t = 0,04437 s; (b):): u (durchgehende Linie), v (gestrichelte Linie), w (Punkte).

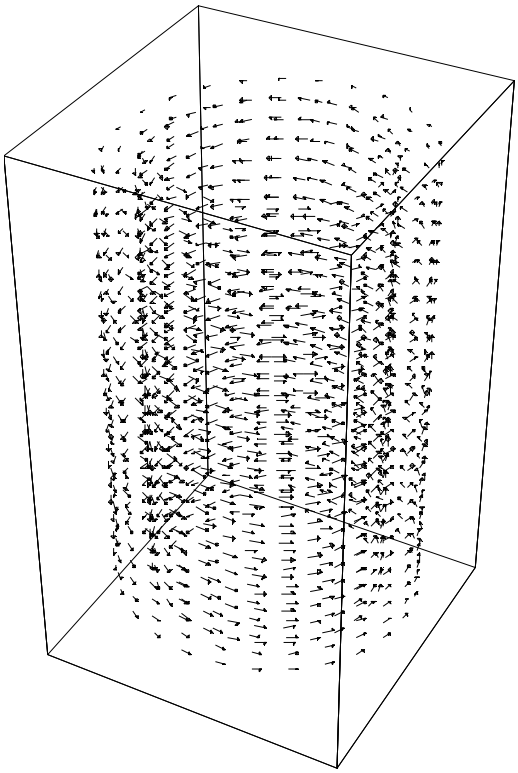
dimensionale Modell einen stärkeren Zufluss der Flüssigkeit aus verschiedenen Richtungen zu einem Punkt als das eindimensionale. Obwohl, wie bereits oben erwähnt, die Flüssigkeit vorrangig tangential zu den Wänden fließt, gewährleisten offensichtlich selbst kleinste Flüsse einen noch positiven Druck, z.B. von 10^{-10} bar.



(a)

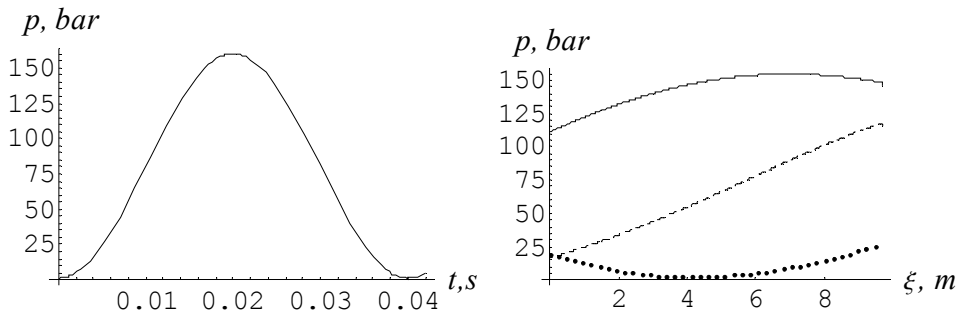


(b)



(c)

Bild 12: Vektorfeld der Strömungsgeschwindigkeit für verschiedene Zeitpunkte:
(a) $t = 0$;
(b) $t = 0{,}03597$ s und
(c) $t = 0{,}04437$ s.

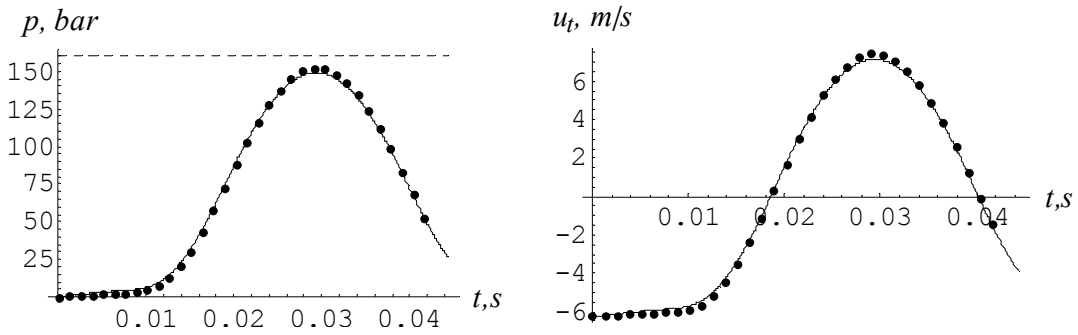


(a) (b)

Bild 13: Numerische Ergebnisse für den Druck im Fall Q_0 = 600 Liter / min im Querschnitt η = 0,5, ζ = 0,5;

(a) Druckverteilung im Eingangsquerschnitt $\xi = s_{min}$ in Übereinstimmung mit (12); (b) Druckverteilung

(b) längs des spiralförmigen Kanals zu verschiedenen Zeitpunkten: durchgehende Linie - t = 23000 τ = 0,02758 s; gestrichelte Linie - t = 30000 τ = 0,03597 s.; punktierte Linie - t = 37000 τ = 0,04437 s.



(a) (b)

Bild 14: Mittlerer Druck (a) und resultirende tangentiale Geschwindigkeit (b) als Funktion der Zeit im Querschnitt $\xi = s_{max}$ des Kanals. Durchgehende Linie – Ergebnisse der dreidimensionalen Berechnung bei t = 0,04437 s; punktierte Linie – Ergebnisse der eindimensionalen Berechnung mit dem TVD – Schema aus [3].

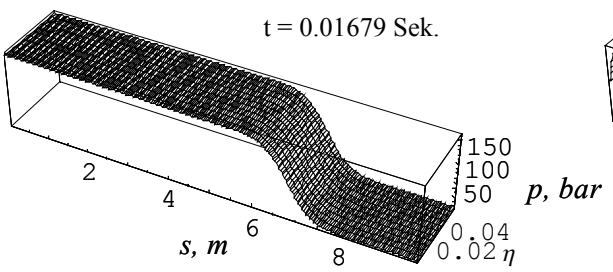
7.2.3. Unstetige Lösung

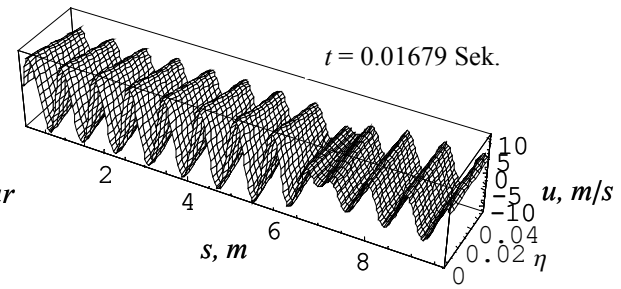
Wie bereits in [3] gezeigt wurde, ist die Flüssigkeitsströmung am unteren Ende des spiralförmigen Kanals im Falle von unstetigen Randbedingungen (13) bei t > 0 ebenfalls unstetig. In diesem Fall wird die Frequenz der Bildung von Stoßwellen durch die Frequenz der Druckschwankungen gemäß (13) bestimmt.

Die Ergebnisse der dreidimensionalen Berechnungen, welche in den Bildern 15 – 20 dargestellt sind, wurden mit Hilfe eines krummlinigen Raumgitters, bestehend aus 321×12×12

Knoten, erhalten. Bild 15 zeigt die Oberflächen des Drucks p und der resultierenden Geschwindigkeit u im Querschnitt $\zeta = 0{,}5$ in den Zeitpunkten $t = 14000\ \tau = 0{,}01679$ s und $t = 50000\ \tau = 0{,}05996$ s. Der Zeitpunkt t = 0,01679 s wurde so gewählt, dass es möglich war zu zeigen, wie sich die erste Stoßwelle, die sich am unteren Ende des Kompensators bildet, ausbreitet. Im Bild 16 werden die Isolinien einiger Parameter des Strömungsfeldes in verschiedenen Querschnitten dargestellt. Aus den Bildern 15 und 16 ist ersichtlich, dass längs der $\bar{r}$ - Achse, d.h. faktisch längs der η – Achse, sich die Größen p und ρ nur schwach ändern. Dieser Sachverhalt wurde bereits im Falle einer stetigen Strömung festgestellt.
Das Profil der resultierenden Geschwindigkeiten u, v, w längs der ξ-Achse unterscheidet sich jedoch bei $t = 0{,}01679$ s und $t = 0{,}05996$ s erheblich voneinander (siehe Bild 17): bei $t = 0{,}01679$ s tritt in der oberen Hälfte des spiralförmigen Kanals eine stehende Strömung auf (siehe auch 18 (a)). Unterhalb dieser Zone fließen die Flüssigkeitsteilchen von unten nach oben in Richtung des Ausgangs vom Kanal, oberhalb dieser Zone – von oben nach unten in Richtung des Eingangs vom Kanal.

Dies ist damit verbunden, dass aus dem Gebiet mit dem erhöhten Druck hinter der Druckwellenfront die Flüssigkeit von unten nach oben aus dem Kompensator getrieben wird. Oberhalb dieser Druckwellenfront wird sie jedoch auch gleichzeitig in den Kompensator gepumpt. Deshalb fließen die Flüssigkeitsteilchen oberhalb der Druckwellenfront im spiralförmigen Kanal weiter von oben nach unten. Folglich gibt es bei $t = 0.01679$ s innerhalb des Kompensators ein kleines Gebiet, in dem die in entgegengesetzte Richtung fließenden Flüssigkeitsteilchen aufeinander stoßen. Dies führt zur Bildung einer von unten nach oben wandernden Ruhezone, die sich gemeinsam mit der Druckwellenfront fortpflanzt. Der Zusammenstoß dieser aufeinandertreffenden Ströme führt jedoch nicht zu einer merklichen Druckerhöhung in diesem Gebiet. Die Gründe dafür sind: a) in dimensionslosen Einheiten ist die Intensität der Druckwelle sehr niedrig; b) die Strömungsgeschwindigkeit der Spülflüssigkeit liegt im Bereich von 5 – 10 m/s und ist damit relativ klein.





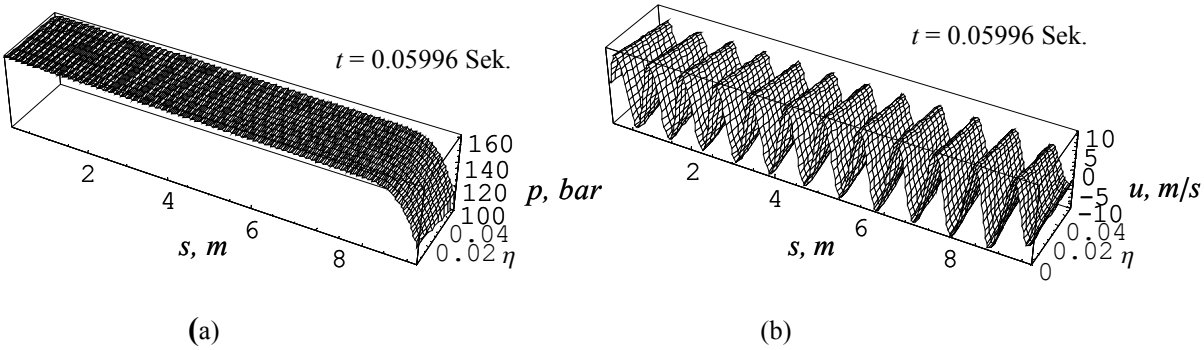


Bild 15: Druckoberfläche $p = p(\xi, \eta, 0.5, t)$ (a) und resultierende Geschwindigkeit $u = u(\xi, \eta, 0.5, t)$ (b) zu verschieden Zeitpunkten t bei einem Volumenstrom von Q_0 = 600 Liter/min, B = 0.08 m und H = 0.0466 m.

Wie aus dem Bild 18 (b) zu erkennen ist, bewegt sich die Flüssigkeit im Moment t = 0.0599 s von unten nach oben über die gesamte Länge des Kanals. Dies ist der Tatsache geschuldet, dass in diesem Moment der Druck überall gleich dem Druck hinter der Druckwellenfront ist (siehe auch Bild 15 (a)).

Im Bild 19 sind die numerischen Ergebnisse, die für den Fall der unstetigen Druckfunktion (13) erhalten wurden, dargestellt. Außerdem ist z erkennen, dass der Druck hinter der Druckwellenfront im Zuge ihrer Fortpflanzung in Richtung des oberen Ausgangs abfällt (Bild 19 (b)). Das bedeutet, dass der Kompensator einen Dämpfungseffekt hat.

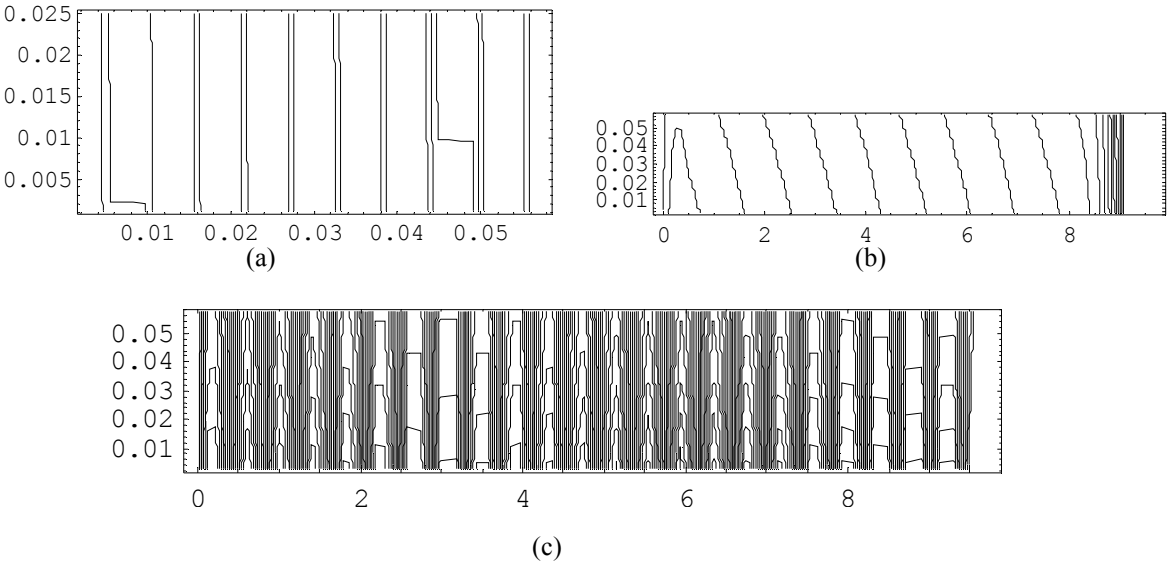


Bild 16: Verteilung der Größen im Strömungsfeld bei t = 0.05996 s; (a) Isolinien der Dichte im Querschnitt $\xi = 159.5\Delta\xi$; (b) Isobaren im Querschnitt $\zeta = 0.5$; (c) Isolinien der resultierenden Geschwindigkeit u im Querschnitt $\zeta = 0.5$.

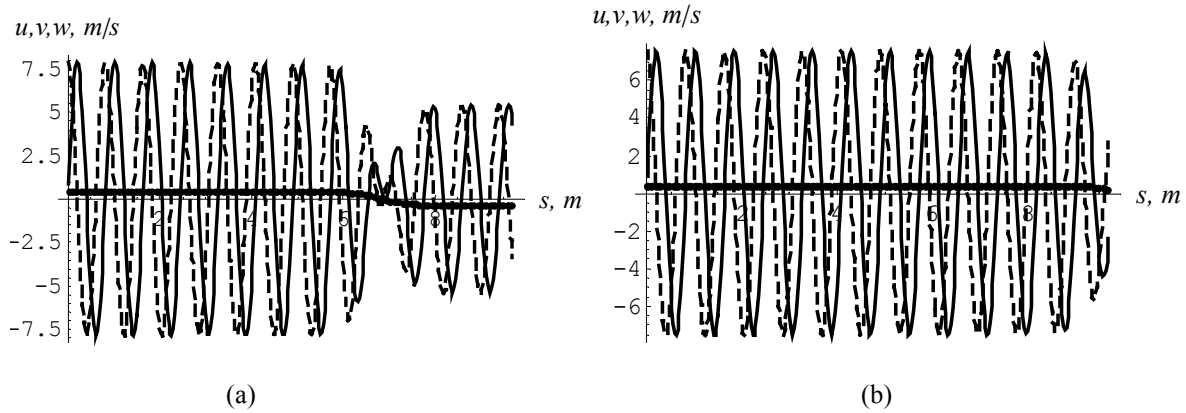


Bild 17: Profile der resultierenden Geschwindigkeit *u, v, w* längs der Achse $s = \xi$ im Querschnitt $\eta = 0.5$, $\zeta = 0.5$ bei t =0.01679 s (a) und bei t = 0.05996 s (b): *u* (durchgehende Linie), *v* (gestrichelte Linie) und *w* (Punkte).

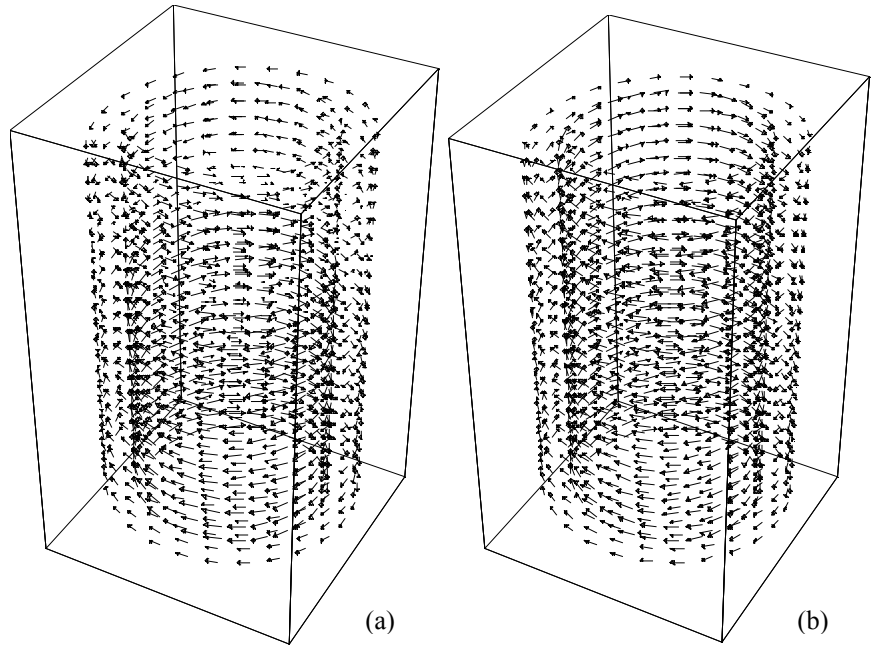


Bild 18: Plot des Vektorfeldes der Strömungsgeschwindigkeit für verschiedene Zeitpunkte: (a) t = 0.01679 s und (b) t = 0.05996 s.

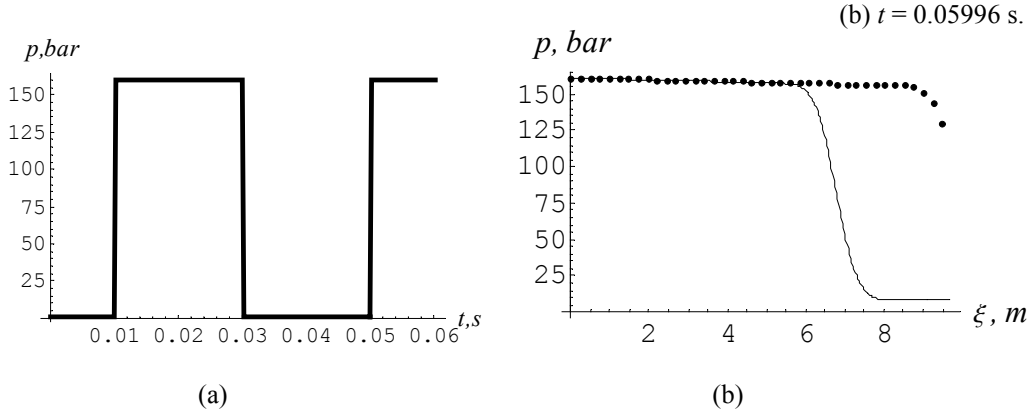


Bild 19: Numerische Ergebnisse für den Druck bei Q_0 = 600 Liter/min im Querschnitt $\eta = 0.5$, $\zeta = 0.5$:

(a) Druckverteilung am Eingangsquerschnitt $\xi = s_{min}$ gemäß (13);

(b) Druckverteilung längs des spiralförmigen Kanals zu verschiedenen Zeitpunkten: durchgehende Linie - $t = 14000\ \tau = 0.01679$ s; punktierte Linie $t = 50000\ \tau = 0.05996$ s.

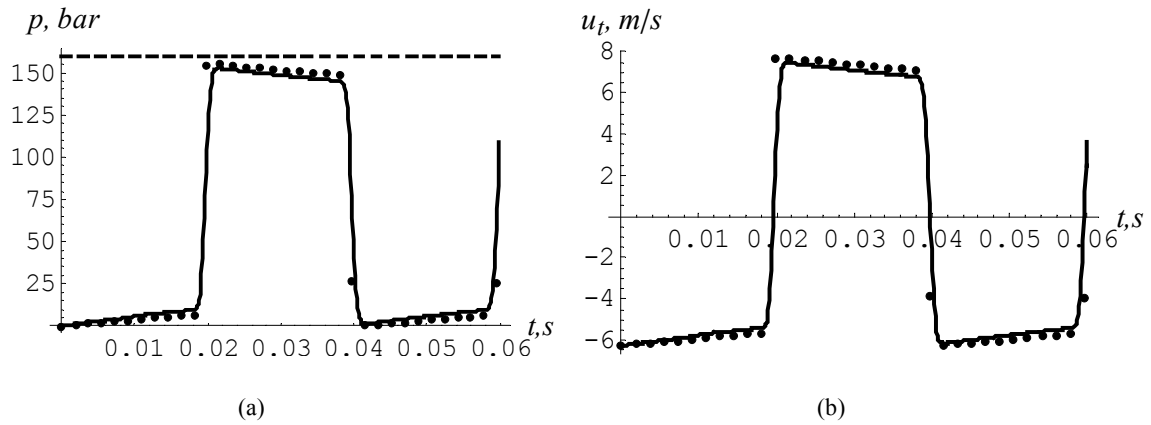


Bild 20: Mittlerer Druck (a) und tangierende resultierende Geschwindigkeit (b) als Funktion der Zeit am Ausgangsquerschnitt $\xi = s_{max}$ des Kanals: durchgehende Linie – Ergebnisse der dreidimensionalen Berechnung bei t = 0.05996 s, punktierte Linie – Ergebnisse der eindimensionalen Berechnung mit dem TVD-Verfahren [3].

Im Bild 20 werden die Ergebnisse der dreidimensionalen Berechnung des mittleren Druckes und der tangierenden resultierenden Geschwindigkeit u_t am Ausgangsquerschnitt $\xi = s_{max}$ des Kanals mit den Ergebnissen der eindimensionalen Berechnungen auf der Grundlage des TVD- Verfahrens [3] dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der drei- und eindimensionalen Berechnungen gut übereinstimmen. Der maximale Druck p_{out} am Ausgang des Kompensators beträgt bei eindimensionaler Berechnung 155.724 bar und bei dreidimensionaler Berechnung - 152.416 bar. Das mathematische Modell der dreidimensionalen Strömung ergibt damit wie erwartet einen etwas größeren Dämpfungseffekt als das eindimensionale Modell.

Im Bild 20 ist außerdem zu erkennen, dass bei der Berechnung mit dem TVD- Verfahren die Druck- und Geschwindigkeitssprünge über die Zeit nicht so intensiv verwischt sind, obwohl nur 200 Zellen auf der x – Achse zum Einsatz kamen. Das ist damit verbunden, dass das TVD– Verfahren, beschrieben in [3], von zweiter Ordnung aber das Verfahren von Roe – von erster Ordnung der Genauigkeit ist.

8. Zusammenfassung der Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wurden ein Differenzenverfahren für die Berechnung einer dreidimensionalen Strömung von kompressiblen Flüssigkeiten in einem spiralförmigen Kompensator für drehschlagende Bohranlagen und einige Ergebnisse der mit diesem Verfahren durchgeführten numerischen Berechnungen vorgestellt. Das Ziel dieser Berechnungen bestand in der Präzisierung der in [3] erhaltenen Ergebnisse auf der Grundlage des eindimensionalen Modells.

Die umfangreichen Berechnungen haben gezeigt, dass die grundlegenden Schlussfolgerungen in [3] sich im vollen Umfang bestätigt haben. Insbesondere ist hervorzuheben, dass die dreidimensionalen Berechnungen im Vergleich mit den eindimensionalen einen größeren Dämpfungseffekt ergeben. Dies liegt daran, dass das dreidimensionale Modell die Geometrie des spiralförmigen Kompensators viel besser als das eindimensionale Modell widerspiegelt. Deshalb kann auch unterstellt werden, dass die dreidimensionalen Berechnungen genauere Aussagen über den realen Dämpfungseffekt des Kompensators erlauben.

Für die konstruktive Gestaltung und Auslegung von spiralförmigen Kompensatoren wird deshalb folgende Vorgehensweise vorgeschlagen:

1) Optimale Auslegung und Konstruktion des vorgeschlagenen spiralförmigen Kompensators durch eine Serie eindimensionaler Berechnungen.
2) Überprüfung der vorgeschlagenen Konstruktion und des spiralförmigen Kompensators mit Hilfe von dreidimensionalen Berechnungen.

Aus den oben durchgeführten Berechnungen lassen noch zwei weitere Schlussfolgerungen ableiten:

- Die Berechnungen zeigen, dass die numerischen Lösungen nur sehr schwach von der radialen Koordinate η abhängig sind. Deshalb kann durch Mittelung längs der radialen Koordinate η aus den Gleichungen (18) ein quasizweidimensionales Modell für die Beschreibung der instationären Flüssigkeitsströmung im spiralförmigen Kanal des Kompensators abgeleitet werden. In einem derartigen Modell hängen die Strömungsparameter nur von den Variablen ξ, ζ und t ab. Der praktische Einsatz eines solchen Modells führt zwangsläufig zu einer erheblichen Einsparung an Rechenzeit.
- Durch örtliche Änderung der Krümmung des Kanals, z. B. durch lokal eingegrenzte glatte Erhebungen oder Beulen , kann der Dämpfungseffekt des Kompensators verstärkt werden. An allen Punkten mit einer sprungartigen Änderung des Krümmungsradius erfolgt eine Diffraktion der Druckwellen, d.h. eine vielfache Reflektion der Strömung an den Wänden des Kanals. Die damit verbundene Verlängerung des Strömungsweges der Flüssigkeitsteilchen und Vergrößerung der Reibung an der Rohrwand des Kanals führt zu einem stärkeren Dämpfungseffekt des Kompensators. Derartige kleine Änderungen der Geometrie des Kanals können nur mit Hilfe eines dreidimensionalen Rechenmodells berücksichtigt werden. Das in dieser Arbeit vorgestellte Rechenmodell und Fortran - Programm bietet dazu eine gute Basis.

Anhang 1: Ausdrücke für die Matrizen R_1,R_2 und R_3

Zunächst werden die Ausdrücke für die Matrizen **A, B, C** formuliert, die in die Formeln (60) eingehen:

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ c^2-u^2 & 2u & 0 & 0 \\ -uv & v & u & 0 \\ -uw & w & 0 & u \end{pmatrix},\ \mathbf{B}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ -uv & v & u & 0 \\ c^2-v^2 & 0 & 2v & 0 \\ -vw & 0 & w & v \end{pmatrix},\ \mathbf{C}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ -uw & w & 0 & u \\ -vw & 0 & w & v \\ c^2-w^2 & 0 & 0 & 2w \end{pmatrix}$$

In der Zerlegung

$$\hat{\mathbf{A}}=J\left(\xi_x\mathbf{A}+\xi_y\mathbf{B}\right)\mathbf{R}_1\mathbf{\Lambda}_1\mathbf{R}_1^{-1} \qquad \text{(A.1)}$$

ist $\mathbf{\Lambda}_1$ – Diagonalmatrix, auf deren Hauptdiagonale die Eigenwerte der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ stehen, wobei vielfache Eigenwerte sich auf der Diagonale entsprechend ihrer Multiplizität wiederholen.

Es sei $\mathbf{X}_k$ – der rechte Eigenvektor der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$, d.h. $\mathbf{X}_k$ erfüllt die Gleichung $\hat{\mathbf{A}}_k\mathbf{X}_k=\lambda_k\mathbf{X}_k$, $k=1,...,4$. Wenn, wie bekannt, die Spalten der Matrix $\mathbf{R}_1$ sich in der Zerlegung (A.1) aus den Koordinaten der rechten Eigenvektoren der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ zusammensetzen, dann ist

$$\mathbf{R}_1=(\mathbf{X}_1|\mathbf{X}_2|\mathbf{X}_3|\mathbf{X}_4). \qquad \text{(A.2)}$$

Die vertikalen Züge in (A.2) trennen eine Spalte von der anderen.

Analog sei $\mathbf{Y}_k$ der linke Eigenvektor der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$, der dem Eigenwert λ_k entspricht, d.h. $\mathbf{Y}_k$ erfüllt die Gleichung

$$\mathbf{Y}_k\hat{\mathbf{A}}=\lambda_k\mathbf{Y}_k\ ,\ k=1,...,4.$$

Damit bestehen die Zeilen der Matrix $\mathbf{R}_1^{-1}$ bei der Zerlegung (A.1) aus den Koordinaten der linken Eigenvektoren der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$, d.h.

$$\mathbf{R}_1^{-1}=\begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \hline \mathbf{Y}_2 \\ \hline \mathbf{Y}_3 \\ \hline \mathbf{Y}_4 \end{pmatrix},$$

wobei die horizontalen Striche eine Zeile von der anderen trennen.

Für die Berechnung der Matrizen $\mathbf{R}_1$ und $\mathbf{\Lambda}_1$ bei der Zerlegung der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ (A.1) können folgende, im System *Mathematica* 4.1 integrierte Funktionen eingesetzt werden: Eigenvalues[**A**] und Transpose[Eigenvectors[**A**]]. Integriert sind außerdem die eingebauten Funktionen JordanDecomposition[**A**], welche gleichzeitig $\mathbf{R}_1$ und $\mathbf{\Lambda}_1$ berechnet. Deshalb wurde gerade die Funktion

$$[\mathbf{R}_1, \mathbf{\Lambda}_1] = \mathbf{JordanDecomposition[As]},$$

wo $\mathbf{As} \equiv \hat{\mathbf{A}}$, a ist, eingesetzt.

$$\mathbf{\Lambda}_1 = \mathrm{diag}(\lambda_1^{(1)}, \lambda_2^{(1)}, \lambda_3^{(1)}, \lambda_4^{(1)}),\ \lambda_1^{(1)} = \lambda_2^{(1)} = J\hat{u},\ \lambda_3^{(1)} = \lambda_1^{(1)} - Jc\,|\nabla\xi|,\ \lambda_4^{(1)} = \lambda_1^{(1)} + Jc\,|\nabla\xi|,$$

$$|\nabla\xi| = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}, \quad \hat{u} = \xi_x u + \xi_y v.$$

Im Ergebnis wurde folgender Ausdruck für die Matrix $\tilde{\mathbf{R}}_1$ gefunden:

$$\tilde{\mathbf{R}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dfrac{1}{w} & \dfrac{1}{w} \\ 0 & -\dfrac{\xi_y}{\xi_x} & \dfrac{-c\xi_x + u\,|\nabla\xi|}{w\,|\nabla\xi|} & \dfrac{c\xi_x + u\,|\nabla\xi|}{w\,|\nabla\xi|} \\ 0 & 1 & \dfrac{-c\xi_y + v\,|\nabla\xi|}{w\,|\nabla\xi|} & \dfrac{c\xi_y + v\,|\nabla\xi|}{w\,|\nabla\xi|} \\ 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.3}$$

Bei der Ableitung der Formel (A.3) wurde der Sachverhalt, dass gemäß (27) die Ableitung $\xi_z = 0$ ist, genutzt. Dies führte zu einer wesentlichen Vereinfachung der Ausdrücke für die Elemente der Matrix $\tilde{\mathbf{R}}_1$.

Aus der Formel (A.3) ist ersichtlich, dass in einigen Elementen der Matrix $\tilde{\mathbf{R}}_1$ im Nenner die resultierende Geschwindigkeit w steht. Damit entstehen im Fall $w = 0$ in diesen Elementen Singularitäten. Andererseits ist bekannt, dass die Matrix $\tilde{\mathbf{R}}_1$ in der Jordanschen Zerlegung nicht eindeutig bestimmt ist. Tatsächlich, wenn $\mathbf{D_1}$ eine nichtsingulare diagonale Matrize und $\mathbf{R}_1 = \tilde{\mathbf{R}}_1\mathbf{D}_1$ ist , dann folgt aus $\mathbf{R}_1\mathbf{\Lambda}_1\mathbf{R}_1^{-1}$:

$$\mathbf{R}_1\mathbf{\Lambda}_1\mathbf{R}_1^{-1} = \tilde{\mathbf{R}}_1\mathbf{D}_1\mathbf{\Lambda}_1\left(\tilde{\mathbf{R}}_1\mathbf{D}_1\right)^{-1} = \tilde{\mathbf{R}}_1\mathbf{D}_1\mathbf{\Lambda}_1\mathbf{D}_1^{-1}\tilde{\mathbf{R}}_1^{-1} = \tilde{\mathbf{R}}_1\mathbf{\Lambda}_1\mathbf{R}_1^{-1} = \hat{\mathbf{A}}.$$

Demnach kann man eine solche diagonale Matrize $\mathbf{D}_1$ wählen, die gewährleistet, dass keine Singularitäten in den Elementen der Matrix (A.3) auftreten. Diese Forderung erfüllt die folgende Matrix $\mathbf{D}_1$:

$$\mathbf{D}_1 = \mathrm{diag}(c,\ c\xi_x,\ w,\ w).$$

Im Ergebnis ist:

$$\mathbf{R}_1 = \tilde{\mathbf{R}}_1\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -c\xi_y & -c\hat{\xi}_x + u & c\hat{\xi}_x + u \\ 0 & c\xi_x & -c\hat{\xi}_y + v & c\hat{\xi}_y + v \\ c & 0 & w & w \end{pmatrix},\ \mathbf{R}_1^{-1} = \begin{pmatrix} -\dfrac{w}{c} & 0 & 0 & \dfrac{1}{c} \\ \dfrac{u\xi_y - v\xi_x}{c\,|\nabla\xi|^2} & \dfrac{-\xi_y}{c\,|\nabla\xi|^2} & \dfrac{\xi_x}{c\,|\nabla\xi|^2} & 0 \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\hat{\xi}_x u + \hat{\xi}_y v}{c}\right) & -\dfrac{\hat{\xi}_x}{2c} & -\dfrac{\hat{\xi}_y}{2c} & 0 \\ \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\hat{\xi}_x u + \hat{\xi}_y v}{c}\right) & \dfrac{\hat{\xi}_x}{2c} & \dfrac{\hat{\xi}_y}{2c} & 0 \end{pmatrix}, \tag{A.4}$$

wo $\hat{\xi}_x = \xi_x / |\nabla\xi|, \hat{\xi}_y = \xi_y / |\nabla\xi|$.

In analoger Weise kann die Jordanische Zerlegung folgender Matrix

$$\hat{\mathbf{B}} = J(\eta_x\mathbf{A} + \eta_y\mathbf{B}) = \mathbf{R}_2\mathbf{\Lambda}_2\mathbf{R}_2^{-1} \ ,$$

wo

$\mathbf{\Lambda}_2 = \mathrm{diag}(\lambda_1^{(2)}, \lambda_2^{(2)}, \lambda_3^{(2)}, \lambda_4^{(2)})$, $\lambda_1^{(2)} = \lambda_2^{(2)} = J\hat{v},\ \lambda_3^{(2)} = \lambda_1^{(2)} - Jc\,|\nabla\eta|,\ \lambda_4^{(2)} = \lambda_1^{(2)} + Jc\,|\nabla\eta|$,

$$|\nabla\eta| = \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}, \quad \hat{v} = \eta_x u + \eta_y v.$$

$$\mathbf{R}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -c\eta_y & -c\hat{\eta}_x + u & c\hat{\eta}_x + u \\ 0 & c\eta_x & -c\hat{\eta}_y + v & c\hat{\eta}_y + v \\ c & 0 & w & w \end{pmatrix},\ \mathbf{R}_2^{-1} = \begin{pmatrix} -\dfrac{w}{c} & 0 & 0 & \dfrac{1}{c} \\ \dfrac{u\eta_y - v\eta_x}{c\,|\nabla\eta|^2} & -\dfrac{\eta_y}{c\,|\nabla\eta|^2} & \dfrac{\eta_x}{c\,|\nabla\eta|^2} & 0 \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\hat{\eta}_x u + \hat{\eta}_y v}{c}\right) & -\dfrac{\hat{\eta}_x}{2c} & -\dfrac{\hat{\eta}_y}{2c} & 0 \\ \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\hat{\eta}_x u + \hat{\eta}_y v}{c}\right) & \dfrac{\hat{\eta}_x}{2c} & \dfrac{\hat{\eta}_y}{2c} & 0 \end{pmatrix},$$

wo $\hat{\eta}_x = \eta_x / |\nabla\eta| = \cos\xi,\ \hat{\eta}_y = \eta_y / |\nabla\eta| = -\sin\xi$ unter Berücksichtigung der Formel (27) durchgeführt werden. Schließlich ist

$$\hat{\mathbf{C}} = J(\zeta_x\mathbf{A} + \zeta_y\mathbf{B} + \zeta_z\mathbf{C}) = \mathbf{R}_3\mathbf{\Lambda}_3\mathbf{R}_3^{-1} \ ,$$

wo

$\mathbf{\Lambda}_3 = \mathrm{diag}(\lambda_1^{(3)}, \lambda_2^{(3)}, \lambda_3^{(3)}, \lambda_4^{(3)})$, $\lambda_1^{(3)} = \lambda_2^{(3)} = J\hat{w},\ \lambda_3^{(3)} = \lambda_1^{(3)} - Jc\,|\nabla\zeta|,\ \lambda_4^{(3)} = \lambda_1^{(3)} + Jc\,|\nabla\zeta|$,

$$|\nabla\zeta| = \sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}, \quad \hat{w} = \zeta_x u + \zeta_y v + \zeta_z w.$$

$$\mathbf{R}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ -\dfrac{c\zeta_z}{\zeta_x} & -\dfrac{c\zeta_y}{\zeta_x} & -c\hat{\zeta}_x + u & c\hat{\zeta}_x + u \\ 0 & c & -c\hat{\zeta}_y + v & c\hat{\zeta}_y + v \\ c & 0 & -c\hat{\zeta}_z + w & c\hat{\zeta}_z + w \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{R}_3^{-1} = \begin{pmatrix} \dfrac{\hat{\zeta}_z\left(\hat{\zeta}_x u + \hat{\zeta}_y v\right) - \left(\hat{\zeta}_x{}^2 + \hat{\zeta}_y^2\right) w}{c} & -\dfrac{\hat{\zeta}_x\hat{\zeta}_z}{c} & -\dfrac{\hat{\zeta}_y\hat{\zeta}_z}{c} & \dfrac{\hat{\zeta}_x^2 + \hat{\zeta}_y^2}{c} \\ \dfrac{\hat{\zeta}_x\hat{\zeta}_y u - \hat{\zeta}_x^2 v + \hat{\zeta}_z\left(-\hat{\zeta}_z v + \hat{\zeta}_y w\right)}{c} & -\dfrac{\hat{\zeta}_x\hat{\zeta}_y}{c} & \dfrac{\hat{\zeta}_x^2 + \hat{\zeta}_z^2}{c} & -\dfrac{\hat{\zeta}_y\hat{\zeta}_z}{c} \\ \dfrac{1}{2} + \dfrac{\hat{w}}{2c\,|\nabla\zeta|} & -\dfrac{\hat{\zeta}_x}{2c} & -\dfrac{\hat{\zeta}_y}{2c} & -\dfrac{\hat{\zeta}_z}{2c} \\ \dfrac{1}{2} - \dfrac{\hat{w}}{2c\,|\nabla\zeta|} & \dfrac{\hat{\zeta}_x}{2c} & \dfrac{\hat{\zeta}_y}{2c} & \dfrac{\hat{\zeta}_z}{2c} \end{pmatrix}.$$

Hier ist

$$\hat{\zeta}_x = \zeta_x / |\nabla\zeta|, \quad \hat{\zeta}_y = \zeta_y / |\nabla\zeta|, \quad \hat{\zeta}_z = \zeta_z / |\nabla\zeta|.$$

Außerdem gilt:

$$\mathrm{Det}(\mathbf{R}_1) = -\,2c^3|\nabla\xi| < 0, \ \mathrm{Det}(\mathbf{R}_2) = -\,2c^3|\nabla\eta| < 0, \ \det(\mathbf{R}_3) = -\,2c^3|\nabla\zeta|.$$

Bei der Umwandlung von ζ_x in Null wurden folgende Ausdrücke für $\mathbf{R}_3$ и $\mathbf{R}_3^{-1}$ genutzt:

$$\mathbf{R}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & c & u & u \\ c\zeta_z & 0 & -c\hat{\zeta}_y + v & c\hat{\zeta}_y + v \\ -c\zeta_y & 0 & -c\hat{\zeta}_z + w & c\hat{\zeta}_z + w \end{pmatrix}, \ \mathbf{R}_3^{-1} = \begin{pmatrix} \dfrac{\zeta_z v - \zeta_y w}{c\,|\nabla\zeta|^2} & 0 & \dfrac{-\zeta_z}{c\,|\nabla\zeta|^2} & \dfrac{\zeta_y}{c\,|\nabla\zeta|^2} \\ \dfrac{-u}{c} & \dfrac{1}{c} & 0 & 0 \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\hat{\zeta}_y v + \hat{\zeta}_z w}{c}\right) & 0 & -\dfrac{\hat{\zeta}_y}{2c} & \dfrac{-\hat{\zeta}_z}{2c} \\ \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\hat{\zeta}_x v + \hat{\zeta}_z w}{c}\right) & 0 & \dfrac{\hat{\zeta}_y}{2c} & \dfrac{\hat{\zeta}_z}{2c} \end{pmatrix}.$$

Dabei ist $\det(\mathbf{R}_3) = -2c^3|\nabla\zeta| < 0$.

Abschließend wird das mit Mathematica 4.2 geschriebene Programm **JacABC.nb** für die analytische Berechnung der Matrizen **A**, **B**, **C**, $\mathbf{R}_\nu$, $\mathbf{R}_\nu^{-1}$, $\nu = 1,2,3$ dargestellt. In Übereinstimmung mit den Formeln (83) – (85) für die Stromfunktionen von Roe, müssen für die praktische Realisierung des Verfahrens von Roe die Matrizen $\mathbf{R}_\nu\psi(\mathbf{\Lambda})\mathbf{R}_\nu^{-1}$ berechnet werden. Das Programm **JacABC.nb** berechnet die analytischen Ausdrücke für diese Matrizen. Das Programm enthält außerdem eine Kontrolle über die Richtigkeit der erhaltenen Ausdrücke. Im Fortran – Programm, das die numerische Berechnung auf der Grundlage des

Verfahrens von Roe realisiert, sind diese Ausdrücke für die Matrizen $\mathbf{R}_v\psi(\mathbf{\Lambda})\mathbf{R}_v^{-1}$ aus dem Mathematica – Programm **JacABC.nb.** integriert.

Das *Mathematica*-Programm JacABC.nb fuer die Berechnung der Jacobi-Matrizen A,B,C

Die Berechnung der Jacobi-Matrizen A,B,C

```
U = {ρ, q1, q2, q3};
f = {q1, q1^2/ρ + Log[ρ], q1*q2/ρ, q1*q3/ρ};
A = Table[D[f[[i]], U[[j]] ], {i, 4}, {j, 4}];
A = A /. {q1 → ρ*u, q2 → ρ*v, q3 → ρ*w};
A = A /. {1/ρ → c^2};
A = Simplify[A];

g = {q2, q1*q2/ρ, q2^2/ρ + Log[ρ], q2*q3/ρ};
B = Table[D[g[[i]], U[[j]] ], {i, 4}, {j, 4}];
B = B /. {q1 → ρ*u, q2 → ρ*v, q3 → ρ*w};
B = B /. {1/ρ → c^2};
B = Simplify[B];
Print["A = ", MatrixForm[A], "; B = ", MatrixForm[B]];

h = {q3, q1*q3/ρ, q2*q3/ρ, q3^2/ρ + Log[ρ]};
CC = Table[D[h[[i]], U[[j]] ], {i, 4}, {j, 4}];
CC = CC /. {q1 → ρ*u, q2 → ρ*v, q3 → ρ*w};
CC = CC /. {1/ρ → c^2};
CC = Simplify[CC];
Print["C = ", MatrixForm[CC]];

(* --- Der partikulaere fall csiz = 0 --- *)
(* ---- Die Matrix Fs ---- *)
Fs = J*csix*A + J*csiy*B ;
{R1, lam} = JordanDecomposition[Fs];
lam1 = lam /. {csix → ξx, csiy → ξy};
Print["Die Eigenwerte der Matrix J(ξxA + ξyB)"];
Print["λ1 = ", lam1[[1, 1]], "; λ2 = ", lam1[[2, 2]]];
Print["λ3 = ", lam1[[3, 3]], "; λ4 = ", lam1[[4, 4]]];
```

```
dr1 = PowerExpand[dr1 /. {csix^2 → 1 / J0^2 - csiy^2}];
Print["det(R1) = ", Simplify[dr1]];
R1inv = FullSimplify[Inverse[R1]];
R1inv0 = PowerExpand[R1inv /. {c * csix^2 + c * csiy^2 → c / J0^2}];
R1inv0 = PowerExpand[R1inv0 /. {csix^2 + csiy^2 → 1 / J0^2}];
R1inv0 = R1inv0 /. {csix → ξx, csiy → ξy, J0 → J0};
Print["R1^-1 = ", MatrixForm[R1inv0]];
Fs1 = Simplify[R1.lam.R1inv - Fs];
Print["Der Jacobi-Kommutator = ", MatrixForm[Fs1]];

(* ---- Die Matrix Gs ---- *)
Gs = J * etax * A + J * etay * B;
{R2, lam} = JordanDecomposition[Gs];
lam1 = lam /. {etax → ηx, etay → ηy};
Print["Die Eigenwerte der Matrix J(ηxA + ηyB)"];
Print["λ1 = ", lam1[[1, 1]], "; λ2 = ", lam1[[2, 2]]];
Print["λ3 = ", lam1[[3, 3]], "; λ4 = ", lam1[[4, 4]]];

R2 = FullSimplify[R2];
D1 = {{c , 0, 0, 0}, {0, c etax, 0, 0}, {0, 0, w, 0}, {0, 0, 0, w}};
R2 = Simplify[R2.D1];
R20 = PowerExpand[R2 /. {etax^2 + etay^2 → 1 / B1^2}];
R20 = R20 /. {etax → ηx, etay → ηy};
BB = B; ClearAll[B]; R20 = R20 /. B1 → B1;
Print["R2 = ", MatrixForm[R20]];
dr2 = Det[R2];
dr2 = PowerExpand[dr2 /. {etax^2 → 1 / B1^2 - etay^2}];
dr2 = dr2 /. B1 → B1; Print["det(R2) = ", Simplify[dr2]];
B = BB; R2inv = FullSimplify[Inverse[R2]];
R2inv0 = PowerExpand[R2inv /. {c * etax^2 + c * etay^2 → c / B1^2}];
R2inv0 = PowerExpand[R2inv0 /. {etax^2 + etay^2 → 1 / B1^2}];
BB = B; ClearAll[B];
R2inv0 = R2inv0 /. {etax → ηx, etay → ηy, B1 → B1};
Print["R2^-1 = ", MatrixForm[R2inv0]];
Fs1 = Simplify[R2.lam.R2inv - Gs];
Print["Der Jacobi-Kommutator = ", MatrixForm[Fs1]];

(* --- Der allgemeine Fall, Matrix J (ζx A + ζy B + ζz C) --- *)
 Print["Der allgemeine Fall, Matrix J(ζxA + ζyB + ζzC)"];
B = BB; Hs = zetax * J * A + zetay * J * B + zetaz * J * CC;
{R3, lam} = JordanDecomposition[Hs];
lam1 = lam /. {zetax → ζx, zetay → ζy, zetaz → ζz};
Print["Die Eigenwerte der Matrix J(ζxA + ζyB + ζzC)"];
Print["λ1 = ", lam1[[1, 1]], "; λ2 = ", lam1[[2, 2]]];
Print["λ3 = ", lam1[[3, 3]]]; Print["λ4 = ", lam1[[4, 4]]];
R3 = FullSimplify[R3];
```

```
D1 = {{c, 0, 0, 0},
{0, c * zetax, 0, 0},
{0, 0, -(c * zetaz - w * Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2]) /
      Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2], 0},
{0, 0, 0, (c * zetaz + w * Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2]) /
         Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2]}};
R3 = Simplify[R3.D1];
R30 = R3 /. {zetax → ξx, zetay → ξy, zetaz → ξz};
Print["R3 = ", MatrixForm[R30]];
dr3 = Det[R3] /. {zetax → ξx, zetay → ξy, zetaz → ξz};
Print["det(R3) = ", Simplify[dr3]];
R3inv = FullSimplify[Inverse[R3]];
R3inv0 = R3inv /. {zetax → ξx, zetay → ξy, zetaz → ξz};
Print["R3^-1 = ", R3inv0];
Fs1 = Simplify[R3.lam.R3inv - Hs];
Print["Der Jacobi-Kommutator = ", MatrixForm[Fs1]];

(* --- Der partikulaere Fall, Matrix Hs, zetax=0 --- *)
 Print["Der partikulaere Fall, Matrix J(ξyB + ξzC)"];
Hs = zetay * J * B + zetaz * J * CC;
{R30, lam} = JordanDecomposition[Hs];

lam1 = lam /. {zetax → ξx, zetay → ξy, zetaz → ξz};
Print["Die Eigenwerte der Matrix J(ξyB + ξzC)"];
Print["λ1 = ", lam1[[1, 1]], "; λ2 = ", lam1[[2, 2]]];
Print["λ3 = ", lam1[[3, 3]], "; λ4 = ", lam1[[4, 4]]];
R30 = FullSimplify[R30];
D1 = {{c, 0, 0, 0},
{0, c * zetax, 0, 0},
{0, 0, -(c * zetaz - w * Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2]) /
      Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2], 0},
{0, 0, 0, (c * zetaz + w * Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2]) /
         Sqrt[zetax^2 + zetay^2 + zetaz^2]}};
R30 = Simplify[R30.D1];
R30 = {{0, 0, 1, 1}, {0, c, u, u},
{c * zetaz, 0, -c * zetay / Sqrt[zetay^2 + zetaz^2] + v,
c * zetay / Sqrt[zetay^2 + zetaz^2] + v},
{-c * zetay, 0, -c * zetaz / Sqrt[zetay^2 + zetaz^2] + w,
c * zetaz / Sqrt[zetay^2 + zetaz^2] + w}};
```

```
R300 = R30 /. {zetax → ζx, zetay → ζy, zetaz → ζz};
Print["R30 = ", MatrixForm[R300]];
R30inv = FullSimplify[Inverse[R30]];
R30inv0 = R30inv /. {zetax → ζx, zetay → ζy, zetaz → ζz};
Print["R30^-1 = ", MatrixForm[R30inv0]];
dd = Simplify[Det[R30]] /. {zetay → ζy, zetaz → ζz};
Print["Det(R30) = ", dd];
Fs1 = Simplify[R30.lam.R30inv - Hs];
Print["Der Jacobi-Kommutator = ", MatrixForm[Fs1]];

(* Die Berechnung von R1*Lam1*R1^-1 *)
psiD1 = {{psi1, 0, 0, 0}, {0, psi1, 0, 0}, {0, 0, psi3, 0},
{0, 0, 0, psi4}};
psiD10 = psiD1 /. {psi1 → ψ[λ1], psi3 → ψ[λ3], psi4 → ψ[λ4]};
Print["ψ(Λ1) = ", MatrixForm[psiD10]];
psiA = R1.psiD1.R1inv; psiA = Simplify[psiA];
psiA0 = PowerExpand[psiA /. {csix^2 + csiy^2 → 1 / J0^2}];
psiA0 = psiA0 /. {csix → ξx, csiy → ξy, J0 → J0};
psiA0 = Simplify[psiA0]; psiA0 = Expand[psiA0];
psiA0 = FullSimplify[psiA0];
psiA0 = psiA0 /. {psi1 → ψ1, psi3 → ψ3, psi4 → ψ4};
Print["Die eingefuehrten Notationen:"];
Print["ψ1= ψ(λ1); ψ3= ψ(λ3); ψ4= ψ(λ4)"];
Print["R1ψ(Λ1)R1^-1 = ", psiA0];

(* Die Validierung des Ausdruckes fuer R1 ψ (Λ1) R1^-1:
   falls ψ (Λ1) = I ist, soll auch R1 ψ (Λ1) R1^-1 =I sein *)
psiA0I = psiA0 /. {ψ1 → 1, ψ3 → 1, ψ4 → 1};
psiA0I = FullSimplify[psiA0I];
psiA0I = psiA0I /. {ξx^2 + ξy^2 → 1 / J0^2};
Print["Der partikulaere Fall: ψ(Λ1) = I"];
Print["R1ψ(Λ1)R1^-1 = ", MatrixForm[psiA0I]];

(* Der partikulaere Fall: csix = 1, csiy = 0 *)
Print["Der partikulaere Fall: ξx = 1, ξy\= 0"];
psiA0 = psiA0 /. {ξx → 1, ξy → 0};
Print["R1ψ(Λ1)R1^-1 = ", psiA0];

(* Die Berechnung von R2*Lam2*R2^-1 *)
psiB = R2.psiD1.R2inv; psiB = Simplify[psiB];
psiB0 = PowerExpand[psiB /. {etax^2 + etay^2 → 1 / B1^2}];
psiB0 = psiB0 /. {etax → ηx, etay → ηy};
BB = B; ClearAll[B]; psiB0 = FullSimplify[psiB0 /. B1 → B1];
psiB0 = psiB0 /. {psi1 → ψ1, psi3 → ψ3, psi4 → ψ4};
Print["R2ψ(Λ2)R2^-1 = ", psiB0];
```

```
(* Die Berechnung von R3*Lam3*R3^-1 *)
psiC = R3.psiD1.R3inv; psiC = Simplify[psiC];
psiC0 = psiC /. {zetax → ξx, zetay → ξy, zetaz → ξz};
psiC0 = psiC0 /. {psi1 → ψ1, psi3 → ψ3, psi4 → ψ4};
Print["R3ψ(Λ3)R3^-1 = ", psiC0];

(* Die Berechnung von R30*Lam3*R30^-1 *)
Print["R3ψ(Λ3)R3^-1 im partikulaeren Fall ξx= 0"];
psiC0 = R30.psiD1.R30inv; psiC0 = Simplify[psiC0];
psiC0 = psiC0 /. {zetax → ξx, zetay → ξy, zetaz → ξz};
psiC0 = psiC0 /. {psi1 → ψ1, psi3 → ψ3, psi4 → ψ4};
Print["R3ψ(Λ3)R3^-1 = ", psiC0];
```

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ c^2 - u^2 & 2u & 0 & 0 \\ -u\,v & v & u & 0 \\ -u\,w & w & 0 & u \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ -u\,v & v & u & 0 \\ c^2 - v^2 & 0 & 2v & 0 \\ -v\,w & 0 & w & v \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ -u\,w & w & 0 & u \\ -v\,w & 0 & w & v \\ c^2 - w^2 & 0 & 0 & 2w \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte der Matrix $J(\xi_x A + \xi_y B)$

$$\lambda_1 = J\,u\,\xi_x + J\,v\,\xi_y; \quad \lambda_2 = J\,u\,\xi_x + J\,v\,\xi_y$$
$$\lambda_3 = J\,u\,\xi_x + J\,v\,\xi_y - c\,J\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}; \quad \lambda_4 = J\,u\,\xi_x + J\,v\,\xi_y + c\,J\sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$$

Die neue Notation eingefuehrt : $J_0 = J/(B_1 H_1) = a + B_1(\eta - 0.5)$

$$R_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -c\,\xi_y & u - c\,J_0\,\xi_x & u + c\,J_0\,\xi_x \\ 0 & c\,\xi_x & v - c\,J_0\,\xi_y & v + c\,J_0\,\xi_y \\ c & 0 & w & w \end{pmatrix}$$

$$\det(R_1) = -\frac{2\,c^3}{J0}$$

$$R_1^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{w}{c} & 0 & 0 & \frac{1}{c} \\ \frac{J_0^2(-v\,\xi_x + u\,\xi_y)}{c} & -\frac{J_0^2\,\xi_y}{c} & \frac{J_0^2\,\xi_x}{c} & 0 \\ \frac{1}{2}\left(1 + \frac{J_0(u\,\xi_x + v\,\xi_y)}{c}\right) & -\frac{J_0\,\xi_x}{2c} & -\frac{J_0\,\xi_y}{2c} & 0 \\ \frac{1}{2} - \frac{J_0(u\,\xi_x + v\,\xi_y)}{2c} & \frac{J_0\,\xi_x}{2c} & \frac{J_0\,\xi_y}{2c} & 0 \end{pmatrix}$$

Der Jacobi -Kommutator $= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Die Eigenwerte der Matrix $J(\eta_x A + \eta_y B)$

$$\lambda_1 = J u \eta_x + J v \eta_y; \quad \lambda_2 = J u \eta_x + J v \eta_y$$

$$\lambda_3 = J u \eta_x + J v \eta_y - c J \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}; \quad \lambda_4 = J u \eta_x + J v \eta_y + c J \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}$$

$$R_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -c\,\eta_y & u - c\,B_1\,\eta_x & u + c\,B_1\,\eta_x \\ 0 & c\,\eta_x & v - c\,B_1\,\eta_y & v + c\,B_1\,\eta_y \\ c & 0 & w & w \end{pmatrix}$$

$$\det(R_2) = -\frac{2\,c^3}{B_1}$$

$$R_2^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{w}{c} & 0 & 0 & \frac{1}{c} \\ \frac{B_1^2\,(-v\,\eta_x + u\,\eta_y)}{c} & -\frac{B_1^2\,\eta_y}{c} & \frac{B_1^2\,\eta_x}{c} & 0 \\ \frac{1}{2}\left(1 + \frac{B_1\,(u\,\eta_x + v\,\eta_y)}{c}\right) & -\frac{B_1\,\eta_x}{2\,c} & -\frac{B_1\,\eta_y}{2\,c} & 0 \\ \frac{1}{2} - \frac{B_1\,(u\,\eta_x + v\,\eta_y)}{2\,c} & \frac{B_1\,\eta_x}{2\,c} & \frac{B_1\,\eta_y}{2\,c} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Der Jacobi-Kommutator} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Der allgemeine Fall, Matrix $J(\zeta_x A + \zeta_y B + \zeta_z C)$
Die Eigenwerte der Matrix $J(\zeta_x A + \zeta_y B + \zeta_z C)$

$$\lambda_1 = J u \zeta_x + J v \zeta_y + J w \zeta_z; \quad \lambda_2 = J u \zeta_x + J v \zeta_y + J w \zeta_z$$

$$\lambda_3 = J u \zeta_x + J v \zeta_y + J w \zeta_z - c J \sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}$$

$$\lambda_4 = J u \zeta_x + J v \zeta_y + J w \zeta_z + c J \sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}$$

$$R_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ -\frac{c\,\zeta_z}{\zeta_x} & -c\,\zeta_y & u - \frac{c\,\zeta_x}{\sqrt{\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2}} & u + \frac{c\,\zeta_x}{\sqrt{\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2}} \\ 0 & c\,\zeta_x & v - \frac{c\,\zeta_y}{\sqrt{\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2}} & v + \frac{c\,\zeta_y}{\sqrt{\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2}} \\ c & 0 & w - \frac{c\,\zeta_z}{\sqrt{\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2}} & w + \frac{c\,\zeta_z}{\sqrt{\zeta_x^2+\zeta_y^2+\zeta_z^2}} \end{pmatrix}$$

$$\det(R_3) = -2\,c^3 \sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}$$

$$R_3^{-1} = \left\{\left\{\frac{-w(\xi_x^2+\xi_y^2)+(u\xi_x+v\xi_y)\xi_z}{c(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}, -\frac{\xi_x\xi_z}{c(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}, -\frac{\xi_y\xi_z}{c(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}, \frac{\xi_x^2+\xi_y^2}{c(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}\right\},\right.$$

$$\left\{\frac{\xi_y(u\xi_x+w\xi_z)-v(\xi_x^2+\xi_z^2)}{c\xi_x(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}, -\frac{\xi_y}{c(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}, \frac{\xi_x^2+\xi_z^2}{c\xi_x^3+c\xi_x\xi_y^2+c\xi_x\xi_z^2}, -\frac{\xi_y\xi_z}{c\xi_x(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}\right\},$$

$$\left\{\frac{1}{2}\left(1+\frac{u\xi_x+v\xi_y+w\xi_z}{c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}\right), -\frac{\xi_x}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}, -\frac{\xi_y}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}, -\frac{\xi_z}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}\right\},$$

$$\left.\left\{\frac{1}{2}-\frac{u\xi_x+v\xi_y+w\xi_z}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}, \frac{\xi_x}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}, \frac{\xi_y}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}, \frac{\xi_z}{2c\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}}\right\}\right\}$$

Der Jacobi -Kommutator $= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Der partikulaere Fall, Matrix $J(\xi_y B + \xi_z C)$

Die Eigenwerte der Matrix $J(\xi_y B + \xi_z C)$

$\lambda_1 = J v \xi_y + J w \xi_z$; $\lambda_2 = J v \xi_y + J w \xi_z$

$\lambda_3 = J v \xi_y + J w \xi_z - c J \sqrt{\xi_y^2 + \xi_z^2}$; $\lambda_4 = J v \xi_y + J w \xi_z + c J \sqrt{\xi_y^2 + \xi_z^2}$

$$R_{30} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & c & u & u \\ c\xi_z & 0 & v - \frac{c\xi_y}{\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} & v + \frac{c\xi_y}{\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} \\ -c\xi_y & 0 & w - \frac{c\xi_z}{\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} & w + \frac{c\xi_z}{\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} \end{pmatrix}$$

$$R_{30}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{w\xi_y - v\xi_z}{c\xi_y^2+c\xi_z^2} & 0 & \frac{\xi_z}{c\xi_y^2+c\xi_z^2} & -\frac{\xi_y}{c(\xi_y^2+\xi_z^2)} \\ -\frac{u}{c} & \frac{1}{c} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(1+\frac{v\xi_y+w\xi_z}{c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}}\right) & 0 & -\frac{\xi_y}{2c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} & -\frac{\xi_z}{2c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} \\ \frac{1}{2}-\frac{v\xi_y+w\xi_z}{2c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} & 0 & \frac{\xi_y}{2c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} & \frac{\xi_z}{2c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}} \end{pmatrix}$$

$\mathrm{Det}(R_{30}) = -2c^3\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}$

Der Jacobi -Kommutator $= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

$$\psi(\Lambda_1) = \begin{pmatrix} \psi[\lambda_1] & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \psi[\lambda_1] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \psi[\lambda_3] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \psi[\lambda_4] \end{pmatrix}$$

Die eingefuehrten Notationen :

$\psi_1 = \psi(\lambda_1)$; $\psi_3 = \psi(\lambda_3)$; $\psi_4 = \psi(\lambda_4)$

$$R_1 \psi(\Lambda_1) R_1^{-1} =$$

$$\Big\{\Big\{\frac{J_0\,(u\,\xi_x + v\,\xi_y)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,(\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \frac{J_0\,\xi_x\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \frac{J_0\,\xi_y\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{1}{2\,c}\,(J_0\,(u\,\xi_y\,(v\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,J_0\,\xi_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)) - \xi_x\,((c - u)\,(c + u)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,v\,J_0\,\xi_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)))),$$

$$\frac{J_0\,(2\,c\,J_0\,\xi_y^2\,\psi_1 + u\,\xi_x\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,J_0\,\xi_x^2\,(\psi_3 + \psi_4))}{2\,c},$$

$$\frac{J_0\,\xi_y\,(u\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,J_0\,\xi_x\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{1}{2\,c}\,(J_0\,(v\,\xi_x\,(u\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,J_0\,\xi_x\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)) - \xi_y\,((c - v)\,(c + v)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,u\,J_0\,\xi_x\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)))),$$

$$\frac{J_0\,\xi_x\,(v\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,J_0\,\xi_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},$$

$$\frac{J_0\,(v\,\xi_y\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,J_0\,(2\,\xi_x^2\,\psi_1 + \xi_y^2\,(\psi_3 + \psi_4)))}{2\,c},\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{w\,(J_0\,(u\,\xi_x + v\,\xi_y)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},$$

$$\frac{w\,J_0\,\xi_x\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \frac{w\,J_0\,\xi_y\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \psi_1\Big\}\Big\}$$

Der partikulaere Fall : $\psi(\Lambda_1) = I$

$$R_1 \psi(\Lambda_1) R_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Der partikulaere Fall : $\xi_x = 1$, $\xi_y = 0$

$$R_1 \psi(\Lambda_1) R_1^{-1} = \Big\{\Big\{\frac{u\,J_0\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,(\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \frac{J_0\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ 0,\ 0\Big\},$$

$$\Big\{-\frac{(c - u)\,(c + u)\,J_0\,(\psi_3 - \psi_4)}{2\,c},\ \frac{J_0\,(u\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,J_0\,(\psi_3 + \psi_4))}{2\,c},\ 0,\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{v\,J_0\,(u\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,J_0\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},\ \frac{v\,J_0\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ J_0^2\,\psi_1,\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{w\,(u\,J_0\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},\ \frac{w\,J_0\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ 0,\ \psi_1\Big\}\Big\}$$

$$R_2\psi(\Lambda_2)R_2^{-1} = \Big\{\Big\{\frac{B_1\,(u\,\eta_x + v\,\eta_y)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,(\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},$$

$$\frac{B_1\,\eta_x\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \frac{B_1\,\eta_y\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ 0\Big\},$$

$$\Big\{-\frac{1}{2\,c}\,(B_1\,(u\,\eta_y\,(v\,(-\psi_3 + \psi_4) - c\,B_1\,\eta_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)) +$$

$$\eta_x\,((c - u)\,(c + u)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,v\,B_1\,\eta_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)))),$$

$$\frac{B_1\,(2\,c\,B_1\,\eta_y^2\,\psi_1 + u\,\eta_x\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,B_1\,\eta_x^2\,(\psi_3 + \psi_4))}{2\,c},$$

$$\frac{B_1\,\eta_y\,(u\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,B_1\,\eta_x\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{1}{2\,c}\,(B_1\,(v\,\eta_x\,(u\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,B_1\,\eta_x\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)) -$$

$$\eta_y\,((c - v)\,(c + v)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,u\,B_1\,\eta_x\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)))),$$

$$\frac{B_1\,\eta_x\,(v\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,B_1\,\eta_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},$$

$$\frac{B_1\,(v\,\eta_y\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,B_1\,(2\,\eta_x^2\,\psi_1 + \eta_y^2\,(\psi_3 + \psi_4)))}{2\,c},\ 0\Big\},$$

$$\Big\{\frac{w\,(B_1\,(u\,\eta_x + v\,\eta_y)\,(\psi_3 - \psi_4) + c\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4))}{2\,c},$$

$$\frac{w\,B_1\,\eta_x\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \frac{w\,B_1\,\eta_y\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c},\ \psi_1\Big\}\Big\}$$

$$R_3\psi(\Lambda_3)R_3^{-1} = \Big\{\Big\{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{u\,\zeta_x + v\,\zeta_y + w\,\zeta_z}{c\sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}}\right)\psi_3 + \left(\frac{1}{2} - \frac{u\,\zeta_x + v\,\zeta_y + w\,\zeta_z}{2\,c\sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}}\right)\psi_4,$$

$$\frac{\zeta_x\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c\sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}},\ \frac{\zeta_y\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c\sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}},$$

$$\frac{\zeta_z\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c\sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2}}\Big\},\ \Big\{\frac{1}{2\,c\,(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)}$$

$$\Big(c\,(v\,\xi_x\,\xi_y + w\,\xi_x\,\xi_z - u\,(\xi_y^2+\xi_z^2))\,(2\,\psi_1-\psi_3-\psi_4) + u\,(u\,\xi_x + v\,\xi_y + w\,\xi_z)$$
$$\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(\psi_3-\psi_4) + c^2\,\xi_x\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4)\Big),$$
$$\frac{u\,\xi_x\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,(2\,(\xi_y^2+\xi_z^2)\,\psi_1 + \xi_x^2\,\psi_3 + \xi_x^2\,\psi_4)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)},$$
$$\frac{\xi_y\,\Big(u\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,\xi_x\,(-2\,\psi_1+\psi_3+\psi_4)\Big)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)},$$
$$\frac{\xi_z\,\Big(u\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,\xi_x\,(-2\,\psi_1+\psi_3+\psi_4)\Big)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}\Big\},$$

$$\Big\{\frac{1}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}$$
$$\Big(c\,(\xi_y\,(u\,\xi_x + w\,\xi_z) - v\,(\xi_x^2+\xi_z^2))\,(2\,\psi_1-\psi_3-\psi_4) + v\,(u\,\xi_x + v\,\xi_y + w\,\xi_z)$$
$$\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(\psi_3-\psi_4) + c^2\,\xi_y\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4)\Big),$$
$$\frac{\xi_x\,\Big(v\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,\xi_y\,(-2\,\psi_1+\psi_3+\psi_4)\Big)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)},$$
$$\frac{v\,\xi_y\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,(2\,(\xi_x^2+\xi_z^2)\,\psi_1 + \xi_y^2\,(\psi_3+\psi_4))}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)},$$
$$\frac{\xi_z\,\Big(v\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,\xi_y\,(-2\,\psi_1+\psi_3+\psi_4)\Big)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}\Big\},$$

$$\Big\{\frac{1}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}$$
$$\Big(-c\,(w\,(\xi_x^2+\xi_y^2) - (u\,\xi_x + v\,\xi_y)\,\xi_z)\,(2\,\psi_1-\psi_3-\psi_4) + w\,(u\,\xi_x + v\,\xi_y + w\,\xi_z)$$
$$\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(\psi_3-\psi_4) + c^2\,\xi_z\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4)\Big),$$
$$\frac{\xi_x\,\Big(w\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,\xi_z\,(-2\,\psi_1+\psi_3+\psi_4)\Big)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)},$$
$$\frac{\xi_y\,\Big(w\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,\xi_z\,(-2\,\psi_1+\psi_3+\psi_4)\Big)}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)},$$
$$\frac{w\,\xi_z\sqrt{\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2}\,(-\psi_3+\psi_4) + c\,(2\,(\xi_x^2+\xi_y^2)\,\psi_1 + \xi_z^2\,(\psi_3+\psi_4))}{2\,c\,(\xi_x^2+\xi_y^2+\xi_z^2)}\Big\}\Big\}$$

$R_3\psi(\Lambda_3)R_3^{-1}$ im partikulaeren Fall $\xi_x = 0$

$$R_3\psi(\Lambda_3)R_3^{-1} = \Big\{\Big\{\frac{1}{2}\left(1+\frac{v\,\xi_y + w\,\xi_z}{c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}}\right)\psi_3 + \left(\frac{1}{2}-\frac{v\,\xi_y + w\,\xi_z}{2\,c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}}\right)\psi_4,$$
$$0,\ \frac{\xi_y\,(-\psi_3+\psi_4)}{2\,c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}},\ \frac{\xi_z\,(-\psi_3+\psi_4)}{2\,c\sqrt{\xi_y^2+\xi_z^2}}\Big\},$$

$$\left\{-u\,\psi_1 + \frac{1}{2}\,u\left(1 + \frac{v\,\zeta_y + w\,\zeta_z}{c\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}}\right)\psi_3 + u\left(\frac{1}{2} - \frac{v\,\zeta_y + w\,\zeta_z}{2\,c\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}}\right)\psi_4,\right.$$

$$\left.\psi_1,\ \frac{u\,\zeta_y\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}},\ \frac{u\,\zeta_z\,(-\psi_3 + \psi_4)}{2\,c\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}}\right\},$$

$$\left\{\frac{1}{2\,c\,(\zeta_y^2 + \zeta_z^2)}\left(c\,\zeta_z\,(w\,\zeta_y - v\,\zeta_z)\,(2\,\psi_1 - \psi_3 - \psi_4) + \right.\right.$$

$$\left.v\,(v\,\zeta_y + w\,\zeta_z)\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(\psi_3 - \psi_4) + c^2\,\zeta_y\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(-\psi_3 + \psi_4)\right),$$

$$0,\ \frac{v\,\zeta_y\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,(2\,\zeta_z^2\,\psi_1 + \zeta_y^2\,\psi_3 + \zeta_y^2\,\psi_4)}{2\,c\,(\zeta_y^2 + \zeta_z^2)},$$

$$\left.\frac{\zeta_z\left(v\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,\zeta_y\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)\right)}{2\,c\,(\zeta_y^2 + \zeta_z^2)}\right\},$$

$$\left\{\frac{1}{2\,c\,(\zeta_y^2 + \zeta_z^2)}\left(-c\,\zeta_y\,(w\,\zeta_y - v\,\zeta_z)\,(2\,\psi_1 - \psi_3 - \psi_4) + \right.\right.$$

$$\left.w\,(v\,\zeta_y + w\,\zeta_z)\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(\psi_3 - \psi_4) + c^2\,\zeta_z\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(-\psi_3 + \psi_4)\right),$$

$$0,\ \frac{\zeta_y\left(w\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,\zeta_z\,(-2\,\psi_1 + \psi_3 + \psi_4)\right)}{2\,c\,(\zeta_y^2 + \zeta_z^2)},$$

$$\left.\left.\frac{w\,\zeta_z\sqrt{\zeta_y^2 + \zeta_z^2}\,(-\psi_3 + \psi_4) + c\,(2\,\zeta_y^2\,\psi_1 + \zeta_z^2\,(\psi_3 + \psi_4))}{2\,c\,(\zeta_y^2 + \zeta_z^2)}\right\}\right\}$$

Anhang 2: Mathematica - Programm „Jacobi.nb“ für die Berechnung der metrischen Ableitungen und der Jacobi - Determinante

```
(* ------ Metrische Ableitungen ----- *)
xksi = D[x[u, v, w], u];    xeta = D[x[u, v, w], v];
xzeta = D[x[u, v, w], w];   yksi = D[y[u, v, w], u];
yeta = D[y[u, v, w], v];   yzeta = D[y[u, v, w], w];
zksi = D[z[u, v, w], u];    zeta = D[z[u, v, w], v];
zzeta = D[z[u, v, w], w];

Jac = Simplify[xksi * (yeta * zzeta - yzeta * zeta) -
yksi * (xeta * zzeta - xzeta * zeta) +
zksi * (xeta * yzeta - yeta * xzeta)];
Regel = {u → ξ, v → η, w → ζ, B1 → B1, H1 → H1, c1 → c1};
Jac1 = Jac /. Regel;
Print["J = ", Jac1];

{xksi1, ycsi1, zksi1} = {xksi, yksi, zksi} / Regel;
Print["xξ =", TraditionalForm[xksi1], "; yξ =",
TraditionalForm[ycsi1], "; zξ =", TraditionalForm[zksi1]];

{xeta1, yeta1, zeta1} = {xeta, yeta, zeta} /. Regel;
Print["xη = ", TraditionalForm[xeta1], " yη = ",
TraditionalForm[yeta1], "; zη = ", TraditionalForm[zeta1]];

ksix = (yeta * zzeta - yzeta * zeta) / Jac;
ksiy = (zeta * xzeta - xeta * zzeta) / Jac;
ksiz = (xeat * yzeta - yeta * xzeta) / Jac;
{ksix1, ksiy1, ksiz1} = {ksix, ksiy, ksiz} /. Regel;
Print["ξx = ", TraditionalForm[ksix1], "; ξy = ",
TraditionalForm[ksiy1], "; ξz = ", TraditionalForm[ksiz1]];

etax = Simplify[(zksi * yzeta - yksi * zzeta) / Jac];
etay = Simplify[(xksi * zzeta - xzeta * zksi) / Jac];
etaz = (yksi * xzeta - xksi * yzeta) / Jac;
{etax1, etay1, etaz1} = {etax, etay, etaz} /. Regel;
Print["ηx = ", TraditionalForm[etax1], "; ηy = ",
TraditionalForm[etay1], "; ηz= ", TraditionalForm[etaz1]];
```

```
zetax = Simplify[(yksi * zeta - zksi * yeta) / Jac];
zetay = Simplify[(xeta * zksi - xksi * zeta) / Jac];
zetaz = Simplify[(xksi * yeta - yksi * xeta) / Jac];
zetax1 = zetax /. Regel;  zetay1 = zetay /. Regel;
zetaz1 = zetaz /. Regel;
Print["ζx = ", TraditionalForm[zetax1], "; ζy = ",
TraditionalForm[zetay1]];
 Print["ζz = ", TraditionalForm[zetaz1]];

(* --- Der Nachweis dreier Identitaeten --- *)
Simplify[ksix * xksi + ksiy * yksi + ksiz * zksi]
Simplify[etax * xeta + etay * yeta + etaz * zeta]
Simplify[zetax * xzeta + zetay * yzeta + zetaz * zzeta]
```

$$J = \frac{1}{2} B_1 (2 a + (-1 + 2 \eta) B_1) H_1$$

$$x_\xi = -\sin(\xi) \left(a + \eta B_1 - \frac{B_1}{2}\right); \quad y_\xi = \cos(\xi) \left(-a - \eta B_1 + \frac{B_1}{2}\right); \quad z_\xi = c_1$$

$$x_\eta = \cos(\xi) B_1 \quad y_\eta = -\sin(\xi) B_1; \quad z_\eta = 0$$

$$\xi_x = -\frac{2 \sin(\xi)}{2 a + (2 \eta - 1) B_1}; \quad \xi_y = -\frac{2 \cos(\xi)}{2 a + (2 \eta - 1) B_1}; \quad \xi_z = 0$$

$$\eta_x = \frac{\cos(\xi)}{B_1}; \quad \eta_y = -\frac{\sin(\xi)}{B_1}; \quad \eta_z = 0$$

$$\zeta_x = \frac{2 \sin(\xi) c_1}{2 a H_1 + 2 \eta B_1 H_1 - B_1 H_1}; \quad \zeta_y = \frac{2 \cos(\xi) c_1}{2 a H_1 + 2 \eta B_1 H_1 - B_1 H_1}$$

$$\zeta_z = \frac{1}{H_1}$$

Bibliographie

1. D.S. Pixton. ***A New Generation Mud Driven Rotary Percussion Tool***. Novatek, Provo, Utah, Feb. 1990.
2. Guangzhuo Zhao. ***Entwicklung und Optimierung eines hydraulischen Bohrhammers***. Mitteilungen aus dem Institut für Erdöl- und Erdgastechnik der Technischen Universität Clausthal, Clausthal – Zellerfeld, 1998, 96 S.
3. W. Schacht, E.V. Vorozhtsov, A.F. Voevodin, V.V. Ostapenko. Numerical modelling of hydraulic jumps in a spiral channel with rectangular cross section. ***Fluid Dynamics. Res.*** 2002. V. 31. No. 3. P. 185 – 213.
4. T. Aki. A TVD-scheme study on nonstationary shock reflection. In: ***Soviet Union — Japan Symposium on Computational Fluid Dynamics, Khabarovsk, 9 – 16. IX. 1988. Proceedings,*** Vol. 1/ Edited by P.I. Chushkin and V.P. Korobeinikov, published by Computing Centre of the USSR Academy of Sciences, Moscow, 1989, p. 154 – 160.
5. A.A. Fursenko, D.M. Sharov, E.V. Timofeev, and P.A. Voinovich. Numerical simulation of shock wave interactions with channel bends and gas nonuniformities. In: ***The Second Japan — Soviet Union Joint Symposium on Computational Fluid Dynamics, Tsukuba, August 27 – 31, 1990. Preprints.*** Published by the University of Tsukuba, 1990. P. 273 – 280.
6. A.A. Fursenko, D.M. Sharov, E.V. Timofeev, and P.A. Voinovich. Numerical simulation of shock wave interactions with channel bends and gas nonuniformities. ***Computers and Fluids.*** 1992. V. 21. No. 3. P. 377 – 396.
7. J.H. Ferziger and M. Perić. ***Computational Methods for Fluid Dynamics***. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1996. 356 pp.
8. A. Dadone. Symmetry techniques for the numerical solution of the 2D Euler equations at impermeable boundaries. ***Int. J. for Numer. Methods in Fluids.*** 1998. V. 28. P. 1093 – 1108.
9. S. Aubert, L. Hallo, P. Ferrand, and M. Buffat. Numerical simulations of a three-dimensional nozzle from inviscid to turnulent flows. ***Int. J. of Numer. Methods for Heat & Fluid Flow***. 1995. V. 5. No. 10. P. 889 – 905.
10. G.-C. Zha and E. Bilgen. Numerical study of three-dimensional flows using unfactored upwind-relaxation sweeping algorithm. J. Comput. Phys. 1996. V. 125. No. 2. P. 425 – 433.
11. Г.В. Баженова, Л.Г. Гвоздева, Ю.П. Лагутов, В.Н. Ляхов, Ю.М. Фаресов, В.П. Фокеев. ***Нестационарные взаимодействия ударных и детонационных волн в газах.*** Наука, М., 1986. 206 с.
12. F. Harlow and A. Amsden. Numerical calculation of almost incompressible flow. ***J. Comput. Phys***. 1968. V. 3. P. 80 – 93.
13. P. Colella and K. Pao. A projection method for low speed flows. ***J. Comput. Phys***. 1999. V. 149. No. 2. P. 245 – 269.
14. V. Casulli and D. Greenspan. Pressure method for the numerical solution of transient, compressible fluid flows. ***Int. J. Numer. Methods Fluids***. 1984. V. 4. No. 11. P. 1001 – 1012.
15. G. Patnaik, R.H. Guirguis, J.P. Boris, and E.S. Oran. A barely implicit correction for flux-corrected transport. ***J. Comput. Phys***. 1987. V. 71. No. 1. P. 1 – 20.
16. F. Moukalled and M. Darwish. A high-resolution pressure-based algorithm for fluid flow at all speeds. ***J. Comput. Phys***. 2001. V. 168. No. 1. P. 101 – 130.
17. S.V. Patankar. ***Numerical Heat Transfer and Fluid Flow***. Hemisphere, New York, 1981.
18. R. Klein. Semi-implicit extension of a Godunov-type scheme based on low Mach number asymptotics. I. One-dimensional flow. ***J. Comput. Phys***. 1995. V. 121. No. 2. P. 213 – 237.
19. S. Klainerman and A. Majda. Compressible and incompressible fluids. ***Comm. Pure Appl. Math***. 1982. V. 35. No. 5. P. 629 – 651.
20. A. Chorin and J.E. Marsden. ***A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics***. Springer-Verlag, New York, 1979.
21. J. Sesterhenn, B. Müller, and H. Thomann. On the cancellation problem in calculating low Mach number flows. ***J. Comput. Phys.*** 1999. V. 151. No. 2. P. 597 – 615.
22. G. Volpe. Performance of compressible flow codes at low Mach numbers. ***AIAA J.*** V. 31. No. 1. P. 49 – 56.
23. A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. ***Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge Kutta Time Stepping Schemes***. AIAA Paper 81-1259, 1981.
24. P.L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. ***J. Comput. Phys***. 1981. V. 43. P. 357 – 372.
25. E.F. Toro. ***Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction***. 2nd Edition. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999. 624 pp.
26. Z.U.A. Warsi. ***Fluid Dynamics. Theoretical and Computational Approaches***. CRC Press, Boca Raton, Ann Arbor, 1993. 683 pp.
27. A.F. Voevodin and S.M. Shugrin. ***Numerical Methods for Calculating One-Dimensional Systems***. (in Russian). Nauka, Siberian Branch, Novosibirsk, 1981. 208 pp.
28. G.N. Abramovich. ***Applied Gas Dynamics.*** Pt. I. (in Russian). Nauka, Moscow, 1991. 600 pp.

29. A.P. Merenkov, E.V. Sennova, S.V. Sumarokov, V.G. Sidler, N.N. Novitskiy, V.A. Stennikov, and V.R. Chupin. ***Mathematical Modeling and Optimization of the Systems for Heat, Water, Oil and Gas Supply***. (in Russian). Nauka, Novosibirsk, 1992. 407 pp.
30. W.R. Jenkner. ***Über die Druckstossgeschwindigkeit in Rohrleitungen mit quadratischen und rechteckigen Querschnitten.*** Schweizerische Bauzeitung. 1971. Heft 5. S. 99 – 103.
31. J.A. Swaffield and A.P. Boldy. ***Pressure Surge in Pipe and Duct Systems***. Avebury Technical, Aldershot, Brookfield USA, Hong Kong, Singapore, Sydney, 1993. 358 pp.
32. E.S. Oran and J.P. Boris. ***Numerical Simulation of Reactive Flow***. Elsevier, New York, Amsterdam, 1987. 660 pp.
33. T.H. Pulliam and J.L. Steger. Implicit finite-difference simulations of three-dimensional compressible flow. ***AIAA J***. 1980. V. 18. No. 2. P. 159-167.
34. V.N. Vatsa. Accurate numerical solutions for transonic viscous flow over finite wings. ***J. Aircraft***. 1987. V. 24. No. 6. P. 377 – 385.
35. V.N. Vatsa and B.W. Wedan. Navier-Stokes solutions for transonic flow over a wing mounted in a tunnel. ***AIAA Paper*** 88-0102, 1988. P. 1 – 14.
36. W. Blaschke. ***Einführung in die Differentialgeometrie***. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1950. 225 S.
37. R.F. Warming, R.M. Beam, and B.J. Hyett. Diagonalization and simultaneous symmetriz-ation of the gas-dynamic matrices. ***Mathematics of Computation***. 1975. V. 29. P. 1037 – 1045.
38. С.К. Годунов. Разностный метод численного расчёта разрывных решений гидромеханики. ***Матем. сб.*** 1959. Т. 47(89). № 3. С. 271 – 306.
39. A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. ***J. Comput. Phys***. 1983. V. 49. No. 3. P. 357 – 393.
40. С.К. Годунов, А.В. Забродин, Г.П. Прокопов. Разностная схема для двумерных нестационарных задач газовой динамики и расчет обтекания с отошедшей ударной волной. ***Журн. вычисл. математики и матем. физики***. 1961. Т. 1. № 6. С. 1020 – 1050.
41. V.G. Ganzha and E.V. Vorozhtsov. ***Numerical Solutions for Partial Differential Equations. Problem Solving Using Mathematica***. CRC Press, Boca Raton, New York, 1996. 347 pp.
42. S. Yamamoto and H. Daiguji. Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier—Stokes equations. ***Computers and Fluids***. 1993. V. 22. No. 2/3. P. 259 – 270.
43. Л.В. Овсянников. ***Лекции по основам газовой динамики***. Наука, М., 1981. 368 с.