

INAUGURAL-DISSERTATION

ZUR
ERLANGUNG DER DOKTORWÜRDE
DER
NATURWISSENSCHAFTLICH-MATHEMATISCHEN
GESAMTFAKULTÄT
DER
RUPRECHT-KARLS-UNIVERSITÄT
HEIDELBERG

vorgelegt von
Master of Science Andreas Hauser
aus München

Tag der mündlichen Prüfung: 1. Juni 2010

Large Eddy Simulation auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern

adaptive LES, Diskretisierungs- und Modellfehler bei der LES, Wärme- und Stofftransport, Mehrgitterverfahren, statischer Mischer

Gutachter: Prof. Dr. Gabriel Wittum
Prof. Dr. Klaus Johansen

Für Lara, Leonard und Luzie

Zusammenfassung

Diese Arbeit vereint die Large Eddy Simulation (LES) mit parallelen, adaptiven Methoden und schnellen Mehrgitterverfahren auf unstrukturierten Gittern. Angefangen von den verwendeten kontinuierlichen Modellen zur Beschreibung turbulenter Strömung, wird das verwendete Teilschritt- Θ -Verfahren für die Zeitintegration und die zu Grunde liegende Finite-Volumen-Methode mit linearen Ansätzen für die räumliche Diskretisierung eingeführt. Da hier die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen und die Energiegleichung voll implizit gelöst werden, spielt der für die Stabilität des Diskretisierungsverfahrens verantwortliche Stabilisierungsterm hierbei eine wichtige Rolle. Anschließend wird die Gitteradaption, wie sie in dem verwendeten Softwarepaket *UG* realisiert wird, dargestellt. Sie ist zunächst unabhängig von dem betrachteten Problem. Die Verbindung zur LES führt über die in Betracht gezogenen *a posteriori*-Indikatoren, die zur Verfeinerung bzw. Vergrößerung eines Anfangsgitters verwendet werden. Die beiden wichtigsten Indikatoren sind der klassische residuenbasierte Indikator, der ursprünglich zur Bestimmung des Diskretisierungsfehlers konstruiert wurde und einen Fehlerindikator darstellt, und der heuristische Maximum-Indikator, der als Verfeinerungs- bzw. Vergrößerungskriterium n.a. die turbulente Viskosität verwendet. Obgleich beide Indikatoren verschieden sind, liefern sie ähnlich gute Ergebnisse. An Hand des *Jet in Crossflow*-Problems im \mathbb{R}^2 und der natürlichen Konvektion in einer hohen Nische im \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3 werden die Diskretisierungs- und Modellfehler bei einer LES, die typischerweise dieselbe Größenordnung besitzen, bestimmt und die adaptiven Methoden den uniformen Verfahren gegenübergestellt. Es kann gezeigt werden, dass durch Gitteradaption mit 30% der Elemente eines uniformen Gitters ähnliche Ergebnisse erzielt werden können. Abgeschlossen wird diese Arbeit mit der numerischen Simulation eines statischen Mischers, dessen Ergebnisse mit den experimentellen Daten verglichen werden.

Diese Arbeit zeichnet sich insbesondere durch drei Aspekte aus. Erstens, es werden die Diskretisierungs- und Modellfehler für zwei klassische Problemstellungen bestimmt. Zweitens, verschiedenste *a posteriori* Indikatoren werden für LES-Rechnungen verwendet und entsprechend bewertet. Und drittens wird über das ganze Zeitintervall einer Rechnung das unstrukturierte Gitter an die instationären Strukturen entsprechend der verwendeten Indikatoren durch Verfeinerung oder Vergrößerung angepasst.

Abstract

This thesis gives insight into the combination of the large eddy simulation (LES) with parallel, adaptive methods applying fast multigrid methods on unstructured grids. Starting from the continuous problem describing turbulent flow, the fractional-step- Θ time integration scheme and the finite volume method using linear ansatz functions for the spatial discretisation are introduced. As the incompressible Navier-Stokes equations including the energy equation are solved fully implicitly, special care has to be taken for the stabilisation of the Stokes element and the convective scheme. Furthermore, grid adaption methods are explained, which are principally independent of the underlying problem.

The connection to LES is realised by the application of specific *a posteriori* error indicators. Specifically, the classical residual based error indicator, which stems from the finite element method and which is constructed in order to track the discretisation error, and a heuristic indicator, that measures the maximum eddy viscosity, are introduced. Although both indicators are significantly different, they give similar results. Applying the methods to the *jet in crossflow* problem in \mathbb{R}^2 and the natural convection problem in a tall cavity in \mathbb{R}^2 and \mathbb{R}^3 , the discretisation and modelling error are determined and the results on adaptive grids are compared with those on uniform grids.

It turns out that with 30% of the elements on uniform grids similar results can be obtained on adaptive grids. Finally, the numerical simulation of the turbulent transport of a passive scalar in a static mixer is carried out.

The uniqueness of this thesis is threefold. Firstly, the discretisation and modelling error of LES computations for the *jet in crossflow* problem and the natural convection in a tall cavity is determined. Secondly, various *a posteriori* error indicators are used for LES computations and evaluated correspondingly. Thirdly, the grid adaptation is carried out continuously over the whole time interval tracking the transient structures within a turbulent flow.

Danksagung

Ich danke dem Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) für die Unterstützung meiner Dissertation, die ich an der Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg erstellt habe.

Mein größter Dank richtet sich an meinen mich betreuenden Professor Gabriel Wittum, dessen voller Unterstützung ich mir stets sicher sein konnte. Das offene Verhältnis setzte den Rahmen für eine freie und selbständige Arbeitsweise, die einerseits die Vereinbarung von Familie und Beruf und andererseits einen umfangreichen Einblick in die verschiedensten Aspekte der numerischen Simulation ermöglichte. Das hier erworbene Wissen kann ich zu einem großen Teil in meiner beruflichen Laufbahn als Wissenschaftler in der Energieindustrie einsetzen.

Besonderen Dank gilt Klaus Johannsen, der mich in vielen fruchtbaren und unterhaltsamen Diskussionen immer wieder mit neuen Aspekten der numerischen Simulation, speziell bei den Lösungsverfahren, versorgte. Nicht zuletzt bin ich ihm besonders dafür dankbar, diese Arbeit auch als Gutachter zu begleiten.

Meinem Zimmernachbarn Oliver Sterz danke ich für die äußerst angenehme Atmosphäre und die vielen Diskussionen. Er brachte mir vor allem die ihn beschäftigende Welt der Elektromagnetik und hier speziell die Maxwell-Gleichungen, die ich tatsächlich noch in meinem Beruf brauchen sollte, näher.

Neben dem unterhaltsamen Austausch unterstützte mich Stefan Lang insbesondere bei Fragen der hier verwendeten parallelen und adaptiven Verfahren. Er hat mir dadurch viel Zeit erspart und ich bin ihm nicht zuletzt dafür dankbar.

Schließlich lebt ein Institut von der guten Atmosphäre, für die nicht zuletzt Oktavia Klassen und Michael Heisig die Verantwortung tragen.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	vii
1. Einleitung	1
2. Inkompressible Strömung, Wärme- und Stofftransport	5
2.1. Erhaltungsgleichungen	5
2.1.1. Masseerhaltung	6
2.1.2. Impulserhaltung	6
2.1.3. Die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen	7
2.1.4. Theorie der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen	8
2.1.5. Energieerhaltung	11
2.2. Natürliche Konvektion und die Boussinesq Approximation	14
2.2.1. Gültigkeit der Boussinesq Approximation	17
3. Turbulenz und die Grobstruktursimulation	19
3.1. Einleitung	19
3.2. Beschreibung der Turbulenz mit Hilfe der Wirbeldynamik	21
3.3. Die Energiekaskade und Kolmogorovschen Hypothesen	23
3.3.1. Energiekaskade	24
3.3.2. Kolmogorovsche Hypothesen	25
3.3.3. Kolmogorovsches 5/3-Gesetz	26
3.4. Die Grobstruktursimulation	26
3.4.1. Filteroperator	27
3.4.2. Die gefilterten Navier-Stokes- und Stofftransportgleichungen	29
3.4.3. Grobstrukturmodelle	29
3.4.4. Grobstruktursimulation von skalarem Stoff- und Wärmetransport	34
3.5. Hilfsmittel zur Beschreibung der Turbulenz	35
3.5.1. Statistische Hilfsmittel	36
3.5.2. Spektrale Hilfsmittel	37
4. Diskretisierung	39
4.1. Variationsformulierung und Linearisierung	39
4.2. Räumliche Diskretisierung	41
4.2.1. Die Finite-Volumen-Methode	42
4.2.2. Der Raum linearer Ansatzfunktionen	45
4.2.3. Diskretisierung nach Schneider und Raw	47
4.2.4. Finite-Volumen-Approximation	48
4.2.5. Stabilisierung	50
4.2.6. Upwind-Strategien	52
4.2.7. Randbedingungen	54
4.2.8. Peclet-Blending	55
4.3. Diskretisierung des Turbulenzmodells	55

4.3.1.	Konstruktion der Filterweiten	56
4.3.2.	Filterweite zu Gitterweite	60
4.4.	Abschätzung der Konsistenzordnung durch uniforme Verfeinerung	61
5.	Lösungsverfahren	63
5.1.	Zeitintegration	63
5.1.1.	Zeitschemata	63
5.1.2.	Approximation und Stabilität	64
5.1.3.	Numerisches Ergebnis	65
5.1.4.	Explizit versus Implizit	66
5.1.5.	Filterung und die CFL-Zahl	68
5.2.	Nichtlinearer Löser	68
5.3.	Lineare Lösungsverfahren	70
5.3.1.	Klassische Iterationsverfahren (additive Abspaltung)	71
5.3.2.	Unvollständige Dreieckszerlegung (ILU)	72
5.3.3.	Konvergenzrate	73
5.3.4.	Mehrgitterverfahren	75
5.3.5.	Präkonditioniertes BiCGStab-Verfahren	81
5.4.	Gesamtverfahren	86
5.5.	Parallelisierung und das Programmpaket UG	87
6.	Gitteradaption und Fehleranalyse	89
6.1.	Fehlerzusammensetzung	89
6.1.1.	Physikalischer und geometrischer Approximationsfehler	89
6.1.2.	Rundungsfehler	89
6.1.3.	Konvergenzfehler bei iterativen Verfahren	90
6.1.4.	Konvergenzfehler bei der Diskretisierung	90
6.2.	Verifikation der numerischen Verfahren und Lösungen	91
6.2.1.	Verifikation von LES-Rechnungen	92
6.3.	Fehleranteile bei der Large Eddy Simulation	92
6.4.	Gitteradaption und adaptive LES	96
6.4.1.	Verfeinerungsstrategie	97
6.4.2.	Indikatoren	98
6.4.3.	Maß für Indikatoren	102
6.4.4.	Qualität und Verlässlichkeit von LES	103
7.	Jet in Crossflow	105
7.1.	Lösungsverlauf und Verifikation auf uniformen Gittern	106
7.1.1.	Konvergenz in der Zeit	107
7.1.2.	Räumliche Konvergenz: kinetische Energie	110
7.1.3.	Räumliche Konvergenz: Subskalendissipation	112
7.1.4.	Diskretisierungs- und Modellfehler	113
7.2.	Adaptive LES	114
7.2.1.	Lösungsstrategie und Gitteradaption	115
7.2.2.	Fehleranalyse der adaptiven Verfahren	117
8.	Turbulenter Wärmetransport durch natürliche Konvektion in einer hohen Nische	121
8.1.	Nischenströmung in zwei Raumdimensionen	122
8.1.1.	Lösungsverlauf und Verifikation auf uniformen Gittern	123
8.1.2.	Adaptive Berechnung	129

8.2. Nischenströmung in drei Raumdimensionen	130
8.2.1. Lösungsverlauf und Verifikation auf uniformen Gittern	131
8.2.2. Konvergenz in der Zeit	131
8.2.3. Einfluss der Filterweite und Gitterauflösung	133
8.2.4. Modell- und Diskretisierungsfehler	134
8.2.5. Adaptive LES	136
9. Turbulente Strömung in einem statischen Mischer	143
9.1. Problembeschreibung	144
9.2. Experiment	144
9.3. Numerische Simulation	145
9.3.1. Gitterhierarchie und Adaptivität	145
9.3.2. Randbedingungen	146
9.3.3. Lösungsstrategie	147
9.3.4. Numerische Ergebnisse	148
9.4. Vergleich Simulation Experiment	150
10. Zusammenfassung und Ausblick	155
A. Anhang	157
A.1. Stabilität und Verstärkungsfaktor	157
A.2. Lösungsverfahren	157
A.3. Strahl in Scherströmung $2D$	158
A.4. Nischenströmung	163
A.5. Gitteradaption	165
A.6. Turbulenter Wärmetransport durch natürliche Konvektion in einer hohen Nische	165
Tabellenverzeichnis	169
Abbildungsverzeichnis	170
Notation	173

1. Einleitung

Es gibt viele Möglichkeiten, turbulente Strömungen zu beobachten. Ob der Rauch aus einem Kamin, ein Wasserfall, ein starker Wind oder die Einspritzung in eine Brennkammer, das betrachtete Fluid zeichnet sich durch instationäre, stark fluktuierende Bewegung von Strukturen unterschiedlichster Größe aus. Die Beschreibung der Turbulenz war und ist nach wie vor Gegenstand intensiver Forschung. Das Aufkommen von großen Rechnerkapazitäten und schnellen Algorithmen bzw. Verfahren führte dazu, dass immer komplexere turbulente Strömungen - vor allem in der Klimaforschung und in technologischen Bereichen wie die Umströmung von Körpern - berechnet werden können. Da die kleinen turbulenten Strukturen für praktisch relevante Problemstellungen nicht aufgelöst werden können, ist der Bedarf an effizienten Turbulenzmodellen groß. Haben sich zunächst statistische Modelle etabliert, einhergehend mit der Betrachtung der Turbulenz aus statistischer Sicht, so hat sich in den letzten Jahren die Grobstruktursimulation oder *Large Eddy Simulation* (LES) in den Vordergrund geschoben. Ein Teil der Modellierungsunsicherheit wird auf Kosten eines erhöhten Rechenbedarfes erkaufte, wobei die LES auch instationäre Phänomene im Gegensatz zu den statistischen Modellen erfassen kann. Trotzdem sind für praktische Problemstellungen die Rechenzeiten immer noch sehr groß.

Auf der anderen Seite wurden für die Strömungsgleichungen sehr effiziente Lösungsverfahren entwickelt. Es seien das Mehrgitterverfahren und die adaptive Gitterverfeinerung erwähnt, die beide in dieser Arbeit Verwendung finden. Adaptive Methoden, die den entsprechenden Diskretisierungsfehler möglichst gleichmäßig über das Gitter verteilen, sind für elliptische und manche parabolische Probleme ausgereift. Auch die durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschriebenen Strömungsgleichungen werden bereits auf adaptierten Gittern gelöst. Es handelt sich allerdings überwiegend um laminare Strömung.

Diese Arbeit verbindet die LES-Modellierung mit adaptiven Methoden und schnellen Lösungsverfahren. Es zeigt sich in den hier durchgeführten Untersuchungen, dass der klassische residuenbasierte Indikator, der für die Finite-Element-Methode und für elliptische Probleme rigoros fundiert ist, auch für die LES geeignet ist. Demgegenüber steht der hier verwendete heuristische Indikator, der die maximale turbulente Viskosität als Maß zur Gitteradaptation zu Grunde legt und der ähnlich gute Ergebnisse liefert.

Neben der spezifischen Beurteilung der Fehlerquellen einer LES und den damit verbundenen kritischen Aspekten wie bspw. die Filterweite, zeichnet sich diese Arbeit dadurch aus, dass die Anfangstriangulierung während des gesamten instationären Lösungsprozesses entsprechend der Indikatoren ständig neu vergrößert und verfeinert wird. Das verwendete Softwarepaket *UG* ermöglicht es, diese Methode im dreidimensionalen Raum, parallel und auf unstrukturierten Gittern durchzuführen. Diese Komplexität ist nach Kenntnis des Autors neu.

Dieser Monolog soll möglichst alle Aspekte einer LES berücksichtigen. Neben der LES-Modellierung steht die Fehleranalyse und die Entwicklung und Beurteilung der für die Gitteradaptation erforderlichen Indikatoren im Vordergrund. Es wird neben der verwendeten Finite-Volumen-Methode auch auf die Finite-Element-Methode eingegangen, die Ausgangspunkt für die hier verwendeten Indikatoren ist. Neben der Beschreibung der verwendeten Lösungsverfahren werden schließlich die Verfahren an drei Problemstellungen getestet.

Diese Arbeit gliedert sich wie folgt. In Kapitel 2 werden die Navier-Stokes-Gleichungen aus den Erhaltungssätzen hergeleitet. Anschließend wird kurz auf deren Theorie (Existenz und Eindeutig-

keit) eingegangen. Da energetische Betrachtungen auch eine Rolle spielen (natürliche Konvektion durch Temperaturdifferenzen), wird zunächst die allgemeine Energiegleichung formuliert und anschließend in die hier verwendete Boussinesq-Approximation überführt. Abgeschlossen wird das Kapitel mit Betrachtungen zur Gültigkeit der Boussinesq-Approximation.

Kapitel 3 geht zunächst allgemein auf die Eigenschaften turbulenter Strömungen ein und stellt die Untersuchungen von Taylor, Richardson und Kolmogorov vor, die Turbulenz quantitativ zu erfassen, wobei hier die Wirbeldynamik und vorallem die Energiekaskade eine wichtige Rolle spielen. Nachdem der Begriff der statistischen Turbulenzmodelle eingeführt wird, widmet sich der Rest dieses Kapitels der LES. Es werden die gefilterten Navier-Stokes-Gleichungen und klassischen LES-Modelle, wie sie hier verwendet werden, erläutert. Hervorzuheben ist sowohl die Übertragung auf passive und aktive Skalare als auch die Verwendung nicht-konstanter Filterweiten, die bei unstrukturierten Gittern und adaptiven Verfahren eine Rolle spielen. Deren Konvergenz und Kommutationsfehler müssen besonders behandelt werden.

Kapitel 4 beschäftigt sich mit der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung der in Kapitel 2 und 3 beschriebenen Modelle. Hier sei insbesondere die Erweiterung der Navier-Stokes-Gleichungen bezüglich der Energiegleichung und des Auftriebsterms hingewiesen, wobei der zusätzliche Skalar in die Stabilisierung und konvektiven Terme der Navier-Stokes-Gleichungen und der Energiegleichung eingeht. Zu unterstreichen ist außerdem die variable Formulierung der Filterweiten, die die numerische Analyse der Fehlerkomponenten bei der LES ermöglicht. Darüberhinaus wird das Verhältnis Filterlänge zu Elementgröße (Δ/h) diskutiert. Abgeschlossen wird das Kapitel mit der Richardson-Extrapolation zur Bestimmung der Gitter- und Filterkonvergenz.

In Kapitel 5 geht es um die Lösungsverfahren sowohl der zeitlichen Integration als auch des nichtlinearen und linearen Problems. Für die Zeitintegration werden Teilschritt- Θ -Verfahren präferiert, die sich als wenig dämpfend - eine wichtige Eigenschaft bei turbulenter Strömung mit hochfrequenten Anteilen - erweisen. Hervorzuheben ist hier besonders die Frage großer CFL-Zahlen in Verbindung mit LES. Nachdem das nichtlineare Verfahren beschrieben wird, stellen die linearen Lösungsverfahren den Schwerpunkt dieses Kapitels dar, wobei hier die Komponenten des (lokalen) Mehrgitterverfahrens und die Konvergenzraten des Gesamtverfahrens, die an einfachen Testbeispielen gezeigt werden, von besonderer Bedeutung sind. Abgeschlossen wird dieses Kapitel mit einer kurzen Beschreibung des verwendeten Programmpaketes *UG* und dessen Parallelisierung.

Das Kapitel 6 ist von zentraler Bedeutung. Hier wird auf die Fehler bei numerischen Simulationen im Allgemeinen und bei der LES im Besonderen eingegangen. Da bei Diskretisierungsverfahren mit linearen Ansätzen der numerische Fehler physikalisch einer künstlichen turbulenten Viskosität entspricht, ist zur Beurteilung einer LES-Rechnung die Quantifizierung des Diskretisierungs- und Modellfehlers von besonderer Bedeutung. Nachdem die technische Umsetzung zur Fehlerbestimmung erläutert wird, widmet sich der zweite Teil dieses Kapitels der adaptiven LES. Das Gitter wird also lokal adaptiv nach entsprechenden Kriterien verfeinert oder vergrößert. Ziel ist es schließlich, die beiden Fehlertypen gleichmäßig auf einem adaptierten Gitter zu verteilen und somit eine optimale Komplexität zu erhalten. Es werden sowohl klassische (wie bspw. der residuenbasierte Fehlerindikator) als auch für die Turbulenz spezielle Indikatoren (z.B. der Maximum-Indikator, der als Maß n.a. die turbulente Viskosität verwendet) in Betracht gezogen, die schließlich in den Kapiteln 7, 8 und 9 an Hand numerischer Beispiele beurteilt werden.

Kapitel 7 ist das erste von drei Kapiteln, in denen die beschriebenen Verfahren angewendet werden. Es handelt sich hier um die Konfiguration eines Freistrahles in einer Scherströmung (*Jet in Crossflow*) im \mathbb{R}^2 . Da im zweidimensionalen Raum keine wirklich turbulente Strömung zu beobachten ist, dient dieses Problem in erster Linie der Validierung der verwendeten Verfahren. Bei diesem Problem zeigt sich zunächst, dass weder die kinetische Energie noch die Subskalendisipation eine konvergente Folge in der Zeit aufweisen. D.h. mit kleiner werdender Zeitschrittweite

entfernen sich die Lösungen voneinander. Im Gegensatz dazu konvergieren die Verfahren im Raum - die Gitterweite wird hier uniform verfeinert -, wobei hier auch Konvergenzordnungen explizit angegeben werden, die näherungsweise der formalen Ordnung des Diskretisierungsverfahrens entsprechen. Bei der separaten Betrachtung des Diskretisierungs- und Modellfehlers fällt auf, dass beide Fehlerkomponenten unterschiedliche Vorzeichen haben und sich teilweise auslöschen.

Die adaptive Berechnung dieses Problems erfolgt mit dem residuenbasierten, hierarchischen und Maximum Indikator. Es zeigt sich, dass der residuenbasierte Indikator am leistungsfähigsten ist, gefolgt vom Maximum Indikator. Der hierarchische Indikator liefert kein befriedigendes Ergebnis. Durch das Verwenden der adaptiven Filterweiten auf dem uniformen Gitter kann für die adaptierten Gitter ebenfalls der Diskretisierungs- und Modellfehler angegeben werden.

Kapitel 8 ist einem weiteren Test der Verfahren gewidmet, wobei hier im Gegensatz zum vorhergehenden Beispiel keine erzwungene, sondern eine natürliche Konvektionsströmung untersucht wird. Dies ist das aussagekräftigste Problem, da dieses sowohl im \mathbb{R}^2 als auch im \mathbb{R}^3 berechnet und schließlich experimentellen Untersuchungen gegenübergestellt wird. Nachdem im \mathbb{R}^2 der typische Lösungsverlauf der Geschwindigkeiten bzw. der Temperatur dargestellt und durch Variation der Zeitschrittweiten die zeitliche Konvergenz betrachtet wird, wird entsprechend das konvergente Verhalten der räumlichen Diskretisierung als auch des Modells für diese Nischenströmung bestimmt. Es ist festzuhalten, dass das Zeitschema bez. der kinetischen Energie konvergiert, bez. der Subskalendissipation aber nicht. Da die Ergebnisse auf den verschiedenen Gitterebenen qualitativ stark unterschiedlich sind, lassen sich die Konvergenzordnungen, die auf einer konvergenten Folge basieren, nur schwer abschätzen. Es kann trotzdem gezeigt werden, dass die kinetische Energie gitter- aber nicht filterkonvergent ist, die Subskalendissipation ein dazu inverses Verhalten aufweist. Abgeschlossen werden die zweidimensionalen Betrachtungen mit der Bestimmung des Diskretisierungs- und Modellfehlers, die dieselbe Größenordnung besitzen, und mit adaptiven Rechnungen. Hierbei zeigen sich wiederholt die Stärken des residuenbasierten und Maximum-Indikators. Die Betrachtungen im \mathbb{R}^3 erfolgen entsprechend. Das Zeitschema erweist sich als konvergent sowohl für Berechnungen mit dem LES-Modell als auch ohne, wobei der Einfluss der Zeitschrittweitenvariation für letztere Problemstellung größer ist. Werden nun durch Variation der Gitterauflösung und Filterweite die Gitter- bzw. Filterkonvergenz untersucht, so zeigt sich, dass die Gitterkonvergenz schneller als die Filterkonvergenz ist. Dies ist allerdings nur für die turbulenten, aber nicht für die kinetische Energie festzustellen. Desweiteren ist das qualitativ stark unterschiedliche Verhalten auf einer Gitterebene relativ zur nächst feineren, wie dies in zwei Dimensionen aufgefallen ist, nicht zu beobachten.

Bei den Fehlerkomponenten ist festzuhalten, dass der Modellfehler für die gewählten Gitterebenen durchweg etwas kleiner ist als der Diskretisierungsfehler.

Abschließend werden die bereits erwähnten Indikatoren für die Gitteradaption eingesetzt, wobei hier kein quasi-stationäres Verhalten einsetzt. Insofern wird permanent alle n Zeitschritte das Gitter verfeinert bzw. vergrößert. Die bisher gewonnenen Erkenntnisse, dass der residuenbasierte und Maximum-Indikator am leistungsfähigsten ist, bestätigt sich erneut. Der Vergleich der Ergebnisse auf uniformen und adaptiven Gittern mit experimentellen Daten sind allerdings nicht hinreichend befriedigend, da die Abweichungen relativ groß sind. Dies dürfte an dem für die Mittelung verwendeten zu kleinen Zeitintervall liegen. Vergleicht man die uniformen mit den adaptiven Geschwindigkeiten entlang einer Geraden, so kann mit 30% bzw. 10% der für die uniforme Rechnung erforderlichen Elemente ähnlich gute Ergebnisse erzielt werden.

Das abschließende Kapitel 9 beinhaltet die numerische Simulation des Impuls- und Stofftransportes in einem statischen Mischer. Die beschriebenen Methoden werden hier für eine geometrisch komplexe Problemstellung eingesetzt. Es geht hierbei nicht um die Fehleranalyse, wie sie in den bereits beschriebenen Kapiteln durchgeführt wurde und auf Grund der Komplexität schwer durchführbar wäre, sondern um das Erreichen möglichst genauer Ergebnisse. Hierzu wird das

Gitter zunächst uniform verfeinert und erste Berechnungen durchgeführt. Durch adaptive Verfeinerung wird schließlich die Triangulierung erreicht, auf welcher das Zeitintervall schließlich integriert wird. Es zeigt sich, dass die Lösung auf dem mittleren Gitter nicht in die Lösungssequenz des nächst gröberen bzw. nächst feineren Gitters passt.

Die Gegenüberstellung der numerischen und experimentellen Ergebnisse zeigt mittlere bis starke Abweichungen. Bei diesem Vergleich ist allerdings davon auszugehen, dass diese Abweichungen im Rahmen der Unsicherheit bei den durchgeführten Experimenten liegen.

2. Inkompressible Strömung, Wärme- und Stofftransport

2.1. Erhaltungsgleichungen

Ausgangspunkt für die Navier-Stokes-Gleichungen, die von dem Franzosen Navier im Jahre 1825 und dem Briten Stokes 1845 unabhängig voneinander aufgestellt wurden, sind die für ein Massevolumen fundamentalen Erhaltungsprinzipien:

- *Masseerhaltung*: Masse wird weder vernichtet noch erzeugt.
- *Impulserhaltung*: Impulse können nur durch das Auftreten einwirkender Kräfte geändert werden (2. Newtonsches Gesetz).
- *Energieerhaltung*: Energie wird weder vernichtet noch erzeugt.

Die Navier-Stokes-Gleichungen können ebenfalls aus der wesentlich komplexeren Boltzmann-Gleichung (7-dimensional), deren Begründung in der kinetischen Gastheorie liegt, hergeleitet werden [68].

Hier werden die Navier-Stokes-Gleichungen aus den Erhaltungsgleichungen hergeleitet. In einem Fluid wirken im wesentlichen Trägheits- und Reibungskräfte. Zu deren Beschreibung wird das *materielle Volumen* $V(t)$ eingeführt. Dabei ist $V(t)$ die Menge $x_i(\xi_i, t)$ aller materieller Punkte ξ_i , die sich zum Anfangszeitpunkt t_0 im Volumen $V_0 = V(t_0)$ befinden. Jedes materielle Volumen $V = V(t)$ hat folglich eine Masse, die mit der stetig verteilten Dichte $\rho(x_i, t) > 0$ folgendermaßen gegeben ist:

$$m(V) := \int_V \rho(x_i, t) dx.$$

Angenommen für jeden materiellen Punkt ξ_i zur Zeit t kann eine physikalische Größe ϕ angegeben werden, so kann ϕ mit

$$\phi = \phi(x_i, t) = \phi(x_i(\xi_i, t), t)$$

auf die Eulerschen Ortspunkte x_i bezogen werden. Die zeitliche Ableitung an einem Ortspunkt ist gegeben durch

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \phi(x_i, t)}{\partial t},$$

wohingegen die zeitliche Änderung von ϕ für ein individuelles Teilchen ξ durch die *materielle Ableitung*

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{D\phi(x_i(\xi, t), t)}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j}.$$

beschrieben wird¹. Dabei ist $u_i(x_i, t) = \frac{\partial x_i(\xi_i, t)}{\partial t}$ das Geschwindigkeitsfeld der materiellen Teilchen. Es kann bewiesen werden [106], dass für jedes materielle Volumen $V(t)$ die Beziehung

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial(\phi u_j)}{\partial x_j} \right) dV \quad (2.1)$$

¹Im Folgenden wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet.

gilt. Gleichung (2.1) wird als *Reynoldsches Transport-Theorem* bezeichnet. Mit Hilfe des Integralsatzes von Gauss lässt es sich auch in der Form

$$\int_{V(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV = - \int_{\partial V(t)} n_j u_j \phi d\Gamma$$

ausdrücken. Die zeitliche Änderung der Größe ϕ im Volumen $V(t)$ ist gleich ihrem negativen Gesamtfluss über den Rand $\Gamma(t)$ des Volumens $V(t)$.

2.1.1. Masseerhaltung

Wie bereits erwähnt wird Masse weder erzeugt noch vernichtet, es gilt also:

$$\frac{dm(V)}{dt} = 0.$$

Wird im Transporttheorem (2.1) $\phi = \rho$ gesetzt, so erhält man für beliebige Volumina V

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} \right) dV = 0.$$

Bei hinreichender Regularität des Integranden gilt an jedem Ortspunkt die Gleichung für die Masseerhaltung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (2.2)$$

die auch *Kontinuitätsgleichung* genannt wird. Bei Flüssigkeiten ist die Kompressibilität auch bei sehr hohen Drücken so gering, dass sich das Volumen $V(t)$ praktisch nicht ändert:

$$\frac{d}{dt} \int_V dV = 0.$$

Es gilt dann die *Divergenzfreiheit*. Bei Gasen kann diese Annahme bei geringen Geschwindigkeiten und Temperaturen auch gemacht werden. In dieser Arbeit werden nur inkompressible Fluide betrachtet.

2.1.2. Impulserhaltung

Für die Impulserhaltung werden nun die auftretenden Kräfte für ein materielles Volumen $V = V(t)$ beschrieben. Prinzipiell treten Massekräfte und Oberflächenkräfte (Spannungen) auf. Massekräfte werden durch volumenhaft verteilte Kraftdichten $f_i(x_i, t)$ mit $i = 1, \dots, d$, wobei d die Raumdimension darstellt, beschrieben:

$$F_i(V) = \int_V \rho(x_i, t) f_i(x_i, t) dV.$$

Die Oberflächenkräfte wiederum werden durch flächenhaft verteilte Kraftdichten $\tau_{ij}^\nu(x_i, t)$ bezogen auf Flächenelemente $S = S(t)$ mit dem Normaleneinheitsvektor $\nu = \nu_i$ beschrieben:

$$F_i(S) = \int_S \tau_{ij}^\nu(x_i, t) dS.$$

Zusammengefasst wirken schließlich folgende Kräfte auf ein materielles Volumen V :

$$F_i(V) = \int_V \rho f_i dV + \int_\Gamma n_j \tau_{ij} d\Gamma = \int_V \left(\rho f_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right) dV.$$

Nach Newtons zweitem Gesetz muss die zeitliche Änderung des Impulses $I_i(V) = \int_V \rho u_i dV$ den wirkenden Kräften mit

$$\frac{dI_i(V)}{dt} = F_i(V)$$

entsprechen, was schließlich die Beziehung

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho u_i dV = \int_V \left(\rho f_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial u_j} \right) dV$$

liefert.

Die Anwendung des Reynoldsschen Transporttheorems (2.1) mit $\phi = \rho u_i$ führt zu der Beziehung

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho u_i dV = \int_V \left(\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} \right) dV,$$

woraus schließlich die Impuls- oder Momentengleichungen

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \rho f_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.3)$$

resultieren.

Der Spannungstensor lässt sich aufteilen in Normal- und Schubspannung:

$$\tau_{ij} = \underbrace{-p\delta_{ij} + \lambda^* e_{kk}\delta_{ij}}_{\text{Normalspannung}} + \underbrace{2\mu e_{ij}}_{\text{Schubspannung}}, \quad (2.4)$$

wobei λ^* ein Maß für die Komprimierbarkeit des materiellen Volumens, e_{ij} den Dehnungstensor mit

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\}$$

und μ die dynamische Viskosität darstellen. Wird davon ausgegangen, dass die Stoffkoeffizienten λ^* und μ nicht vom Dehnungstensor abhängen, so heißt (2.4) *lineare Materialgleichung*.

Ein Fluid heißt *nicht-Newton'sches Fluid*, wenn die Viskosität mit $\mu = f\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)$ eine Funktion des Geschwindigkeitsgradienten ist. Ist dies nicht der Fall, so spricht man von *Newton'schen Flüssigkeiten*. In dieser Arbeit werden nur Newton'sche Flüssigkeiten betrachtet.

2.1.3. Die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen

Wird (2.4) in (2.3) eingesetzt, so folgen die *Navier-Stokes-Gleichungen* in ihrer allgemeinen Form:

$$\frac{D(\rho u_i)}{Dt} = \rho f_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ -p + \lambda^* \frac{\partial u_k}{\partial u_k} \right\} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \right\}. \quad (2.5)$$

Wenn für die Druckzähigkeit

$$\eta_D = \lambda^* + \frac{2}{3}\mu = \text{konstant}$$

gilt, die Normalspannung (Druck) proportional zur Normaldehnung ist, was außer beispielsweise bei auftretenden Schocks in den meisten Fällen gilt (Stokessche Hypothese), dann kann (2.5) geschrieben werden als:

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho f_i + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\}. \quad (2.6)$$

Bei inkompressibler Strömung und linearer Materialgleichung vereinfacht sich der Spannungstensor zu:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\} = \mu \left\{ \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right\} = \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}.$$

Schließlich folgen die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen inklusive Kontinuitätsgleichung, wie sie in dieser Arbeit verwendet werden:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = \rho f_i, \quad i = 2, 3 \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.8)$$

Wirbeltransportgleichung

Für die Beschreibung der Turbulenz mit Hilfe der Wirbeldynamik, wie sie in Abschnitt 3.2 näher dargestellt wird, soll hier noch die Wirbeltransportgleichung angeführt werden. Wendet man den Rotationsoperator $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \epsilon_{ijk}$ auf (2.7) an, wobei ϵ_{ijk} das *Levi-Civita-Symbol* oder kurz den *Epsilon-Tensor* darstellt, so folgt die Wirbeltransportgleichung

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial \omega_i}{\partial x_k} = \omega_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \nu \frac{\partial^2 \omega_i}{\partial x_k^2}. \quad (2.9)$$

Das Maß für die Rotation einer Strömung ist die Zirkulation, das Linienintegral entlang einer geschlossenen Linie C :

$$\Gamma = \oint_C u_i dx_i. \quad (2.10)$$

Wird mit

$$\omega_i = \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \epsilon_{kji} \quad (2.11)$$

die Wirbelstärke bezeichnet, so lässt sich durch den Stokesschen Integralsatz folgende Beziehung aufstellen:

$$\Gamma = \oint_C u_i dx_i = \int_S \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \epsilon_{kji} n_i dS = \int_S \omega_i n_i dS.$$

Hierbei bezeichnen S die durch C eingeschlossene Fläche und n_i die auf dieser Fläche orientierten Normalen.

2.1.4. Theorie der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen

Der Nachweis der Existenz der instationären inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in ihrer allgemeinen Form (2.7) und (2.8) ist nach wie vor eines der herausragenden ungelösten Probleme der angewandten Mathematik.

Für das Stokes-Problem

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} - \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0$$

und das stationäre Navier-Stokes-Problem

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (u_j u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = f_i, \quad \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.12)$$

mit entsprechenden Randbedingungen gibt es den Nachweis der Existenz und auch der Eindeutigkeit [49].

Obleich der Schwerpunkt dieser Arbeit nicht auf der Eindeutigkeit und Existenz der zu lösenden Navier-Stokes-Gleichungen liegt, soll hier kurz die Beweisführung des vereinfachten Stokes-Problems mit anschließender Erweiterung auf die stationären Navier-Stokes-Gleichungen gezeigt werden. Speziell die Eindeutigkeit mit der *inf-sup-Bedingung* (siehe weiter unten) ist in bezug auf die Stabilität der Diskretisierung von Bedeutung.

Im Folgenden wird die symbolische Schreibweise verwendet. Das zunächst betrachtete Stokes-Problem beschreibt in dem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit der Dimension d eine stationäre Strömung durch die Geschwindigkeit \mathbf{u} und Druck p

$$\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d \text{ und } p : \Omega \rightarrow \mathbb{R},$$

welche durch das folgende System von partiellen Differentialgleichungen beschrieben wird:

$$\begin{aligned} -\nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} & \text{in } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 & \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}_0 & \text{auf } \Gamma, \end{aligned}$$

wobei Γ den Gebietsrand von Ω darstellt und stückweise glatt und an möglichen Ecken konvex ist. Mit dem Satz von Gauss folgt eine *Kompatibilitätsbedingung* für u_0 :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Gamma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \, dx = 0.$$

Es wird nun eine Variationsformulierung gewählt, bei der die Masseerhaltung explizit gefordert wird². Für die zentrale Aussage bezüglich der Existenz und Eindeutigkeit wird die Variationsformulierung verwendet. Hierzu wird für die Geschwindigkeiten \mathbf{u} der Sobolevraum $H_0^1(\Omega)$ und für den Druck p der Hilbertraum $L_0^2(\Omega)$ mit

$$H_0^1(\Omega; \Gamma)^2 := \{\mathbf{u} \in H^1(\Omega)^d \mid \mathbf{u} = 0 \text{ auf } \Gamma\}, \quad L_0^2(\Omega) := \{q \in L^2(\Omega) \mid (q, 1)_{\Omega} = 0\} \quad (2.13)$$

eingeführt. H_0^1 ist der Funktionenraum der Lebesgue-integrierbaren Funktionen inklusive der schwachen Ableitung erster Ordnung mit Nullrandbedingungen. Zum Raum L_0^2 gehören alle Lebesgue-integrierbaren Funktionen mit Nullrandbedingung. Zusätzlich wird noch die negative Sobolevnorm

$$\|f\|_{-1} := \sup_{\phi \in H} \frac{\langle f, \phi \rangle}{\|\nabla \phi\|},$$

die die Norm des Dualraumes $H^{-1}(\Omega)$ der stetigen, linearen Funktionale auf H darstellt, verwendet. Da der Druck nur bis auf eine Konstante bestimmt ist, wird mit $\int_{\Omega} q \, d\Omega = 0$ in (2.13) die Konstante eliminiert und der Druck somit fixiert. Mit $H := H_0^1(\Omega; \Gamma)^d$ bzw. $L := L^2(\Omega)$ und $a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \nu(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{v})$ bzw. $b(p, \mathbf{v}) := (p, \nabla \cdot \mathbf{v})$ lautet die variationelle Formulierung der stationären Navier-Stokes-Gleichung (2.12):

Finde $\mathbf{u} \in H$ und $p \in L$ derart, dass

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - b(p, \mathbf{v}) &= (\mathbf{f}, \mathbf{v}) & \forall \mathbf{v} \in H \\ b(q, \mathbf{u}) &= 0 & \forall q \in L. \end{aligned} \quad (2.14)$$

²Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Nebenbedingung $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ in den Funktionenraum einzubauen.

Die Diskussion des gemischten Variationsproblems lässt sich in zwei Schritte einteilen. Zuerst wird ein reduziertes Problem betrachtet, das nur die Geschwindigkeiten \mathbf{u} als Unbekannte enthält. Im zweiten Schritt der Analyse muss die Existenz einer Funktion $p \in L$ gezeigt werden, so dass man mit \mathbf{u} als Lösung dann $\{\mathbf{u}, p\}$ als Lösung für das komplette Sattelpunktproblem erhält.

Das erste Teilproblem erhält man, indem der Raum H sowohl für die gesuchte Lösung \mathbf{u} als auch für die Testfunktion \mathbf{v} eingeschränkt wird. Dazu wird der folgende Raum V eingeführt:

$$V = \{\mathbf{v} \in H \mid b(\mathbf{v}, q) = 0 \text{ für alle } q \in L\} = \{\mathbf{v} \in H \mid \nabla \cdot \mathbf{u} = 0\} = \ker b.$$

Man sieht sofort, dass die Komponente $\mathbf{u} \in V$ einer Lösung $\{\mathbf{u}, p\}$ von (2.14) auch Lösung des folgenden Variationsproblems ist:

Gegeben sei $\mathbf{f} \in L_2(\Omega)$. Gesucht ist nun eine Funktion $\mathbf{u} \in V$, so dass für alle $\mathbf{v} \in V$ gilt:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{f}, \mathbf{v}). \quad (2.15)$$

Das Problem (2.15) besitzt genau eine Lösung. Diese Aussage folgt sofort aus dem *Satz von Lax und Milgram*, denn

Begründung 1.

1. a ist eine Bilinearform;
2. a ist koerziv, d.h. es gibt eine Konstante $\alpha_1 > 0$ mit

$$|a(v, v)| \geq \alpha_1 \|v\|_1^2 \quad \forall v \in V;$$

Die Koerzivität folgt aus der *Ungleichung von Friedrichs*: Es gibt für kompakte Gebiete³ eine Konstante C mit

$$\int_{\Omega} |v|^2 dx \leq C^2 \int_{\Omega} \|\nabla v\|^2 dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega);$$

3. a ist stetig, d.h. es gibt eine Konstante α_2 mit

$$|a(u, v)| \leq \alpha_2 \|u\|_1 \|v\|_2,$$

was unmittelbar aus der *Schwarz-Cauchyschen Ungleichung* folgt;

4. $(f, v) \in V^*$, dem dualen Raum von V . Das folgt ebenfalls sofort aus der Schwarz-Cauchyschen Ungleichung.

Die Geschwindigkeit \mathbf{u} existiert und ist eindeutig.

Im Folgenden wird schließlich der zweite Teilaspekt betrachtet. Das Variationsproblem für den Druck p lautet:

Finde $p \in L$ derart, dass gilt

$$b(p, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) := a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - (\mathbf{f}, \mathbf{v})_0 \quad \forall \mathbf{v} \in H. \quad (2.16)$$

Dies ist formal ein Variationsproblem wie beispielsweise das für ein Poisson-Problem, wobei hier die Bilinearform $b(\cdot, \cdot)$ auf verschiedenen Räumen definiert ist. Das Lax-Milgram-Lemma reicht hier also nicht aus. Die rechte Seite von (2.16) stellt ein lineares Funktional dar mit der Eigenschaft $l(\mathbf{v}) = 0$, $\mathbf{v} \in H$. Es gilt $l(\mathbf{v}) = 0$, da $b(p, \mathbf{v}) = (p, \nabla \cdot \mathbf{v}) = 0$. Mit dem nachfolgenden Hilfssatz wird die Existenz und Eindeutigkeit des zugehörigen Drucks sichergestellt:

³Vereinfacht stellt ein kompaktes Gebiet eine abgeschlossene und beschränkte Teilmenge des euklidischen Raumes \mathbb{R}^d dar.

Satz 1 (inf-sup-Bedingung).

1. Zu jedem linearen Funktional $l(\cdot)$ auf H mit der Eigenschaft $l(\mathbf{v}) = 0, \mathbf{v} \in H$ gibt es eine eindeutig bestimmte Funktion $p \in L$, so dass

$$(p, \nabla \cdot \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in H. \quad (2.17)$$

2. Zu jeder Funktion $p \in L$ existiert ein $\mathbf{u} \in H$ mit der Eigenschaft

$$p = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad \|\nabla \mathbf{u}\| \leq \gamma \|p\|, \quad (2.18)$$

mit einer von p unabhängigen Konstante $\gamma > 0$. Ferner gilt die Stabilitätsungleichung (kontinuierliche inf-sup-Bedingung):

$$\inf_{q \in L} \sup_{\mathbf{v} \in H} \frac{(q, \nabla \cdot \mathbf{v})}{\|q\| \|\nabla \mathbf{v}\|} \geq \gamma > 0. \quad (2.19)$$

Ist Ω ein *Lipschitz-Gebiet*⁴, so gilt für die Lipschitz-Konstante $L(\Omega) > 0$ und es existiert eine eindeutige Lösung zum oben formulierten Stokes-Problem.

Das bisher betrachtete Stokes-Problem wird nun um den nichtlinearen Term ergänzt. Mit der negativen Sobolevnorm

$$\|f\|_{-1} := \sup_{\phi \in H} \frac{\langle f, \phi \rangle}{\|\nabla \phi\|},$$

die die Norm des Dualraumes $H^{-1}(\Omega)$ der stetigen, linearen Funktionale auf H darstellt und mit $c(\mathbf{u}; \mathbf{u}, \mathbf{v}) := (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \mathbf{v})$ lautet das variationelle Problem der stationären Navier-Stokes-Gleichungen folgendermaßen:

Finde $\{\mathbf{u}, p\} \in H(\Omega) \times L_0^2(\Omega)$ derart, dass

$$c(\mathbf{u}; \mathbf{u}, \mathbf{v}) + a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - b(p, \mathbf{v}) = (\mathbf{f}, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in H(\Omega)^n \quad (2.20a)$$

$$b(q, \mathbf{u}) = 0 \quad \forall q \in L_0^2(\Omega). \quad (2.20b)$$

Satz 2 (Existenzsatz). Das stationäre Navier-Stokes-Problem (2.20a) mit der Nebenbedingung (2.20b) besitzt im Fall $\partial\Omega = \Gamma_w$ für beliebige Reynolds-Zahlen $Re = 1/\nu$ eine Lösung $\{\mathbf{u}, p\} \in H \times L$. Für hinreichend kleine $C\nu^{-2}\|f\|_{-1} < 1$ ist diese Lösung eindeutig.

Γ_w ist der Rand des Gebietes Ω mit Hafttrandbedingung. Die Konstante C hängt linear von der Reynoldszahl ab. Auch für die instationären Navier-Stokes-Gleichungen kann die Lösbarkeit mit ähnlichen Mitteln nachgewiesen werden. Die Eindeutigkeit hängt wieder von der „Kleinheitsbedingung“ $C\nu^{-2}\|f\|_{-1} < 1$ ab. Den Beweis kann man beispielsweise in [106] oder [49] nachlesen. Das Bemerkenswerte an Satz (2) ist, dass die nichtlinearen Navier-Stokes-Gleichungen für alle Reynoldszahlen stets lösbar sind. Allerdings müssen diese Lösungen nicht eindeutig sein.

2.1.5. Energieerhaltung

Die Energiebilanz in einem Inertialsystem wird durch den *ersten Hauptsatz der Thermodynamik* beschrieben. Dieser besagt, dass die zeitliche Änderung der inneren Energie⁵ und kinetischen

⁴Gebiet mit Lipschitz-stetigem Rand

⁵Die innere Energie beschreibt auf mikroskopischer Ebene den Energiegehalt der Moleküle. Neben der Bewegungsenergie der Teilchen zählen auch Anziehungs-/Abstoßungskräfte und chemische Potentiale dazu.

Energie in einem Körper gleich sein muss der Leistung der auf diesen Körper einwirkenden Massekräfte und Spannungen sowie die Energiezufuhr bzw. -abfuhr. Der Körper ist im Sinne der Kontinuumsmechanik wieder das materielle Volumen $V = V(t)$. Bezogen auf V ist die innere Energiedichte $e = e(x_i, t)$

$$E_{int}(V) = \int_V \rho e \, dV$$

und die kinetische Energie

$$E_{kin}(V) = \frac{1}{2} \int_V \rho u_i u_i \, dV.$$

Wird $\phi = \frac{1}{2}\rho u_i u_i + \rho e$ in das Reynoldsche Transporttheorem (2.1) eingesetzt und bilanziert man die Leistung der Massekräfte und Spannungen und die Wärmequellen bzw. Wärmeflüsse über die Oberfläche $\Gamma = \partial V(t)$, die durch den Gaußschen Satz zu Volumengrößen umgeformt werden, so folgt die allgemeine Energiegleichung:

$$\begin{aligned} \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\rho e + \frac{1}{2} \rho u_i u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho e u_j + \frac{1}{2} \rho u_i u_i u_j) \right\} dV = \\ \int_V \left\{ \rho f_i u_i + \rho h + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji} u_i - q_j) \right\} dV. \end{aligned}$$

Hierbei steht ρf_i für die Massekräfte, ρh für eine externe Quelle und den Wärmetransport durch Strahlung, σ_{ij} für die Spannungen und q_i für den Wärmefluss.

Die allgemeine Energiegleichung für die totale Energie in differentieller Form lautet:

$$\frac{\partial(\rho e + 1/2 \rho u_i u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e u_j + 1/2 \rho u_i u_i u_j)}{\partial x_j} = \rho f_j u_j + \frac{\partial(\sigma_{ji} \cdot u_i)}{\partial x_j} + \rho h - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}. \quad (2.21)$$

Werden die Terme auf der linken Seite von (2.21) gemäß

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e + 1/2 \rho u_i u_i)}{\partial t} &= \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + 1/2 u_i u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} u_i \\ \frac{\partial(\rho e u_j + 1/2 \rho u_i u_i u_j)}{\partial x_j} &= \frac{\partial(\rho e u_j)}{\partial x_j} + 1/2 u_i u_i \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_i \end{aligned}$$

umgeformt und die Zeitableitungen $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ und $\frac{\partial u_i}{\partial t}$ durch die Kontinuitätsgleichung und Impulsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \rho f_i + \frac{\sigma_{ji}}{\partial x_j}$$

ersetzt, so reduziert sich die allgemeine Energiegleichung (siehe [106]) auf

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e u_j)}{\partial x_j} = \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \rho h. \quad (2.22)$$

Thermodynamische Zusammenhänge

Bei einem perfektem Gas wird eine lineare Abhängigkeit des Drucks von der Dichte bzw. Temperatur postuliert:

$$p = R \rho T, \quad (2.23)$$

wobei R in dieser Zustandsgleichung die Gaskonstante darstellt.

Nach dem ersten Satz der Thermodynamik entspricht eine Zunahme der inneren Energie der eingebrachten Wärme Q und Arbeit A :

$$de = \delta Q + \delta A.$$

Betrachtet man bei der Arbeit ausschließlich die Kompression oder Expansion des Massevolumens V , so folgt $dA = -pdV$. Der Zuwachs an innerer Energiedichte de infolge Wärmezufuhr δq und Kompression $d(\rho^{-1})$ eines Volumens mit Masse $\rho(V) = 1 \rightarrow V = \rho^{-1}$ ist daher

$$de = \delta q - pd(\rho^{-1}). \quad (2.24)$$

Das Symbol d beschreibt eine differentielle Änderung einer Zustandsgröße, unabhängig von der Art wie dieser erreicht wurde. Demgegenüber bezeichnet das Symbol δ eine infinitesimale Änderung mit der Berücksichtigung des Weges. Dies spielt besonders bei reversibler bzw. irreversibler Prozessen eine Rolle.

Wird einem materiellen Volumen mit $V = konst$ eine Wärmemenge δq zugeführt, so erhöht sich die Temperatur um $dT = c_v^{-1}\delta q$, wobei c_v die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen darstellt. Da mit dem Volumen auch die Dichte konstant ist ($d(\rho^{-1}) = 0$), gilt bezüglich (2.24)

$$e = c_v T + konst.$$

Wird einem materiellen Volumen bei konstantem Druck $p = konst$ Wärme zugeführt, so gilt bezüglich des Gasgesetzes (2.23) mit der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p

$$p = R d\rho dT \quad (2.25)$$

und es folgt

$$de = c_v dT = c_p T - R dT. \quad (2.26)$$

Sind c_v und c_p unabhängig von Druck und Temperatur, so spricht man von einem *kalorisch perfekten Gas*. Diese Annahme wird erst bei sehr hohen Temperaturen und Drücken, wie sie hier nicht vorkommen, verletzt.

Wegen (2.25) und (2.26) gilt auch

$$\rho e = c_p \rho T - R \rho T = c_p \rho T - p. \quad (2.27)$$

Nimmt man desweiteren als Wärmefluss q_i die Wärmeleitfähigkeit nach dem Gesetz von Fourier

$$q = -\lambda \nabla T \quad (2.28)$$

mit dem Wärmeleitkoeffizient λ an, und setzt (2.27) und (2.28) in die Energiegleichung (2.22) ein, so folgt

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{\partial(\rho c_p u_j T)}{\partial x_j}}_{\text{Konvektiver Transport}} = \underbrace{\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(u_j p)}{\partial x_j}}_{\text{substantielle Druckableitung}} + \underbrace{\frac{\partial(\sigma_{ji} \cdot u_i)}{\partial x_j}}_{\text{Dissipation}} + \underbrace{\rho h}_{\text{Strahlung}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)}_{\text{Wärmeleitung}}. \quad (2.29)$$

Geht man schließlich davon aus, dass die Wärmeleitung und -strahlung die einzige nicht-mechanische Energieübertragung ist und wird sowohl die Wärmeentwicklung durch viskose Dissipation als auch die substantielle Ableitung des Drucks (bei kleinen Machzahlen ist dies gerechtfertigt

[100]) vernachlässigt, so reduziert sich (2.29) auf eine zeitabhängige Konvektions- und Diffusionsgleichung in der Temperatur [19]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(u_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + 1/c_p h, \quad (2.30)$$

wobei der Wärmediffusivitätskoeffizient κ definiert ist durch

$$\kappa = \frac{\lambda}{\rho c_p}.$$

2.2. Natürliche Konvektion und die Boussinesq Approximation

Natürliche Konvektion beschreibt den Antrieb einer Strömung durch Auftriebskräfte, welche in der Impulsgleichung als Masse- bzw. Gravitationsterm auftauchen. Hier werden nur Dichteänderungen bedingt durch Temperaturgradienten berücksichtigt. Der Einfluss von Dichteänderungen durch Konzentrationsgradienten wird also nicht betrachtet. Der natürlichen Konvektion steht die *erzwungene Konvektion* gegenüber, bei der die Strömung durch vorgeschriebene Geschwindigkeitsrandbedingungen angetrieben wird. Spielen beide Prozesse eine Rolle, so spricht man von *gemischter Konvektion*.

Wird davon ausgegangen, dass keine Wärmequellen innerhalb des Strömungsgebietes vorhanden sind und wird desweiteren der thermische Strahlungstransport vernachlässigt, so kann der Wärmetransport durch natürliche Konvektion wie folgt beschrieben werden. Der direkte Wärmeübergang von einer Wand mit der Temperatur T_w zum Fluid erfolgt ausschließlich durch Wärmeleitung, also durch molekulare Teilchenbewegung innerhalb der Grenzschicht δ_T gemäß des Temperaturgrenzschichtverlaufes $T(x_i)$ (siehe Abbildung 2.1). Die Wärmekonvektion setzt wegen der

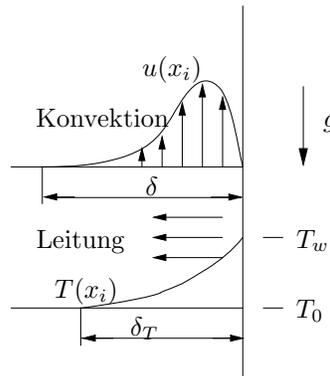


Abbildung 2.1.: Wärmetransport bei natürlicher Konvektion.

Grenzschicht δ in einem infinitesimalen Abstand zur Wand mit einer infinitesimalen Geschwindigkeit ein und steigt mit zunehmendem Abstand entsprechend des Grenzschichtprofils $u(x_i)$ an.

Die in der Impuls- und Energiegleichung vorkommenden Stoffgrößen Dichte ρ , Viskosität μ , spezifische Wärmekapazität c_p , Wärmeexpansion γ und Wärmeleitung λ , sind temperatur- und druckabhängig. Die Berücksichtigung dieser Abhängigkeiten führt auf ein sehr komplexes, nicht-lineares System partieller Differentialgleichungen. Zur Vereinfachung wird häufig die *Boussinesq Approximation* verwendet. Unter der Boussinesq Approximation versteht man allgemein, dass

- Dichteunterschiede nur im Gravitationsfeld berücksichtigt
- alle anderen Stoffgrößen als konstant angenommen werden können und
- viskose Dissipation vernachlässigt werden kann.

Geht man davon aus, dass keine zusätzliche Massekraft nennenswerten Einfluss hat, so stellt ρf_i in der Impulsgleichung (2.7) die Graviationskraft

$$\rho f_i = \Delta \rho \delta_{i3} g,$$

dar, mit der Gravitation g und der vertikalen Richtung $i = 3$.

Um zur Boussinesq Approximation zu gelangen, wird nun eine Taylorreihenentwicklung eines Stoffwertes α bezüglich einer Referenztemperatur T_0 und eines Referenzdruckes p_0 durchgeführt, wobei nach der ersten Ordnung abgebrochen wird:

$$\frac{\alpha}{\alpha_0} = 1 + \left[\frac{\partial \alpha}{\partial T} \frac{T}{\alpha} \right]_0 \frac{T - T_0}{T_0} + \left[\frac{\partial \alpha}{\partial p} \frac{p}{\alpha} \right]_0 \frac{p - p_0}{p_0} + \dots \quad (2.31)$$

Die Terme in eckigen Klammern sind reine Stoffgrößen. Hierbei zeigt sich, dass die Druckabhängigkeit bei Flüssigkeiten um mehrere Größenordnungen kleiner ist als die entsprechende Temperaturabhängigkeit [51]. Die Vernachlässigung der Druckabhängigkeit bei Gasen ist dann zulässig, wenn nur kleine Mach-Zahlen (asymptotisch $Ma \rightarrow 0$) auftreten. Da in dieser Arbeit das Fluid als inkompressibel betrachtet wird und somit die Mach-Zahl $Ma = u/c = 0$ mit einer Referenzgeschwindigkeit u und der Schallgeschwindigkeit $c = c_{\text{ink}} = \infty$ beträgt, wird im folgenden ausschließlich die Temperaturabhängigkeit berücksichtigt.

Wird für α die Dichte ρ verwendet, diese aufgeteilt in einen konstanten Teil ρ_0 und einen variierenden Anteil ρ' mit

$$\rho' = \rho - \rho_0,$$

und in (2.31) eingesetzt, so folgt der thermodynamische Zusammenhang:

$$\rho' = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial T} \theta = \gamma \rho_0 \theta, \quad (2.32)$$

mit der dimensionslosen Temperaturdifferenz $\theta = \frac{T - T_0}{T_0}$. Da nur noch konstante Dichten betrachtet werden, wird $\rho = \rho_0$ gesetzt.

Der Druck p in (2.7) setzt sich zusammen aus einem statischen Druck p_{stat} und einem dynamischen Druck p_{dyn}

$$p = p_{\text{stat}} + p_{\text{dyn}},$$

wobei der statische Druck mit der Säulenhöhe h durch

$$p_{\text{stat}} = \rho \delta_{i3} g h$$

bestimmt wird. Setzt man den aufgeteilten Druck nun in die Impulsgleichung (2.7) ein, so heben sich die statischen Graviationskräfte gegenseitig auf und es bleibt nur noch der dynamische Druck. Aus diesem Grunde spielen bei der natürlichen Konvektion nur *Dichtedifferenzen* eine Rolle.

Das aus der Kontinuitäts- (2.8), Impuls-(2.7) und vereinfachten Energiegleichung (2.30) bestehende zu lösende System lautet schließlich:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.33a)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \gamma \rho \delta_{i3} g(T - T_0) = 0 \quad (2.33b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(u_j T)}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = 1/c_p h. \quad (2.33c)$$

Die bisherigen Betrachtungen beziehen sich auf dimensionsbehaftete Größen. Für eine bessere Veranschaulichung und einfachere Implementierung werden die um die Energiegleichung erweiterten Navier-Stokes-Gleichungen entdimensionalisiert. Mit den dimensionsbehafteten durch (*) gekennzeichneten Geschwindigkeits-, Temperatur-, Längen- und Zeitgrößen, können die primitiven Variablen und die unabhängigen Größen mit

$$u_i = \frac{u_i^*}{u_0^*}, p = \frac{p^*}{p_0^*}, \theta = \frac{T^*}{\Delta T^*}, x_i = \frac{x_i^*}{L_0^*}, t = \frac{t^*}{t_0^*}$$

entdimensionalisiert werden. Durch Einführung der Referenzgrößen

$$u_0^* = \frac{\kappa}{L_0^*}, p_0^* = \frac{\rho \kappa^2}{L_0^{*2}}, t_0^* = \frac{L_0^{*2}}{\kappa}$$

folgt aus (2.33) das häufig anzutreffende und auch hier implementierte entdimensionalisierte Gleichungssystem:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.34a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_j u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - Pr \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + Gr \frac{\nu^2}{\kappa^2} \theta = 0 \quad (2.34b)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial(u_j \theta)}{\partial x_j} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_j \partial x_j} = \frac{h \rho L_0^{*2}}{\lambda \Delta T^*}. \quad (2.34c)$$

In (2.34b) steht Pr für die Prandtl-Zahl, die als reine Stoffgröße das Verhältnis zwischen viskosem Impuls- und diffusivem Wärmetransport wiedergibt:

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} = \frac{\nu}{\kappa}. \quad (2.35)$$

Für Luft beispielsweise beträgt $Pr = 0.71$, die Temperaturgrenzschicht δ_T ist also größer als die Grenzschicht für die Geschwindigkeit δ (siehe Abbildung 2.1). Desweiteren beschreibt die Grashof-Zahl

$$Gr = \frac{\gamma \Delta T L_0^3}{\nu^2} \quad (2.36)$$

das Verhältnis der Auftriebskräfte zu den viskosen Kräften. Die Formulierung (2.34) ist deswegen attraktiv, da die Grashof-Zahl eine problemabhängige charakteristische Größe darstellt, ähnlich der Reynolds-Zahl bei erzwungener Konvektion, und somit etwas über das Strömungsverhalten aussagt. Eine weitere Kennzahl ist die Rayleigh-Zahl, die als das Produkt aus Grashof- und Prandtl-Zahl definiert ist:

$$Ra = Pr Gr = \frac{g \gamma \Delta T L_0^3}{\nu \kappa}.$$

Für die Beurteilung der Rayleigh-Zahl ist die Kenntnis des zu Grunde liegenden Fluids notwendig.

2.2.1. Gültigkeit der Boussinesq Approximation

Verwendet man für die temperatur- und druckabhängigen Stoffkoeffizienten $\rho, \mu, \gamma, \lambda, c_p$ eine lineare Approximation (Taylorreihenentwicklung 1. Ordnung) wie beispielsweise für den Volumenexpansionskoeffizienten γ in (2.32), so stellt sich die Frage, wie groß der Fehler bei gegebener Problemstellung eigentlich ist. In der Literatur wird meistens davon gesprochen, dass nur bei kleinen Temperaturdifferenzen die Boussinesq Approximation angewendet werden darf [127, 119]. Eine quantitative Aussage hingegen geben Gray und Giorgini in [61]. Sie entwickeln ein Verfahren zur Bestimmung der Grenzen der Anwendbarkeit der Boussinesq Approximation für ein bestimmtes Fluid. Dabei werden alle Stoffkoeffizienten in einer Taylorreihe bis zur 1. Ordnung entwickelt und in die Kontinuitäts-, Impuls- und Energiegleichung eingesetzt. Durch Entdimensionalisierung und Einführung entsprechender Sensitivitätsparameter ϵ_i für die einzelnen Terme können die Gleichungen entsprechend vereinfacht werden. Für ein spezielles Fluid werden dann die Stoffeigenschaften bezüglich eines Referenzpunktes eingesetzt. Die kritischsten Terme, bei denen die Sensitivitätsparameter am größten sind, können nun identifiziert werden. Als überkritisch wird ein Fehler von mehr als 10% bezüglich der Entwicklung $[1 + \epsilon_i \Delta T + \epsilon_j \Delta P]$ betrachtet. In [61] wurden explizit Wasser und Luft bei einer Temperatur von $T_0 = 15^\circ C$ und $P_0 = 1 \text{ atm} = 1013.25 \text{ hPa}$ untersucht. Es zeigt sich, dass die Druckabhängigkeit, wie bereits weiter oben erwähnt, keine nennenswerte Rolle spielt. Außerdem haben sich insbesondere die folgenden zwei Terme kondensiert:

$$\left| \epsilon_1 \left(\frac{T_0}{\Delta T} \right) \right| \leq 0.1 \quad (2.37)$$

und

$$|\epsilon_2| \left(\frac{Pr}{Ra} \right) \leq 0.1 \frac{1}{(PrRa)^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.38)$$

Bei Wasser sind die beiden kritischen Größen die Temperaturdifferenz ΔT und Referenzlänge L_0 . Die Referenzlänge ist hierbei die charakteristische Höhe in einer Rayleigh-Bénard-Strömung. Der Temperaturbereich innerhalb dessen die Boussinesq-Approximation die genannten 10% nicht übersteigt ist die Temperaturdifferenz

$$\Delta T \leq 1.25^\circ C$$

und die Referenzlänge

$$L_0 \leq 2400 \text{ m}.$$

Bei Luft sind ebenfalls die Temperaturdifferenz als auch die Lauflänge die kritischen Größen. Die maximal zulässige Temperatur ist mit

$$\Delta T \leq 28.6^\circ C$$

deutlich höher, die maximal zulässige Länge ist mit

$$L_0 \leq 830 \text{ m}$$

niedriger als bei Wasser.

Die Längen stellen demnach nur bei geophysikalischen Problemstellungen eine nennenswerte Fehlerquelle dar, wie sie beispielsweise in [127] besprochen werden. Bei den hier untersuchten Problemen sind diese bei weitem nicht erreicht.

Bei den Temperaturdifferenzen stößt man mit der Boussinesq Approximation allerdings schnell an die Grenzen der Gültigkeit. Für turbulente Strömungen, bei den die Rayleighzahl sehr groß

ist, bedeutet dies, dass in erster Linie die Lauflänge groß sein muss. Ein Beispiel dafür ist das in Kapitel 8.1 behandelte Problem einer natürlichen Konvektion in einer hohen Nische. Es ist also festzuhalten, dass bei der Boussinesq Approximation konstante Stoffwerte verwendet werden können, solange die Lauflänge und Temperaturdifferenzen die oben genannten Werte nicht überschreiten. In den hier betrachteten Problemstellungen trifft dies nicht zu und es wird für die Berechnungen das Gleichungssystem (2.34) zu Grunde gelegt.

3. Turbulenz und die Grobstruktursimulation

3.1. Einleitung

Turbulenz ist nach wie vor Gegenstand der Forschung. Zwar wurden erhebliche Fortschritte gemacht, seit Stokes und Navier die Gleichungen (2.5) zur Beschreibung allgemein strömender Flüssigkeiten, die für den laminaren und turbulenten Fall gleichermaßen gültig sind, um 1845 aufgestellt haben. Es gibt jedoch keine 'Theorie' der Turbulenz, mit der generisch die unterschiedlichsten Erscheinungsformen beschrieben werden könnten.

Die ersten und sicherlich bekanntesten Experimente, die den Übergang von laminarer in turbulente Bewegung dokumentieren, waren G.I. Taylor, C. Bénard und O. Reynolds in den 20er Jahren des letzten Jahrhunderts. Nach Reynolds ist auch die bedeutendste Größe der Strömungsmechanik benannt: die Reynoldszahl

$$Re = \frac{uL}{\nu},$$

die das Verhältnis der Massekräfte zu den viskosen Kräften wiedergibt. Neben unzähligen Fachbeiträgen ist die Veröffentlichung von Tennekes und Lumley im Jahre 1972 zu nennen [126], in der fundamentale Eigenschaften turbulenter Strömungen beschrieben und vor allem der Frage nachgegangen wird, wie Turbulenz quantitativ - allerdings noch rein statistisch - erfasst werden kann.

Auf eine formale Definition der Turbulenz konnte man sich bisher nicht einigen, weswegen die eine turbulente Strömung beschreibenden Charakteristika, einer phänomenologischen Betrachtungsweise entsprechend, aufgelistet werden [45]:

- Turbulenz ist instationär und zufällig (stochastischer Charakter).
- Turbulente Strömung ist inhärent dreidimensional.
- Turbulente Strömungen bestehen aus einer Vielzahl von Wirbeln unterschiedlicher Größe (Längenskalen), deren Bewegungen innerhalb unterschiedlicher Zeiträume (Zeitskalen) ablaufen.
- Die Dynamik der Wirbel, im Speziellen das Dehnen der Wirbel (*vortex stretching*), ist der grundlegende Mechanismus, bei der Turbulenz intensiviert wird.
- Turbulenz beschleunigt wesentlich die Vermischung einer Erhaltungsgröße. Das Mischen einer Konzentration beispielsweise erfolgt in turbulenter Strömung um Größenordnungen schneller als in laminarer Strömung.
- Turbulenz ist dissipativ. Die Energie, die die kleinsten Wirbel in Dissipation freisetzen, muss stetig zugeführt werden.

- Turbulente Strömungen weisen kohärente Strukturen auf, die deterministisch sind und sich immer wiederholen. Allerdings unterscheiden sich diese durch den zufälligen Charakter turbulenter Strömung bei jeder Realisation¹.

Ein Großteil der praktisch relevanten Strömungen sind turbulent. Zunächst haben sich die Untersuchungen turbulenter Strömungen hauptsächlich auf Experimente beschränkt, die allerdings meist sehr aufwendig und teuer waren und speziell für eine bestimmte Problemstellung durchgeführt wurden. Mit der rasanten Entwicklung sowohl der zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten als auch der einhergehenden Entwicklung neuer Turbulenzmodelle und numerischer Verfahren, wurden und werden immer mehr turbulente Strömungen simuliert. Es besteht also ein großes Interesse an akkuraten Modellen, wobei die Genauigkeit einerseits und der Aufwand andererseits für das jeweilige Problem abzuwägen sind.

Eine turbulente Strömung besteht aus einer Vielzahl großer, mittlerer und sehr kleiner kohärenter Strukturen. Je höher der Turbulenzgrad einer Strömung, desto kleiner sind die kleinsten Strukturen. Die größten Strukturen entsprechen in etwa der Ausdehnung des relevanten Gebietes. Löst man nun alle Skalen mit einem Rechengitter auf, so spricht man von einer *Direkten Numerischen Simulation* (DNS). Landau und Lifshitz [84] fanden bereits 1959 den Zusammenhang zwischen der Anzahl der im Raum zu verwendenden Datenpunkte N , um diese kleinsten Skalen aufzulösen, und der Reynoldszahl:

$$N \sim Re^{9/4}.$$

Werden noch zusätzlich die zur Beschreibung turbulenter Strömungen benötigten Zeitpunkte berücksichtigt, so hängt die benötigte Rechenzeit mit

$$\text{Rechenzeit} \sim Re^3$$

kubisch von der Reynoldszahl ab. Dies hat zur Folge, dass mit den heute zur Verfügung stehenden Methoden und Rechenressourcen in erster Linie akademische Problemstellungen mit moderaten Reynoldszahlen direkt simuliert werden können. Beispielsweise benötigt ein Rechner mit einem Teraflops² für die Berechnung einer turbulenten Strömung mit einer Reynoldszahl von 1000 bereits mehrere Wochen [33]. Die für die Praxis interessanten Strömungen besitzen häufig hohe Reynoldszahlen und treten in komplexen Geometrien auf. Die DNS wird folglich in erster Linie zu Referenzzwecken und zur prinzipiellen Untersuchung der Eigenschaften turbulenter Strömungen verwendet.

Für die Beschreibung turbulenter Strömung werden die Geschwindigkeiten u_i , der Druck p und sonstige zu berücksichtigende Feldgrößen ϕ in einen bezüglich der Zeit gemittelten Anteil $\langle \cdot \rangle$ und einen fluktuierenden Anteil $\langle \cdot \rangle'$ aufgeteilt:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad p = \bar{p} + p', \quad \phi = \bar{\phi} + \phi'. \quad (3.1)$$

Die gemittelten Größen werden explizit berechnet, die Fluktuationen modelliert. Wird nun (3.1) in die Impulsgleichung (2.7) eingesetzt und diese Gleichung unter Beachtung der Rechenregeln für die Mittelwerte beliebiger Zufallsgrößen gemäß

$$\bar{u}_i(x_j) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2}$$

gemittelt, wobei T den Zeitbereich darstellt, in dem statistische Stationarität angenommen werden kann, so erhält man die *Reynoldsen Gleichungen* [121]

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_j}) = \bar{f}.$$

¹Wiederholung eines Experiments

²FLOPS steht für *Floating Point Operation Per Second* und stellt eine Gleitkommazahloperation dar.

Der Term $u'_i u'_j =: \tau_{ij}^R =: \tau_{ij}$ wird als *Reynoldscher Spannungstensor* bezeichnet. O. Reynold postulierte in seiner bekannten Hypothese, dass Turbulenz vorwiegend dort entsteht, wo große Geschwindigkeitsgradienten herrschen, es gelte also:

$$\tau_{ij}(u'_i) \approx \tau_{ij} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.2)$$

Betrachtet man beispielsweise die hohen Geschwindigkeitsgradienten an der Frontseite eines umströmten Tragflächenprofils und die dort vorhandene laminare Strömung, so wird deutlich, dass die Reynoldsche Hypothese nicht generell zutrifft. Alle auf die Reynoldsen Gleichungen aufbauenden Turbulenzmodelle, die *Reynolds Averaged Navier-Stokes*- oder kurz *RANS*-Modelle, scheitern an diesem Punkt. Da RANS-Modelle auf einer zeitlichen Mittelung basieren, sind diese aus rein statistischer Sicht zu betrachten und werden deshalb auch *statistische* Turbulenzmodelle genannt. Sie liefern für zeitlich mittelbare Strömungen und einfache Geometrien teilweise zufriedenstellende Ergebnisse. Bei diesen Turbulenzmodellen wird unterschieden zwischen Modellen nullter, erster und zweiter Ordnung. Modelle nullter Ordnung verwenden zur Schließung ausschließlich algebraische Beziehungen. Sie sind ungenau und werden praktisch nicht mehr verwendet. Modelle erster Ordnung (*Eingleichungsmodelle*) beziehen mit Hilfe einer Transportgleichung eine statistische Größe mit ein. Am populärsten sind Modelle zweiter Ordnung (*Zweigleichungsmodelle*), die zwei statistische Größen berücksichtigen. Von diesen Zweigleichungsmodellen sei das $k-\epsilon$ -Modell erwähnt, bei dem die turbulente kinetische Energie $k := 1/2(\mathbf{u}'\mathbf{u}')$ und die Dissipationsrate $\epsilon := \nu/2|\nabla\mathbf{u}' + \nabla\mathbf{u}'^T|^2$ in Form von zwei zusätzlichen Konvektions-Diffusionsgleichungen mittransportiert werden.

Allerdings sind statistische Modelle per se nicht in der Lage, transiente Phänomene zu beschreiben, da sie wie bereits erwähnt auf zeitlich gemittelten Größen basieren. Interessante Anwendungen wie reagierende Strömungen, bei denen beispielsweise transiente chemische Reaktionen auftreten, können nicht oder nur mit großem Modellieraufwand berechnet werden. RANS-Modelle sind unabhängig von dem zu Grunde liegenden Gitter, da das gesamte Frequenzspektrum modelliert wird. Dieser Vorteil steht allerdings der hohen Modellierungsunsicherheit gegenüber. Darüberhinaus müssen diese Modelle in den meisten Fällen an die gegebene Problemstellung durch Parametervariation angepasst werden und sind somit problemspezifisch.

Die Grobstruktursimulation oder *Large Eddy Simulation* (LES) verfolgt einen anderen, deterministischen Ansatz. Der russische Mathematiker Kolmogorov stellte 1942 fest [81], dass die kleinen turbulenten Strukturen isotrop und weitestgehend unabhängig von der Geometrie sind. Dieser Gedanke spielt bei der LES eine zentrale Rolle, als dass im Idealfall die anisotropen Strukturen mit dem Rechengitter explizit aufgelöst werden und für die isotropen Strukturen einfache Modelle zu Grunde gelegt werden können. Insofern stellt das Rechengitter eine Art impliziten Tiefpassfilter dar. Die Größe dieses Filters ist nach wie vor Gegenstand intensiver Forschung [101]. Es zeigt sich, dass bei stark turbulenten Strömungen das zur Auflösung der Strukturen bis zur Isotropiegrenze erforderliche Gitter nach wie vor sehr fein ist. Der Aufwand einer LES liegt also zwischen dem einer DNS und dem statistischer Turbulenzmodelle.

Im Folgenden werden zunächst die Natur und fundamentalen Eigenschaften turbulenter Strömungen beschrieben, gefolgt von den bahnbrechenden Phänomänologien von Kolmogorov, Taylor und Richardson, auf denen die später beschriebenen Turbulenzmodelle basieren.

3.2. Beschreibung der Turbulenz mit Hilfe der Wirbeldynamik

Wirbel spielen eine entscheidende Rolle in turbulenten Strömungen. Diese können sich nur materiell (advektiv) von einem Ort zum nächsten bewegen, wohingegen der Impuls durch den Druck

instantan verteilt wird. In diesem Sinne betrachtet man bei der Beschreibung turbulenter Strukturen das ω -Feld und die Wirbeltransportgleichung (2.9). Eine turbulente Strömung im Sinne der Wirbeldynamik ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

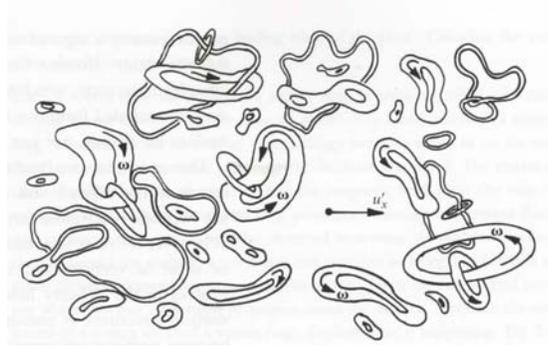


Abbildung 3.1.: Kohärente Strukturen in turbulenter Strömung [33].

Die Dynamik der Wirbel ist ein zentraler Mechanismus in der Bewegung turbulenter Strömung. Wie weiter unten noch gezeigt wird, spielt die Viskosität in erster Linie im Bereich kleiner Skalen eine Rolle. Nimmt man also idealisiert an, dass die viskosen Effekte bei größeren Strukturen vernachlässigbar sind, kann auf die Dynamik reibungsfreier Strömungen zurückgegriffen werden, die als qualitative Methode zur Beschreibung von Turbulenz zu verstehen ist.

Der *Thomsonsche Wirbelsatz* (auch *Kelvinsches Zirkulationstheorem* genannt) ist Ausgangspunkt für die berühmten *Helmholtzschen Wirbelsätze*, die eine anschauliche Interpretation von Wirbelbewegungen ermöglichen. Er besagt, dass die Zirkulation Γ (2.10), die ein Maß für die Rotation der Geschwindigkeit darstellt, einer geschlossenen materiellen Linie in einer reibungsfreien (und barotropen) Flüssigkeit für alle Zeiten konstant ist:

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = 0.$$

Bei der Zirkulation Γ handelt es sich um eine Erhaltungsgröße. Der *erste Helmholtzsche Wirbelsatz* besagt nun, dass die Zirkulation einer Wirbelröhre entlang dieser Röhre konstant ist [121, 33]:

$$\oint_{C_1} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{x} = \oint_{C_2} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{x}, \quad (3.3)$$

wobei C_1 und C_2 Kurven der Querschnitte A_1 und A_2 der Wirbelröhre darstellen. Eine Wirbelröhre wird durch Wirbellinien³, die durch eine geschlossene Kurve der Röhre gehen, gebildet. Mit Hilfe des Stokesschen Integralsatzes kann (3.3) in ein Flächenintegral der Gestalt

$$\iint_{A_1} (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \iint_{A_2} (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS =: \omega$$

überführt werden. Der Ausdruck $\iint (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS$ wird auch als *Wirbelstärke* bezeichnet⁴. Der erste Helmholtzsche Wirbelsatz impliziert, dass die Wirbelröhre im Inneren eines Fluids nicht enden kann, da die Flüssigkeitsmenge, die pro Zeiteinheit durch die Wirbelröhre fließt, am Ende

³Wirbellinien sind die Tangentialkurven eines Wirbelvektorfeldes in einer rotationsbehafteten Strömung.

⁴In der Literatur wird der Begriff der Wirbelstärke allerdings auch für ω oder für den Betrag von $\nabla \times \mathbf{u}$ verwendet.

der Röhre nicht einfach verschwinden kann. Entweder reicht die Röhre ins Unendliche, endet an den Grenzen der Flüssigkeit oder schließt sich in sich selbst und bildet einen Wirbelring.

Betrachtet man nun

$$\oint_{C_1} \mathbf{u} \cdot d\mathbf{x} = \iint_{A_1} (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \Gamma,$$

so erkennt man, dass bei einer Verkleinerung der Fläche A_1 die Winkelgeschwindigkeit zunehmen muss (Erhaltung des Drehimpulses).

Der *zweite Helmholtzsche Wirbelsatz* besagt, dass eine Wirbelröhre immer aus denselben Flüssigkeitsteilchen besteht. Dies ist unmittelbare Folge des Kelvinschen Zirkulationstheorems [121, 33]. Wie bereits erwähnt, wird die Energie in erster Linie von den großen, energiereichen zu den kleinen, energiearmen Strukturen transferiert. Diese Energiekaskade, wie sie im nächsten Abschnitt beschrieben wird, kann mit Hilfe der Wirbeldynamik veranschaulicht werden. Mit $\omega = \bar{\omega} + \omega'$, wobei mit $\bar{\omega}$ die zeitlich gemittelte Rotation der Geschwindigkeiten und ω' die fluktuierende Rotation der Geschwindigkeiten dargestellt werden, kann die Wirbeltransportgleichung (2.9) folgendermaßen geschrieben werden:

$$\frac{D\omega'}{Dt} = \underbrace{\bar{\omega} \nabla \mathbf{u}'}_{(1)} + \underbrace{\omega' \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}}}_{(2)} + \underbrace{\omega' \cdot \nabla \mathbf{u}'}_{(3)} + \underbrace{\nu \Delta \omega'}_{(4)}. \quad (3.4)$$

Es werden nun die einzelnen Beiträge betrachtet:

1. Der Wirbel der Hauptströmung transportiert die Fluktuationen der Geschwindigkeit. Hier wird die Energie der Hauptströmung in die Turbulenz eingebracht.
2. Die fluktuierenden Wirbel interagieren mit der Hauptströmung. Hier findet das Dehnen der Wirbel durch die Hauptströmung statt und bewirkt die Erhöhung der Wirbelstärke und somit der kinetischen Energie.
3. Die Wirbelfluktuationen interagieren mit den Geschwindigkeitsfluktuationen, d.h. die Turbulenz wirkt auf sich selbst. Hier tritt die Energiekaskade in Erscheinung. Diese Interaktion führt dazu, dass die Wirbel durch Querdiffusion (in diesem Skalenbereich ist die Viskosität sehr wohl von Bedeutung) und gegenseitiges Dehnen in kleinere Strukturen zerfallen.
4. Die Wirbelfluktuationen diffundieren bevor diese schließlich dissipieren.

Zusammengefasst beschreibt (3.4) den kompletten Energietransfer. Die Wirbelintensität wird kontinuierlich durch die Hauptströmung (Wirbeldehnung) erhöht. Dies beschreibt den Transfer der Hauptströmung in die Turbulenz. Die Intensität der großen Wirbel wird dann durch $\omega' \cdot \nabla \mathbf{u}'$ an die kleineren Wirbel weitergegeben, wo die Energie schließlich dissipiert.

Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, sind die Wirbelsätze gut geeignet, den Energietransfer zwischen den unterschiedlichen Wirbeln bzw. Turbulenzballen zu veranschaulichen.

3.3. Die Energiekaskade und Kolmogorovschen Hypothesen

L.F. Richardson postulierte bereits 1922, dass die Energie in einer turbulenten Strömung kontinuierlich von den großskaligen zu den kleinskaligen Strukturen transferiert wird, wo diese schließlich in viskose Spannungen aufgeht und dissipiert. Der Energietransfer von den großskaligen zu den kleinskaligen Strukturen wird *forward scattering*, der umgekehrte Prozess *backward scattering* genannt. Diese Energiekaskade ist von zentraler Bedeutung, gerade im Hinblick auf die numerische Simulation. Wie sich weiter unten noch zeigen wird, unterscheiden sich die Turbulenzmodelle u.a.

darin, inwieweit der Energietransfer adäquat dargestellt werden kann. Kolmogorov konstatierte in seiner berühmten Hypothese [81], dass die Eigenschaften kleinskaliger Strukturen nur von der Viskosität ν und der von den großskaligeren Strukturen weitergegebenen Energie abhängen. Desweiteren sind diese kleinen Strukturen statistisch isotrop und universal, d.h. sie sind überall gleich, ob in einem turbulenten Freistrahle oder in turbulenten Grenzschichten. Diese beiden Hypothesen stellten sich im Laufe der Zeit als weitgehend zutreffend heraus und werden nun näher beschrieben.

3.3.1. Energiekaskade

Eine fundamentale Eigenschaft turbulenter Strömung ist die Verteilung der Energie über die einzelnen Skalen und der Energietransfer zwischen den Skalen. Üblicherweise wird dies im Frequenzraum durchgeführt und entsprechend über der Wellenzahl $k = 1/\lambda$, wobei λ die Wellenlänge darstellt, aufgetragen. Eine schematische Verteilung der spektralen Energie über die Wellenzahlen zeigt Abbildung 3.2, die die Vorstellung von Richardson widerspiegelt. Energie wird im großskaligen Bereich produziert, weiter über die Energiekaskade an die nächst kleineren Skalen gegeben und schließlich im kleinstskaligen Bereich dissipiert. Im Folgenden bezeichne u die

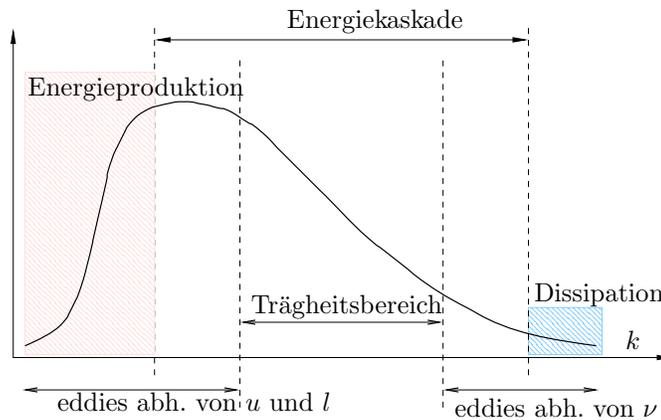


Abbildung 3.2.: Klassische Energiekaskade

Geschwindigkeit, l die Länge der großen, v die Geschwindigkeit bzw. η die Länge der kleinen Skalen. Die charakteristische Zeit für das Zerfallen⁵ der großen Skalen ist $t = l/u$. Befindet sich das System im statistischen Equilibrium, so muss die Energieproduktion (kinetische Energie pro Zeiteinheit)

$$\Pi \sim \frac{u^2}{t} = \frac{u^2}{u/l} = \frac{u^3}{l} \quad (3.5)$$

sowohl dem Energietransfer von den großen zu den kleinen Skalen als auch der schließlichen Dissipation

$$\epsilon = 2\nu S'_{ij} S_{ij} \sim \nu \frac{v^2}{\eta^2} \quad (3.6)$$

entsprechen; ansonsten würde im System Energie erzeugt oder vernichtet werden. Die Beziehung (3.6) gibt die Proportionalität des Dehnungstensors $S_{ij} := \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})$ und des kleinskaligen Verhältnisses der Geschwindigkeit und Länge wieder.

⁵Unter Zerfallen ist hier der Transfer auf kleinere Skalen zu verstehen.

Der Energiefluss von den größten bis hin zu den kleinsten Skalen kann nun mit

$$G = \underbrace{\rho^{-1} \tau_{ij}^R \bar{S}_{ij}}_{\text{Energietransfer zur Turbulenz}} = \underbrace{\Pi_A = \Pi_B = \dots = \Pi_N}_{\text{Energietransfer entlang der Kaskade}} = \underbrace{\epsilon}_{\text{Dissipation}} \quad (3.7)$$

beschrieben werden, wobei \bar{S}_{ij} den Dehnungstensor der gemittelten Geschwindigkeiten darstellt. Setzt man (3.5) und (3.6) in (3.7) ein, so folgt schließlich der für die im anschließenden Abschnitt beschriebenen Kolmogorovschen Hypothesen entscheidende Zusammenhang:

$$\Pi \sim u^3/l \sim \epsilon \sim \nu v^2/\eta^2. \quad (3.8)$$

3.3.2. Kolmogorovsche Hypothesen

Kolmogorov ergänzte das Bild der Energieskaskade von Richardson und quantifizierte 1941 die Eigenschaften der unterschiedlichen Skalen in einer turbulenten Strömung. Die Kolmogorovschen Hypothesen waren so bahnbrechend, dass die kleinsten Skalen seinen Namen tragen. Die erste Hypothese betrifft die Isotropie der kleinskaligen Bewegung ($l < l_{EI}$), wobei l_{EI} die Demarkation zwischen anisotropen großen und isotropen kleinen Wirbeln darstellt. Generell ist die Bewegung der großen Turbulenzballen wegen der Geometrieränder anisotrop und statistisch instationär. Kolmogorov postulierte, dass anisotrope Informationen durch das stetige Aufbrechen großer in immer kleinere Skalen verloren gehen, die kleinsten Skalen schließlich isotrope Eigenschaften aufweisen.

Kolmogorovsche lokale Isotropiehypothese Bei einer ausreichend hohen Reynoldszahl sind die Bewegungen der kleinen turbulenten Skalen ($l \ll l_0$) statistisch isotrop⁶.

Die Bewegungen kleiner Skalen sind also unabhängig von der Geometrie und der Hauptströmung. Da die Bewegungen der Wirbel im Bereich $l < l_{EI}$ nur von der Viskosität und dem Energietransfer von den größeren Skalen abhängen, folgerte Kolmogorov mit $\epsilon \approx \Pi$ (3.7) weiter, dass Wirbel im Bereich $l < l_{EI}$ nur von der Viskosität ν und Dissipation ϵ abhängen.

Kolmogorovsche erste Ähnlichkeitshypothese In jeder turbulenten Strömung mit ausreichend hoher Reynoldszahl ist die Statistik der kleinskaligen Bewegungen $l < l_{EI}$ universal und wird ausschließlich durch ν und ϵ bestimmt.

In diesem Bereich sind die Zeitskalen $l/u(l)$ wesentlich kleiner als l_0/u_0 , wobei u_0 die charakteristische Geschwindigkeit einer gegebenen Problemstellung darstellt. Die kleinen Wirbel können sich also sehr schnell an die jeweilige Energiezufuhr anpassen und erreichen somit ein statistisches Equilibrium.

Da im kleinskaligen Bereich die viskosen Kräfte dominieren, gilt

$$Re = \frac{v\eta}{\nu} \sim 1,$$

und aus (3.8) folgen schließlich die Kolmogorovschen (kleinsten) Skalen:

$$\eta \sim l(ul/\nu)^{-3/4} \sim (\nu^3/\epsilon)^{1/4} \quad (3.9a)$$

$$v \sim u(ul/\nu)^{-1/4} \sim (\nu\epsilon)^{1/4} \quad (3.9b)$$

$$\tau \sim \tau_0(ul/\nu)^{-1/2} \sim (\nu\epsilon)^{1/2}. \quad (3.9c)$$

⁶ l_0 ist die für ein Problem charakteristische Länge.

Die Spannungen der kleinsten Teilchen werden in (3.9c) mit τ bezeichnet. Bei Problemstellungen mit natürlicher Konvektion, wie sie auch in dieser Arbeit vorkommen, und bei der keine Referenzgeschwindigkeit a priori vorliegt, kann diese nach Grötzbach [63] mit

$$u_0 = \sqrt{g\gamma\Delta T_w D} \quad (3.10)$$

abgeschätzt und die Kolmogorovschen Skalen somit durch Einsetzen in (3.9) bestimmt werden.

3.3.3. Kolmogorovsches 5/3-Gesetz

Dieses wichtige Gesetz ist insofern bemerkenswert, als dass es den Verlauf der Energiedichte im Trägheitsbereich über die Frequenzen sehr genau quantifiziert, was beim Studium turbulenter Strömungen selten angetroffen wird. Es besagt, dass die Energiedichte um 5 Größenordnungen abnimmt, wenn die Frequenz bzw. Wellenzahl k um 3 Größenordnungen abnimmt und ist folgendermaßen definiert (Herleitung in [33]):

$$E(k) = \alpha \epsilon^{2/3} k^{-5/3},$$

mit der Konstanten α . Dieses Gesetz wurde in zahlreichen Experimenten nachgewiesen und kann als allgemein gültig betrachtet werden. Bei numerischen Ergebnissen wird dieses Verhalten häufig zur Validierung herangezogen.

Bemerkung 1. Eine grundlegende Voraussetzung der Kolmogorov-Theorie ist die Annahme der statistischen Stationarität und des Gleichgewichtes. Daher werden transitionelle Strömungen nicht erfasst, da sie nicht im Gleichgewicht sind und die Energieumverteilung durch sehr spezifische Transitionsmechanismen geschieht [47].

3.4. Die Grobstruktursimulation

Wie bereits erwähnt werden bei der LES die großen Strukturen aufgelöst und die kleinen modelliert. Diese Art der Berechnung turbulenter Strömungen steht somit zwischen den RANS-Methoden und der DNS. Der Erfolg der LES liegt darin begründet, dass die Energie in erster Linie von den großen zu kleinen zu modellierenden Skalen transferiert wird und nicht umgekehrt (obwohl dies auch vorkommt). Die kleinen Skalen verhalten sich passiv und können mit verhältnismäßig einfachen Modellen erfasst werden.

Bestechend ist die Attraktivität der LES besonders im Wellenzahlenraum. In [112] wurde das Energiespektrum $E(\kappa)$ unterschiedlichster Problemstellungen zusammengetragen. Wird $E(\kappa)$ über die mit der Kolmogorovschen Länge η skalierten Wellenzahlen κ aufgetragen, so kommt man zur Schlussfolgerung, dass

$$\kappa_{DI}\eta = 0.1$$

gilt, wobei κ_{DI} den Übergang der Energie zur Dissipation markiert. Da $\kappa\eta \leq 1.5$, bedeutet dies, dass alle $\kappa > 0.1$ im dissipativen Bereich liegen. In drei Raumdimensionen mit den Wellenzahlen κ hat dies zur Folge, dass nur 0.15% aller Moden in dem Bereich liegen, in dem die kinetische Energie nicht dissipiert. Da die Energie im dissipativen Bereich sehr gering ist und diese somit i.A. nicht berücksichtigt wird, reduziert die LES die Komplexität drastisch bei gleichzeitiger Auflösung energiereicher Skalen.

Die zahlreichen Veröffentlichungen zeigen, dass die LES einerseits in viele Bereiche wie Stofftransport und reaktive Strömungen Einzug erhalten hat, aber andererseits nach wie vor Grundlagenforschung betrieben wird.

3.4.1. Filteroperator

Um die großen von den kleinen Skalen zu trennen, bedient man sich einer räumlich lokalen Mittlung der Geschwindigkeiten, des Drucks und anderer Feldgrößen. Dies entspricht einer Tiefpassfilterung und wird mit einem Faltungsintegral im Ortsraum realisiert. Eine gefilterte Größe $\phi(\xi)$ auf dem Intervall $(-\infty, +\infty)$ ist nun folgendermaßen definiert [86]:

$$\bar{\phi}(\xi) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi - \eta) \phi(\eta) d\eta, \quad -\frac{1}{2}\Delta \leq \eta \leq \frac{1}{2}\Delta, \quad (3.11)$$

wobei die Filterweite Δ der kompakte Träger des Kerns G ist. Desweiteren hat die Filteroperation die Eigenschaft

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi) d\xi = 1.$$

Zusätzlich muss der Kern ausreichend schnell konvergieren, d.h. mit $G(\xi) \rightarrow 0$ für $|\xi| \rightarrow \infty$ müssen die Momente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi) \xi^n d\xi$$

für $n \geq 0$ existieren. Für den hier verwendeten Box-Filter besitzt der Kern die folgende Form:

$$G(\xi - \eta) = \begin{cases} 1 & \eta \in \Omega_\Delta \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei Ω_Δ den Trägerbereich für die Filterweite Δ im Gebiet Ω darstellt. Die Filterweite im \mathbb{R}^n , wobei hier nur $n = 2, 3$ von Interesse ist, ist mit $\Delta = \sqrt[n]{|\Omega_\Delta|} = \sqrt[n]{\prod_i \Delta_i}$ definiert. Der einfacheren Schreibweise wegen wird der Filter mit der assoziierten Filterweite Δ auch mit G_Δ bezeichnet.

Die Formulierung der Filterung gemäß (3.11) gilt nur für uniforme (konstante) Filterweiten. In dieser Arbeit kommen aber auch adaptive Verfahren bzw. unstrukturierte Gitter zum Einsatz, weswegen (3.11) auf nicht-uniforme Filterweiten verallgemeinert werden muss. Ghosal und Moin [56] geben folgende mathematische Formulierung für eine Filteroperation an:

$$\bar{\phi}(\xi) = \frac{1}{(\Delta_+(\xi) + \Delta_-(\xi))} \int_{\xi - \Delta_-(\xi)}^{\xi + \Delta_+(\xi)} \phi(\eta) d\eta, \quad -\frac{1}{2}\Delta \leq \xi \leq \frac{1}{2}\Delta, \quad (3.12)$$

wobei $\Delta_+(\xi)$ und $\Delta_-(\xi)$ positive Funktionen sind und $\Delta_+(\xi) + \Delta_-(\xi)$ die effektive Filterweite am Ort ξ darstellt. Für ein endliches Gebiet müssen $\Delta_+(\xi)$ und $\Delta_-(\xi)$ hinreichend schnell gegen Null konvergieren, damit $(\xi - \Delta_-(\xi), \xi + \Delta_+(\xi))$ immer im Gebiet von ϕ liegt. Es kann gezeigt werden [94], dass mit der Definition (3.12) gilt:

$$\frac{\overline{d\phi}}{d\xi} - \frac{d\bar{\phi}}{d\xi} = \frac{(d/d\xi)(\Delta_+(\xi) + \Delta_-(\xi))}{\Delta_+(\xi) + \Delta_-(\xi)} \bar{\phi} - \frac{1}{(\Delta_+ + \Delta_-)} \left[\phi(\xi + \Delta_+) \frac{d\Delta_+}{d\xi} + \phi(\xi - \Delta_-) \frac{d\Delta_-}{d\xi} \right].$$

Werden Funktionen mit nicht-uniformen Filterweiten gefiltert (gefaltet), so erhält man also den *Kommutationsfehler*

$$e_k = \left(\frac{\overline{d\phi}}{d\xi} \right) - \left(\frac{d\bar{\phi}}{d\xi} \right) \neq 0. \quad (3.13)$$

Der Kommutationsfehler kann auch physikalisch interpretiert werden. Sequenzen von sich stark unterscheidenden Filterweiten (nicht-konvergierende Filterweiten) induzieren numerisch verfälschten Energietransfer. Bewegen sich kohärente Strukturen von einem Gebiet kleiner Filterweite in

ein Gebiet größerer Filterweite bei konstanter physikalischer Situation, so wird entsprechend der Filterweitenfolge mehr Energie von den großen zu den kleinen Skalen transferiert. Das Umgekehrte kann ebenfalls zutreffen, wobei dann zusätzlich Energie durch *backscattering*, also von den kleinen zu den Großen Skalen, transferiert wird. Ist nun der Übergang der Filterweiten hinreichend glatt, so kann dieser numerisch induzierte Energietransfer vernachlässigt werden.

Werden die Navier-Stokes-Gleichungen gefiltert, so erhält man bei nicht-uniformen Filterweiten neben dem Reynoldsen Spannungstensor ein zusätzliches Schließungsproblem, das übrigens auch für lineare Funktionen auftritt. Steht die Filterweite in festem Verhältnis zur Gitterweite, so ist der Kommutationsfehler nach Ghosal und Moin [56] zweiter Ordnung. Bei höheren Diskretisierungsverfahren (mit der Fehlerordnung $\mathcal{O}(h^\alpha)$, $\alpha > 2$) ist dieser der dominierende Fehler. Vasilyev et al. zeigen in [131] einen systematischen Ansatz, wie Filterfunktionen mit beliebig kleinem Kommutationsfehler entwickelt werden können.

Da hier nur lineare Ansätze verwendet werden und der Konsistenzfehler zweiter Ordnung ($\mathcal{O}(h^\alpha)$, $\alpha = 2$) in derselben Größenordnung wie der Kommutationsfehler bezüglich des hier verwendeten Boxfilters liegt, wird der durch nicht-uniforme Filterweiten entstehende Kommutationsfehler nicht weiter berücksichtigt.

Bemerkung 2 (Optimale Filterweite). Häufig werden die Elemente als Filterweiten verwendet, dann gilt $\Delta = h$, obgleich nach dem Nyquist Theorem ein Gitter mit der Gitterweite h nur Skalen der Größe $2h$ auflösen kann [44]⁷.

Bei diesem Verhältnis zeigt sich häufig, dass sich der Diskretisierungs- und Modellfehler gegenseitig auslöschen kann. Bei weiterer Verfeinerung des Gitters und konstanter Filterweite steigt der Gesamtfehler u.U. an [53]. Bei $\Delta/h \gg 1$ ist keine wesentliche Verbesserung der Lösung festzustellen [136, 54]. Vielmehr kommt man schnell an die Grenzen des Modells, was Meyers et al. in [93] am Beispiel des Smagorinsky-Modells nachgewiesen haben.

Für die hier durchgeführten Untersuchungen werden Filterweiten mit prinzipiell beliebig großem Träger verwendet, wobei die kleinste Filterweite das Kontrollvolumen darstellt. Der Träger $\Omega_\Delta(\xi)$ für den Filter Δ ist an jedem diskreten Knoten N_i des Rechengitters definiert. Die Konstruktion der Filterweiten wird in Abschnitt 4.3.1 beschrieben.

Bemerkung 3 (Filterung und Mittelung). Es wird bei den statistischen Modellen von gemittelten Größen und bei der LES von gefilterten Größen gesprochen. Bei einer Mittelung bspw. bezüglich des Ortes ist diese gemittelte Größe unabhängig vom Ort. Bei der LES trifft dies nur im Extremfall (und Ausnahmefall) einer das ganze Gebiet umfassenden Filterweite zu. Es gilt bei statistischen Modellen

$$\langle u \langle v \rangle \rangle = \langle u \rangle \langle v \rangle,$$

was bei einer Filterung typischerweise nicht gilt:

$$\overline{uv} \neq \bar{u}\bar{v}.$$

⁷Der Diskretisierungsparameter h gibt die Größe der durch Einteilung des Gebietes Ω entstehenden diskreten Teilgebiete (Elemente) an

3.4.2. Die gefilterten Navier-Stokes- und Stofftransportgleichungen

Wendet man nun die Filteroperation (3.12) auf die erweiterten Navier-Stokes Gleichungen (2.33) an, so erhält man formal folgendes System:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \gamma \delta_{i3} g (\bar{\theta} - \theta_0) = \bar{f}_i \quad (3.14a)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.14b)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{\theta})}{\partial x_j} - \kappa \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} = \bar{J}. \quad (3.14c)$$

Bis auf den turbulenten Spannungstensor 2. Stufe

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j := \tau_{ij}^{sgs} \quad (3.15)$$

und dem Vektor für den turbulenten Wärmefluss (näheres zur Modellierung in Abschnitt 3.4.4)

$$q_i = \overline{u_j \theta} - \bar{u}_j \bar{\theta} := q_i^{sgs} \quad (3.16)$$

entspricht (3.14) den ungefilterten Navier-Stokes-Gleichungen (2.7). Die zu modellierenden Tensoren (3.15) und (3.16) schließen somit das unbestimmte System (3.14). Da diese Tensoren die unterhalb der mit dem Rechengitter darstellbaren Skalen beschreiben, heißen diese auch *Subskalen* (*subgrid scale*) oder kurz *sgs*-Tensoren.

Die nichtlinearen Terme $\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j)$ und $\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j \bar{\theta})$ stellen die entsprechenden Massekräfte dar, die letztendlich die Turbulenz verursachen und die die turbulente Intensität bestimmen. Es ist also naheliegend, Turbulenzmodelle an Hand des funktionalen Zusammenhanges $\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$ bzw. $\overline{u_j \theta} - \bar{u}_j \bar{\theta}$, der das Zusammenspiel zwischen den gerade aufgelösten und nicht mehr aufgelösten Skalen beschreibt, zu entwickeln.

Der turbulente Spannungstensor wirkt wie eine veränderte Viskosität des Fluids, der turbulente Wärmeflussvektor wie eine veränderte Diffusivität. Das um die Modellterme erweiterte gefilterte Gleichungssystem kann somit folgendermaßen geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - (\nu + \nu_t) \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} &= \bar{f}_i \\ \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{\theta})}{\partial x_j} - (\kappa + \kappa_t) \frac{\partial^2 \bar{\theta}}{\partial x_j \partial x_j} &= \bar{J}. \end{aligned}$$

Die zusätzlich eingeführte turbulente Viskosität ν_t wird häufig auch *eddy*-Viskosität genannt. Diese Viskosität ist beim *forward scattering* positiv und negativ beim *backward scattering*. Analoges gilt für die Wärmediffusivität.

3.4.3. Grobstrukturmodelle

Die LES führt ähnlich den Reynolds-gemittelten Ansätzen zu einem Schließungsproblem. Eine entsprechende Einteilung in Ansätze nullter, erster und zweiter Ordnung kann prinzipiell auch unternommen werden. Allerdings sind bei der LES die zu modellierenden kleinen Skalen wesentlich unabhängiger vom betrachteten globalen Problem. Im Idealfall sind die zu modellierenden Strukturen isotrop. Deswegen begnügt man sich bei der LES mit relativ einfachen Modellen.

Ein Subskalenmodell, das rein dissipativ ist (für die turbulente Viskosität gilt: $\nu_t \geq 0$), kann ausschließlich Energie von den großen zu den kleinen Skalen transportieren; für die Subskalendissipation (3.32) gilt dann:

$$\epsilon^{sgs} \leq 0.$$

Mit diesem Modell kann also nur der Energietransfer großer Skalen zu kleineren Skalen wiedergegeben werden. Das *mixing-layer*-Problem [20], bei dem sich gerade aus kleinen Wirbeln große Wirbel bilden, also Energie von den kleinen zu den großen Strukturen transportiert wird, kann mit einem reinen Viskositätsansatz nicht adäquat beschrieben werden.

Im Folgenden werden die drei bekanntesten Modelle, die auch hier eingesetzt werden, beschrieben.

Smagorinsky

Das älteste und einfachste Modell für die LES ist das Wirbelviskositätsmodell von Smagorinsky [120], dessen turbulenter Spannungstensor durch

$$\tau_{ij}^{sgs} := \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j = 2\nu_t |\bar{S}| \bar{S}_{ij} = 2C\Delta^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \quad (3.17)$$

bestimmt wird.

Es basiert auf einem Boussinesq-Ansatz, der einen linearen Zusammenhang zwischen dem turbulenten Spannungstensor und dem gefilterten Geschwindigkeitstensor herstellt:

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{1}{3} \delta_{ij} = -2\nu_T \bar{S}_{ij}.$$

Die Spur des sgs-Spannungstensors, also der isotrope Anteil, wird zum gefilterten Druck addiert. Da der Druck nur bis auf eine Konstante bestimmt ist, hat dies keinen weiteren Einfluss. Die turbulente Viskosität ν_t ist hier folgendermaßen definiert:

$$\nu_t := l^2 |\bar{S}| = (C_s \bar{\Delta})^2 |\bar{S}|. \quad (3.18)$$

Sie ist somit eine Funktion des Dehnungstensors

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right),$$

mit

$$|\bar{S}| = (2\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{0.5}.$$

C_s ist die Smagorinsky Konstante und wird in der Literatur üblicherweise mit $0.05 \leq C_s \leq 0.2$ angegeben. (3.18) lässt sich folgendermaßen veranschaulichen: Die Einheiten der turbulenten (kinematischen) Viskosität ν_t sind $l^2 t^{-1} [m^2 s^{-1}]$ und legen den Ansatz

$$\nu_T = C_s q l \quad (3.19)$$

nahe, wobei l eine Längen- und q eine Geschwindigkeitsskala darstellen. Die offensichtliche Wahl für l ist die größte nicht mehr auflösbare Längenskala in einem Gitter, also die Maschenweite eines Elementes oder die Filterweite Δ . Die Größenordnung von q entspricht der Änderung der Geschwindigkeiten in einem Element, was wiederum dem Dehnungstensor entspricht:

$$q := l |\bar{S}| = l (2\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{1/2}. \quad (3.20)$$

Setzt man (3.20) mit $l = C_s \Delta$ in (3.19) ein, so erhält man (3.18).

Das Smagorinsky-Modell ist ein rein dissipatives Modell. Es wurde zwar auf viele Problemstellungen angewendet, es zeigt sich allerdings, dass die Smagorinsky-Konstante C_s stark problemabhängig ist. Desweiteren ist die optimale Wahl von C_s in inhomogenen Strömungen von Ort zu Ort unterschiedlich. Schließlich bedarf das Smagorinsky-Modell noch zusätzlicher Annahmen in Transitionsbereichen, in denen laminare in turbulente Strömung umschlägt, bzw. wandnahen Gebieten.

Dynamisches Modell

Als Weiterentwicklung des Smagorinsky-Modells wurde von Germano et al. in [50] das *dynamische Modell* eingeführt. Die Idee dabei ist es, durch eine zweite gröbere Filterung der Navier-Stokes-Gleichungen mit einem *Testfilter* und anschließendem Vergleich zweier unterschiedlich gefilterter Geschwindigkeiten den Modellparameter $C = C(x, t)$ dynamisch zu bestimmen. Es wird davon ausgegangen, dass ein funktionaler Zusammenhang besteht zwischen den durch einfache Filterung und gröbere Filterung resultierenden Skalen.

Zuerst wird ein Testfilter $\hat{\Delta}$ ($\hat{\Delta} > \Delta$) eingeführt. Werden nun die beiden Filter $G_{\Delta} \circ G_{\hat{\Delta}}$ auf die Navier-Stokes Gleichungen (2.7) angewendet, so erhält man einen Subskalen-Tensor T_{ij} ähnlich τ_{ij}^{sgs} in (3.15):

$$T_{ij} := \widehat{\widehat{u_i u_j}} - \hat{u}_i \hat{u}_j. \quad (3.21)$$

Wird der Testfilter $G_{\hat{\Delta}}$ auf die aufgelösten, mit dem Filter G_{Δ} gefilterten Gleichungen angewendet, so erhält man durch Vergleich beider Systeme den *Leonard-Term*:

$$\mathcal{L}_{ij} := \widehat{\widehat{u_i u_j}} - \hat{u}_i \hat{u}_j = T_{ij} - \hat{\tau}_{ij}^{sgs}. \quad (3.22)$$

Folgt man nun dem funktionalen Zusammenhang zwischen Subskalen-Dehnungstensor \bar{S}_{ij} bzw. \hat{S}_{ij} und Subskalen-Spannungstensor τ_{ij} bzw. T_{ij} wie beim Smagorinsky-Modell, so gelten die Beziehungen:

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{sgs} = -2(C\bar{\Delta})^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \quad \text{und} \quad T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} = -2(C\hat{\Delta})^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij}, \quad (3.23)$$

mit dem Dehnungstensor

$$\hat{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{und} \quad |\hat{S}| = \sqrt{2\hat{S}_{ij}\hat{S}_{ij}}.$$

Werden die Gleichungen (3.22) und (3.23) umgeformt, so folgt für den Leonard-Term folgender Zusammenhang:

$$\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{L}_{kk} = -2C(x, t) \left\{ \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij} - \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \right\} =: C(x, t) \mathcal{M}_{ij}. \quad (3.24)$$

Lilly schlug in [88] vor, das System mit 6 Unbekannten im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate durch

$$(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{L}_{kk} - \mathcal{M}_{ij})^2 \rightarrow \min$$

zu minimieren, womit der Modellparameter folgendermaßen bestimmt werden kann:

$$C(x, t) = \frac{\mathcal{L}_{ij} \mathcal{M}_{ij}}{\mathcal{M}_{kl} \mathcal{M}_{kl}}. \quad (3.25)$$

Die Bestimmung des Modellparameters mit Hilfe von (3.25) erfolgt nun automatisch. In laminarer Strömung und im Wandbereich ist C Null. Der Modellparameter kann auch negative Werte annehmen, womit das dynamische Modell also prinzipiell auch den inversen Energietransfer darzustellen versucht. Obgleich in [55, 29] die Fähigkeit des *backward scattering*, Energie von den kleinen zu den größeren Skalen transferieren zu können, dem dynamischen Modell zugesprochen wird, ist dieses Modell nach wie vor ein reines Viskositätsmodell. Dieses ist nicht in der Lage, die Menge an vorhandener Dissipationsenergie korrekt wiederzugeben [78]. Und in der Tat zeigen Untersuchungen, dass das *backward scattering* überschätzt wird [39]. Der physikalische Prozess des *backward scattering* ist also nicht einfach die Inversion des *forward scattering*.

Gemischtes Modell

Wegen der Nachteile des reinen Viskositätsmodells speziell in Bezug auf das *backward scattering* wurde von Bardina et al. [9] das *Skalenähnlichkeitsmodell* eingeführt. Hier wird die Annahme zu Grunde gelegt, dass die gerade noch aufgelösten Strukturen die kleineren zu modellierenden Strukturen am Besten abbilden können. Wird die Geschwindigkeitskomponente u_i in einen fluktuierenden Teil u'_i und gemittelten Anteil \bar{u}_i mit $u_i = \bar{u}_i + u'_i$ aufgespalten und wird diese Auspaltung mit der Filterweite $\bar{\Delta}$ gefiltert, so folgt:

$$\overline{u'_i} = \bar{u}_i - \bar{\bar{u}}_i. \quad (3.26)$$

Dies kann als Gleichsetzung der größten Skalen der Fluktuationen u'_i und der kleinsten Skalen der gemittelten Geschwindigkeiten \bar{u}_i interpretiert werden. Wird (3.26) nun in den Subskalenspannungstensor (3.15) eingesetzt und nimmt man desweiteren an, dass $\overline{u'_i u'_j} \approx \overline{u'_i} \overline{u'_j}$ und $\overline{u'_i \bar{u}_j} \approx \overline{u'_i} \bar{\bar{u}}_j$ gilt, so erhält man für den Leonard-Term die Beziehung

$$\mathcal{L}_{ij}^m = \bar{\bar{u}}_i \bar{\bar{u}}_j - \bar{\bar{u}}_i \bar{\bar{u}}_j. \quad (3.27)$$

Das Skalenähnlichkeitsmodell erlaubt also den Energietransfer von den kleinen zu den großen Skalen und setzt eben nicht, wie die reinen Viskositätsmodelle, einen expliziten funktionalen Zusammenhang zwischen dem Subskalendehnungstensor τ_{ij}^{sgs} und dem Spannungstensor \bar{S}_{ij} fest.

Da das reine Ähnlichkeitsmodell die Dissipation i.A. unterschätzt, schlug Bardina et al. in [9] vor, dieses mit dem Smagorinsky-Modell zu kombinieren. Diese Art des Modells wird *Gemischtes Modell* genannt. Zang et al. ersetzten in [149] das Smagorinsky-Modell durch das dynamische Modell. Dieses Modell findet große Verwendung und wird auch hier benutzt.

Der zweite Filter in (3.27) kann prinzipiell dieselbe Filterweite wie der erste Filter besitzen. Typischerweise besitzt der zweite Filter, der auch als Testfilter in Verbindung mit dem dynamischen Modell bezeichnet wird, eine größere Filterweite.

Beim gemischten Modell wird also ein Ähnlichkeits- mit einem Viskositätsmodell kombiniert. Es wird folgender Ansatz verfolgt:

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{sgs} = -2C(x, t) \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} + \mathcal{L}_{ij}^m - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{L}_{kk}^m.$$

Wird diese Beziehung nun in die Subskalenspannungstensoren auf Filterebene in (3.17) und auf Testebene in (3.21) mit

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^{sgs} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{sgs} &= -2C(x, t) \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} + \mathcal{L}_{ij}^m - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{L}_{kk}^m \\ T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} &= -2C(x, t) \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij} + \mathcal{L}_{ij}^M - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathcal{L}_{kk}^M, \quad \text{mit } \mathcal{L}^M := \widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \hat{\bar{u}}_i \hat{\bar{u}}_j \end{aligned}$$

eingesetzt, so folgt für den Leonard-Term die Beziehung:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk} &= -2C(x,t)\widehat{\Delta}^2|\widehat{S}|\widehat{S}_{ij} + \mathcal{L}_{ij}^M - \frac{1}{3}\mathcal{L}_{kk}^M \\
&\quad + 2C(x,t)\bar{\Delta}^2|\widehat{S}|\widehat{S}_{ij} + \widehat{\mathcal{L}}_{ij}^m + \frac{1}{3}\widehat{\mathcal{L}}_{kk}^m \\
&= C(x,t)\mathcal{M}_{ij} + \widehat{\bar{u}_i\bar{u}_j} - \widehat{\hat{u}_i\hat{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i\bar{u}_j} + \widehat{\bar{u}_i\bar{u}_j} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}^M + \frac{1}{3}\delta_{ij}\widehat{\mathcal{L}}_{kk}^m \\
&= C(x,t)\mathcal{M}_{ij} - \widehat{\hat{u}_i\hat{u}_j} + \widehat{\bar{u}_i\bar{u}_j} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}^M + \frac{1}{3}\delta_{ij}\widehat{\mathcal{L}}_{kk}^m.
\end{aligned}$$

Mit den Tensoren

$$\begin{aligned}
H_{ij} &:= \widehat{\bar{u}_i\bar{u}_j} - \widehat{\hat{u}_i\hat{u}_j} && \text{Skalenähnlichkeitsbeitrag} \\
I_{kk} &:= \mathcal{L}_{kk} + \widehat{\mathcal{L}}_{kk}^m - \mathcal{L}_{kk}^M && \text{isotroper Anteil} \\
\mathcal{M}_{ij} &:= -2\widehat{\Delta}^2|\widehat{S}|\widehat{S}_{ij} + 2\bar{\Delta}^2|\widehat{S}|\widehat{S}_{ij} && \text{Wirbelviskositätsbeitrag}
\end{aligned}$$

ergibt sich nun die Beziehung

$$\mathcal{L}_{ij} - H_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}I_{kk} = C(x,t)\mathcal{M}_{ij}, \quad (3.28)$$

woraus wiederum durch den Ansatz der kleinsten Fehlerquadrate das Minimierungsproblem

$$(\mathcal{L}_{ij} - H_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}I_{kk} - C(x,t)\mathcal{M}_{ij})^2 \rightarrow \min$$

zum Modellparameter

$$C(x,t) = \frac{(\mathcal{L}_{ij} - H_{ij})\mathcal{M}_{ij}}{\mathcal{M}_{kl}\mathcal{M}_{kl}}$$

führt.

Weitere Modelle

Es gibt neben den hier beschriebenen Modellen noch zahlreiche andere, wie beispielsweise das anisotrope Modell von Akula et al. [3], bei dem der Anisotropie turbulenter Strömung im LES-Modell Rechnung getragen wird. Implizite Modelle (MILES-Monotone Implicit LES) stellen eine weitere Modellklasse dar. Diese bspw. in Boris et al. [21] eingeführten Modelle kontrollieren die numerische Diffusion zur Bestimmung der turbulenten Viskosität. Das Problem hierbei ist allerdings, dass die Trennung der Fehleranteile der Diskretisierung und des Modells nicht mehr möglich ist und auch kein *backscattering* abgebildet werden kann.

Das Dissipationsspektrum mit Hilfe der *Hyperviskosität* zu verkleinern verfolgt Borue et al. in [22], wobei dieser Ansatz hauptsächlich für im Frequenzraum definierte Problemstellungen Anwendung findet.

Desweiteren gibt es Mehrskalensmodelle, bei denen zur Bestimmung des sgs-Spannungstensors τ_{ij}^{sgs} nicht der gesamte Frequenzbereich sondern nur hochfrequente bzw. kleine Skalen verwendet werden. Eine gute Übersicht liefert Cole et al. in [32].

Am stärksten verbreitet sind neben den für bestimmte Problemstellungen angepassten Modelle nach wie vor die drei oben beschriebenen klassischen Modelle.

Konvergenz der LES-Modells

Für die in Abschnitt 6.3 durchgeführten Fehleranalysen ist die Konvergenz des verwendeten LES-Modells erforderlich. An der Formulierung der LES-Modelle (3.17), (3.24), (3.28) ist die Konvergenz direkt für $\Delta \rightarrow 0$ abzulesen. Beim Smagorinsky-Modell verschwindet der Feinskalentensor gemäß

$$\tau_{ij}^{sgs} = \overline{u_i u_j} + \bar{u}_i \bar{u}_j = 2C\Delta^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} = 0 \quad \text{für} \quad \Delta \rightarrow 0.$$

Beim dynamischen Modell, bei dem ein zusätzlicher Testfilter $\hat{\Delta} > \Delta$ eingesetzt wird, konvergiert der Feinskalentensor bezüglich des Testfilters entsprechend langsamer.

Schließlich treten beim Skalenähnlichkeitsmodell dreifach gefilterte Größen auf. Alle Modelle sind konvergent, wobei mit zunehmenden Filterungsschritten sich die Konvergenz verlangsamt.

Dies wird durch die Beobachtung von Geurts in [52] bestätigt, dass das Skalenähnlichkeitsmodell langsamer als das dynamische bzw. Smagorinsky-Modell konvergiert.

Zur Konvergenz sei noch auf Abschnitt 6.3 verwiesen.

3.4.4. Grobstruktursimulation von skalarem Stoff- und Wärmetransport

Wird eine skalare Größe von der Strömung transportiert, ohne diese dabei zu beeinflussen, spricht man von einem *passiven* Skalar. Die LES von Strömungen mit Transport passiver Skalare hat große Bedeutung bei der Simulation von Ausbreitungsvorgängen wie bspw. Wärmetransport oder Mischungsprozesse. Eine weit verbreitete und einfache Annahme geht davon aus, dass der Subskalen-Wärmefluss q_i^{sgs} wie auch der Subskalen-Stofftransport j_i^{sgs} den gleichen physikalischen Gesetzmäßigkeiten folgen wie der Subskalen-Spannungstensor τ_{ij}^{sgs} in (3.14). Das heißt, es gilt

$$q_i^{sgs} := \overline{u_i T} - \bar{u}_i \bar{T} = \kappa_t \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i},$$

wobei κ_t die turbulente Diffusivität bezeichnet und auf demselben Weg wie die turbulente Viskosität ν_t bestimmt wird. Die Grenzschichtdicken des Impuls- und Wärmetransportes sind allerdings typischerweise nicht gleich groß, was sich in Prandtl-Zahlen $Pr \neq 1$ (2.35) widerspiegelt. Für die Skalierung von ν_t führt man die sgs-Prandtl-Zahl Pr_t ein, die das Verhältnis zwischen dem viskosen Impulstransport und diffusivem Wärmetransport im Subskalenbereich wiedergibt. Bei statistischen Turbulenzmodellen wird auch von der turbulenten Prandtl-Zahl gesprochen. Diese ist allerdings als Ensemble-gemittelte Größe (siehe Abschnitt 3.5) zu verstehen. Die sgs-Prandtl-Zahl ist demgegenüber orts- und zeitabhängig. Es ist a priori also nicht davon auszugehen, dass beide Größen dieselben Ergebnisse liefern. In [138] zeigt sich allerdings, dass die Unterschiede zumindest bei einfacher Scherströmung nicht sonderlich groß und zu vernachlässigen sind. Dorfman zeigt in [40] den Einfluss verschiedener turbulenter Prandtl-Zahlen bei umströmten Körpern. Erst bei Peclet-Zahlen größer $1e+3$ tritt ein nennenswerter Einfluss auf. Wang et al. zeigen in [138] und Montreuil et in [95] die stark schwankende sgs-Prandtl-Zahl in einer erhitzten Kanalströmung. In dieser Arbeit wird allerdings davon ausgegangen, dass der Einfluss auf das Ergebnis verglichen mit anderen Fehlerquellen vernachlässigbar ist. Es gilt im Folgenden $Pr_t=1$. Gilt das Gleiche für den sgs-Stofftransport, so führt man anstelle der Prandtl-Zahl die sgs-Schmidt-Zahl ein, die mit

$$Sc_t := \frac{\nu_t}{D_t}$$

das Verhältnis von viskosem Impuls- zu diffusivem Stofftransport beschreibt, wobei D_t die turbulente Diffusion darstellt. Bei einer sgs-Lewis-Zahl von

$$Le_t := \frac{Sc_t}{Pr_t} = 1,$$

entspricht der diffusive Stofftransport dem diffusivem Wärmetransport im Subskalbereich. Mit der sgs-Schmidt-Zahl Sc_t gilt schließlich für den sgs-Stofftransport

$$j_i^{sgs} := \overline{u_i c} - \overline{u_i} \overline{c} = D_t \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_i}.$$

Da über die turbulente Viskosität der sgs-Wärme- bzw. sgs-Stofftransport bestimmt wird, werden auch in diesem Kontext die beschriebenen Grobstrukturmodelle wie sie in Abschnitt 3.4.3 beschrieben sind, verwendet.

Bemerkung 4 (LES aktiver Skalare). In dieser Arbeit werden auch Gravitationskräfte (natürliche Konvektion) betrachtet. In diesem Fall stellt die Temperatur einen aktiven Skalar dar. Eine stabile Schichtung bewirkt eine Reduktion der turbulenten Fluktuationen, wohingegen eine instabile Schichtung diese anfacht. Deardoff schlägt in [35] diesbezüglich eine je nach Art der Schichtung variable turbulente Prandtl-Zahl vor. Eine alternative Korrekturformulierung der turbulenten Viskosität ist in [146] zu finden. Obgleich diese Korrekturen u.U. einen nennenswerten Einfluss auf das Gesamtergebnis haben, werden diese in dieser Arbeit nicht eingesetzt. Der Schwerpunkt liegt auf optimalen numerischen Verfahren und dem Vergleich untereinander und nicht auf möglichst genauer Modellierung.

3.5. Hilfsmittel zur Beschreibung der Turbulenz

Turbulenz besitzt einen zufälligen, chaotischen Charakter. Die deterministische *Eulersche Betrachtungsweise*, bei der die Geschwindigkeit strömender Flüssigkeiten u_i mit

$$u_i = u_i(x_j, t)$$

eine Funktion des Ortes x_j und der Zeit t ist, ist daher zur Beschreibung der Turbulenz oftmals ungeeignet. Der Geschwindigkeitsvektor $u_i(x_j, t)$ ist hier eine Zufallsvariable, und zur rationellen Beschreibung sind sowohl statistische als auch spektrale Hilfsmittel erforderlich.

Eine wichtige Größe im Zusammenhang mit der Turbulenz ist die kinetische Energie, die durch

$$E_{kin}(t) := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \bar{u}_i \bar{u}_i dV \quad (3.29)$$

definiert ist. Die zu 3.29 skalierte Größe ist die L_2 - oder Euklidische Norm:

$$\|\bar{u}_i\|_2 = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (|\bar{u}_i| |\bar{u}_i|)^{1/2} dV. \quad (3.30)$$

Betrachtet man die kinetische Energie der Fluktuationen, so erhält man die *aufgelöste* oder *turbulente kinetische Energie*

$$E_{res}(t) := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u'_i u'_i dV. \quad (3.31)$$

Ebenfalls von Bedeutung ist die bereits erwähnte Dissipation. Hierbei wird in der molekularen Dissipation

$$\epsilon = \nu S_{ij} S_{ij} \quad (3.32)$$

und Feinstruktur(sgs)-Dissipation

$$\epsilon^{sgs}(x_j, t) := \tau_{ij}^{sgs} \bar{S}_{ij} = -2\nu_T \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}$$

unterschieden. Die sgs-Dissipation wird in den hier durchgeführten Berechnungen als räumlich integrierte Größe verwendet:

$$\epsilon^{sgs}(t) := \int_{\Omega} \epsilon^{sgs}(x_j, t). \quad (3.33)$$

Eine Möglichkeit, die relative Größe der modellierten turbulenten Viskosität zu erhalten, ist die um die kinematische Viskosität reduzierte turbulente Viskosität, die *Subskalenaktivität*, die folgendermaßen definiert ist:

$$S = \frac{\nu_t}{\nu}. \quad (3.34)$$

3.5.1. Statistische Hilfsmittel

Aus Sicht der Statistik ist eine Ensemble-gemittelte Größe $\bar{\phi}$ wünschenswert, bei der die Anzahl der Realisierungen mit denselben Anfangs- und Randbedingungen sehr groß sein muss. Dieser für die Theorie außerordentlich wichtige Begriff hat keinen realen Bezug, da man es immer mit einer Teilmenge aus dem Ensemble, meist sogar nur - wie auch hier - mit einem einzigen System zu tun hat. Trotzdem stimmen statistische Vorhersagen, die aus der Ensembleannahme gewonnen werden, wie Ensemblemittelwerte aufgrund der Ergodenhypothese⁸ mit zeitlichen Mittelwerten einzelner Systeme überein.

Hier wird grundsätzlich das arithmetische Mittel

$$\bar{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i \quad (3.35)$$

verwendet, was ein Schätzwert mit guter Näherung für die Ensemble-gemittelte Größe $\langle \phi \rangle$ darstellt, die folgendermaßen definiert ist:

$$\langle \phi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi_n.$$

Um den bei den hier gezeigten numerischen Experimenten zu beobachtenden Einschwingvorgang, bei dem wesentlich höhere Schwankungen auftreten können, von den turbulenten Schwankungen trennen zu können, wird ein Schwellenwert ϵ eingeführt, unter dem die Varianz liegen muss, damit die folgenden Werte für die Mittelung verwendet werden:

$$\sigma < \epsilon \quad \text{mit hier} \quad \epsilon = [0.01..0.001], \quad (3.36)$$

wobei die Varianz einer Größe ϕ definiert ist durch:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i^n (\phi_i - \bar{\phi})^2}. \quad (3.37)$$

⁸Hypothese, die von W. Boltzmann in die kinetische Gastheorie eingeführt und später von P. und T. Ehrenfest durch die genauere Quasi-Ergodenhypothese ersetzt wurde. Danach wird in einem sich selbst berlassenen thermodynamischen System (z. B. einem Gas) bei Vorhandensein einer bestimmten Gesamtenergie im Laufe der Zeit jeder mögliche Bewegungszustand des Systems mit beliebiger Annäherung verwirklicht.

3.5.2. Spektrale Hilfsmittel

Die hier zu Grunde liegenden Daten sind zeitabhängig. Für die Frequenzanalyse werden die Daten in den Frequenzbereich transformiert. Dies geschieht mittels der *Fouriertransformation*, die sich des Prinzips der *Orthogonalität* bedient [139] und mathematisch beschrieben wird durch:

$$\mathcal{H}(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{2\pi jft} dt, \quad (3.38)$$

wobei $\mathcal{H}(f)$ die Fouriertransformierte des Eingabesignals $h(t)$ im Zeitbereich und f die Frequenz ist. Das diskrete Pendant lautet:

$$\mathcal{H}_n = \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi jkn/N}.$$

n bezeichnet mit $n = i\Delta n$ die Periode und somit die Frequenz, bei der die Transformation erfolgt, und N stellt das finite Intervall bzw. die maximale Anzahl von Datenpunkten dar.

Da die Phasenverschiebung hier nicht von Interesse ist, wird der Modulus der Transformierten durch Multiplikation mit dem konjugiert komplexen Anteil verwendet:

$$|\mathcal{H}(f)| = \sqrt{\text{Re}(\mathcal{H}(f))^2 + \text{Im}(\mathcal{H}(f))^2} = \sqrt{\mathcal{H}^*(f)\mathcal{H}(f)}.$$

Das *Powerspektrum* oder auch die *Spektraldichte* S spielt hier eine besonders wichtige Rolle, da es die turbulente kinetische Energie über den charakteristischen Skalen wiedergibt. Das Powerspektrum $S(f)$ oder $S_{xx}(f)$ eines Signals ist die Fouriertransformierte der Autokorrelation

$$R_{u'_\alpha u'_\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} u'_\alpha(t)u'_\alpha(\tau + t)dt$$

und ist definiert durch:

$$S(f) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau)e^{2\pi ift} d\tau.$$

Für die fluktuierenden Größen u'_i bezüglich ihrer Autokorrelation $R_{u'_\alpha u'_\alpha}$ ist das Powerspektrum folgendermaßen definiert:

$$S_{u'_\alpha u'_\alpha}(f) = \int_{-\infty}^{\infty} R_{u'_\alpha u'_\alpha}(\tau)e^{2\pi jft} d\tau.$$

Das Powerspektrum für die hier vorliegenden diskreten Signale bzw. Daten lautet:

$$S_{u'_\alpha u'_\alpha}(n) = \sum_{k=0}^{N-1} R(\tau)e^{2\pi jkn/N}.$$

Für die praktische Berechnung, die hier mit Hilfe der *Fast Fourier Transformation (FFT)* [46] durchgeführt wird, ist insbesondere die fundamentale Eigenschaft von Bedeutung, dass das Quadrat des Betrages der Fouriertransformation dem Powerspektrum entspricht (siehe bspw. [102]):

$$S(f) = |\mathcal{H}(f)|^2 = \mathcal{H}(f)\mathcal{H}^*(f).$$

Die beschriebenen Verfahren werden in den Kapiteln 7 und 8 zur Analyse der turbulenten Strömung angewendet.

4. Diskretisierung

Zur numerischen Lösung der um die Transportgleichung erweiterten instationären Navier-Stokes-Gleichungen wird nach dem *Rothe-Verfahren* vorgegangen, d.h. es wird zunächst in der Zeit und dann in jedem einzelnen Zeitschritt das auftretende quasi-stationäre Problem im Ort diskretisiert. Das folgende Kapitel ist folgendermaßen aufgebaut. Zuerst wird die Variationsformulierung der partiellen Differentialgleichungen aufgestellt und linearisiert. Anschließend wird die verwendete Finite-Volumen-Formulierung beschrieben, wobei noch kurz auf die Finite-Elemente-Formulierung eingegangen wird. Die Diskretisierung des Turbulenzmodells einschließlich der Konstruktion der Filterweiten schließt das Kapitel ab.

4.1. Variationsformulierung und Linearisierung

Für das System partieller Differentialgleichungen (2.34), wie für jedes klassische Randwertproblem, gibt es eine Variationsformulierung [62, 23]. Zur Herleitung wird zunächst ein beschränktes Gebiet Ω betrachtet, auf dessen stückweise glattem Rand Γ ausschließlich Dirichletrandbedingungen \mathbf{u}_0 für die Geschwindigkeiten und θ_0 für die Transportgrößen (Temperatur, Konzentration) vorgegeben sind. Für den Druck werden keine weiteren Annahmen getroffen. Es seien im Folgenden $L := L_0^2(\Omega, \Gamma)$ der Funktionenraum der Lebesque-integrierbaren¹ Funktionen mit Nullrandbedingungen und $H := H_0^1(\Omega, \Gamma)$ der Funktionenraum der ebenfalls Lebesque-integrierbaren und einmal stetig differenzierbaren Funktionen mit Nullrandbedingungen. Wird (2.34) mit den Testvektoren $\mathbf{v} \in H$ und $q \in L$ multipliziert und über das Gebiet Ω integriert, so lässt sich das zugehörige Variationsproblem formulieren:

Finde $\{\mathbf{u}, p, \theta\} \in H \times L \times H$, so dass gilt:

$$\int_{\Omega} \{(\mathbf{u}_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p - \nu \Delta \mathbf{u}), \mathbf{v}\} dV = \int_{\Omega} (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dV \quad \forall \mathbf{v} \in H \quad (4.1a)$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}, q) dV = 0 \quad \forall q \in L \quad (4.1b)$$

$$\int_{\Omega} \{(\theta_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \theta - \kappa \Delta \theta), s\} dV = \int_{\Omega} (J, s) dV \quad \forall s \in H. \quad (4.1c)$$

Wird das Greensche Theorem auf (4.1) angewendet und werden die Nullrandbedingungen ausgenutzt, so folgt:

$$\int_{\Omega} \{(\mathbf{u}_t, \mathbf{v}) + (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \mathbf{v}) + (\nu \nabla \mathbf{u}, \nabla \mathbf{v}) - (p, \nabla \cdot \mathbf{v})\} dV = \int_{\Omega} (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dV \quad \forall \mathbf{v} \in H \quad (4.2a)$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}, q) dV = 0 \quad \forall q \in L \quad (4.2b)$$

$$\int_{\Omega} \{(\theta_t, s) + (\mathbf{u} \cdot \nabla \theta, s) + (\kappa \nabla \theta, \nabla s)\} dV = \int_{\Omega} (J, s) dV \quad \forall s \in H. \quad (4.2c)$$

¹Gegenüber dem klassischen Riemann-Integral kann durch das Lebesque-Integral auch beispielsweise die Delta-Funktion integriert werden [108].

Die Anforderung an die Regularität der Lösung lässt sich also mit Hilfe der Variationsformulierung um eine Ordnung reduzieren. Wird an die klassische Lösung in jedem Punkt im Gebiet Ω zweifache Differenzierbarkeit gefordert, so wird bei (4.2) lediglich einfache stetige Differenzierbarkeit und lokale Lebesgue-Integrierbarkeit gefordert. In diesem Sinne heißt $\{\mathbf{u}, p, \theta\}$ *schwache Lösung* von (4.2).

Bei symmetrischen Bilinearformen kann die kontinuierliche Variationsformulierung in eine Minimierungsaufgabe umformuliert werden [23] und auch direkt als Minimierungsproblem gelöst werden. Man spricht dann vom *Ritz-Verfahren*. Das hier auftretende kontinuierliche System partieller Differentialgleichungen ist wegen der konvektiven Terme nicht symmetrisch. Basiert das diskrete System auf der Formulierung (4.2), so heißt das Verfahren *Galerkin-Verfahren*.

Geht man davon aus, dass das Gebiet neben einem Einströmrand mit nicht verschwindenden Geschwindigkeiten (normal zu diesem Rand) auch einen Ausströmrand mit ebenfalls nichtverschwindenden Geschwindigkeiten (normal zu diesem Rand) besitzt, so kann die Impulsgleichung (4.1a) auch folgendermaßen geschrieben werden [106]:

$$\int_{\Omega} \{\mathbf{u}_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p - \nu \nabla \mathbf{u} - \mathbf{f}\} \mathbf{v} \, dV + \int_{\Gamma_{\text{aus}}} \{\nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{n} p\} \mathbf{v} \, dS = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in H.$$

Wegen der Divergenzfreiheit bleibt für den Ausströmrand nur noch

$$\int_{\Gamma_{\text{aus}}} \mathbf{n} p \, dS = 0.$$

In der variationellen Formulierung eines Ein- bzw. Ausströmproblems ist inhärent die homogene Neumannrandbedingung für den Druck enthalten, weswegen diese auch *natürliche* Randbedingung heißt.

Für die diskrete Behandlung des nichtlinearen Systems (4.2) muss dieses noch geeignet linearisiert werden. Folgende Näherungen für die nichtlinearen Terme werden betrachtet:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \approx \mathbf{u}^k \cdot \nabla \mathbf{u}^{k+1} + \mathbf{u}^{k+1} \cdot \nabla \mathbf{u}^k \quad (4.3a)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \theta \approx \mathbf{u}^k \cdot \nabla \theta^{k+1} + \mathbf{u}^{k+1} \cdot \nabla \theta^k. \quad (4.3b)$$

Man spricht dann von einer *vollen Newton-Linearisierung*. Sie hat eine quadratische Konvergenzordnung. Da die zweiten Terme auf der rechten Seite in (4.3) u.U. Probleme für den linearen Löser verursachen können, werden diese sich wie Reaktionsterme verhaltende Anteile weggelassen. Mit dem Iterationsindex k wählt man:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \approx \mathbf{u}^k \cdot \nabla \mathbf{u}^{k+1} \quad (4.4a)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \theta \approx \mathbf{u}^k \cdot \nabla \theta^{k+1}. \quad (4.4b)$$

Man spricht dann von einer *Quasi-Newton-Linearisierung*. Mit dieser Linearisierung erhält man für die nichtlineare Iteration maximal eine lineare Konvergenzrate.

Für die folgende Bemerkung wird zunächst die *Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl* eingeführt:

$$CFL := \frac{|\mathbf{u}| \Delta t}{h}. \quad (4.5)$$

Sie gibt an, wie weit eine Größe mit der Geschwindigkeit $|\mathbf{u}|$ bezogen auf die Gitterweite h innerhalb des Zeitintervalls Δt transportiert wird.

Bemerkung 5 (Nichtlineare Konvergenz bei instationären Problemstellungen). Bei nicht allzu großen CFL-Zahlen ($CFL < 5$), wie sie hier typischerweise vorkommen, ist die Nichtlinearität des Problems wegen der damit verbundenen geringeren Zeitschrittweite abgeschwächt, weswegen sich eine lineare Konvergenzrate als ausreichend erwiesen hat. Neben der durch das Weglassen des Terms $\mathbf{u}^{k+1} \cdot \mathbf{u}$ besseren Lösbarkeit des linearen Problems ist zusätzlich der Vorteil zu erwähnen, dass nicht in jeder nichtlinearen Iteration die Jakobi-Matrix aufgestellt werden muss. Es hat sich als ausreichend herausgestellt, nach drei bis fünf Iterationen die Jakobi-Matrix neu zu assemblieren. Bei stark nichtlinearen Problemstellungen, wie bspw. dem Stefan-Boltzmann-Gesetz bei Strahlungsrandbedingungen (T^4 -Gesetz), ist eine volle Linearisierung u.U. erforderlich. Dennis und More gehen in [38] detailliert auf Quasi-Newton-Verfahren und deren Effizienz speziell im Zusammenhang mit instationären Verfahren ein; Engelman et al. zeigen in [41] diesen Aspekt in Verbindung mit Strömungsproblemen.

4.2. Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen begann mit der Finite-Differenzen-Methode (FDM). Bei dieser Methode wird das betrachtete Gebiet in äquidistante, diskrete Punkte eingeteilt und die einzelnen Differentialoperatoren mit finiten Differenzen approximiert. Finite Differenzen können in Taylorreihen prinzipiell beliebig genau entwickelt werden können. Um die Stabilität der Diskretisierung (bzw. des Stokes-Elements bei der Finite-Elemente-Methode (FEM)) zu garantieren², wird hierbei häufig ein versetztes Gitter (*staggered Grid*) verwendet. Bei unstrukturierten und komplexen Gebietsrändern stößt dieses Verfahren jedoch an seine Grenzen [43]. Die FDM niedriger Ordnung spielt heute eine untergeordnete Rolle. Für spezielle Problemstellungen, bei denen strukturierte Gitter und hohe Ordnungen verwendet werden können, besitzt die FDM nach wie vor eine hohe Attraktivität, da hohe Ordnungen vergleichsweise einfach zu realisieren sind. Einen interessanten Ansatz wird von Schönauer [117] verfolgt, der auf einem unstrukturierten Finite-Elemente-Gitter die finiten Differenzen aufstellt und somit auch komplexe Geometrien behandeln kann. Das lokal adaptive FDM-Schema basiert auf einem Fehlerschätzer, der durch den Vergleich von Polynomen unterschiedlicher Ordnung den Diskretisierungsfehler abschätzt. Eine verbesserte Approximation des Gebietsrandes durch Verfeinerung ist hier allerdings nicht möglich, da nur auf einem Gitter, nicht aber auf der Geometrie gearbeitet wird.

Die FEM spielt demgegenüber nicht zuletzt durch die umfangreiche mathematische Theorie und ihre hohe Flexibilität eine bedeutende Rolle. Ausgangspunkt für die FEM ist die in Abschnitt 4.1 beschriebene schwache Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen. Die globalen Integrale können durch Einteilung des betrachteten Gebietes in kleine einfachere Teilprobleme aufgeteilt und mit Ansätzen prinzipiell beliebiger Ordnung gelöst werden. Verfahren höherer Ordnung sind allerdings immer noch Gegenstand der Wissenschaft, wohingegen sich lineare Ansätze in sehr unterschiedlichen Anwendungsgebieten (Strömungs- und Strukturmechanik, Elektromagnetik, etc.) durchgesetzt haben.

Desweiteren kann grundsätzlich ein unstrukturiertes, aus verschiedensten Elementtypen zusammengesetztes Gitter, verwendet werden. Eine vielversprechende Variante stellt die *Discontinuous Galerkin*-Methode (DG) dar, bei der im Gegensatz zu klassischen, konformen FE-Methoden, die Funktionen auf den Elementrändern nicht stetig sein müssen. Die Ordnung der Polynome auf den Elementen kann flexibel verändert werden (p-Methode). Bei hohen Ordnungen ist die Bandbreite³ der assemblierten Matrix allerdings sehr groß, was für das Lösungsverfahren (sowohl für direkte als auch iterative Verfahren) Schwierigkeiten verursacht.

²Die immer noch anzutreffende Formulierung, bei der lineare Ansätze sowohl für den Druck als auch für die Geschwindigkeiten verwendet werden, ist instabil.

³Vereinfacht ausgedrückt ist die Bandbreite einer schwachbesetzten Matrix, wie sie bei den hier beschriebenen

Die Finite-Volumen-Methode (FVM) vereint sowohl Elemente der FEM als auch der FDM. Sie kann allerdings auch als eigenständiges Diskretisierungsverfahren aufgefasst werden. Hier werden die Volumenintegrale mit Hilfe des Gauss'schen Divergenztheorems in Oberflächenintegrale umformuliert und die über die Elementgrenzen (*cell-centered*) bilanzierten Flüsse in Kontrollvolumen erfasst. Diese Methode ist somit per se lokal masseerhaltend. Werden nicht die Elementsondern die Kontrollvolumengrenzen verwendet, so spricht man von einer *vertex-centered*-FVM, die auch in dieser Arbeit verwendet wird (siehe Abschnitte 4.2.1 und 4.2.3).

Schließlich sei noch die Spektralmethode erwähnt [28], bei der die Ansatzfunktionen typischerweise mit trigonometrischen, Tschebyscheff- oder Legendre-Polynomen approximiert werden. Die Testfunktionen dienen dazu, das entstehende Residuum zu reduzieren. Mit dieser Methode erhält man eine sehr hohe Genauigkeit. Dieses Verfahren führt allerdings zu vollbesetzten Matrizen, die für große Problemstellungen schwer zu lösen sind.

Vor diesem Hintergrund hat sich die FEM und FVM am stärksten verbreitet. Innerhalb dieser beiden Klassen hat sich allerdings noch nicht *die* Diskretisierung für die Navier-Stokes-Gleichungen herausgestellt. Es existieren auch nur wenige objektive Vergleiche der verschiedenen Verfahren. Turek hat in [128] die Ergebnisse verschiedener wissenschaftlicher Gruppen mit unterschiedlichen Verfahren für ein Strömungsproblem verglichen. Eine optimale Diskretisierung sollte sowohl flexibel einsetzbar als auch gute Lösungseigenschaften besitzen. In [128] wird beispielsweise das nichtkonforme Stokes-Element niedriger Ordnung hervorgehoben, bei dem die Geschwindigkeiten auf den Seiten und der Druck auf dem Element definiert sind bzw. ist. Die Vorteile der einfach konstruierbaren Stabilität und einfachen Implementierung werden durch die erhöhte Anzahl der Freiheitsgrade eines Tetraeder-Gitters, bei dem ungefähr 12 mal mehr Elementseiten als Knoten vorhanden sind, mehr als kompensiert. Auch die Lösungsalgorithmen für das entstehende Sattelpunktproblem sind aufwendiger als die für stabilisierte, knotenbasierte Ansätze.

Dies ist ein Beispiel dafür, dass die Suche nach der besten Diskretisierung noch lange nicht abgeschlossen ist, was nicht zuletzt auch an den zahlreichen Veröffentlichungen auf diesem Gebiet ablesbar ist.

4.2.1. Die Finite-Volumen-Methode

Die Finite-Volumen-Methode wird speziell bei Differentialgleichungen in Divergenzform angewendet. Für die theoretische Behandlung wird die FVM häufig als Petrov-Galerkin FEM betrachtet, bei der die Testfunktionen konstant sind. Im Gegensatz zu den Volumenintegralen bei der FEM werden die Terme der Differentialoperatoren mit Hilfe des Divergenztheorems von Gauss auf Oberflächenintegrale umformuliert. Ausgangspunkt hier ist auch die schwache Formulierung, womit die Anforderung an die Regularität wie auch bei der FEM verringert wird. Für die Fehlerabschätzungen werden häufig die Abschätzungen der Galerkin-FEM herangezogen, gegen die dann wiederum die FVM abgeschätzt wird. Die Fehlerabschätzungen für die FEM unterscheiden sich nur unwesentlich von denen der FVM. Bei elliptischen Problemen und linearen Ansätzen beispielsweise stimmen die Diskretisierungsmatrizen beider Verfahren überein. Bey zeigt in [18], dass Oberflächenintegrale eine geringfügig geringere Regularität besitzen.

Die FVM kann als Petrov-Galerkin FEM aufgefasst werden, bei welcher die Testräume $V := \mathcal{P}_0(\Omega; \Gamma) := \{\phi \in L^2(\Omega) \mid \phi|_{\Omega} \in \mathcal{P}_0\}$ konstant sind, und nicht den Ansatzräumen $H := H_0^1(\Omega; \Gamma)$ entsprechen. Wendet man das Greensche Theorem auf die variationelle Formulierung (4.1) an, wobei diesmal die Anzahl der Terme mit Hilfe der Nullrandbedingungen nicht reduziert werden, so erhält man folgendes Problem:

Verfahren auftreten, die Breite der Nichtnull-Eintragungen in einer Zeile. Eine Tridiagonalmatrix besitzt die Bandbreite 3.

Finde $\{\mathbf{u}, p, \theta\} \in H \times L \times H$, so dass gilt:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} (\mathbf{u}_t, \mathbf{v}) dV + \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}\mathbf{u}, \mathbf{v}) - (\nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}, \mathbf{v}) + (\mathbf{n} \cdot p, \mathbf{v}) dS \\
& \quad - \underbrace{\int_{\Omega} (\mathbf{u}\mathbf{u}, \nabla \mathbf{v}) - (\nu \nabla \mathbf{u}, \nabla \mathbf{v}) + (p, \nabla \cdot \mathbf{v})}_{=0} dV = \int_{\Omega} (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dV \quad \forall \mathbf{v} \in V \\
& \quad \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}, q) dS - \underbrace{\int_{\Omega} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}, \nabla q) dV}_{=0} = 0 \quad \forall q \in V \quad (4.6) \\
& \int_{\Omega} (\theta_t, s) dV + \int_{\Gamma} \{(\mathbf{u} \cdot \nabla \theta, s) - (\kappa \mathbf{n} \cdot \nabla \theta, s)\} dS \\
& \quad - \underbrace{\int_{\Omega} \{(\mathbf{u} \cdot \nabla \theta, s) - (\kappa \nabla \theta, \nabla s)\} dV}_{=0} = \int_{\Omega} (J, s) dV \quad \forall s \in V.
\end{aligned}$$

Da die Ableitungen der Testfunktionen nicht existieren, verschwinden mit Ausnahme des Zeitterms die Volumenintegrale auf der linken Seite. Für die Differentialoperatoren bleiben lediglich Oberflächenintegrale übrig. Die Testvektoren sind konstant und werden nicht weiter aufgeführt. Aus (4.6) erhält man schließlich die variationelle Formulierung, die den Ausgangspunkt für die Diskretisierung mit der FVM darstellt:

$$\int_{\Omega} \mathbf{u}_t dV + \int_{\Gamma} \{\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}\mathbf{u} - \nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{n} \cdot p\} dS = \int_{\Omega} \mathbf{f} dV \quad (4.7a)$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} dS = 0 \quad (4.7b)$$

$$\int_{\Omega} \theta_t dV + \int_{\Gamma} \{\mathbf{u}\mathbf{n} \cdot \theta - \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla \theta\} dS = \int_{\Omega} J dV. \quad (4.7c)$$

Konstruktion der Boxgitter

Für die räumliche Diskretisierung wird die *vertex-centered*-FVM verwendet. Die Idee ist es hierbei, das Gebiet Ω in M Teilgebiete Ω_i einzuteilen, mit einem zu diesem Teilgebiet assoziierenden Knoten $x_j \in \mathbb{R}^n$, und über diese die Erhaltungsgleichungen zu bilanzieren. Für die Teilgebiete, die Kontrollvolumina oder Boxen genannt werden, gilt:

1. jedes Ω_i ist offen, einfach zusammenhängend und stückweise glatt, d.h. Schlitzte sind beispielsweise nicht zugelassen.
2. $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ ($i \neq j$)
3. $\cup_{i=1}^M \Omega_i = \bar{\Omega}$

Im Gegensatz zu dem *Mittelsenkrechverfahren*, bei dem die Kontrollvolumina durch die Normalen der Elementseiten und der Elementknoten aufgespannt werden und das i.A. von erster Ordnung ist [18], wird hier das *Schwerpunktverfahren* angewendet. Die Kontrollvolumina werden konstruiert, indem die Schwerpunkte der um einen Knoten liegenden Elemente mit den Mittelpunkten der Elementseiten verbunden werden (siehe Abb. 4.1).

Die so erzeugten Kontrollvolumina oder *Boxen* bilden nun ein zu der Triangulierung τ_h^4 *duals Boxgitter* \mathcal{B}_h . Für die mathematische Erfassung wird zunächst die Elementumgebung und

⁴Der Begriff der Triangulierung wird in Abschnitt 5.3.4 eingeführt. Eine Triangulierung τ_h ist bspw. die Zerlegung des Gebietes Ω in Dreiecke der Kantenlänge h .

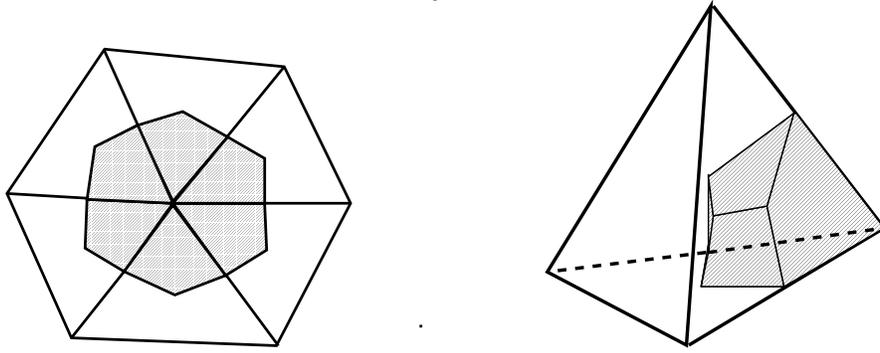


Abbildung 4.1.: FVM nach dem Schwerpunktverfahren: Kontrollvolumen im \mathbb{R}^2 (links) und Subkontrollvolumen im \mathbb{R}^3 (rechts).

Kanten- bzw. Seitenumgebung eines Knotens x_j eingeführt:

$$\text{Elementumgebung : } U(x_j) := \bigcup_{K': K' \cap x_j \neq \emptyset} K' \quad (4.8)$$

$$\text{Kanten-/Seitenumgebung : } U(E(x_j)) := \bigcup_{E': E' \cap x_j \neq \emptyset} E'. \quad (4.9)$$

$U(x_j)$ beschreibt also die Menge aller Elemente, die den Knoten x_j schneiden. $U(E(x_j))$ beschreibt die Menge der Kanten/Seiten eines Elements $K \subset U(x_j)$. Eine Box B_j ist die Vereinigung der zum Knoten x_j gehörenden Boxanteile $B_{j,K}$ in allen Elementen $K \cap U(x_j)$. Mit dem Schwerpunkt $s_K \in \mathbb{R}^n$ des Elements $K \subset U(x_j)$

$$s_K := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

und dem Schwerpunkt $s_E^i \in \mathbb{R}^n$ der Kanten/Seiten $E_K^i \subset (U(E(x_j)) \cap K)$

$$s_E^i := \frac{1}{n_E} \sum_{i=j}^{n_E} x_j^E,$$

wobei n die Anzahl der Knoten eines Elements, n_E die Anzahl der Knoten einer Kante/Seite und x_i^E die Endpunkte der Kante E darstellen, ist der Boxanteil scv (Subkontrollvolumen) bezüglich des Knotens x_j des Elements K nun die lineare Hülle der Punkte x_j, s_K, s_E^i :

$$B_{j,K} = \text{conv}\{x_j, s_K, s_E^i\}.$$

Eine Box ist nun folgendermaßen definiert:

$$B_j := \bigcup_{K': K' \subset U(K)} B_{j,K'}. \quad (4.10)$$

Die Vereinigung der Boxen B_j ergibt schließlich die Boxmenge \mathcal{B}_h . Es kann gezeigt werden [18], dass \mathcal{B}_h tatsächlich ein duales Boxgitter zu τ_h ist.

4.2.2. Der Raum linearer Ansatzfunktionen

Zunächst wird ein endlich dimensionaler Raum V_h eingeführt, der durch linear unabhängige Basisfunktionen N_1, N_2, \dots, N_n aufgespannt wird:

$$V_h := \text{span}\{N_j\}_{j=1}^n.$$

In dieser Arbeit werden ausschließlich knotenbasierte Basisfunktionen verwendet, die folgende Kriterien erfüllen müssen:

1. N_j sind beschränkt und kontinuierlich,

$$N_j \in C(K);$$

2. N_j mit B_j als kompakten Träger sind also nur auf den an den Knoten x_j angrenzenden Elementen ungleich Null.
3. Für die nodalen (Knoten) Werte gilt:

$$N_j(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j, \\ 0 & \text{sonst;} \end{cases}$$

Eine Funktion u_h kann nun durch Linearkombination der Basisfunktionen $N_j \in V_h$ mit

$$u_h = \sum_{i=1}^N c_j N_j$$

dargestellt werden. Um nicht für jedes einzeln vorkommende Element die Ansatzfunktionen ausrechnen zu müssen, werden einmal für ein Referenzelement \hat{K} die nodalen Ansatzfunktionen $\{\hat{N}_i^K\}_{i=1}^M$ bestimmt und anschließend durch affine Projektion auf das Ausgangselement transformiert. Zuerst muss allerdings gewährleistet sein, dass jeder Punkt $\boldsymbol{\xi}$ in \hat{K} eindeutig auf einen Punkt \mathbf{x} in K abgebildet werden kann:

$$F_K : \hat{K} \rightarrow K \subset \mathbb{R}^n, F_K(\boldsymbol{\xi}) \equiv T_K \boldsymbol{\xi} + \mathbf{b}_K = \mathbf{x},$$

mit dem Transformationsoperator F_K , der invertierbaren $n \times n$ Matrix T_K und dem Translationsvektor \mathbf{b}_K . Nachdem nun jedes Referenzelement in das Ausgangselement überführt werden kann und vice versa, werden die Ansatzfunktionen $\hat{N}_i^K(\boldsymbol{\xi})$ in Form eines Polynomes der Ordnung k auf einem Referenzelement definiert und schließlich auf die Ansatzfunktionen $N_i^K(\mathbf{x})$ des Ausgangselementes transformiert. Es wird ein Operator G_K eingeführt, der eine auf dem Ausgangselement definierte Funktion $u(\mathbf{x})$ in eine Funktion $\hat{u}(\boldsymbol{\xi})$ überführt, die auf dem Referenzelement definiert ist:

$$G_K u = \hat{u}, \quad \hat{u}(\boldsymbol{\xi}) = u(\mathbf{x}), \quad \text{mit } \mathbf{x} = F_K(\boldsymbol{\xi}),$$

es gilt also auch für die als Polynome definierten Ansatzfunktionen:

$$G_K^{-1} \hat{N}_i^K = N_i^K.$$

Bezeichnet man den von den Ansatzfunktionen \hat{N}_i^K aufgespannten Raum mit \hat{X} , so kann ein Projektionsoperator mit

$$\hat{\Pi} : C(\hat{K}) \rightarrow \hat{X}, \quad \hat{\Pi} \hat{u} = \sum_{i=1}^n \hat{u}(\boldsymbol{\xi}_i) \hat{N}_i^K$$

definiert werden, der jedes $\hat{u} \in C(\hat{K})$ auf die Interpolierte $\hat{u} \in \hat{X}$ projiziert. Das Gleiche gilt für den Projektionsoperator Π auf dem Ausgangselement:

$$\Pi : C(K) \rightarrow X, \quad \Pi u = \sum_{i=1}^n u(\mathbf{x}_i) N_i^K.$$

Sind \hat{K} und K affin-äquivalente Elemente, so gilt für den Interpolationsfehler [108]:

$$\hat{\Pi} \hat{u} = \widehat{\Pi u}. \quad (4.11)$$

Gleichung (4.11) besagt also, dass durch die Transformation kein zusätzlicher Interpolationsfehler hinzukommt.

Da $\hat{N}_i^K \in C(K)$, kann der Gradient der Funktion analog bestimmt werden. Hier werden wieder zuerst der Gradient auf dem Referenzelement

$$\hat{\nabla} \hat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^n \hat{\nabla} \hat{N}_i^K(\boldsymbol{\xi}) u_i,$$

und schließlich durch Transformation und mit Hilfe der Kettenregel der Gradient auf dem Ausgangselement mit

$$\nabla u(\mathbf{x}) = J^{-1} \hat{\nabla} \hat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^n J^{-1} \hat{\nabla} \hat{N}_i^K(\boldsymbol{\xi}) u_i,$$

bestimmt. Die Jacobi-Determinante J im \mathbb{R}^2 sieht folgendermaßen aus:

$$|J| = \left| \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \end{bmatrix} \right| = \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} - \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1}.$$

Für die hier durchgeführten Rechnungen wurden lineare Ansätze für Simplizes im $\mathbb{R}^{2,3}$, bilineare Ansätze für Vierecke und trilineare Ansatzfunktionen für Hexaeder verwendet. Ein Beispiel für eine bilineare Ansatzfunktion $\hat{N}_2(\boldsymbol{\xi})$ auf einem Referenzviereck ist in Abb. 4.2 dargestellt und ist folgendermaßen definiert:

$$\hat{N}_2(\boldsymbol{\xi}) = \xi_1 \xi_2, \quad \boldsymbol{\xi} = [0, 1]$$

Näheres zur Konstruktion und Definition der Ansatzfunktionen ist bspw. in [114] nachzulesen.

Bei der FV-Diskretisierung werden die räumlichen Differentialoperatoren durch Oberflächenintegrale approximiert, die an den sogenannten Integrationspunkten ausgewertet werden. Die Zeit- und Quellterme werden durch Volumenintegrale approximiert. Abbildung 4.3 zeigt beispielhaft für ein Dreieckselement die für die Diskretisierung verwendeten geometrischen Objekte. Hierbei bezeichnet ip_0 den Integrationspunkt, an dem das Oberflächenintegral ausgewertet wird. Er befindet sich am Schwerpunkt der Subkontrollvolumenfläche $scvf_0$. co_i bezeichnet den Knoten i eines Elements. $\boldsymbol{\nu}_0$ bezeichnet die Normale von $scvf_0$ und ist bezüglich des Subkontrollvolumens (scv_0) nach außen gerichtet. Desweiteren bezeichne n_{co} die Anzahl der Knoten, n_{ip} die Anzahl der Integrationspunkte eines Elements.

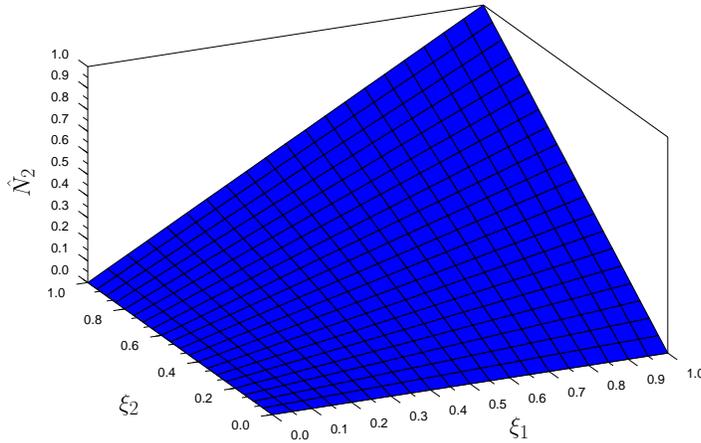


Abbildung 4.2.: Bilineare Ansatzfunktion auf einem Referenzviereck.

4.2.3. Diskretisierung nach Schneider und Raw

Die hier verwendete FV-Diskretisierung geht auf Schneider und Raw [107, 116] zurück und wurde von Rentz-Reichert [109] in das hier verwendete Programmpaket *UG*, das näher in Abschnitt 5.5 beschrieben wird, implementiert. Bei der FVM werden die Flüsse an den Integrationspunkten (ip) ausgewertet. Da es sich hier um knotenbasierte Ansätze handelt, ist eine Interpolation von den Knotenwerten auf die Integrationspunkte erforderlich. Es ist diese Interpolation, die die Besonderheit dieser Diskretisierung ausmacht. Hierbei wird eine lokale Impulsgleichung aufgestellt, die mit Finiten Differenzen approximiert wird und sowohl nodale Geschwindigkeiten und Drücke als auch die Geschwindigkeiten an den Integrationspunkten miteinbezieht. Nach den Geschwindigkeiten an den Integrationspunkten \mathbf{u}_{ip} umgestellt, können diese nun sowohl in den konvektiven Term $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^0_{ip}$ der globalen Impulsgleichung (4.12a), den Term $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_{ip}$ in der Kontinuitätsgleichung (4.12b), als auch in den konvektiven Term $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^0_{ip} \theta$ der Transportgleichung (4.12c) eingesetzt wer-

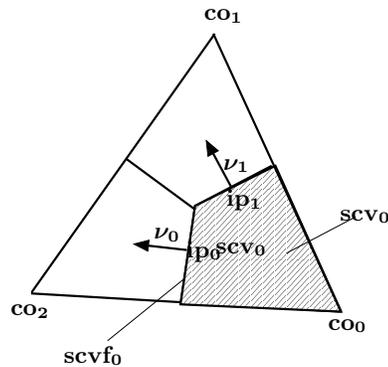


Abbildung 4.3.: Geometrische Größen eines Subkontrollvolumens eines Dreieckelementes.

den. Es resultieren Einträge in der Steifigkeitsmatrix sowohl für die nodalen Geschwindigkeiten als auch für die nodalen Drücke. Insbesondere bedeutet dies sowohl ein spezielles Aufwindverfahren für die Behandlung der konvektiven Terme als auch eine Stabilisierung des Stokes-Elements, das bei den hier verwendeten konformen, linearen Ansätzen sowohl für die Geschwindigkeiten als auch für den Druck ohne Stabilisierung die diskrete inf-sup-Bedingung nicht erfüllen würde [57]. Es wird also einerseits physikalisch zwischen den Knoten und Integrationspunkten interpoliert und andererseits damit das Stokes-Element stabilisiert. Es zeigt sich, dass dieser Stabilisierungsterm nur linear bezüglich der Gitterweite konvergiert. Dies nahm Karimian in [76] zum Anlass, den Ansatz etwas zu modifizieren mit dem Ergebnis, dass der Stabilisierungsterm nun quadratisch konvergiert. Diese auch hier verwendete Variante heißt FLOW und wurde von Nägele in *UG* implementiert [96].

Im Folgenden werden die Diskretisierung des globalen Gleichungssystems mit der um die Transportgleichung erweiterten Navier-Stokes-Gleichungen (2.7) und anschließend die lokale Impulsgleichung und verschiedene Aufwindverfahren beschrieben.

4.2.4. Finite-Volumen-Approximation

Statt eine globale Funktion für das Gesamtgebiet zu finden, wird das Gebiet Ω in Teigegebiete Ω_j zerlegt und auf diesen das vereinfachte Teilproblem aufgestellt:

$$\sum_j^n \left(\sum_k^{n_{scv}(j)} \int_{scv_k} \mathbf{u}_t dV + \sum_k^{n_{scvf}(j)} \int_{scvf_k} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}\mathbf{u} - \nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{n}p dS_k \right) = \sum_j^n \sum_k^{n_{scv}} \int_{scv_k} \mathbf{f} dV_k \quad (4.12a)$$

$$\sum_j^n \sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf_k} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} dS_k = 0 \quad (4.12b)$$

$$\sum_j^n \left(\sum_k^{n_{scv}} \int_{scv_k} \theta_t dV_k + \sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf_k} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}\theta - \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla \theta dS_k \right) = \sum_j^n \sum_k^{n_{scv}} \int_{scv_k} J dV_k \quad (4.12c)$$

Die lineare Interpolation der Knoten auf die Integrationspunkte besitzt die Konsistenzordnung $\mathcal{O}(h^2)$ und entspricht der Mittelpunktsregel. Bei den Volumenintegralen wird explizit die Mittelpunktsregel verwendet.

Ein Teilgebiet entspricht nun gerade einer Box B_j bzw. einem Kontrollvolumen. Es werden nun die Approximationen für die einzelnen Terme für eine Box B_j angegeben, wobei die Normale $\boldsymbol{\nu}$ mit der Länge der Subkontrollvolumenkante $scvf_k$ skaliert wird:

$$\mathbf{n}_k = \boldsymbol{\nu}_k \int_{scvf_k} dS.$$

Impulsgleichung

Die Impulsgleichung besteht aus einem Zeitterm und den beiden Termen für den konvektiven und diffusiven Impulstransport als auch aus dem Druckfluss. Für die Bestimmung werden sowohl Größen an den Knoten (*co*) als auch an den Integrationspunkten verwendet:

- Konvektiver Impulstransport (Quasi-Newton-Linearisierung)

$$\sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf_k} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^0 \mathbf{u} dS \approx \sum_k^{n_{scvf}} \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{u}_{up}^0 \mathbf{u}_{up}, \quad (4.13)$$

Die verschiedenen Upwind-Strategien und entsprechende Bestimmung der Upwind-Geschwindigkeiten \mathbf{u}_{up} werden weiter unten behandelt.

- Diffusiver Impulstransport

$$\sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf} \nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \, dS \approx \sum_k^{n_{scvf}} \sum_{co}^{n_{co}} \nu \mathbf{n}_k \cdot \nabla N_{co}(ip_k) \mathbf{u}_{co}$$

- Druckfluss

$$\sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf} \mathbf{n} p \, dS \approx \sum_k^{n_{scvf}} \sum_{co}^{n_{co}} \mathbf{n}_k N_{co}(ip_k) p_{co}$$

- Volumenkräfte

$$\sum_k^{n_{scv}} \int_{scv} \mathbf{f} \, dV \approx \sum_k^{n_{scv}} \sum_{co}^{n_{co}} \mathbf{f} |scv|_{co}$$

$|scv|_{co}$ stellt das Subkontrollvolumen bezüglich des Knotens co dar. ist.

- Zeitterm

$$\sum_k^{n_{scv}} \int_{scv} \mathbf{u}_t \, dV \approx \sum_k^{n_{scv}} \mathbf{u}_t |scv|_{co} \quad (4.14)$$

Masseerhaltung

Für die Masseerhaltung werden ausschließlich die Geschwindigkeiten am Integrationspunkt verwendet:

$$\sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf_k} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \, dS \approx \sum_k^{n_{scvf}} \mathbf{n}_k \mathbf{u}(ip_k)$$

Transportgleichung

Die Transportgleichung besteht aus den im Folgenden definiertem konvektivem, diffusivem, und einem Quell- bzw. Zeitterm:

- Konvektion

$$\sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^0 \theta \, dS \approx \sum_k^{n_{scvf}} \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{u}_{up}^0 \sum_{co}^{n_{co}} N_{co}(ip_k) \theta_{co}$$

- Diffusion

$$\sum_k^{n_{scvf}} \int_{scvf} \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla \theta \, dS \approx \sum_k^{n_{scvf}} \mathbf{n}_k \cdot \sum_{co}^{n_{co}} \nabla N_{co}(ip_k) \theta_{co}$$

- Quellterm

$$\sum_k^{n_{scv}} \int_{scv} \mathbf{J} dV \approx \sum_k^{n_{scv}} \sum_{co}^{n_{co}} J_{co|scv|co},$$

- Zeitterm

$$\sum_k^{n_{scv}} \int_{scv} \theta_t dV \approx \sum_k^{n_{scv}} \theta_t|scv|co$$

4.2.5. Stabilisierung

Die nodalen Größen werden mit großen, die Integrationspunktgeschwindigkeiten mit kleinen Buchstaben abgekürzt. Wie bereits erwähnt wird zur Interpolation der nodalen Größen auf die Integrationspunkte eine lokale Impulsgleichung entsprechend der globalen Impulsgleichung (2.33b) verwendet⁵:

$$\underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \gamma \delta_{i3} g T - f_i}_{:=\dot{\epsilon}} = u_i \underbrace{\frac{\partial u_j}{\partial x_j}}_{:=\ddot{\epsilon}}, \quad (4.15)$$

wobei bereits die Variante FLOW mit nach Karimian verbesserter Konvergenz verwendet wird. Die lokale Impulsgleichung wird zunächst als Fehlergleichung bezüglich des Impulses und der Divergenz aufgefasst:

$$\dot{\epsilon} - u_i \ddot{\epsilon} = 0.$$

Da die transportierte Divergenz $u_i \ddot{\epsilon}$ auch als

$$u_i \ddot{\epsilon} = u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \sum_{j=1, j \neq i}^d \left(u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)$$

geschrieben werden kann, wird der diskrete Divergenzfehler an jedem Knoten nun folgendermaßen approximiert:

$$u_i \ddot{\epsilon} \approx \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i^{dn} - u_i^{up}}{L_{dn}} - \sum_{j=1, j \neq i}^d \sum_k^{n_{co}} \left(\tilde{u}_j \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_i^k - \tilde{u}_i \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_j^k \right),$$

wobei L_{dn} die Länge vom Aufwindpunkt y_{up} zum Abwindpunkt y_{dn} und $\|\tilde{\mathbf{u}}\|$ den Betrag der letzten Iterierten⁶ Geschwindigkeit bezeichnen. Die so aufgestellte lokale Impulsgleichung lautet diskret schließlich wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{u_i - u_i^0}{\Delta t} + \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i - u_i^{up}}{L_c} - \nu \frac{\sum_k^{n_{co}} N_k U_i^k - u_i}{L_d^2} + \sum_k^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k + \gamma \delta_{i3} g T + \\ - \underbrace{\|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i^{dn} - u_i^{up}}{L_{dn}} + \sum_{j=1, j \neq i}^d \sum_k^{n_{co}} \left(\tilde{u}_j \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_i^k - \tilde{u}_i \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_j^k \right)}_{:=A} = f_i. \end{aligned} \quad (4.16)$$

⁵Der bekannte Teil γT_0 des Gravitationsterms wird der rechten Seite f_3 zugeschlagen

⁶Hier kann die letzte Iterierte sowohl die letzte zeitliche, nichtlineare aber auch lineare Iterierte sein.

Hierbei bedeuten u_i^0 die letzte Zeititerierte am Integrationspunkt, u_i^{up} die Aufwindgeschwindigkeit, L_c und L_d die weiter unten spezifizierten Konvektions- bzw. Diffusionslängen. Formt man nun (4.16) nach den Integrationspunktgeschwindigkeiten u_i um, so folgt:

$$u_i = \frac{1}{1 + \frac{\nu\Delta t}{L_d^2} + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|\Delta t}{L_c}} u_i^0 + \frac{1}{1 + \frac{L_c\nu}{\|\tilde{\mathbf{u}}\|} + \frac{L_c}{\|\tilde{\mathbf{u}}\|\Delta t}} u_i^{up} + \frac{1}{1 + \frac{L_d^2\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{\nu L_c} + \frac{L_d^2}{\nu\Delta t}} \sum_k^{n_{co}} N_k U_i^k + \frac{1}{\frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} + \frac{\rho\nu}{L_d^2} + \frac{1}{\Delta t}} \left(- \sum_k^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x} P_k + \gamma\delta_{i3}T + A + f_i \right). \quad (4.17)$$

Numerisch wird mit Hilfe des Gauss-Eliminationsverfahrens nach u_i gelöst, wobei das System (4.16) beispielsweise auf einem Viereck aus acht Gleichungen besteht und stets diagonaldominant ist [96].

Der Diffusionsterm (Laplaceoperator)

$$\nu \frac{\sum_k^{n_{co}} N_k U_i^k - u_i}{L_d^2}$$

in (4.16) wird durch einen 5-Punkt-Stern approximiert. Eine gute Approximation liegt allerdings nur bei einer speziellen Anordnung der Stützstellen vor. Eine Verbesserung schlagen Schneider und Raw in [116] vor:

$$L_{d_{Raw}}^2 = \frac{|SCV_0|^2}{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2} + \frac{3}{8}d^2,$$

wobei d die Diagonale der zum Integrationspunkt gehörenden Teilkontrollvolumenfläche darstellt. Eine verbesserte Formulierung gibt Rentz-Reichert in [109] mit

$$\frac{1}{L_{d(2)}^2} = \frac{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}{|SCV_0|^2} + \frac{8d^2}{3\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}$$

an. Nägele gibt in [96] schließlich die hier verwendete Variante an:

$$\frac{1}{L_{d(2)_{korrr}}^2} = \frac{2\|\mathbf{n}_{min}\|^2}{|SCV_0|^2} + \frac{8}{3\|\mathbf{n}_{avrg}\|^2},$$

wobei $\|\mathbf{n}_{min}\|^2$ das Minimum aller Normen der zum Element gehörenden Normalen und $\|\mathbf{n}_{avrg}\|^2 = \frac{1}{n_{co}} \sum_k^{n_{co}} \|\mathbf{n}_k\|^2$ das mittlere Maß der Normalen darstellen.

Das gelöste System erzeugt schließlich Einträge für nodale Größen in der Form:

$$u_i(ip) = \sum_k^{n_{co}} (C_{U_i}(co_k)U_i^k + C_P(co_k)P^k) + C_T T + C_f f_i + C_t u_i^{n-1}.$$

Die Konstanten C_{U_i} , C_P und C_T bezeichnen die Abhängigkeiten der ip-Geschwindigkeiten von den nodalen Geschwindigkeiten, des Druckes und der Temperatur.

Konvergenz und Kritik

Der Stabilisierungsterm ist physikalisch unerwünscht, da die Masseerhaltung dadurch gestört wird. Für asymptotische kleine Gitterweiten gilt für den Stabilisierungsterm:

$$\lim_{h \rightarrow 0} L_d^2 \Delta p = 0.$$

Diese Eigenschaft ist zwar notwendig für die Konvergenz der Diskretisierung, aber nicht hinreichend für große Gitterweiten. Hier kann durchaus der Stabilisierungsterm das Gesamtergebnis stören.

Ein weiterer Nachteil ist das Anwachsen des Druckeintrages in der Kontinuitätsgleichung mit kleiner werdender Viskosität ν (siehe (4.17)). Im Falle kleiner Viskositäten, wird der Druckeintrag in der Kontinuitätsgleichung gegenüber den Geschwindigkeitseinträgen dominanter. Im Extremfall $\nu \rightarrow 0$ wird nur noch $\Delta p = 0$ gelöst.

Die letztgenannte Kritik tritt nur bei diesbezüglich extremen Problemstellungen auf. Bei den hier durchgeführten Berechnungen wird davon ausgegangen, dass der Stabilisierungsterm keinen dominanten Einfluss auf das Gesamtergebnis hat. Eine Diskussion des Stabilisierungsterms ist Gegenstand der Dissertation von Nägele [96].

Bei der Lösung thermischer Probleme mit hohen Temperaturdifferenzen hat sich eine weitere Schwierigkeit dieser Diskretisierung herausgestellt⁷. Die *ip*-Geschwindigkeiten werden wie bereits erläutert mit Hilfe der Impulsgleichung (nichtlinear) bestimmt. Der Impuls der letzten Iterierten $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_{ip}^0$ im konvektiven Term der Temperatur $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_{ip}^0 \theta$ stellt die Divergenz dar. Der im Kontinuierlichen lineare Divergenzoperator wird im diskreten Raum nichtlinear. In numerischen Experimenten konnte nachgewiesen werden, dass bei hohen Temperaturen (hohe θ -Werte) diese zusätzliche Nichtlinearität eine dominante Rolle spielt und die Konvergenz des Gesamtverfahrens entscheidend verschlechtert.

Allerdings, diese Diskretisierung mit den hier verwendeten knotenbasierten, linearen Ansätzen sowohl für die Geschwindigkeiten als auch für den Druck garantiert eine stabile Diskretisierung zweiter Ordnung, ohne einen zu justierenden Parameter⁸. Schließlich führt diese Diskretisierung nicht auf ein Sattelpunktproblem, das aufwendigere Lösungsverfahren erfordert.

4.2.6. Upwind-Strategien

Bei linearen Ansätzen bieten sich prinzipiell auch für den konvektiven Term $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ zentrale Differenzen an, die allerdings zwei Nachteile besitzen. Erstens erzeugt die zentral-differenzierte Diskretisierung einen Nulleintrag auf der Diagonalen und somit eine Schwächung der Diagonaldominanz der Steifigkeitsmatrix. Bei konvektionsdominanten Strömungen sind die Einträge für die Konvektion wesentlich größer (und auch unsymmetrisch) als die der Diffusion, was dazu führt, dass die hier verwendeten iterativen Lösungsverfahren versagen. Zweitens führen zentrale Differenzen bei dominierender Konvektion zu Oszillationen in der Lösung. Dies liegt daran, dass bei stärker werdender Konvektion die aufzulösende Grenzschicht immer schmaler wird und somit die erforderliche Gitterweite immer kleiner werden muss. An einfachen Beispielen kann dieses Verhalten illustriert werden [80]. Aus physikalischer Sicht ist anzuführen, dass eine zentral-differenzierte Diskretisierung den Informationsfluss ungünstigerweise mit allen Knoten und nicht nur mit den in Aufwindrichtung liegenden Knoten bestimmt. Um diese Nachteile zu umgehen, werden stabilisierte Verfahren angewendet. Für die FEM ist hier an erster Stelle die *Streamline-Diffusion*-Methode zu nennen [111], die eine in Strömungsrichtung gewichtete künstliche Diffusion einführt. Bei der FVM haben sich die sogenannten Aufwind-Verfahren (*upwind*) etabliert, bei dem die stromaufwärts gelegenen Knoten stärker gewichtet werden.

Für die Abschätzung der Ordnung des jeweiligen Verfahrens wird der Aufwindpunkt bezüglich

⁷Konkret wurde das Temperaturfeld einer gasisolierten Schaltanlage (GIS) berechnet [123, 124], wobei der durch die Leiter fließende Strom entsprechende Verlustleistungen induziert, die wiederum Wärmequellen in der Energiegleichung darstellen.

⁸Bei manchen FE-Diskretisierungen muss ein Strafterm problemabhängig eingestellt werden.

des Integrationspunktes ip in einer Taylorreihe

$$\phi_{ip}(x_{ip}) = \phi_{up}(x_{up}) + \Delta x \frac{\partial \phi}{\partial x}(x_{up}) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (4.18)$$

entwickelt, wobei $\Delta x = x_{up} - x_{ip}$ den Abstand zwischen dem Integrations- und dem Aufwindpunkt darstellt. Das einfachste Verfahren stellt das *full upwinding* dar (Abb. 4.4), bei dem bezüglich eines Integrationspunktes ip die nächstgelegene Elementkante und schließlich der stromaufwärts liegende Aufwindpunkt verwendet wird. Dieses Verfahren ist einfach und stabil, aber nur gemäß 4.18 von erster Ordnung.

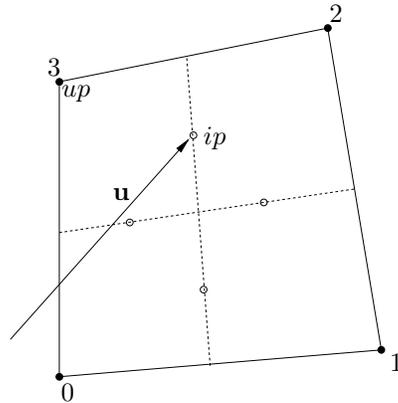


Abbildung 4.4.: Full upwinding

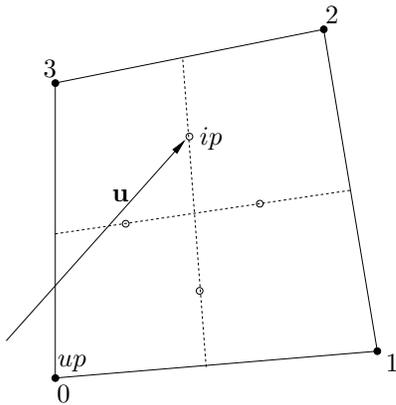


Abbildung 4.5.: Skewed Upwinding

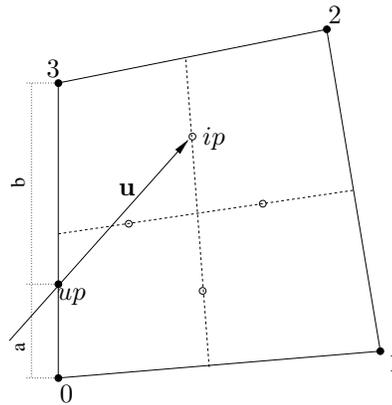


Abbildung 4.6.: LPS Upwinding

Beim *skewed upwinding* wird der Geschwindigkeitsvektor am Integrationspunkt stromaufwärts verlängert, bis dieser die Elementkante schneidet (Abb. 4.5). Der diesem Schnittpunkt nächste Knoten ist dann der Aufwindpunkt. Dieses gegenüber dem full-upwinding genauere Verfahren ist auch nur von erster Ordnung. Beim *linear profile skewed upwinding* (LPS) (Abb. 4.6) stellt der Schnittpunkt der stromaufwärts verlängerten Geschwindigkeit mit der Elementkante den Aufwindpunkt dar und wird mit Hilfe der an diese Kante grenzenden Knoten interpoliert. Die Korrektur durch lineare Interpolation führt auf eine höhere Approximationsordnung, wobei der

in Abb. 4.6 dargestellte Aufwindpunkt folgendermaßen bestimmt wird:

$$\mathbf{u}^{up} = \frac{b}{a+b} \mathbf{U}_0 + \frac{a}{a+b} \mathbf{U}_3.$$

Für diese Diskretisierung bieten sich noch das sogenannte *positive upwinding* und *regular upwinding* an. Diese werden in dieser Arbeit nicht verwendet, weswegen für die Beschreibung auf [107, 115] bzw. [109, 92] verwiesen wird.

4.2.7. Randbedingungen

Für die Vervollständigung des weiter oben dargestellten Randwertproblems werden nun die hier verwendeten Randbedingungen (RB) eingeführt. Es werden die klassischen Bedingungen für den Einström-, Ausströmrand und die Wand verwendet.

Einströmrand

Beim Einströmrand Γ_{in} , wie er beispielsweise bei den Berechnungen des statischen Mischers (siehe Kapitel 9) auftritt, wird ein Geschwindigkeitsprofil vorgegeben (inhomogene Dirichlet-RB). Der Druck stellt sich durch die Geschwindigkeiten entsprechend ein und wird nicht vorgegeben. In der Impulsgleichung wird der Eintrag an den entsprechenden Knoten co_k am Einströmrand mit der Geschwindigkeit \mathbf{u}_{in} durch

$$\mathbf{u}(co_k) = \mathbf{u}_{in}(co_k) \quad \forall co_k \in \Gamma_{in} \quad (4.19)$$

vorgegeben.

Die Kontinuitätsgleichung wird am Rand Γ_{in} assembliert, indem der bekannte Massenfluss

$$\mathbf{u}_{in}(bip) \cdot \mathbf{n}_{bip}$$

eingesetzt wird.

Da keine Interpolation von den Integrationspunkten auf die Elementknoten durchgeführt wird, entfällt die Stabilisierung, was einer homogenen Neumann-RB entspricht (vgl. (4.16)):

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0.$$

Für andere skalare Größen wie Temperatur oder Konzentration gilt gemäß (4.19)

$$\theta(co_k) = \theta_{in} \quad \forall co_k \in \Gamma_{in}.$$

Ausströmrandbedingung

Das Strömungs- und Skalarfeld sollte möglichst ungestört den physikalisch nicht vorhandenen Gebietsrand Γ_{out} verlassen können. Bei gleichmäßigen Strömungsfeldern wird ein konstanter Dirichletwert für den Druck über den ganzen Rand vorgegeben (Rechtfertigung siehe [99]). Durch Projektion der Flüsse auf die Flächennormale wird eine parallele Ausströmung erzwungen. Bei turbulenten Strömungen liegt kein gleichmäßiges Strömungsfeld vor, weswegen die schwächere Formulierung für den Druck

$$\int_{out} p \, dS = 0$$

gefordert wird. Diese Bedingung wird in der Diskretisierung realisiert, indem alle Druckflüsse über den Ausflussrand gleich Null gesetzt werden:

$$\int_{\Gamma_{KV}} p n_i dS = \sum_{SKVF} p n_i = \sum_{ip} p_{ip} n_i + \sum_{bip \notin \Gamma_{out}} p_{pib} n_i.$$

Für die Geschwindigkeiten hat sich das Lösen einer zeitabhängigen Konvektionsgleichung

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0 \quad (4.20)$$

als die stabilste Randbedingung erwiesen. Alternativ dazu kann auch die volle Impulsgleichung assembliert (Näheres siehe [96]). Die diskrete Form von (4.20) entspricht (4.13) bzw. (4.14).

Wandrandbedingung

Bei reibungsbehafteten Strömungen ist die Geschwindigkeit an der Wand Γ_W Null. Nur in speziellen Gasströmungen, bei der die freien Weglängen l groß, bzw. die in Mikro- und Nanoströmung auftretenden Referenzlängen L_0 klein sind (ausgedrückt durch die Knudsen-Zahl: $Kn = l/L_0 > 1$), trifft dies nicht zu [141]. In den hier betrachteten Fällen gilt $Kn \ll 1$.

Diskret sieht die homogene Dirichletbedingung aus wie folgt:

$$\mathbf{u}(co_k) = \mathbf{u}_{\Gamma_W}(co_k) = 0 \quad \forall co_k \in \Gamma_W.$$

4.2.8. Peclet-Blending

Es ist oft vorteilhaft, nicht reine Aufwindverfahren bzw. zentrale Differenzen zu verwenden, sondern diese abhängig von der lokalen Strömungssituation zu kombinieren. Raithby und Torrance schlagen in [104] folgende Konvexkombination vor:

$$u_i(ip) = \omega u_i^{up} + (1 - \omega) \sum_k^{n_{co}} N_k(ip) U_i^k, \quad \omega = [0, 1].$$

Die Wichtung wird hierbei rein lokal auf jedem Element und abhängig vom lokalen Verhältnis der Konvektion zur Diffusion mit Hilfe der Peclet-Zahl

$$Pe = \frac{u_n L}{\nu}$$

bestimmt [107]:

$$\omega = \frac{Pe^2}{5 + Pe^2}.$$

4.3. Diskretisierung des Turbulenzmodells

Im Folgenden wird die im Rahmen der oben beschriebenen FVM diskrete Behandlung des Turbulenzmodells erläutert, das außer der variablen Konstruktion der Filterweiten größtenteils auf [96] zurückgeht.

4.3.1. Konstruktion der Filterweiten

Bei den meisten LES-Rechnungen, bei denen die Filterweite implizit verwendet wird⁹, steht diese in festem Verhältnis zur Gitterweite. Bei der FVM bietet sich entweder das Kontroll- oder Elementvolumen an. In dieser Arbeit wird standardmäßig entweder das Kontrollvolumen oder das Volumen der an einen Knoten grenzenden Elemente als Filterweite verwendet (siehe Abbildung 4.7). Beim dynamischen Modell werden beide Filterweiten verwendet, wobei der größere Filter

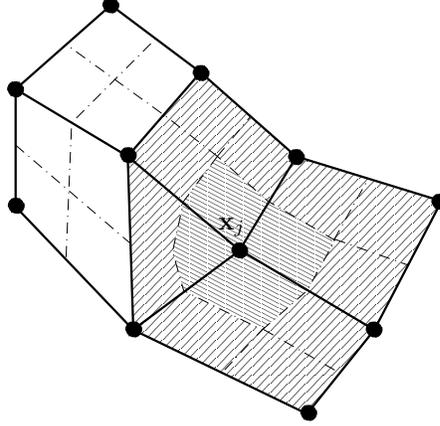


Abbildung 4.7.: Standard-Filterweiten auf einem unstrukturierten Gitter $\tau_l \in \mathbb{R}^2$: Filterweite als Kontrollvolumen (feine Schraffur) und als an den Knoten \mathbf{x}_j angrenzende Elementvolumina (grobe Schraffur).

den Testfilter darstellt.

Für die Analyse der Fehleranteile in einer LES (siehe Kapitel 6) werden zwei Methoden zur Bestimmung der Filterweite angewendet. Bei der ersten Variante wird die Bestimmung der Filterweite gemäß eines rekursiven Schalenalgorithmus⁷ auf einer Gitterebene durchgeführt. Diese Methode ist für die explizite Filterung erforderlich. Bei der zweiten Variante geht es darum, konstante Filterweiten innerhalb einer Gitterhierarchie zu verwenden. Ausgangspunkt hierbei ist das Kontrollvolumen auf dem größten Gitter τ_0 . Auf den darüberliegenden Gittern $\tau_l, l > 0$ wird durch ein Suchalgorithmus bestimmt, welche Elemente (*Sohnelemente*) auf der nächst höheren Gitterebene in diesem Kontrollvolumen liegen. Zur Filterung werden schließlich diese verwendet.

Filterweitenbestimmung durch Rekursion auf einer Gitterebene

Ziel hierbei ist es, auf einer Gitterebene τ_l die Filterweite variieren zu können. Ausgangspunkt ist das Kontrollvolumen B_j , das bei der hier verwendeten *vertex centered* FVM aus den Subkontrollvolumina der an einen Knoten \mathbf{x}_j angrenzenden Elemente besteht. Die nächst größere Filterweite ist das Volumen aller an einen Knoten grenzenden Elemente. Die nächsten Erweiterungen der Filterweite erfolgt rekursiv, indem die an die Filterweite angrenzenden Elemente hinzugefügt werden. Hierbei handelt es sich um die Nachbarn bezüglich der Elementkante bzw. -seite und die Elemente mit gemeinsamen Knoten. Die so erzeugten Filterweiten können also maximal das gesamte Gebiet Ω einnehmen. Die Filterweiten werden gemäß der Rekursionstiefe mit Δ_d bezeichnet. Beginnend mit dem Kontrollvolumen Δ_0 , über die an einen Knoten angrenzenden Elemente Δ_1 , bis zur beliebig großen Filterweite Δ_d mit der Rekursionstiefe d . Abbildung

⁹Die gefilterte Größe wird direkt in der Assemblierung, also im sgs-Spannungstensor, berücksichtigt.

4.8 zeigt drei Filterweiten der Rekursionstiefen $d = [0, 1, 2]$ auf einem strukturierten Vierecksgitter. Abbildung 4.9 zeigt die Vergrößerung der Filterweiten für $d = [0, 1, 2]$ auf unstrukturierten

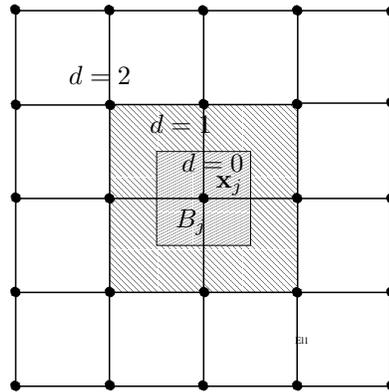


Abbildung 4.8.: Rekursive Bestimmung der Filterweite τ_l auf einem uniformen Vierecksgitter $\tau_l \in \mathbb{R}^2$. Mit der Rekursionstiefe $d = 0$ wird das Kontrollvolumen, mit $d = 1$ die an den Knoten \mathbf{x}_j angrenzenden Elementvolumina beschrieben. Mit $d = 2$ werden die an das Volumen, das mit $d = 1$ definiert ist, angrenzenden Elementvolumina hinzugenommen.

Dreiecksgittern. Analog zur Konstruktion des Boxgitters wird eine Filterumgebung $U(\Delta_{l,d}(\mathbf{x}_j))$

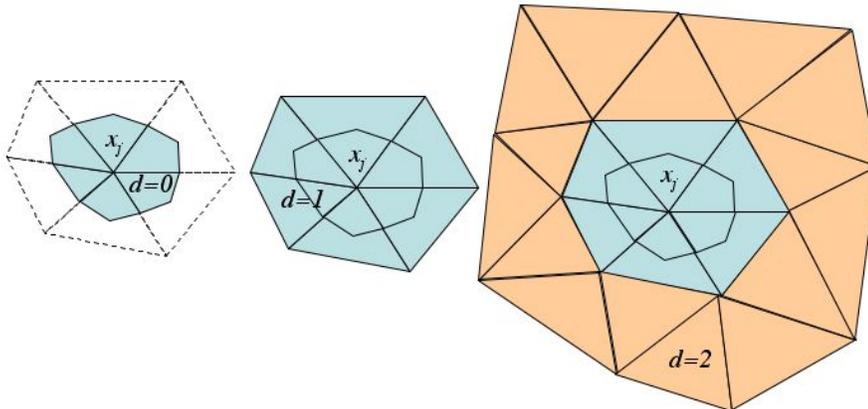


Abbildung 4.9.: Rekursive Bestimmung der Filterweite auf einem unstrukturierten Dreiecksgitter $\tau_l \in \mathbb{R}^2$ mit $d = 0$ (links), $d = 1$ (mitte) und $d = 2$ (rechts).

für die Filterweite $\Delta_{l,d}(\mathbf{x}_j)$ bezogen auf den Knoten \mathbf{x}_j eingeführt, womit die Bestimmung der Filterweite folgende kompakte Form annimmt:

$$U(\Delta_{l,d}(\mathbf{x}_j)) := \begin{cases} B_j & \text{für } d = 0 \\ \bigcup \{K' \in \tau_l : K' \cap \mathbf{x}_j \neq \emptyset, K' \cap U(\Delta_{l,d-1}) \neq \emptyset\} & \text{für } d > 0. \end{cases}$$

Hierbei bezeichnet l die Ebene des Gitters τ_l , auf dem die Filterung tatsächlich durchgeführt wird. B_j ist die auf den Knoten \mathbf{x}_j bezogene Box.

Konstante Filterweiten innerhalb einer Gitterhierarchie

Zur Bestimmung der Filterweite nach dieser Variante wird analog zur ersten eine entsprechende Umgebung $U(\Delta_l^{l-1}(\mathbf{x}_j))$ eingeführt.

$$U(\Delta_l^{l-i}(\mathbf{x}_j)) := \begin{cases} B_j & \text{für } i = 0 \\ \bigcup \{K' \in \tau_l : K' \cap K'' \neq \emptyset, K'' \in \tau_{l-i} : K'' \cap \mathbf{x}_j \neq \emptyset\} K' & \text{für } i > 0. \end{cases} \quad (4.21)$$

Das Element $K'' \in \tau_{l-i}$ ist das i -te Väterelement¹⁰ von $K' \in \tau_l$. (4.21) nutzt also die auf den verschiedenen Gittern definierten Filterweiten aus. Mit Hilfe der vorhandenen Gitterhierarchie können somit die unterschiedlichen Filterweiten bestimmt werden. Abbildung 4.10 zeigt drei verschiedene Filterweiten. Die kleinste Filterweite $U(\Delta_l^l)$ auf der feinsten Gitterebene τ_l umfasst die Elemente K_8, K_9, K_{10}, K_{11} . Die nächstgrößere Filterweite $U(\Delta_l^{l-1})$ erhält man, indem die Väter K_4, K_5, K_6, K_7 der genannten Elemente zur Bestimmung der Filterweite herangezogen werden. Die dritte Filterweite $U(\Delta_l^{l-2})$ umfasst schließlich alle Söhne der Söhne der Elemente K_0, K_1, K_2, K_3 . Wohlgemerkt werden für die tatsächliche Filterung immer die Elemente auf dem feinsten Gitter verwendet. Für den Fall $i = 0$ entspricht die Filterweite einfach der Box B_j .

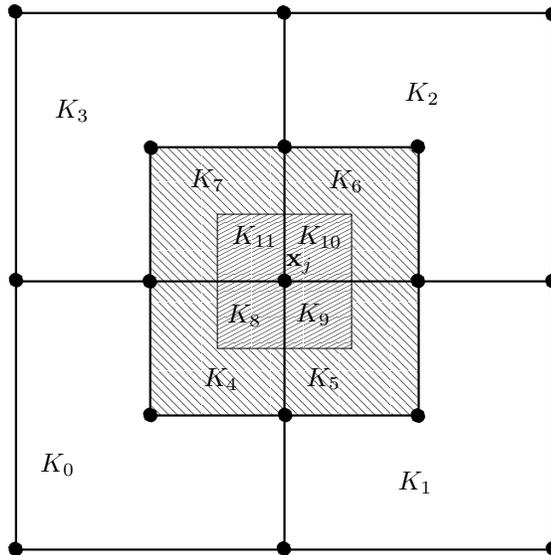


Abbildung 4.10.: Bestimmung der Filterweite mit Hilfe der Gitterhierarchie.

Tritt der Fall auf, dass die vorhandene Filterhierarchie nicht ausreicht, eine entsprechend große Filterweite Δ_l^{l-i} zu bestimmen, so werden rekursiv auf dem Gitter τ_l die Elementnachbarn zur Bestimmung der Filterweite hinzugezogen.

Mit dieser Variante kann einerseits eine spezielle Filterweite bestimmt werden, der algorithmische Rahmen ermöglicht aber auch die weiter oben erwähnte Notwendigkeit, die Filterweite innerhalb

¹⁰Werden aus einem Element K_{Vater} durch Verfeinerung mehrere (Sohn-)Elemente erzeugt, so heißt dieses *Väterelement*.

einer Gitterhierarchie konstant zu halten. Das Filtervolumen wird dann mit zunehmender Gitterfeinheit genauer aufgelöst.

Berechnung der Spannungstensoren

Die turbulente Viskosität ist bei den hier betrachteten LES-Modellen immer eine Funktion des Spannungstensors \bar{S}_{ij} und dessen Norm. Die FV-Diskretisierung von S_{ij} ist nun definiert wie folgt:

$$\begin{aligned}\bar{S}_{ij} &= \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \int_{\Omega_{KV}} S_{ij} dV \\ &= \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \int_{\Omega_{KV}} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) dV \\ &= \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \int_{\Omega_{KV}} \frac{1}{2} (u_i n_j + u_j n_i) dS.\end{aligned}$$

Analog zur Diskretisierung wird die Integration auf dem Rand des Kontrollvolumens mit Hilfe der Mittelpunktsregel durchgeführt und liefert:

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\Omega_{KV}|} \int_{\partial\Omega_{KV}} \frac{1}{2} (u_i n_j + u_j n_i) dS &= \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \sum_{l=1}^{n_{SKVF}} \int_{SKVF_l} \frac{1}{2} (u_i n_j + u_j n_i) dS \\ &\approx \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \sum_{l=1}^{n_{SKVF}} \frac{1}{2} |SKVF_l| \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip_l) (U_i^k n_j + U_j^k n_i).\end{aligned}$$

Mit

$$\bar{S}_{ij} := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

wird die Norm des Spannungstensors folgendermaßen bestimmt:

$$|\bar{S}| := \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}.$$

Der Modellparameter beim dynamischen Modell

Der Modellparameter $C = C(x, t)$ unterliegt großen Schwankungen sowohl im Raum als auch in der Zeit. Dies geht so weit, dass die gesamte kinetische Energie bei einem Problem, bei dem das Backscattering eine geringe Rolle spielt, mit dem dynamischen Turbulenzmodell größer ist, als ohne Turbulenzmodell. Deswegen wird in vielen Fällen - wie auch hier - der lokal bestimmte Modellparameter erstens örtlich mit den Nachbarwerten und zweitens zeitlich gemittelt.

Was die zeitliche Mittelung angeht, so schlagen Breuer und Rodi in [25] vor, den Modellparameter mit einem Tiefpassfilter zu glätten:

$$C_{\text{avrg}}^{n+1} = (1 - \epsilon)C^n + \epsilon C^{n+1}, \quad \epsilon \in (0, 1),$$

wobei $n + 1$ den auf n folgenden Zeitschritt darstellt. Mit $\epsilon = 10^{-3}$ werden alle hochfrequenten Anteile gedämpft und es verbleiben nur niederfrequente Oszillationen. Dies wurde neben [25] auch in [2] erfolgreich angewendet.

Eine kürzlich formulierte Abschneide- oder Clippingprozedur ist in [82] zu finden. Hier wird der Abschneidewert des dynamischen Modellparameters mit Hilfe einer Taylor-Expansion bestimmt, wobei keine zusätzlichen Größen während einer Rechnung erforderlich sind.

Um Oszillationen im Raum zu dämpfen, wird der Parameter mit dem Testfilter G_{Δ} gefiltert:

$$C(x, t) = \frac{1}{|\Omega_{TV}|} \sum_{j=1}^{n_{pts}^T} |SKV_j| \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(y_j) C(co_k, t).$$

Beschränkung der turbulenten Viskosität

Außer beim Smagorinsky-Modell kann die turbulente Viskosität auch negative Werte annehmen und die materielle Viskosität auslöschen. Dies würde zu einer Schwächung der Diagonaldomains der resultierenden Matrix und entsprechenden Konvergenzproblemen führen. Deswegen wird die turbulente von der materiellen Viskosität mit

$$\nu + \nu_t \geq \xi \nu, \quad \xi \in (0, 1]$$

wegbeschränkt. Der Modellparameter C ist dann folgendermaßen formuliert:

$$\nu_t = C \Delta^2 |\bar{S}| \geq (\xi - 1) \nu \quad \leadsto C \geq (\xi - 1) \frac{\nu}{\Delta^2 |\bar{S}|}.$$

Die Division durch die Norm des Spannungstensors bringt keine Schwierigkeiten, da nur im Falle einer von Null verschiedenen turbulenten Viskosität eine Beschränkung in obiger Form erfolgt, d.h. für den betrachteten Fall gilt $|\bar{S}| \neq 0$.

Bemerkung 6 (Gittertransfer der turbulenten Viskosität). Der in dieser Arbeit verwendete Mehrgitterzyklus erfordert den Transfer auch der turbulenten Viskosität. Die (bi-)lineare Interpolation, wie sie für alle sonstigen Größen verwendet wird, der turbulenten Viskosität induziert bei der Restriktion eine unerwünschte räumliche Verteilung, weswegen in diesem Fall die Injektion bevorzugt wird, d.h. es wird für einen Gitterknoten direkt der Wert des auf dem feineren Gitter liegenden Sohnknotens übernommen¹¹. Darüberhinaus wird die turbulente Viskosität ausschließlich auf dem feinsten Gitter bestimmt und somit lediglich restringiert, nicht aber prolongiert. Auf die spezielle Behandlung des Skalenähnlichkeitsterms beim Skalenähnlichkeitsmodell sei auf [96] verwiesen.

4.3.2. Filterweite zu Gitterweite

Wie im Kapitel 6 näher beschrieben wird, hängt die Qualität einer LES-Lösung sowohl von der Gitter- als auch von der Filterweite ab. Bei impliziter LES, bei der die Filterung also implizit während des Lösungsprozesses durchgeführt wird, spielt das Verhältnis von Δ/h eine besondere Rolle. Es beschreibt die für die Auflösung der kleinsten Skalen verfügbaren Gitterpunkte. Bei kleinem Verhältnis Δ/h müssen stark fluktuierende Strukturen durch wenige Gitterpunkte aufgelöst werden. Der Diskretisierungsfehler ist folglich größer. Ist das Verhältnis Δ/h groß, so ist der Diskretisierungsfehler zwar klein, doch steigt entsprechend die Modellierungsunsicherheit. Es hängt also an diesem Verhältnis, ob der Gesamtfehler minimal ist.

Wegen der in Verbindung mit LES eingesetzten Diskretisierungen wurde in erster Linie das Verhältnis $\Delta = h$ (z.B. Deardoff in [34] und Norman & Lesieur in [97]) und $\Delta = 2h$ (z.B. Zang et al. in [148]) verwendet. Bei Diskretisierungen zweiter Ordnung haben Kwak et al. [83] und Love [89] den geringsten Fehler bei $\Delta = 2h$ festgestellt. Vreman hat in [135] an der kompressiblen Variante der *Mixing layer*-Problemstellung verschiedene Konsistenzordnungen untersucht, und kommt zu dem Schluss, dass für höhere Ordnungen das Verhältnis $\Delta = 2h$, für niedrigere Ordnungen $\Delta = h$ zu bevorzugen ist.

¹¹Der Begriff des Sohn- bzw. Vaterknotens ist analog zu den zuvor eingeführten Begriffen des Sohn- bzw. Vater-elementes zu verstehen.

4.4. Abschätzung der Konsistenzordnung durch uniforme Verfeinerung

Neben diversen Methoden der Fehlerabschätzung¹², wie das Lösen einer separaten Differentialgleichung oder die Verwendung Verfahren höherer Ordnung [110], hat sich als einfache und verlässliche Methode die Fehlerabschätzung durch uniforme Verfeinerung¹³ herausgestellt.

Unter dem Begriff der Gitterkonvergenz versteht man das Verhalten einer Sequenz diskreter Lösungen $\{x_l, x_{l+1}, \dots\}_{l_0}^{l_{max}}$ auf sukzessiv uniform verfeinerten Gittern τ_l auf Ebene $l \in \mathbb{N}_0$. Wird der Abstand zweier Lösungen mit zunehmender Gitterebene kleiner, so gilt:

$$\|x_l - x_{l+1}\| > \|x_{l+1} - x_{l+2}\|, \quad l \rightarrow \infty.$$

Im asymptotischen Bereich handelt es sich um eine uniforme Konvergenz. In der Praxis muss die Komplexität beschränkt werden und man begnügt sich mit der maximalen Anzahl verfügbarer Lösungen, wobei mindestens drei Lösungen, die auf uniform verfeinerten Gittern gerechnet wurden, vorhanden sein müssen. Ob sich diese verwendeten Lösungen auch tatsächlich in dem Bereich uniformer Konvergenz befinden, muss von Fall zu Fall bewertet werden. Im asymptotischen Bereich gilt i.A. $\epsilon/h^p = const$, wobei ϵ den Fehler, p die Ordnung des Verfahrens und h den Gitterparameter (Gitter- oder Maschenweite) darstellen.

Kann die exakte Lösung x durch die approximierte Lösung x_h und dem Diskretisierungsparameter h mit

$$x = x_h^i + Ch_i^n, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.22)$$

dargestellt werden, und stehen drei Lösungen x_h^1, x_h^2, x_h^3 auf uniform verfeinerten Gittern $\tau_i, i = 1, 2, 3$ zur Verfügung, so lässt sich durch sukzessives Einsetzen in (4.22) und nachfolgende Subtraktion die Ordnung des Verfahrens bezüglich dieser drei Lösungen bestimmen:

$$p = \ln\left(\frac{x_h^l - x_h^{l+1}}{x_h^{l+1} - x_h^{l+2}}\right) / \ln(r), \quad (4.23)$$

mit $r = h^1/h^2 = h^2/h^3$. Diese Methode wird auch als *Richardson Extrapolation* bezeichnet.

Bemerkung 7 (Konsistenz und Konvergenz). Eine konsistente Approximation eines Diskretisierungsverfahrens impliziert nicht notwendigerweise eine konvergente Approximation; eine Aussage über die Konvergenz geht über den Begriff der Stabilität. Da die Stabilität aber nicht so einfach wie die Konsistenz (Richardson Extrapolation) bestimmt werden kann, wird hier die Stabilität vorausgesetzt. Damit wird bei einem konsistenten Verfahren auch ein konvergentes Verhalten unterstellt. In Abschnitt 6.1.4 wird noch näher auf die Begriffe der Konsistenz, Konvergenz und Stabilität eingegangen.

Abschließend sei hier noch erwähnt, dass die hier beschriebene Gitterkonvergenz bei einer LES nicht zutreffen muss. In [52] wird gezeigt, dass der Gesamtfehler beispielsweise bei einem reinen Skalenähnlichkeitsmodell bei zunehmender Verfeinerung (des Gitters und der Filterweiten) nicht kleiner wird. In den hier durchgeführten numerischen Experimenten wird bei nichtkonvergentem Verhalten davon ausgegangen, dass sich die Lösung noch nicht im asymptotischen Bereich befindet, das LES-Modell aber konvergent ist.

¹²Der Begriff der Fehlerabschätzung wird hier nicht im mathematisch strengen Sinne verwendet.

¹³Unter uniformer Verfeinerung versteht man das Verfeinern (zunächst unabhängig von der Regel, nach der verfeinert wird) aller Elemente. Im Gegensatz dazu ist die lokale Verfeinerung zu nennen, bei der nur ausgewählte Elemente der Triangulierung τ_l verfeinert werden.

5. Lösungsverfahren

Die mit den beschriebenen Verfahren diskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen führen auf ein algebraisches Gleichungssystem, das noch gelöst werden muss. Hierbei wird zwischen der Zeitintegration, dem Lösen des nichtlinearen und des linearen Problems unterschieden. Diese werden nun im Folgenden beschrieben.

5.1. Zeitintegration

Für die Zeitdiskretisierung werden die sogenannten Θ -Schemata verwendet, die auch als diagonal-implizite Runge-Kutta-Verfahren [118] aufgefasst werden können. Sie gehören in den Bereich gewöhnlicher Differentialgleichungen. Im Folgenden sei $f = f(t, x)$ eine in einem beschränkten Gebiet $G(t_0 \leq t \leq t_N, -\infty < x < \infty)$ definierte, vorgegebene Funktion. Gesucht ist eine wenigstens einmal differenzierbare Funktion $x = x(t)$, welche für $t_0 < t \leq t_N$ die Gleichung

$$x' = f(t, x)$$

erfüllt und im Punkt $t = t_0$ den gegebenen Anfangswert x_0 annimmt. Zur numerischen Lösung der in Kapitel 4 beschriebenen diskretisierten Gleichungen, wird zunächst ein Zeitintervall mit der Zeitschrittweite $\Delta t := t_{n+1} - t_n$ und den Zeitpunkten

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_N$$

betrachtet, innerhalb dessen das semidiskrete nichtlineare System (5.12) gelöst wird.

Die Steifigkeitsmatrix A ist mit $A = A(\mathbf{x}(t)) := A^t$ also auch zeitabhängig. Zur Vereinfachung der Notation wird der Index t von A^t , der den Zeitpunkt angibt, an dem die Matrix A aufgestellt wird, weggelassen.

Neben der Approximation ist die Stabilität der Verfahren von großer Bedeutung, die beide auch gerade im Hinblick auf turbulente Strömung im Folgenden untersucht werden sollen.

5.1.1. Zeitschemata

Beim *Einschritt- Θ -Schema* wird ein Wert bestehend aus implizitem und explizitem Anteil zum Fortschreiten in der Zeit verwendet und lautet mit dem Parameter $\Theta \in \mathbb{R}$, $\Theta \in [0, 1]$:

$$M \frac{\mathbf{x}^{t_{n+1}} - \mathbf{x}^{t_n}}{\Delta t} + \Theta A \mathbf{x}^{t_{n+1}} + (1 - \Theta) A \mathbf{x}^{t_n} = \Theta b^{t_{n+1}} + (1 - \Theta) b^{t_n}. \quad (5.1)$$

Mit $\Theta = 0$ entspricht (5.1) dem expliziten und mit $\Theta = 1$ dem impliziten Rückwärts-Euler-Verfahren. Mit $\Theta = 0.5$ erhält man das Crank-Nicholson Verfahren. Da die Massenmatrix im Druck singular ist, entspricht die Divergenzfreiheit

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{t_{n+1}} = 0 \quad (5.2)$$

einer Nebenbedingung, die zu erfüllen ist. Das Verfahren ist generisch implizit, da auch im rein expliziten Fall $\Theta = 0$ zwar das Geschwindigkeitsfeld sich explizit fortpflanzt, die Nebenbedingung (5.2) aber die Lösung eines impliziten Gleichungssystems verlangt.

Ein *Zweischritt- Θ -Schema* oder auch *Alexander-Schema* [4] ist ein zweimaliges Ausführen eines *Einschritt- Θ -Schemas*, wobei der Zeitschritt in Subintervalle δt mit $\sum_{i=1}^2 \delta t_i = \Delta t$ eingeteilt wird, und mit $\Theta_1 = \sqrt{2} - 1$, $\Theta_2 = 1$ und $\delta t_1 = 1/\sqrt{2}\Delta t$, $\delta t_2 = (1 - 1/\sqrt{2})\Delta t$ definiert ist durch:

$$\begin{aligned} M \frac{\mathbf{x}^{t_n+\delta t_1} - \mathbf{x}^{t_n}}{\delta t_1} + \Theta_1 A \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1} + (1 - \Theta_1) A \mathbf{x}^{t_n} &= \Theta_1 b^{t_n+\delta t_1} + (1 - \Theta_1) b^{t_n} \\ M \frac{\mathbf{x}^{t_{n+1}} - \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1}}{\delta t_2} + \Theta_2 A \mathbf{x}^{t_{n+1}} + (1 - \Theta_2) A \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1} &= \Theta_2 b^{t_{n+1}} + (1 - \Theta_2) b^{t_n+\delta t_1} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Das *Teilschritt- Θ -Schema* besteht aus drei Schritten und geht auf [58, 27] zurück und wird beispielsweise in [106] beschrieben. Es ist analog zu (5.3) mit $\sum_{i=1}^3 \delta t_i = \Delta t$ folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} M \frac{\mathbf{x}^{t_n+\delta t_1} - \mathbf{x}^{t_n}}{\delta t_1} + \Theta_1 A \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1} + (1 - \Theta_1) A \mathbf{x}^{t_n} &= \Theta_1 b^{t_n+\delta t_1} + (1 - \Theta_1) b^{t_n} \\ M \frac{\mathbf{x}^{t_n+\delta t_1+\delta t_2} - \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1}}{\delta t_2} + \Theta_2 A \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1+\delta t_2} + (1 - \Theta_2) A \mathbf{x}^{t_n+\delta t_1} &= \\ &= \Theta_2 b^{t_n+\delta t_1+\delta t_2} + (1 - \Theta_2) b^{t_n+\delta t_1} \\ M \frac{\mathbf{x}^{t_{n+1}} - \mathbf{x}^{t_{n+1}-\delta t_3}}{\delta t_3} + \Theta_3 A \mathbf{x}^{t_{n+1}} + (1 - \Theta_3) A \mathbf{x}^{t_{n+1}-\delta t_3} &= \\ &= \Theta_3 b^{t_{n+1}} + (1 - \Theta_3) b^{t_{n+1}-\delta t_3}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

wobei $\Theta_1 = \Theta_3 = 2 - \sqrt{2}$, $\Theta_2 = \sqrt{2} - 1$ und $\delta t_1 = \delta t_3 = (1 - 1/\sqrt{2})\Delta t$, $\delta t_2 = (\sqrt{2} - 1)\Delta t$.

Führt man die approximierte Größe $\tilde{\mathbf{x}}^j$ (am Zeitpunkt t_j) ein, so kann das entsprechend der Schemata zu lösende System formal folgendermaßen geschrieben werden:

$$\text{Einschritt-Schema:} \quad F_{\Theta}^{j,j-1}(\tilde{\mathbf{x}}^{j-1}, \tilde{\mathbf{x}}^j) = 0 \quad (5.5)$$

$$\text{Zweischritt-Schema:} \quad F_{\Theta}^{j,j-1}(\tilde{\mathbf{x}}^{j-1}, \tilde{\mathbf{x}}^{j-1+\Theta}, \tilde{\mathbf{x}}^j) = 0 \quad (5.6)$$

$$\text{Dreischritt-Schema:} \quad F_{\Theta}^{j,j-1}(\tilde{\mathbf{x}}^{j-1}, \tilde{\mathbf{x}}^{j-1+\Theta}, \tilde{\mathbf{x}}^{j-\Theta}, \tilde{\mathbf{x}}^j) = 0. \quad (5.7)$$

5.1.2. Approximation und Stabilität

Zur Bewertung der Qualität eines Zeitschrittschemas ist zunächst die Approximationsordnung ($\Delta t \rightarrow 0$) zu erwähnen. Nachzulesen beispielsweise in [62] ist das Euler-Schema konsistent erster Ordnung, wohingegen das Crank-Nicholson-, Alexander- und Teilschritt- Θ -Schema konsistent zweiter Ordnung sind.

Im Folgenden bezeichne \mathbf{x}^n den Lösungsvektor zum Zeitpunkt $t = t_n$. Neben der Approximationsordnung ist auch die Stabilität ($\Delta t \rightarrow \infty$) eines Verfahren von fundamentaler Bedeutung. Ein Schema verhält sich numerisch stabil (kontraktiv), wenn mit der Konstanten $0 < \kappa < 1$

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \tilde{\mathbf{x}}^{n+1}\| \leq \kappa \|\mathbf{x}^n - \tilde{\mathbf{x}}^n\| \quad (5.8)$$

gilt, wobei $\tilde{\mathbf{x}}^n, \mathbf{x}^n$ die von demselben Schema erzeugten Näherungswerte zu verschiedenen Anfangswerten sind. Prinzipiell hängt \mathbf{x}^{n+1} in komplizierter Weise von \mathbf{x}^n ab, so dass mit einfachen Mitteln (5.8) nicht überprüft werden kann. Um aber eine quantifizierbare Aussage diskreter

Schemata zu erhalten, wendet man diese auf eine skalare Testgleichung an und erhält nach entsprechender Umformung den Stabilitätsfaktor mit der Ordnung r (Notation und Herleitung siehe Anhang A.1):

$$R(\Delta tq) = e^{\Delta tq} + \mathcal{O}(\Delta t^{r+1}), q \in \mathbb{C}, \quad (5.9)$$

der eine Approximation der Exponentialfunktion darstellt. Mit $\lambda := q\Delta t$ heißt ein Verfahren *A-stabil*, wenn

$$|R(\lambda)| \leq 1 \quad \forall \lambda \text{ mit } \operatorname{Re}\lambda < 0$$

gilt. Das Verfahren liefert für alle komplexen λ mit negativem Realteil bei beliebiger Zeitschrittweite Δt eine monoton fallende Folge von Näherungen. Ein verfahren heißt *stark A-stabil*, wenn

$$|R(\lambda)| < 1 \quad \forall \lambda \text{ mit } \operatorname{Re}\lambda < 0$$

gilt. Ein Verfahren ist *streng A-stabil* (auch *L-stabil* genannt), wenn dieses A-stabil ist und zusätzlich

$$\lim_{\operatorname{Re}\lambda \rightarrow -\infty} R(\lambda) = 0$$

gilt. Eine weitere wichtige Eigenschaft ist durch

$$|R(\lambda)| = 1 - \mathcal{O}(|\operatorname{Im}\lambda|) \quad \text{mit } \lambda \rightarrow 0 \quad (5.10)$$

definiert und besagt, wie stark im Ort oszillierende Lösungen gedämpft werden (Energie-Erhaltung).

Entsprechend diesen Kategorien ist das implizite Euler-Verfahren zwar streng *A-stabil*, besitzt aber mit der einfachen Ordnung dissipativen Charakter. Zusätzlich dämpft das Verfahren oszillierende Lösungen auch bei kleinen Zeitschrittweiten. Gemäß A.3 gilt $|R(\operatorname{Im}\lambda)| = \frac{1}{1-\lambda} = 1$ für $\lambda \rightarrow 0$.

Im Gegensatz dazu ist das Crank-Nicholson-Schema konsistent zweiter Ordnung, aber nur *A-stabil*, da $\lim_{\operatorname{Re}\lambda \rightarrow -\infty} R(\lambda) = 1$. Werden große Zeitschritte verwendet, so ist dieses Verfahren zumindest für oszillierende Lösungen ungeeignet, da in (A.2) der Verstärkungsfaktor exponentiell abfallen müsste. Für kleine Zeitschrittweiten gibt es gar keine Dämpfung: $|R(\operatorname{Im}\lambda)| = 1$ für $\operatorname{Re}\lambda \rightarrow 0$, die Energie wird hier voll erhalten [105].

Das Alexander- und das Teilschritt- Θ -Schema sind beide zweiter Ordnung konsistent und streng *A-stabil*. Sie besitzen eine geringe Dissipation und sind den oben genannten Verfahren überlegen. Hinsichtlich der Genauigkeit entspricht ein Zyklus des Teilschritt- Θ -Verfahrens in etwa drei Crank-Nicholson-Schritten [106, 62].

5.1.3. Numerisches Ergebnis

In Abbildung 5.1 sind am Beispiel einer Scherströmung mit CFL=5 die Spektren $\mathcal{H}(f)$ (siehe (3.38) in Kapitel 3.5) der kinetischen Energie (L_2 -Norm der Geschwindigkeiten) für die Geschwindigkeiten dargestellt, die einmal durch das Rückwärts-Euler, das DIRK und Teilschritt- Θ -Verfahren berechnet wurden.

Da der nichtlineare Löser beim Crank-Nicholson-Verfahren nicht mehr konvergierte, ist diese Lösung nicht dargestellt. Wie auch in anderen numerischen Experimenten bestätigt, dämpft erwartungsgemäß das Euler-Verfahren gerade die in der Turbulenz auftretenden Oszillationen, wohingegen das Alexander- und Teilschritt- Θ -Schema das Spektrum besser auflösen. Sie weisen außerdem ähnlichen Charakter auf. Für dieses Modellproblem wurde auch die maximal erreichbare CFL-Zahl, bei der der nichtlineare Löser noch konvergiert, in Abhängigkeit des Schemas bestimmt und in Tabelle 5.1 dargestellt.

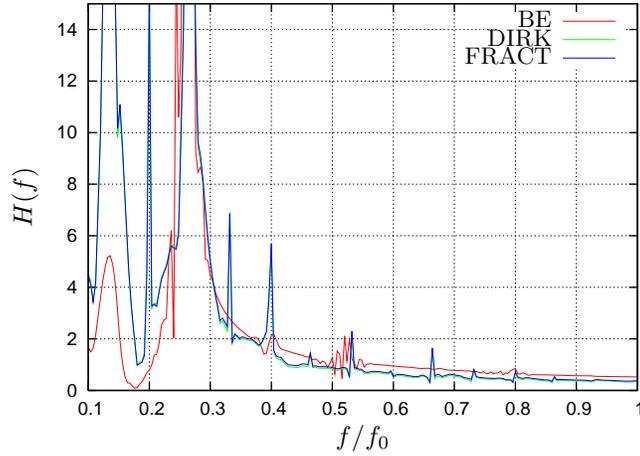


Abbildung 5.1.: Frequenzspektrum der kinetischen Energie beim Rückwärts-Euler (BE), Alexander (DIRK) und Teilschritt- Θ (FRACT).

Schema	Δt_{\max}	CFL_{\max}
Backward Euler	2.56	44.4
DIRK	1.28	24.9
Teilschritt- Θ	0.64	12.7
Crank Nicholson	0.04	0.6

Tabelle 5.1.: Maximale Zeitschrittweiten und CFL-Zahlen

Dass die größte Zeitschrittweite mit dem Euler-Verfahren erzielt wird, liegt an der niedrigen Ordnung und der damit verbundenen hohen Dissipation. Das Crank-Nicholson scheint für oszillierende Lösungen ungeeignet zu sein, da nur für sehr kleine Zeitschrittweiten der nichtlineare Löser konvergiert. Das Teilschritt- Θ - und das Alexander-Schema ermöglichen große Zeitschrittweiten¹. Da das Alexander-Schema nur zweimal das nichtlineare Problem löst, das Teilschritt- Θ -Schema aber dreimal, wird in den folgenden Rechnungen das Alexander-Schema bevorzugt verwendet.

5.1.4. Explizit versus Implizit

Eine zentrale Frage in der numerischen Strömungssimulation beschäftigt sich damit, ob für die Zeitintegration explizite oder implizite Verfahren verwendet werden sollen.

Wird nun eine neu zu bestimmende Lösung \mathbf{x}^{n+1} mit Hilfe bekannter Lösungen bestimmt,

$$\mathbf{x}^{n+1} = f(t, \mathbf{x}^n)$$

so spricht man von rein *expliziten* Verfahren, wobei f den Integranden darstellt. Im Gegensatz dazu heißt ein Verfahren *implizit*, wenn die neu zu bestimmende Lösung von dieser selbst abhängt:

$$\mathbf{x}^{n+1} = f(t, \mathbf{x}^{n+1}),$$

¹Die nichtlineare Konvergenz ist kein direktes Kriterium für die Güte eines Zeitschrittverfahrens. Da die nichtlinearen Iterationen einen hohen Aufwandsanteil am Gesamtverfahren einnehmen, ist eine diesbezügliche Bewertung von Interesse.

wobei hier ein lineares Gleichungssystem gelöst werden muss. Semi-implizite Verfahren, wie sie typischerweise bei den druckbasierten Formulierungen vorkommen, lösen einen Teil der algebraischen Gleichungen implizit und einen Teil explizit.

Explizite Verfahren unterliegen der Einschränkung, dass für die CFL-Zahl (4.5) $CFL < 1$ gelten muss, im Gegensatz zu impliziten Verfahren, bei der diese Einschränkung nicht gilt.

Desweiteren ist ein Verfahren relativ stabil, wenn die Oszillationen für $\Delta t \rightarrow \infty$ klein sind.

Soll nun ein Vorgang zeitgenau erfasst werden, so bestimmt die charakteristische Zeitskala des vorliegenden physikalischen Problems entsprechend die Zeitschrittweite. Die CFL-Zahl wird dann mit gegebener räumlicher Auflösung bestimmt und liefert die Antwort, ob ein explizites Verfahren stabil ist.

Soll auf der anderen Seite ein quasi-stationärer Zustand durch Zeitintegration erreicht werden, so sind impliziten Verfahren mit entsprechend großen Zeitschrittweiten der Vorzug zu geben.

Bei komplexen Geometrien ist die Zeitschrittweitenbeschränkung bei expliziten Verfahren häufig sehr restriktiv. Erfordert beispielsweise eine einspringende Ecke eine hohe Gitterauflösung bzw. eine kleine Gitterweite, so muss sich das Gesamtverfahren nach diesen lokalen Gitterweiten richten.

Bei turbulenten Strömungen werden häufig explizite Verfahren verwendet. Dies liegt teilweise darin begründet, dass die häufig verwendeten Druckkorrekturverfahren² nur für die Druckkorrektur ein Gleichungssystem, das aus der Diskretisierung des Laplace-Operators entstanden ist, gelöst werden muss. Hierbei kann auf Standard-Lösungsverfahren wie das Gauss-Seidel-Verfahren bzw. entsprechende präkonditionierte Krylov-Unterraum-Verfahren zurückgegriffen werden. Aber auch Mehrgitterverfahren mit Standardglättern bieten sich für diesen Operator an. Bei voll impliziten Verfahren kommen demgegenüber zusätzlich die diskretisierten konvektiven bzw. Reaktionsterme hinzu, die auf ein u.U. schwer zu lösendes Gleichungssystem führen. Die dafür notwendigen robusten Lösungsverfahren, wenn es sie überhaupt gibt, sind wesentlich aufwendiger zu implementieren.

Desweiteren wird das Argument angeführt, dass die turbulenten Zeitskalen stets so klein sind, dass das CFL-Kriterium nicht verletzt wird. Choi et al. zeigen in [31] allerdings, dass bei einer DNS auch große Zeitschrittweiten (bis $CFL = 5$) die turbulenten Fluktuationen auflösen können. Bezüglich der numerischen Eigenschaften sind bei steifen Gleichungssystemen, die explizit gelöst werden, wegen der Stabilität sehr kleine Zeitschritte erforderlich. Implizite Verfahren sind hier üblicherweise vorzuziehen [60].

Die Frage, ob explizite oder implizite Verfahren vorzuziehen sind, hängt von der verwendeten Diskretisierung, der Eigenschaft des Gleichungssystems und des gestellten Problems und des Lösungsverfahrens ab. Dies wurde bezogen auf die LES von Ertem-Müller in [42] gezeigt. Er zeigt an Hand numerischer Simulationen, dass bei einer turbulenten Kanalströmung die numerische Effizienz eines expliziten Verfahrens höher ist als die eines impliziten Verfahrens. Bei einer turbulenten Zylinderumströmung allerdings ist das implizite Verfahren effizienter.

Bei den hier durchgeführten Simulationen werden ausschließlich voll implizite Verfahren verwendet.

Implizite Verfahren bei DNS

Bei turbulenten Strömungen ohne Turbulenzmodell bestimmen die Kolmogorovschen Skalen sowohl die erforderliche Zeit- als auch Raumauflösung. Wie bereits in Abschnitt 3.3.2 beschrieben,

²Ein Beispiel dafür ist das von Patankar aus dem Jahre 1972 stammende SIMPLE-Verfahren [125].

sind die Kolmogorovschen Skalen folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} l_k &= l_0 Re^{-1/2} \\ t_k &= t_0 Re^{-3/4}. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Bei einer DNS müssen diese Skalen also auch numerisch aufgelöst werden; es gilt

$$h := l_k \quad \text{und} \quad \Delta t := t_k.$$

Werden nun die beiden Gleichungen in (5.11) in (4.5) eingesetzt so folgt mit $u_0 := |\mathbf{u}|$

$$CFL = \frac{u_0 t_0}{l_0 Re^{1/4}}.$$

Werden die Referenzlänge l_0 und Referenzzeit t_0 als konstant angenommen, dann wächst die CFL-Zahl mit n -mal größer werdender Referenzgeschwindigkeit und somit entsprechender größerer Reynoldszahl gemäß

$$\mathcal{O}(n^{3/4}).$$

Wird bspw. die Referenzgeschwindigkeit u_0 und somit die Reynoldszahl verdoppelt, so vergrößert sich die CFL-Zahl um $2^{3/4} \approx 1.68$. Implizite Verfahren werden bei der DNS insbesondere mit höher werdenden Reynoldszahlen u.U. attraktiv. Werden Turbulenzmodelle verwendet, so muss prinzipiell bei $CFL > 1$ auch ein Modell für die Zeit eingesetzt werden (siehe nächsten Abschnitt 5.1.5).

5.1.5. Filterung und die CFL-Zahl

Prinzipiell kann nicht davon ausgegangen werden, dass bei der Modellierung der kleinen Strukturen sowohl die räumlichen als auch die zeitlichen Eigenschaften gleichermaßen reproduziert werden. In fast allen LES-Rechnungen wird aber nur die räumliche Filterung berücksichtigt, es wird also kein Zeitmodell eingesetzt. Allerdings zeigen Carati und Wray in [30], dass der Einfluss der Zeitfilterung bei reinen Viskositätsmodellen sehr und bei Skalenähnlichkeitsmodellen immer noch recht klein ist. In dieser Analyse wird leider nicht auf die CFL-Zahl eingegangen, die nach Meinung des Autors eine wichtige Rolle spielt. Man betrachte die Skalen in der Zeit und im Raum und gehe davon aus, dass bei einer Filterung im Raum auch die zu den gefilterten räumlichen Strukturen gehörenden Zeitskalen wegfallen. Wird nun eine Zeitschrittweite gewählt mit $CFL \leq 1$, so werden die räumlichen Strukturen auch alle zeitlich aufgelöst. Im Gegensatz dazu werden mit $CFL > 1$ die auf dem Gitter dargestellten Skalen nicht mehr zeitlich aufgelöst. Bei laminarer Strömung und stark A-stabilen Zeitschemata (siehe Abschnitt 5.1.2) geht hierbei auch bei großen CFL-Zahlen keine Information verloren. Bei turbulenter Strömung hingegen geht sehr wohl Information verloren. Die nicht mehr aufgelösten zeitlichen Skalen müssen auch modelliert werden. In dieser Arbeit wird keine explizite Zeitfilterung durchgeführt und somit auch kein Modell diesbezüglich besprochen bzw. eingesetzt. Es sei lediglich darauf hingewiesen, dass mit zunehmender CFL-Zahl auch die Notwendigkeit eines Zeitmodells größer wird. Dies ist auch der Grund, weswegen in den meisten durchgeführten Rechnungen die CFL-Zahl bezüglich der Zeitschrittweite nicht maximiert wird.

5.2. Nichtlinearer Löser

Wird die im Druck singuläre Massenmatrix M , die rechte Seite \mathbf{r} , der Lösungsvektor

$$\mathbf{x} = [\mathbf{u}, p, \theta]^T, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n,$$

und der nichtlineare Operator $A(\mathbf{x})$ eingeführt, so lässt sich (4.2) kompakt als

$$M\dot{\mathbf{x}} + A(\mathbf{x}) = \mathbf{r} \quad (5.12)$$

darstellen, mit dem nichtlinearen Defekt

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) := M\dot{\mathbf{x}} + A(\mathbf{x}) - \mathbf{r} = 0,$$

wobei $\dot{\mathbf{x}}$ die Zeitableitung beinhaltet.

Die Herleitung des Newton-Verfahrens kann auf unterschiedliche Weisen gezeigt werden [139, 23]. Hier wird dem Ansatz von Knabner und Angermann [80] gefolgt. Die Funktion $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ wird durch eine einfache Funktion $\mathbf{G}(\mathbf{x})$, die $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ in der Nähe von \mathbf{x}^0 approximiert und deren Nullstelle bestimmt, ersetzt. Es wird dann \mathbf{x}^1 als die Lösung von $\mathbf{G}(\mathbf{x}) = 0$ bestimmt. Man entwickelt zunächst $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ um \mathbf{x}^0 in einer Taylorreihe und bricht nach dem linearen Term ab. Es folgt mit der Jacobi-Matrix $J(\mathbf{x}) := \nabla \mathbf{F}(\mathbf{x})$, wobei vorausgesetzt, dass $J(\mathbf{x})$ nicht singulär ist:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^0) + J(\mathbf{x}^0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0) + \mathcal{O}((\mathbf{x} - \mathbf{x}^0)^2).$$

Die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$J(\mathbf{x}^0)(\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)$$

lautet dann

$$\mathbf{x}^1 := \mathbf{x}^0 - J(\mathbf{x}^0)^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}^0).$$

Mit der Korrektur $\mathbf{c}^k := \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$ lautet der k -te Iterationsschritt des Newton-Verfahrens daher:

$$J^k \mathbf{c} = -\mathbf{d}^k, \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}, \quad (5.13)$$

das noch zu lösen ist (die entsprechenden linearen Lösungsverfahren werden im nächsten Abschnitt 5.3 beschrieben). Das Newton-Verfahren besitzt eine quadratische Konvergenzordnung, d.h. die Folge $(\mathbf{x}^k)_k$ mit der Konvergenzordnung $p = 2$ konvergiert in der Norm $\|\cdot\|$ gegen den Fixpunkt \mathbf{x} , wenn

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|}{\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}\|} = 0.$$

Da keine volle Newton-Linearisierung zum Einsatz kommt, kann wie in Abschnitt 4.1 bereits erwähnt, maximal eine lineare Konvergenzrate erwartet werden. Es gilt dann mit der Konstanten C mit $0 < C < 1$

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}\| \leq C\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}\|.$$

Um eventuelle Konvergenzprobleme zu umgehen, kann das nichtlineare Iterationsverfahren mit dem Parameter $\lambda \in (0, 1]$ gedämpft werden:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda \mathbf{c}.$$

Es wird also nicht die volle Korrektur sondern nur ein Teil davon zur Bestimmung der neuen Iterierten herangezogen. Der Dämpfungsparameter kann optimal durch eine Liniensuche bestimmt werden. Durch das Kriterium

$$r = \frac{\|\mathbf{d}^{k+1}\|}{\|\mathbf{d}^k\|} < \epsilon, \quad \epsilon < 1,$$

mit entsprechend vorgegebener Toleranz ϵ , kann zukzessive, beginnend mit $\lambda = \lambda_{max}$, die Dämpfung erhöht werden, bis entweder der minimale Dämpfungsparameter oder die vorgegebene nichtlineare Defektreduktion erreicht ist.

5.3. Lineare Lösungsverfahren

Ausgangspunkt ist das aus der in Kapitel 4 beschriebenen Diskretisierung und Linearisierung des partiellen Differentialgleichungssystems (3.14) resultierende Gleichungssystem in der Defektformulierung (5.13). Um zur gewohnten Notation bei linearen Gleichungssystemen übergehen zu können, wird die lösungsbasierte Formulierung verwendet. Mit der Steifigkeits- oder auch Systemmatrix (Jacobi-Matrix) $J =: A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, dem Lösungsvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ und der rechten Seite $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ lautet das zu lösende lineare Gleichungssystem schließlich:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \quad (5.14)$$

Eine Invertierung von (5.14) erfordert nach dem klassischen Gauß-Eliminationsverfahren $N = \frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3}$ Divisions- und Multiplikationsoperationen und einen Speicherbedarf von $n^2 + n$ [65], wobei n die Anzahl der Unbekannten darstellt. Beträgt die Rechenzeit für eine Operation $1 \mu\text{sec}$, dann benötigt der Gauß-Algorithmus für $n = 10^3$ ca. 5 min und für $n = 10^4$ bereits 4 Tage. Obgleich es schnellere Verfahren für spezielle Matrizen wie das Cholesky-Verfahren für positiv-definite Matrizen gibt, sind direkte Verfahren für die hier auftretenden Jacobi-Matrizen nur für kleine n einsetzbar. Es sei noch angemerkt, dass die aus FVM/FEM/FDM resultierenden Matrizen schwachbesetzt sind, d.h. die Anzahl der Einträge pro Zeile ist konstant klein, also auch unabhängig von n . Bei großen Systemmatrizen, wie sie auch hier vorkommen, sind iterative Lösungsverfahren erforderlich. Hierbei wird unterschieden zwischen klassischen Iterationsverfahren, die auf einer regulären Aufspaltung der Matrix A basieren, den Mehrgitterverfahren, die klassische Iterationsverfahren und Gitterhierarchien zur Konvergenzbeschleunigung kombinieren, und den Krylov-Unterraum-Verfahren, bei denen zur Lösung des Gleichungssystems Orthogonalitäten der Lösungsvektoren zu Unterräumen ausgenutzt werden. Die klassischen Iterationsverfahren wiederum werden in additive und multiplikative Aufspaltungen eingeteilt, wobei erstere auf beispielsweise das Jacobi- oder Gauß-Seidel-Verfahren, und letztere auf die unvollständige Dreieckszerlegung (ILU) führen. Die Verfahren werden weiter unten näher beschrieben.

Unter einem linearen Iterationsverfahren $\phi(\mathbf{x}^m, \mathbf{b})$ zur Lösung von (5.14) versteht man eine Iteration der Form (zweite Normalform [65])

$$\mathbf{x}^{m+1} := \mathbf{x}^m + C(\mathbf{b} - \mathbf{Ax}^m), \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (5.15)$$

mit einem beliebigen Startvektor $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ und einer vom Iterationsschritt m unabhängigen Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Diese werden *Approximative* zu A^{-1} bzw. *Präkonditionierer* genannt und typischerweise so gewählt, dass $C \approx A^{-1}$ gilt. Das lineare Iterationsverfahren ist dann konvergent, wenn für den Spektralradius $\rho(M)$ der Iterationsmatrix $M := I - CA$ gilt:

$$\rho(M) < 1, \quad (5.16)$$

wobei die Invertierbarkeit von C notwendig ist. Anschaulich kann dies gezeigt werden, indem das Iterationsverfahren mit der exakten Lösung \mathbf{x}^* im Fehler $\mathbf{e}^k := \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*$ durch die Subtraktion der Iterationsvorschrift in der ersten Normalform

$$\mathbf{x}^{m+1} = M\mathbf{x}^k + N\mathbf{b}$$

von der Fixpunktgleichung

$$\mathbf{x}^* = M\mathbf{x}^* + N\mathbf{b}$$

abgezogen folgendermaßen formuliert wird:

$$\mathbf{e}^{m+1} = M\mathbf{e}^k. \quad (5.17)$$

Die Fixpunktgleichung setzt ein konsistentes Verfahren im Sinne von

$$\mathbf{x}^* = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{x}^m = \lim_{m \rightarrow \infty} \phi(\mathbf{x}^{m-1}, \mathbf{b})$$

voraus.

Die Forderung (5.16) für ein konvergentes Verfahren kann anschaulich folgendermaßen gezeigt werden. Besitzt die Iterationsmatrix M n linear unabhängige Eigenvektoren $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ mit den dazugehörigen Eigenwerten $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ so kann der Fehler \mathbf{e}^0 durch

$$\mathbf{e}^0 = c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \mathbf{v}_n \quad (5.18)$$

dargestellt werden. Mit (5.18) in die Iterationsvorschrift (5.17) eingesetzt folgt:

$$\mathbf{e}^m = M^m \mathbf{e}^0 = c_1 \lambda_1^m \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2^m \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \lambda_n^m \mathbf{v}_n.$$

Für eine beliebigen Start- und somit Fehlervektor gilt $\mathbf{e}^m = 0$ für $k \rightarrow \infty$ nur dann, wenn $|\lambda_i| < 1$, $i = 1, \dots, n$ und folglich $\rho(M) < 1$ (Beweis siehe [91, 65]).

5.3.1. Klassische Iterationsverfahren (additive Abspaltung)

Im Folgenden werden die drei bekanntesten klassischen Iterationsverfahren besprochen: das Jacobi-, Gauß-Seidel- und SOR-Verfahren. Diese fallen in die Klasse der additiv aufspaltbaren linearen Iterationsverfahren.

Ausgangspunkt ist das lineare Gleichungssystem $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ und die additive Aufspaltung der Systemmatrix A in $A = W - R$ (W regulär). Eingesetzt ergibt sich ein äquivalentes Gleichungssystem $W\mathbf{x} = R\mathbf{x} + \mathbf{b}$ woraus sofort das Iterationsverfahren

$$W\mathbf{x}^{m+1} = R\mathbf{x}^m + \mathbf{b}$$

gewonnen werden kann. Die Matrizen der ersten Normalform

$$\mathbf{x}^{m+1} = M\mathbf{x}^m + N\mathbf{b}$$

lauten $M = W^{-1}R$ bzw. $N = W^{-1}$. Beim *Jacobi-Verfahren* (auch Gesamtschrittverfahren genannt) wird die Systemmatrix in eine Diagonalmatrix $D := \text{diag}(A)$ und eine Restmatrix $R = L + U$ aufgespalten, wobei L die strikte untere und U strikte obere Dreiecksmatrix von A ist. Für die Iterationsmatrix folgt schließlich

$$M^{jac} = -D^{-1}(L + U), \quad N^{jac} = D^{-1}.$$

Das Jacobi-Verfahren ist dann wohldefiniert wenn für die Matrixeinträge $a_{ii} \neq 0$ gilt. Außerdem hängt dieses Verfahren nicht von der Indexanordnung der Matrix ab. Ein Index einer Vektorkomponente b_i stellt die Zuordnung zu einem Freiheitsgrad eines Finiten Elementes dar. Wegen der numerischen Behandlung der Freiheitsgrade (Ansatzraum) existiert in natürlicherweise für jede Vektorkomponente ein Indexpaar. Interessant ist die Unabhängigkeit des Verfahrens von der Indexanordnung besonders für die Parallelisierung. Beim Jacobi-Verfahren können die einzelnen Partitionen unabhängig abgearbeitet werden. Die hier angewendeten auch parallelen Lösungsverfahren werden partitionsbezogen stets mit dem Jacobi-Verfahren gelöst. Die einzelne Partition selbst wird typischerweise mit dem weiter unten näher beschriebenen ILU-Verfahren gelöst. Je kleiner die Partitionen werden, desto mehr nähert sich das Verfahren dem Jacobi-Verfahren. Demgegenüber hängt das *Gauß-Seidel-Verfahren* von der Indexanordnung ab. Beim Gauß-Seidel-Verfahren (auch Einzelschrittverfahren genannt) wird zunächst die Matrix A wieder in

eine strikte untere und strikte obere Dreiecksmatrix L bzw. U und in eine Diagonalmatrix D zerlegt. Analog zur Herleitung für das Jacobi-Verfahren lautet die Iterationsmatrix folgendermaßen:

$$M^{GS} = (D - L)^{-1}F, \quad N^{GS} = (D - L)^{-1}.$$

Sowohl das Jacobi- als auch das Gauß-Seidel-Verfahren kann durch die Einführung des skalaren Parameters $\vartheta \in \mathbb{R}_+$ gedämpft werden. Die gedämpfte zweite Normalform lautet:

$$\mathbf{x}^{m+1} = \mathbf{x}^m - \vartheta N(A\mathbf{x}^m - b), \quad \text{für } \vartheta < 1. \quad (5.19)$$

Für $\vartheta = 1$ erhält man das ungedämpfte Verfahren und für $\vartheta > 1$ das extrapolierte Verfahren. Das *SOR-Verfahren* (successive overrelaxation) resultiert aus der Extrapolation oder Überrelaxation der Einzelschritte. Zur einfacheren Darstellung wird die komponentenweise Schreibweise gewählt:

$$x_j^{m+1} = \omega x_j^{m+1}|_{GS} + (1 - \omega)x_j^m,$$

mit dem Relaxationsparameter $\omega \in (0, 2)$ und der Gauß-Seidel-Iterierten $x_j^{m+1}|_{GS}$.

Das Gauss-Seidel-Verfahren konvergiert in der Regel besser als das Jacobi-Verfahren, da für die Komponente x_i^{k+1} bereits aktuelle x_j^{k+1} für $j < i$ verwendet werden. Das SOR-Verfahren kann durch geeignete Wahl des Relaxationsparameters die Konvergenz deutlich beschleunigen [91].

5.3.2. Unvollständige Dreieckszerlegung (ILU)

Gegenüber der beschriebenen additiven Zerlegung wird beim ILU-Verfahren (Incomplete Lower and Upper) multiplikativ im Sinne von $A = LU$ zerlegt. Für schwachbesetzte Gleichungssysteme eignet sich diese Form der Zerlegung nicht, da die Faktoren L und U weit mehr Nichtnullelemente aufweisen als die Ausgangsmatrix A . Die zuerst von Varga in [130] und später mit Bezug auf das Mehrgitterverfahren von Wesseling und Kettler in [77, 140] eingeführte unvollständige LU-Zerlegung beruht nun auf der Idee, die Auffüllung der Matrix während des Eliminationsprozesses dadurch zu vermeiden, dass nicht mehr alle Matrixeinträge von A eliminiert werden. Die Gleichheit $A = LU$ gilt nur noch bis auf die Restmatrix R :

$$A = LU - R. \quad (5.20)$$

Zur exakten Beschreibung des Verfahrens müssen zunächst ein paar Begriffe eingeführt werden. Eine Teilmenge $G \subset I \times I$ aller Indexpaare (i, j) mit $I = \{1, 2, \dots, n\}$ heißt Graph. Der Graph $G(A)$ der Matrix A ist dann die Menge aller Indexpaare der Nichtnullelemente, für die gilt:

$$G(A) = \{(i, j) \in I \times I : a_{ij} \neq 0\}.$$

Für einen vorgegebenen Graphen G ist die ILU-Zerlegung definiert durch

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n l_{ij}u_{jk} &= a_{ik} & (i, k) \in G \\ l_{ij} &= u_{jk} = 0 & (i, k) \notin G. \end{aligned}$$

Definiert man $D := \text{diag}(U)$, $U' := U - D$, $L' := (L - \mathbb{I})D$ so sind L' eine strikte untere und U' eine strikte obere Dreiecksmatrix. Nun lässt sich (5.20) schreiben als

$$A = (D + L')D^{-1}(D + U') - R. \quad (5.21)$$

Nachdem durch (5.20) und (5.21) eine additive Zerlegung $A = W - R$ von A gegeben ist, kann die zugehörige ILU-Iteration definiert werden:

$$W(\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^{m+1}) = A\mathbf{x}^m - \mathbf{b} \quad \text{mit} \quad W = LU \text{ bzw. } W = (D + L')D^{-1}(D + U').$$

Die übrigen Matrizen in der ersten Normalform sind $M = NR$ mit $N = U^{-1}L^{-1}$. Bezüglich der Stabilität der ILU-Zerlegungen sei auf Wittum [142] verwiesen.

Werden Einträge a_{ij} mit $(i, j) \notin G$ nicht ersatzlos weggelassen, spricht man von modifizierten ILU-Zerlegungen. Es gibt verschiedenste Strategien die Restmatrix zu berücksichtigen. Eine Variante berücksichtigt Elemente in der Restmatrix, wenn diese einen vorgegebenen Schwellenwert überschreiten. Dieses Verfahren heißt *THILU* [109]. Desweiteren führen Bank et al. in [8] eine ILU-Variante ein, bei der Koeffizienten in der Restmatrix berücksichtigt werden, die Elementkanten auf größeren Gittern einer Mehrgitterhierarchie (Mehrgitterverfahren werden weiter unten besprochen) zugeordnet sind.

Eine andere wichtige Erweiterung ist das von Wittum in [143] speziell für singular-gestörte Systeme eingeführte robuste modifizierte ILU_β -Verfahren. Hierbei werden die Koeffizienten in der Restmatrix mit dem Faktor $\beta \in \mathbb{R}$ skaliert und auf D mit

$$D_\beta = \text{diag}\left\{d_i + \beta \sum_{j=1}^m |n_{ij}|\right\}$$

addiert. Das ILU_β -Verfahren lautet nun in Anlehnung an (5.20) und (5.21) folgendermaßen:

$$A = W_\beta - R_\beta \quad \text{mit} \quad W = (D_\beta + L')D_\beta^{-1}(D_\beta + U').$$

Mit $\beta = 0$ erhält man das ursprüngliche ILU-Verfahren. Mit $\beta = -1$ wird eine Verbesserung der Kondition erreicht. Mit $\beta > 0$ weist aufgrund der Dämpfung das Iterationsverfahren bessere Stabilitätseigenschaften auf.

Existenzaussagen der Zerlegung (5.21) gibt es für M -Matrizen³ und H -Matrizen⁴. Für allgemeine Matrizen gibt es Gegenbeispiele, bei der das ILU-Verfahren vorzeitig terminiert, weil eine Null auf der Diagonalen vorkommt, was zu einer Division durch Null führt. Trotzdem ist in der Praxis ein Abbrechen der Berechnung der Zerlegung üblicherweise nicht zu beobachten.

5.3.3. Konvergenzrate

Für positiv-definite Matrizen ($A > 0$) kann am Beispiel des Jacobi-Verfahrens die Konvergenz bewiesen werden:

Definition 1 (Konvergenz des Jacobi-Verfahrens für symmetrisch positiv-definite Matrizen). Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $A > 0$ und $2D - A > 0$, dann konvergiert das Jacobi-Verfahren streng monoton in der Energienorm

$$\rho(M^{jac}) = \|M^{jac}\|_A < 1.$$

Für den Beweis sei auf [72] verwiesen. Allgemein kann die Konvergenz der klassischen Iterationsverfahren für positiv definite Matrizen bewiesen werden. Für allgemein, nichtsymmetrische Matrizen ist die Frage der Konvergenz schwieriger zu beantworten. Eine Ausnahme in dieser Hinsicht bilden die M -Matrizen (siehe [18]).

³Eine M -Matrix besitzt nichtpositive Außerdiagonalelemente und eine Inverse, deren Elemente sämtlich nicht-negativ sind [60].

⁴Eine Matrix A mit positiven Diagonalelementen ist eine H -Matrix, wenn die Matrix \hat{A} mit den Elementen $\hat{a}_{ij} = -|a_{ij}|, i \neq j$, und $\hat{a}_{ii} = a_{ii}$ eine M -Matrix ist.

Die Konvergenzrate hängt, wie bereits erwähnt, von der Iterationsmatrix und somit von der Systemmatrix ab. Die Systemmatrix ist allerdings problemabhängig, weswegen keine allgemeinen Aussagen über die Geschwindigkeit der Konvergenz gemacht werden können. Allen genannten Verfahren ist allerdings gemein, dass sich die Konvergenzrate asymptotisch, also bei feiner aufgelösten Gittern ($h \rightarrow 0$), wie $1 - \mathcal{O}(h^2)$ verhält [26]. Beim SOR-Verfahren mit optimaler Parameterwahl kann bei der Poisson-Gleichung ein Konvergenzverhalten gemäß $1 - \mathcal{O}(h)$ gezeigt werden [18]. Wird das SOR-Verfahren als Prädiktionierer für Krylov-Unterraum-Verfahren (siehe Abschnitt 5.3.5) verwendet, verbessert sich die Konvergenzrate auf $1 - \mathcal{O}(\sqrt{h})$.

Die oben beschriebenen Iterationsverfahren verhalten sich alle h -abhängig, d.h. mit zunehmend feiner werdendem Gitter gilt $\rho \rightarrow 1$. Es zeigt sich, dass die schlechte Konvergenzrate auf die langwelligen, d.h. bezüglich einer Triangulierung τ_h relativ glatten Fehlerkomponenten zurückzuführen ist. Am Beispiel einer Laplace-Gleichung auf einem eindimensionalen, uniformen Gitter mit den Gitterpunkten ξ_0, \dots, ξ_n und den Randbedingungen $x(\xi_0) = x(\xi_n) = 0$ soll dies gezeigt werden. Das kontinuierliche Problem wird mit Finiten Differenzen diskretisiert und lautet in Stencil-Notation wie folgt:

$$\mathcal{L}x := h^{-2}[-1 \ 2 \ -1]x = 0, \quad (5.22)$$

wobei \mathcal{L} den Diskretisierungsoperator, h den Gitterparameter und $[-1 \ 2 \ -1]$ den Diskretisierungsstern bezeichnen.

Ausgangspunkt ist nun die Überlegung, wie ein spezielles iteratives Lösungsverfahren auf die einzelnen Komponenten einer beliebigen Anfangslösung wirkt. Hierfür wird der Diskretisierungsstern auf die trigonometrische Anfangslösung

$$x_j := x_j(\xi_j) = \sin\left(\frac{jk\pi}{n}\right), \quad 0 \leq j \leq n, \quad 1 \leq k \leq n-1,$$

mit der Vektorkomponente j und der Wellenzahl k angewendet:

$$[-1 \ 2 \ -1] \sin(jk\pi/n) = \sin(jk\pi/n)(4 \sin^2(k\pi/(2n))). \quad (5.23)$$

Wird vorausgesetzt, dass die Eigenwerte des Diskretisierungsoperators \mathcal{L} auf die gesamte Systemmatrix A übertragen werden können⁵, dann gilt

$$A_{ij}x_{i,k} = x_{j,k}\lambda_k. \quad (5.24)$$

Damit ist $x_{j,k}$ Eigenvektor zu den Eigenwerten λ_k . Dies gilt zumindest für hohe Frequenzen in jedem Fall, da der Einfluss der Randwerte vernachlässigbar ist [26]. Hier wird allerdings davon ausgegangen, dass die Aussage (5.24) für alle Frequenzen gilt. Sind die Eigenwerte der Systemmatrix bekannt, so gilt für die für die Konvergenz verantwortliche Iterationsmatrix unter Verwendung des gedämpften Jacobi-Verfahrens in der zweiten Normalform (5.19) und mit $n = 1/h$:

$$\lambda_k(M^{jac}) = 1 - N^{jac}\lambda_k(A) = 1 - \vartheta 2 \sin^2(k\pi h/2).$$

Für $\vartheta = 0.5$ und den glattesten Mod bzw. für die kleinste Wellenzahl $k = 1$ folgt

$$\lambda_1(M^{jac}) = 1 - \sin^2(\pi h/2) = 1 - \frac{1}{2}\pi^2 h^2 + \mathcal{O}(h^4) = 1 - \mathcal{O}(h^2). \quad (5.25)$$

Das gedämpfte Jacobi-Verfahren ist zwar in der Lage, die hochfrequenten aber nicht die niederfrequenten, langwelligen Anteile zu reduzieren. Die gleichen Untersuchungen können auch bezüglich des Gauß-Seidel oder SOR-Verfahrens durchgeführt werden. Die gezeigte quantitative spektrale Untersuchung wird auch als *Local Mode Analysis* bezeichnet und ist beispielsweise in [26] und [24] nachzulesen.

⁵Im Allgemeinen passen die Eigenvektoren der Systemmatrix nicht zu den Eigenwerten des Diskretisierungssterns, da typischerweise kein unendliches Gebiet bzw. periodische Randbedingungen betrachtet werden. Bei hochfrequenten Moden kann diese Einschränkung allerdings vernachlässigt werden.

5.3.4. Mehrgitterverfahren

Mehrgitteridee

Es ist festzuhalten, dass die beschriebenen Lösungsverfahren nur bez. einer Triangulierung τ_h die hochfrequenten Anteile reduzieren. Sie werden deswegen als Glätter bezeichnet. Die Darstellung der einzelnen Moden ist allerdings abhängig vom zugrunde liegenden Gitter. Eine Funktion ist langwellig auf einem feinen Gitter τ_l , aber kurzwellig auf einem groben Gitter τ_{l-i} , $i \in \mathbb{N}_{>0}$. Man führt nun eine Zweigitterhierarchie ein, auf deren feiner Gitterebene zunächst klassische Iterationsverfahren den hochfrequenten Anteil glätten und transferiert die geglättete Funktion auf das gröbere Gitter (Restriktion), wo diese durch die gröbere Auflösung aus Sicht des groben Gitters hochfrequente Anteile besitzt. Diese wird geglättet und auf das feine Gitter τ_l transferiert (Prolongation). Schließlich wird die ursprüngliche Funktion auf dem feinen Gitter τ_l korrigiert (Grobgitterkorrektur). Weitet man diesen Zweigitterzyklus auf mehrere Gitterebenen aus (Mehrgitter), wobei im günstigsten Fall auf dem größten Gitter direkt invertiert werden kann, so erhält man im optimalen Fall eine h -unabhängige Konvergenzrate. Für eine Einführung von Mehrgitterverfahren sei auf [64, 26, 18] verwiesen.

Es sei noch erwähnt, dass eine Konvergenzrate unabhängig von der Problemgröße N auch nur einen algorithmischen Aufwand von $\mathcal{O}(N)$ nach sich zieht. Obgleich dieser optimale Aufwand nur für skalare elliptische Probleme bewiesen werden konnte, wies z.B. Wittum [144] einen Aufwand von $\mathcal{O}(N2\nu)$ für die Stokes-Gleichung mit Hilfe eines transformierenden Glätters nach, wobei ν die Anzahl der Glättungsschritte darstellt. Zulehner [150] zeigte für eine Sattelpunktformulierung für das Stokes-Problem sogar einen Aufwand von $\mathcal{O}(N\nu)$. Robuste Mehrgitterverfahren für die Konvektions-Diffusions Gleichung wurden von Johannsen [72] und Probst [103] entwickelt.

Komponenten des Mehrgitters

Die Mehrgitteridee wird nun formalisiert. Es bedarf folgender Komponenten:

- Gitterhierarchie
- Transferrountinen zwischen den Gittern, um Funktionen bzw. Defekte zu übergeben
- Glätter
- Grobgitterlöser

Gitterhierarchie

Anstelle einer einzigen Triangulierung τ_h des Gebietes Ω ist für das Mehrgitterverfahren eine Folge von Triangulierungen $\{\tau_l\}_{l=0,\dots,L}$ erforderlich. Ausgehend von einer zulässigen Triangulierung τ_0 werden die feineren Gitter τ_l sukzessive mit l durch reguläre Verfeinerung der Elemente $K \in \tau_{l-1}$ erzeugt. Für Dreiecke bzw. Vierecke gibt Braess [23] folgende Definition:

Definition 2 (Zulässige Triangulierung). Sei $\tau_0 = \{K_0, K_1, \dots, K_n\}$ eine Triangulierung von Ω , so heißt die Triangulierung zulässig, wenn

1. $\bigcup_{i=1}^m T_i = \bar{\Omega}$
2. Ist $K_i \cap K_j$ genau ein Punkt, so ist dieser Punkt auch Ecke von K_i und K_j .
3. Besteht für $i \neq j$ die Menge $K_i \cap K_j$ aus mehr als einem Punkt, so ist $K_i \cap K_j$ sowohl Kante von K_i als auch von K_j .

Die Verwendung des Begriffs für dreidimensionale Gitter unterschiedlicher Elementtypen gibt Lang [85].

Eine reguläre Verfeinerung erzeugt aus einem zulässigem Gitter τ_l wiederum ein zulässiges Gitter τ_{l+1} , wobei eine Verfeinerung den Vorgang der Unterteilung eines Elements in Teilelemente gemäß einer Verfeinerungsregel bezeichnet.

Eine reguläre Verfeinerung für Dreiecke gibt Bastian [10] folgendermaßen an:

Definition 3 (Reguläre Verfeinerung). Alle Elemente der Ausgangstriangulierung τ_0 heißen regulär. $\tau_k = \{K_1^k, \dots, K_n^k\}$ entsteht aus τ_{k-1} unter Anwendung genau einer der folgenden Regeln für jedes Dreieck K aus τ_{k-1} .

1. K ist regulär und wird in vier kongruente Dreiecke durch Verbinden der Kantenmittelpunkte zerlegt. Die entstehenden Dreiecke heißen wieder regulär.
2. K ist regulär und wird in zwei Dreiecke durch Verbinden eines Kantenmittelpunktes mit der gegenüberliegenden Ecke zerlegt. Die entstehenden Dreiecke heißen irregulär.
3. K wird in τ_k unverändert übernommen. Das Dreieck heißt kopiert.
4. τ_k muss auch wieder alle Kriterien einer zulässigen Triangulierung erfüllen.

Da in dieser Arbeit sowohl adaptiv als auch uniform verfeinerte Gitter verwendet werden, seien diese Begriffe hier erläutert.

Man spricht von einer *uniformen* Verfeinerung, wenn Elemente immer nur regulär unterteilt werden. Die regulär verfeinerten Elemente werden auch als *rot* bezeichnet. Irregulär verfeinerte Elemente werden als *grün* bezeichnet. Diese Notation stammt von Bank et al. [7] und basiert auf der sogenannten *rot-grün-Verfeinerung*. Wird nur eine Teilmenge der Elemente $K \in \tau_l$ regulär verfeinert, kann durch sogenannte Abschlusselemente, die durch irreguläre Verfeinerung erzeugt werden, eine zulässige Triangulierung erzeugt werden. Bei adaptiven Verfeinerungen trifft dies zu und es treten sowohl regulär und irregulär verfeinerte Elemente als auch u.U. kopierte (gelb) Elemente auf. Eine umfangreiche Darstellung auf diesem Gebiet in zwei Dimensionen und drei Dimensionen stellen die Arbeiten von Bastian [10] bzw. Lang [85] dar.

Werden keine isoparametrischen Elemente betrachtet (siehe Projektion weiter unten), ist die durch reguläre Verfeinerung entstehende Folge von Triangulierungen *geschachtelt*

$$\tau_0 \subset \tau_1 \subset \dots \tau_L = \tau_h,$$

so dass unter Beibehaltung der Finite-Elemente-Ansätze⁶ auf jeder *Stufe* auch die endlichdimensionalen Räume

$$V_0 \subset V_1 \subset \dots V_L = V_h$$

geschachtelt sind. Bei lokal adaptiv verfeinerten Elementen mit durch irreguläre Verfeinerung entstehenden Abschlusselementen trifft dies nicht zu. Auch bei der Projektion der durch Verfeinerung neu entstehenden Knoten auf gekrümmte Ränder sind die Räume nicht mehr geschachtelt. Ein Beispiel einer sukzessiv durch uniforme Verfeinerung verbesserte Gebietsapproximation ist in Abbildung 5.2 dargestellt.

Durch die Einführung der Gitterhierarchie wird das Gleichungssystem (5.14) nun stets auf die Stufenzahl l bezogen:

$$A_l \mathbf{x}_l = \mathbf{b}_l. \tag{5.26}$$

⁶Die in Abschnitt 4 beschriebene Finite-Volumen-Diskretisierung kann auch als Finite-Elemente-Formulierung aufgefasst werden.

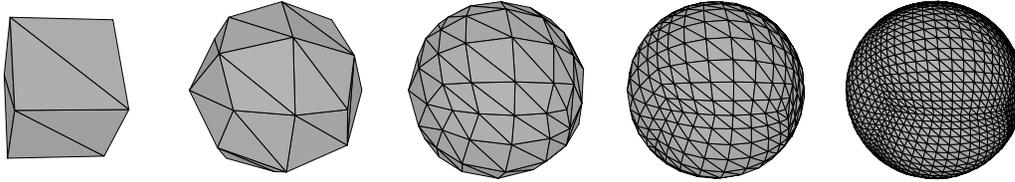


Abbildung 5.2.: Verbesserte Gebietsapproximation durch sukzessive durchgeführte reguläre Verfeinerung.

Gittertransfer

Zwischen den verschiedenen Stufen in (5.26) muss eine Verbindung hergestellt werden. Eine lineare, injektive Abbildung vom groben in das feine Gitter mit dem Operator p heißt *Prolongation*:

$$p : \mathbf{x}_{l-1} \rightarrow \mathbf{x}_l \quad l = 1, 2, \dots$$

Umgekehrt stellt ein Operator r eine surjektive Abbildung vom feinen in das grobe Gitter dar

$$r : \mathbf{x}_l \rightarrow \mathbf{x}_{l-1}$$

und heißt *Restriktion*. Bei geschachtelten Räumen existiert eine kanonische Wahl von Prolongation und Restriktion. Es kann jeder Vektor $\mathbf{v}_l \in V_l$ durch Linearkombination der Basisfunktionen des Ansatzraumes mittels eines Koeffizientenvektors $c_l \in \mathbb{R}^{n_{KP_l}}$ kombiniert werden:

$$\mathbf{v}_l = \sum_{k=1}^{n_{KP_l}} c_k N_k := I_l c_l.$$

Hierbei stellen n_{KP_l} die Anzahl der Knotenpunkte auf dem Gitter τ_l und N_k die knotenbasierte Ansatzfunktion dar. Andererseits lässt sich auch jeder Vektor $\mathbf{v} \in V_{l-1}$ durch die Ansatzfunktionen des feineren Raumes darstellen:

$$\mathbf{v}_{l-1} = I_l c_l.$$

Die Restriktion r lässt sich als Adungierte der Prolongation p schreiben:

$$r = p^*.$$

Im Falle der uniformen Verfeinerung und linearer Ansatzfunktionen hat die Matrix p die Form

$$p_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{Knoten } i \text{ und } j \text{ liegen an derselben geometrischen Position} \\ 0.5 & \text{Knoten } i \text{ liegt auf einer Kante dessen einer Endpunkt Knoten } j \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Neben diesen Gittertransferoperatoren gibt es noch weitere, die Einfluss auf die Konvergenz haben können. Beispielsweise besitzt die Restriktion durch einfache Injektion den geringsten Aufwand, da keine arithmetische Operation erforderlich ist. Bei einem Gauß-Seidel-Verfahren mit einer Schachbrett-Indexanordnung fällt aber bspw. im eindimensionalen Fall jeder zweite Punkt auf einem größeren Gitter weg, womit die beiden Probleme $A_l \mathbf{x}_l = \mathbf{b}_l$ und $A_{l-1} \mathbf{x}_{l-1} = \mathbf{b}_{l-1}$ unterschiedlich sind und die für die Konvergenz erforderliche *Approximationseigenschaft* (siehe weiter unten) verletzen.

Grobgitterlöser

Als Löser auf Stufe 0 kann bei kleiner Problemgröße die direkte Invertierung von $A_0 \mathbf{x}_0 = \mathbf{b}_0$ durch eine LU -Zerlegung durchgeführt werden. Bei komplexen geometrischen Problemstellungen ist das Grobgitter zu groß, um das daraus resultierende Gleichungssystem direkt zu lösen. Dann bieten sich die oben beschriebenen Glätter an, obgleich das inhärente Problem der schlechten Konvergenz nach wie vor vorhanden ist. Eine Alternative ist der SuperLU von Demmel et al. [36], der auch im Stande ist, sehr große Systeme aber dann iterativ pseudo-direkt zu invertieren. Diese Methode hat sich allerdings für die hier verwendeten Strömungsgleichungen als nicht ausreichend robust herausgestellt, weswegen das Grobgitterproblem hier iterativ gelöst wird. Es zeigt sich, dass bereits durch ein paar Glättungsschritte auf dem größten Gitter eine befriedigende Konvergenzrate für das Mehrgitterverfahren erzielt werden kann.

Mehrgitteralgorithmus

Die nun eingeführten Komponenten des Mehrgitterverfahrens werden in Form des im Pseudocode 1 dargestellten rekursiven Algorithmus' miteinander verbunden.

Algorithmus 1 (Das (γ, ν_1, ν_2) Mehrgitterverfahren). $MG(l, x_l, b_l)$

- | | |
|---|-------------------------------|
| (1) if $l = 0$ | |
| (2) $x_0 = A_0^{-1} b_0$ | Lösung des Grobgitterproblems |
| (3) else | |
| (4) $x_l = S^{\nu_1}(x_l, b_l)$ | Vorglättung |
| (5) $d_l = b_l - A_l x_l$ | Defektberechnung |
| (6) $d_{l-1} = r_l^{l-1} d_l$ | Restriktion |
| (7) $c_{l-1} = 0$ | |
| (8) for $i = 1$ to γ do | |
| (9) $MG(l-1, x_{l-1}, b_{l-1})$ | Grobgitterkorrektur |
| (10) $x_l = x_l + p_{l-1}^l c_{l-1}$ | Prolongation |
| (11) $x_l = S^{\nu_2}(x_l, b_l)$ | Nachglättung |

Ausgehend von einer Gitterebene $l > 0$ wird mit dem Glättungsoperator S das Problem $A_l \mathbf{x}_l = \mathbf{b}_l$ mit ν_1 -Schritten geglättet (Vorglättung). Anschließend wird der geglättete Defekt auf die Ebene $l-1$ restringiert. Der Mehrgitteralgorithmus wird rekursiv aufgerufen, wobei nun das oben beschriebene Procedere auf Gitterebene $l-1$ durchgeführt wird. Bei Erreichen der Grobgitterebene $l=0$ wird das wesentlich kleinere Problem direkt invertiert oder iterativ gelöst und die rekursiven Aufrufe terminieren. Es verbleibt nun, auf jeder Gitterebene $l > 0$ zunächst die Grobgitterkorrektur mit der geglätteten Lösung über $x_l = x_l + p_{l-1}^l c_{l-1}$ zu verbinden und die korrigierte Lösung mit ν_2 -Schritten nachzuglätten. Für $\gamma = 1$ erhält man den sogenannten *V-Zyklus* und mit $\gamma = 2$ den *W-Zyklus*. Beim V-Zyklus wird nur einmal eine Grobgitterkorrektur pro Mehrgitteriteration durchgeführt, beim W-Zyklus mehrmals. Der Aufwand pro Mehrgitteriteration ist beim W-Zyklus also größer, es kann aber auch eine bessere Konvergenzrate erwartet werden. Bei den hier betrachteten Problemstellungen wird üblicherweise ein V-Zyklus bevorzugt. Das Mehrgitterverfahren kann auch zur schnellen Bestimmung einer Anfangslösung verwendet werden, indem der Algorithmus 1 mit $l=0$ gestartet und so zukzessive die Gitterhierarchie hinaufgestiegen, dabei geglättet und prolongiert wird (*Nested iteration*). Ein Beispiel dafür ist die in Kapitel 9 beschriebene turbulente Strömung durch einen statischen Mischer, bei dem dieses Verfahren innerhalb der Zeitintegration durchgeführt wird.

Der hier dargestellte und auch verwendete Mehrgitterzyklus heißt *multiplikativ*. Das Zusammenspiel zwischen Glättung und Gittertransfer kann auf den unterschiedlichen Gitterebenen auch unabhängig voneinander erfolgen und wird als *additiver Mehrgitterzyklus* bezeichnet. Die Konvergenzraten bei multiplikativen (klassischen) sind besser als bei additiven Mehrgitterverfahren [13]. Letzteres eignet sich allerdings besser zur Parallelisierung.

Konvergenztheorie

An dieser Stelle sei noch kurz der Beweis der Mehrgitterkonvergenz skizziert, wobei hier der Beweisführung von Hackbusch [64] gefolgt wird. Gegenüber den klassischen Verfahren muss beim Mehrgitterverfahren noch zusätzlich die Verwandtschaft der Gleichungen $A_l \mathbf{x}_l = \mathbf{b}_l$ mit $A_{l-1} \mathbf{x}_{l-1} = \mathbf{b}_{l-1}$ berücksichtigt werden. Als hinreichende Kriterien bezüglich des Konvergenzbeweises wird die *Glättungseigenschaft*, die von rein algebraischer Natur ist, und die *Approximationseigenschaft*, die auf das zugrunde liegende kontinuierliche Problem zurückgreift, eingeführt. Zunächst wird das Zweigitterverfahren bewiesen und mit einem Störargument auf das Mehrgitterverfahren geschlossen.

Die Iterationsmatrix des Mehrgitter- bzw. Zweigitterverfahrens mit der Grobgitterkorrektur M_l^{GG}

$$M_l^{ZG} := S_l^{\nu_1} M_l^{GG} S_l^{\nu_1}$$

kann mit $\nu_2 = 0$ folgendermaßen aufgespalten werden⁷:

$$\begin{aligned} M_l^{ZG} &= (\mathbb{I} - pA_{l-1}^{-1}rA_l)S_l^{\nu_1} \\ &= (A_l^{-1} - pA_{l-1}^{-1}r)(A_l S_l^{\nu_1}). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Hinreichend für die Konvergenz ist die Beschränkung des Spektralradius $\rho(M_l^{ZG}) < 1$. Beide Faktoren des Produkts (5.27) können nun getrennt untersucht werden.

Definition 4 (Approximationseigenschaft). Die Matrix des ersten Faktors in (5.27) erfüllt die Approximationseigenschaft, falls mit der von der Gitterebene l unabhängigen Konstante C_A gilt:

$$\|A_l^{-1} - pA_{l-1}^{-1}r\| \leq \frac{C_A}{\|A_l\|} \quad \forall l \geq 1.$$

Die Abschätzung des zweiten Terms in (5.27) führt auf die Definition der Glättungseigenschaft.

Definition 5 (Glättungseigenschaft). Eine Iteration S_l erfüllt die Glättungseigenschaft, wenn es eine Funktion $\eta(\nu)$ unabhängig von der Gitterebene l gibt, mit

$$\|A_l S_l^\nu\| \leq \eta(\nu) \|A_l\|, \quad \forall l, \nu \geq 1, \eta(\nu) \rightarrow 0, \nu \rightarrow \infty.$$

Für elliptische Probleme kann die euklidische $\|\cdot\|_2$ oder Maximumnorm $\|\cdot\|_\infty$ verwendet werden. Aus der Approximationseigenschaft und Glättungseigenschaft folgt die von der Gitterebene l unabhängige Konvergenz des Zweigitterverfahrens

$$\|M_l^{ZG}\| \leq C_A \eta(\nu) \rightarrow 0, \quad \nu \rightarrow \infty.$$

Wird die Mehrgitteriteration folgendermaßen dargestellt

$$M_l^{MGGM} = M_l^{ZG}(\nu_1, \nu_2) + S_l^{\nu_2} p(M_{l-1}^{MGGM})^\gamma A_{l-1}^{-1} r A_l S_l^{\nu_1},$$

so kann diese als Störung der Zweigitteriteration aufgefasst werden: $M_l^{MGGM} = M_l^{ZG} - \epsilon$. Ist diese Störung hinreichend klein, so kann das Zweigitterverfahren in das Mehrgitterverfahren überführt werden. Die genauen Bedingungen für ϵ sind in [65] nachzulesen.

⁷Beim Mehrgitterverfahren kann die Grobgitterinvertierte A^{-1} in (5.27) als approximative Inversion des γ -fachen Aufrufes der Grobgitterkorrektur aufgefasst werden.

Lokales Mehrgitterverfahren

Die Optimalität des Mehrgitterverfahrens resultiert aus der Unabhängigkeit der Konvergenzrate von der Problemgröße N_L (Anzahl der Unbekannten) und der linearen Abhängigkeit des Aufwandes einer Iteration bezüglich des Speichers und der Zeit ($\mathcal{O}(N_L)$). Die Gültigkeit der letzteren Bedingung erfordert ein geometrisches Wachstum der Unbekannten zwischen den Triangulierungen des Mehrgitterverfahrens:

$$N_l > qN_{l-1}, \quad l = 1, \dots, L, \quad q > 1.$$

Dann ist der Aufwand für alle Gitterebenen durch

$$\mathcal{O}\left(\frac{q}{q-1}N_L\right) \quad (5.28)$$

abschätzbar. Bei adaptiver Verfeinerung kann dieses Wachstum verletzt werden. Wenn nur wenige Elemente je Gitterebene verfeinert werden, so erhält man einen Aufwand von

$$\mathcal{O}(LN_L).$$

Eine Lösungsmöglichkeit, doch eine Optimalität gemäß (5.28) für adaptive Verfahren zu erhalten, ist das Beschränken der zu glättenden Freiheitsgrad ausschließlich auf die verfeinerten Elemente. Es wird dann von einem *lokalen Mehrgitterverfahren* gesprochen. Ein Vergleich der Gitterhierarchie mit globalen und lokalen Gittern ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Bei der glo-

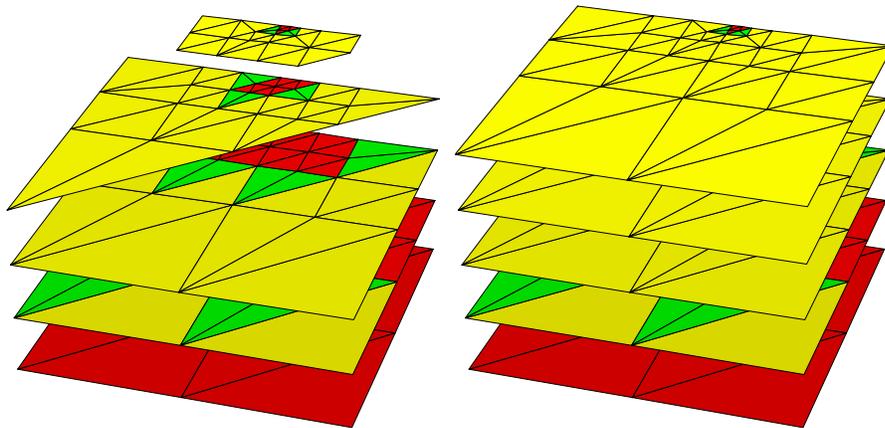


Abbildung 5.3.: 2D-Gitterhierarchie mit lokalen (links) und globalen Gittern (rechts).

balen Gitterhierarchie wird auch auf der höchsten Gitterebene das gesamte Gebiet zur Lösung verwendet. Demgegenüber steht das deutlich kleinere Gebiet auf höchster Gitterebene bei der lokalen Gitterhierarchie. Zur genaueren Begriffsbildung sei auf Yserentant [147] und Bank et al. [6] verwiesen.

Eine Darstellung des lokalen Mehrgitterverfahrens in Verbindung mit *UG* ist bei Sterz in [122] nachzulesen. Numerische Untersuchungen zeigen allerdings, dass für die hier betrachteten turbulenten Strömungen in Verbindung mit den in Kapitel 6 vorgestellten adaptiven Verfahren das lokale Mehrgitterverfahren nicht oder sehr schlecht konvergiert. Die Konvergenzrate hängt entscheidend davon ab, wie zusammenhängend die verfeinerten Gebiete sind. Da das auch einzelne Turbulenzballen umfassende Gebiet, das von anderen turbulenten Strukturen hinreichend weit

entfernt ist, verfeinert wird, führt das zu nicht zusammenhängenden verfeinerten Gebieten und der daraus folgenden schlechten Konvergenz. Ein Grund ist in der Tatsache zu sehen, dass die auf lokal isotrop verteilte Größen aufbauenden Verfahren in erster Linie für parabolische Problemstellungen geeignet sind. Bei hohen Reynoldszahlen verhält sich das System in Hinblick auf die Strömung richtungsabhängiger. Stehen keine Informationen in der erforderlichen Richtung in Form von Elementen bzw. Freiheitsgraden auf der lokal verfeinerten Gitterebene zur Verfügung, ist die Approximationseigenschaft verletzt. Das Mehrgitterverfahren konvergiert nicht. Deswegen werden die nicht verfeinerten Elemente auf die nächsthöhere Ebene kopiert und mit in die Glättungsiteration einbezogen. Es sei hier noch angemerkt, dass die Reduktion des linearen Defektes in ein oder zwei Iterationen erreicht wird, und somit die erhöhte Anzahl der zu glättenden Freiheitsgrade wenig ins Gewicht fällt.

5.3.5. Präkonditioniertes BiCGStab-Verfahren

Die aus der Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen resultierenden Matrizen sind nicht symmetrisch noch positiv-definit. Mehrgitterverfahren mit Standardglätttern wie dem Gauß-Seidel-Verfahren konvergieren, wenn überhaupt, relativ schlecht. Eine Beschleunigung der Konvergenz kann mit Krylov-Unterraum-Verfahren erreicht werden. Für die hier durchgeführten Rechnungen wird das mit dem Mehrgitter vorkonditionierte BiCGStab-Verfahren verwendet. Im Folgenden wird das als Grundlage dienende CG-Verfahren und die davon abgeleiteten CGS- und BiCG-Verfahren vorgestellt. Anschließend wird der Begriff der Präkonditionierung eingeführt und schließlich das präkonditionierte BiCGStab-Verfahren beschrieben.

Krylov-Unterraum-Verfahren

Diese Verfahren beruhen auf der Idee, das gegebene n -dimensionale Problem auf niederdimensionale Unterräume zu projizieren. Sie werden deswegen auch als Projektionsverfahren bezeichnet. Sie sind im Gegensatz zu den oben beschriebenen linearen Iterationsverfahren nichtlinear, da der Iterationsoperator selbst von der Lösung abhängt.

Für das CG-Verfahren ist der Ausgangspunkt die Umformulierung von $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ in das Minimierungsproblem

$$F(\mathbf{x}) = \min, \quad (5.29)$$

mit der konvexen Funktion

$$F := \frac{1}{2}(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{b}, \mathbf{x}), \quad (5.30)$$

wobei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv-definit ist und deswegen gilt:

$$F'(\mathbf{x}) = \text{grad}F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(A + A^T)\mathbf{x} - \mathbf{b} = A\mathbf{x} - \mathbf{b}.$$

Notwendig für ein Minimum von F ist das Verschwinden des Gradienten: $A\mathbf{x} - \mathbf{b}$. Die Lösung des Gleichungssystems $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ist also äquivalent zur Lösung der Minimierungsaufgabe (5.29). Es stellt sich nun die Frage, in welche Richtung $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^1 \setminus \{0\}$ die Minimierung von F erfolgen soll. Bei den hier betrachteten Verfahren wird davon ausgegangen, dass die Funktion F ausgehend vom Punkt $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ entlang spezieller Richtungen \mathbf{p} sukzessive minimiert wird. Daher wird für $\mathbf{x}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ die eindimensionale Minimierungsaufgabe in $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{x}, \mathbf{p}} : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R} \\ \lambda &\mapsto f_{\mathbf{x}, \mathbf{p}}(\lambda) := F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{p}) \end{aligned}$$

eingeführt. Das Minimum von f und somit die optimale Wahl von λ wird über die Bedingung $f'(\lambda) = (A\mathbf{x} - \mathbf{b}) + \lambda(A\mathbf{p}, \mathbf{p}) = 0$ bestimmt. Der optimale Parameter λ_{opt} lautet für die positiv-definite, symmetrische Matrix A :

$$\lambda_{opt}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) := \arg \min_{\lambda \in \mathbb{R}} f_{\mathbf{x}, \mathbf{p}}(\lambda) = \frac{(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{(A\mathbf{p}, \mathbf{p})},$$

wobei $\mathbf{r} := \mathbf{b} - A\mathbf{x}$ den Residuenvektor darstellt. Ausgehend von einer beliebigen Iterierten \mathbf{x}^m wird nun die nächste Iterierte \mathbf{x}^{m+1} bestimmt:

$$\mathbf{x}^{m+1} = \mathbf{x}^m + \lambda^m \mathbf{p}^m.$$

Wird für \mathbf{p} der - die aus lokaler Sicht optimalste Wahl - Residuenvektor \mathbf{r} als Richtung gewählt, gelangt man zum *Gradientenverfahren*, mit

$$\lambda_{opt}^m := \frac{\|\mathbf{r}^m\|^2}{(A\mathbf{r}^m, \mathbf{r}^m)}.$$

Für den Residuenvektor gilt weiter:

$$\mathbf{r}^{m+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{m+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^m - \lambda^m A\mathbf{r}^m = \mathbf{r}^m - \lambda^m A\mathbf{r}^m.$$

Für das Gradientenverfahren gilt die Abschätzung in der Energienorm $\|\cdot\|_A$ (siehe [65]):

$$\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^*\|_A \leq \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} \right)^m \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_A.$$

Eine schlechte Kondition (hohe Konditionszahl) $\text{cond} := \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ bedeutet also eine Verschlechterung der Konvergenz. Der Nachteil des Gradientenverfahrens resultiert aus der Tatsache, dass die Richtung auf das globale Minimum nur bei gleichen Koeffizienten der Diagonaleinträge der Richtung auf das lokale Minimum entspricht [91], und nur dann kann eine schnelle Konvergenz erwartet werden. Das Dilemma liegt auch daran, dass \mathbf{r}^m nicht transitiv ist, d.h. aus $\mathbf{r}^m \perp \mathbf{r}^{m+1}$ und $\mathbf{r}^{m+1} \perp \mathbf{r}^{m+2}$ folgt nicht $\mathbf{r}^m \perp \mathbf{r}^{m+2}$, so dass \mathbf{r}^{m+2} im Allgemeinen seine Optimalität bezüglich \mathbf{r}^m verliert [65].

Eine Verbesserung bezüglich der Richtungen stellt das Verfahren mit *konjugierten Richtungen* dar. Die Idee hierbei ist die Erweiterung der Optimalität der ermittelten Näherungen \mathbf{x}^m auf den gesamten Unterraum $U^m = \text{span}\{\mathbf{p}^0, \dots, \mathbf{p}^{m-1}\}$ mit linear unabhängigen Suchrichtungen $\mathbf{p}^0, \dots, \mathbf{p}^{m-1}$. Dieses Verfahren gehört somit zu den Krylov-Unterraum-Verfahren. Ist \mathbf{x} optimal bezüglich des Unterraumes U , dann bleibt $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \mathbf{q}$ genau dann optimal, wenn

$$A\mathbf{q} \perp U$$

gilt. Das Verfahren findet die Lösung \mathbf{x}^* in n Schritten und für λ gilt die Darstellung

$$\lambda_{opt}(\mathbf{x}^m, \mathbf{p}^m) = \frac{(\mathbf{r}^m, \mathbf{p}^m)}{(A\mathbf{p}^m, \mathbf{p}^m)}.$$

Die Methode der konjugierten Richtungen ist für die Praxis uninteressant, wenn die Auswahl der \mathbf{p}^m nicht geschickt getroffen wird, da mit einem speziellen Anfangswert gezeigt werden kann, dass erst im letzten Schritt die Lösung gefunden wird.

Die Kombination aus Gradienten-Verfahren und konjugierten Richtungen führt auf das von Hestenes und Stiefel [67] eingeführte *konjugierte Gradientenverfahren* oder kurz *CG-Verfahren*

(*Conjugate Gradient*). Damit die Optimalität nicht verloren geht, werden nur konjugierte Richtungen zugelassen. Die Residuen (negative Gradienten) verwendet man zur Bestimmung der Suchrichtung \mathbf{p}^m . Es werden nach wie vor nur positiv-definite Matrizen betrachtet. Für die Suchrichtungen wird mit

$$\mathbf{p}^m = \mathbf{r}^m + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j \mathbf{p}^j$$

sukzessive der Unterraum U^m aufgespannt, wobei die Koeffizienten α_j , $j = 0, \dots, m-1$ mit

$$\alpha_j = -\frac{(\mathbf{A}\mathbf{r}^m, \mathbf{p}^j)}{(\mathbf{A}\mathbf{p}^j, \mathbf{p}^j)} \quad (5.31)$$

bestimmt werden. An (5.31) ist zu erkennen, dass zur Bestimmung von α_j möglicherweise alle \mathbf{p}^j bekannt sein müssen und somit eine vollbesetzte $n \times n$ -Matrix gespeichert werden muss. Es kann allerdings gezeigt werden [91], dass

$$\mathbf{p}^m = \mathbf{r}^m - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{(\mathbf{A}\mathbf{r}^m, \mathbf{p}^j)}{(\mathbf{A}\mathbf{p}^j, \mathbf{p}^j)} \mathbf{p}^j = \mathbf{r}^m - \frac{(\mathbf{A}\mathbf{r}^m, \mathbf{p}^{m-1})}{(\mathbf{A}\mathbf{p}^{m-1}, \mathbf{p}^{m-1})} \mathbf{p}^{m-1}$$

gilt, womit der Speicheraufwand unabhängig von der Anzahl der Iterationen ist.

Wird zusätzlich zur Suchrichtung \mathbf{p} eine zweite Suchrichtung $\tilde{\mathbf{p}}$ bezüglich A^T eingeführt, so folgt

$$\mathbf{p}^{m+1} = \mathbf{r}^{m+1} - \beta_m \mathbf{p}^m \quad \tilde{\mathbf{p}}^{m+1} = \tilde{\mathbf{r}}^m - \beta_m \tilde{\mathbf{p}}^m$$

und für die Residuenvektoren

$$\mathbf{r}^{m+1} = \mathbf{r}^m - \alpha_m \mathbf{A}^T \mathbf{p}^m \quad \tilde{\mathbf{r}}^{m+1} = \tilde{\mathbf{r}}^m - \alpha_m \mathbf{A}^T \tilde{\mathbf{p}}^m,$$

mit

$$\alpha_m := \frac{(\mathbf{r}^m, \tilde{\mathbf{r}}^m)}{(\mathbf{A}\mathbf{p}^m, \tilde{\mathbf{p}}^m)} \quad \beta_m := \frac{(\mathbf{r}^{m+1}, \tilde{\mathbf{r}}^{m+1})}{(\mathbf{A}\mathbf{p}^m, \tilde{\mathbf{p}}^m)},$$

und erhält das *BiCG-Verfahren*, das auch für nichtsymmetrische Matrizen angewendet werden kann. Die Bi-Orthogonalität wird mit

$$\tilde{\mathbf{r}}^{i^T} \mathbf{r}^j = \tilde{\mathbf{p}}^{i^T} \mathbf{A}\mathbf{p}^j = 0, \quad \text{für } i \neq j$$

gefordert. Das BiCG-Verfahren kann auch auf nichtsymmetrische Matrizen angewendet werden, zeigt aber ungleichmäßige Konvergenz bis hin zur Divergenz.

Eine Variante des BiCG-Verfahrens stellt das *CGS-Verfahren* (*Conjugate Gradient Squared*) dar. Hierbei wird der Residuenvektor des BiCG-Verfahrens als Polynom P in A mit

$$\mathbf{r}^m = P_m(A)\mathbf{r}^0 \quad (5.32)$$

aufgefasst. Das gleiche Polynom gilt auch für den zweiten Residuenvektor bezüglich A^T , womit keine Transponierte berechnet werden muss. Stellt P in (5.32) eine Kontraktion dar, so kann dieser Effekt durch zweimaliges Anwenden, also durch

$$\mathbf{r}^m = P_m(A)^2 \mathbf{r}^0,$$

verstärkt werden. Beim CGS-Verfahren kann tatsächlich doppelte Konvergenzgeschwindigkeit gegenüber dem BiCG-Verfahren beobachtet werden. Das beim CGS beobachtete ungleichmäßige Konvergenzverhalten zeigt sich beim BiCG-Verfahren entsprechend deutlicher.

Das nun folgende und für die hier durchgeführten Berechnungen verwendete *BiCGStab-Verfahren* (*Bi Conjugate Gradient Stabilized*) wurde zur Lösung nichtsymmetrischer linearer Systeme von Van der Vorst [129] entwickelt. Der Algorithmus in der präkonditionierten Formulierung (siehe weiter unten) und die Größen $\omega_m, \mathbf{s}^m, \mathbf{t}^m$ sind in dem Pseudocode 3 im Anhang dargestellt bzw. erklärt. Es wird also zusätzlich zur Bi-Orthogonalität der Residuen \mathbf{r} und $\tilde{\mathbf{r}}$ auch eine Minimierung durchgeführt, wodurch ein gleichmäßigerer Konvergenzverlauf zu erwarten ist. Anstelle des Ansatzes wie beim CGS-Verfahrens mit $i \mapsto P_i^2(A)\mathbf{r}^0$ folgt das BiCGStab-Verfahren der Rechenvorschrift $i \mapsto Q_i(A)P_i(A)\mathbf{r}^0$, wobei Q_i wiederum ein Polynom i -ter Ordnung in der Form

$$Q_i(A) = (I - \omega_1 A)(I - \omega_2 A) \dots (I - \omega_i A)$$

darstellt. Der aktuelle Residuenvektor ist hierbei folgendermaßen definiert:

$$\mathbf{r}^{m+1} = \mathbf{s}^m - \omega_m \mathbf{t}^m.$$

Präkonditionierung

Wie bereits beim Gradientenverfahren dargestellt, ist die Kondition $\text{cond}(A) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ von entscheidender Bedeutung bezüglich der Konvergenz. Multipliziert man das lineare Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit der Matrix P , so erhält man das linkspräkonditionierte⁸ System

$$PA\mathbf{x} = P\mathbf{b}. \quad (5.33)$$

Die optimale Wahl bezüglich der Konditionszahl wäre $PA = I = P\mathbf{b}$ mit $P = A^{-1}$, da dann $\text{cond}(PA) = 1$. Da die Invertierung von A einen zu großen Aufwand bedeutet und somit nicht praktikabel ist, reicht es zur Verbesserung der Kondition aus, eine der Inversen Angenäherte $P = N$ gemäß der zweiten Normalform (siehe Abschnitt 5.3.1) zu verwenden. Wird nun das ursprüngliche Gleichungssystem als präkonditioniertes System umformuliert, so folgt für die Funktion \hat{F} analog zu (5.30):

$$\hat{F}(\hat{\mathbf{x}}) := \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{x}}) - (\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{x}}), \quad (5.34)$$

wobei die neuen Größen, die sich auf das präkonditionierte Gleichungssystem (5.33) beziehen, mit $\hat{(\cdot)}$ bezeichnet sind. Durch entsprechendes Einsetzen von (5.34) in die verschiedenen Krylov-Unterraum-Verfahren erhält man schließlich die analogen präkonditionierten Verfahren, die durchweg eine bessere Konvergenz aufweisen [65]. Das präkonditionierte BiCGStab-Verfahren (siehe Pseudocode 3) erfordert schließlich das Lösen zweier linearer Gleichungssysteme für die Bestimmung der beiden neuen Suchrichtungen. In dieser Arbeit stellt das Mehrgitterverfahren den Präkonditionierer dar.

Numerische Experimente

Die Leistungsfähigkeit des mit dem Mehrgitterverfahren (V-Zyklus, $\nu_1 = \nu_2 = 1$) präkonditionierten BiCGStab-Verfahrens wird nun an Hand numerischer Experimente gezeigt. Zunächst wird das stationäre Problem *natürliche Konvektion in einer hohen Nische* in 2D (Beschreibung siehe Abschnitt 8.1) betrachtet. Eine stationäre Lösung existiert, wenn die Rayleighzahl entsprechend klein ist (hier: $Ra \approx 1e+4$). Es wird kein LES-Modell verwendet. Die gemittelten linearen Konvergenzraten $\bar{\rho}$, die Anzahl der zur Reduktion des vorgegebenen linearen Residuums benötigten linearen Iterationen und die dafür benötigte Zeit jeweils auf den Gitterebenen l_5, l_6, l_7, l_8 sind in Tabelle 5.2 dargestellt. Hierbei ist $\bar{\rho} := 1/\#\text{iter} \sum_{i=1}^{\#\text{iter}} \rho_i$, wobei $\#\text{iter}$ die Anzahl der li-

⁸Rechtspräkonditionierer sind hier nicht von Interesse.

Ebene l_i	ohne BiCGStab			mit BiCGStab		
	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock
5	91	0.90	1.53	15	0.47	0.66
6	97	0.91	6.88	14	0.44	2.93
7	98	0.91	30.72	14	0.52	12.2
8	-	-	-	14	0.50	52.44

Tabelle 5.2.: Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (2D, stationär).

nearen Iterationen und ρ_i die Konvergenzrate eines linearen Iterationsschrittes darstellen. Die linearen Größen beziehen sich auf die letzte nichtlineare Iteration des Gesamtverfahrens. Die Konvergenzraten sind durchweg h -unabhängig, wobei das BiCG-Stab-Verfahren einerseits in der Konvergenzrate und der Komplexität (*Wall Clock Time*) aber auch in der Robustheit (keine Konvergenz ohne BiCG-Stab auf Gitterebene l_8) dem reinen Mehrgitterverfahren überlegen ist. Das zweite numerische Experiment entspricht dem in Abschnitt 8.1 beschriebenen Problem der natürlichen Konvektion in einer hohen Nische in 2D, also instationär und mit LES-Modell. Die lineare Konvergenzrate ist aus der letzten nichtlinearen Iteration im dritten Zeitschritt entnommen. Die lineare Konvergenzrate verhält sich erfahrungsgemäß in den anderen Zeitschritten ähnlich. Tabelle 5.3 zeigt schließlich diese, die Anzahl der Iterationen und die *Wall Clock Time* auf den Ebenen l_5, l_6, l_7, l_8 . Obwohl keine h -Unabhängigkeit festzustellen ist, kann aus Erfahrungswerten davon ausgegangen werden, dass die Anzahl der Iterationen zwar gitterabhängigen Schwankungen unterliegt, diese aber nicht zwangsläufig anwachsen.

Ebene l_i	ohne BiCGStab			mit BiCGStab		
	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock
5	19	0.72	0.63	3	0.47	0.29
6	21	0.68	2.77	5	0.12	1.36
7	19	0.64	10.57	6	0.17	5.59
8	21	0.63	43.27	7	0.30	24.51

Tabelle 5.3.: Konvergenzraten des Problems *Natürliche Konvektion in einer hohen Nische* (2D, instationär, mit LES-Modell).

Als nächstes soll das gleiche Problem in 3D (siehe Abschnitt 8.2) auf einem unstrukturiertem Tetraedergitter betrachtet werden. In Tabelle 5.4 sind die entsprechenden Größen für den stationären Fall dargestellt. Es sei noch angemerkt, dass die Problemstellung auf Gitterebene l_0

Ebene l_i	ohne BiCGStab			mit BiCGStab		
	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock
0	181	0.95	41.22	7	0.21	25.35
1	50	0.83	88.17	5	0.16	46.33
2	41	0.80	1164	5	0.14	298.10

Tabelle 5.4.: Konvergenzraten des Problems *Natürliche Konvektion in einer hohen Nische* (3D, stationär).

einem Eingitterverfahren entspricht und somit die schlechte Konvergenzrate ohne BiCGStab erklärt werden kann. Es zeigt sich prinzipiell ein ähnliches Bild wie in zwei Dimensionen. Das

BiCGStab-Verfahren reduziert den Gesamtaufwand (Zeit) von knapp der Hälfte auf Gitterebene l_0 auf ein Drittel auf Gitterebene l_3 .

Ebene l_i	ohne BiCGStab			mit BiCGStab		
	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock
0	1100	0.992	1623	19	0.57	66.47
1	710	0.986	833.12	15	0.502	153.1
2	-	-	-	34	0.75	2265

Tabelle 5.5.: Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (3D, instationär, LES-Modell).

Bemerkung 8 (BiCGStab als Grobgitterlöser). Wie bereits erwähnt wird als Grobgitterlöser üblicherweise ein direkter Löser verwendet. Ist das Grobgitterproblem zu groß für eine direkte Invertierung, wird alternativ ein iteratives Verfahren verwendet. Wird nun das BiCGStab-Verfahren sowohl als präkonditioniertes Lösungsverfahren als auch als mit der ILU-Iteration vorkonditioniertem Grobgitterlöser innerhalb des Mehrgitterverfahrens verwendet, zeigt sich bei den hier betrachteten Problemstellungen, dass der Aufwand mit BiCGStab als Grobgitterlöser größer ist, als der Aufwand, wenn nur der ILU als Grobgitterlöser verwendet wird (siehe Tabelle A.1). Allerdings ist das BiCGStab-Verfahren in der Regel robuster und kann bei manchen Problemstellungen als einzig noch konvergierendes Verfahren auch als Grobgitterlöser zum Einsatz kommen.

5.4. Gesamtverfahren

Das resultierende Gesamtverfahren besteht nun aus mehreren geschachtelten Iterationen. Es sei \mathbf{x}^t die Lösung zum Zeitpunkt t_n bzw. $\mathbf{x}^{t+\delta_i}$ die Lösung zum Zeitpunkt $t_n + \delta_i$, wobei die Teilschrittweiten und der Parameter Θ_i je nach Verfahren aus (5.1), (5.3), (5.4) zu entnehmen sind. Das Gesamtverfahren kann dann algorithmisch wie im Pseudocode 2 dargestellt werden.

Algorithmus 2 (Gesamtlösungsverfahren). Vorgabe der Zeitschrittweite Δt , Gesamtzeit $Time$, Anzahl der Teilschritte $\#\Theta steps$, des nichtlinearen Abbruchkriteriums tol_{nl} , der Anzahl nichtlinearer Iterationen $\#nl steps$

- (1) $t = 0.0$
- (2) **while**($t \leq Time$)
- (3) $\delta_0 = 0$
- (4) **for** $i = 0; i < \#\Theta steps$
- (5) **for** $n = 0; n < \#nl steps$
- (6) $\mathbf{d}^i = M \frac{\mathbf{x}^{t+\delta_{i+1}} - \mathbf{x}^{t+\delta_i}}{(\delta_{i+1} - \delta_i)\Delta t} + \Theta_i A \mathbf{x}^{t+\delta_{i+1}} + (1 - \Theta_i) A \mathbf{x}^{t+\delta_i} +$
- (7) $-\Theta_i \mathbf{b}^{t+\delta_{i+1}} + (1 - \Theta_i) \mathbf{b}^{t+\delta_i}$ Assemblierung des nichtlinearen Defekts
- (8) **if** $\mathbf{d}^i \leq tol_{nl}$ **then break**
- (9) $\left(M \frac{1}{(\delta_{i+1} - \delta_i)\Delta t} + J^{t+\delta_i} \right) \mathbf{c}^{t+\delta_{i+1}} = \mathcal{R}^{t+\delta_i}$ Löse lineares Problem
- (10) $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \mathbf{c}$ Korrektur der nichtlin. Lösung mit neuer lin. Lösung
- (11) $\tilde{\mathbf{d}}^i = M \frac{\tilde{\mathbf{x}}^{t+\delta_{i+1}} - \tilde{\mathbf{x}}^{t+\delta_i}}{(\delta_{i+1} - \delta_i)\Delta t} + \Theta_i A \tilde{\mathbf{x}}^{t+\delta_{i+1}} + (1 - \Theta_i) A \tilde{\mathbf{x}}^{t+\delta_i} +$
- (12) $-\Theta_i \tilde{\mathbf{b}}^{t+\delta_{i+1}} + (1 - \Theta_i) \tilde{\mathbf{b}}^{t+\delta_i}$ Assemblierung des korrigierten Defekts
- (12) $t+ = \Delta t$

Ausgehend von einer initialisierten Anfangslösung $\mathbf{x}^0 = \mathbf{x}^{\text{ini}}$ wird die Zeitintegrationsschleife gestartet, innerhalb derer über die Anzahl der Teilschritte gelaufen wird, wobei je nach Zeitintegrationsschema einmal, zweimal oder dreimal ($i = 1, 2, 3$) die nichtlineare Newton-Iteration aufgerufen wird. Innerhalb jeder Newton-Iteration wird das nichtlineare Problem $M\mathbf{x}_t + A(\mathbf{x})\mathbf{x} - \mathbf{b}$ linearisiert und das lineare Teilproblem $J\mathbf{c} = \mathcal{R}$ mit dem BiCGStab-Verfahren gelöst, das wiederum zweimal das Mehrgitterverfahren als Prädiktionierer aufruft. Beim Erreichen der linearen Defektreduktion wird die lineare Iteration verlassen und die Newton-Iteration fortgesetzt, bis schließlich der nichtlineare Defekt \mathbf{d}^i die geforderte nichtlineare Konvergenzreduktion tol_{nl} erreicht hat. Das nächste Teilschritt-Problem wird erneut gelöst bis schließlich die Gesamtzeit $Time$ integriert ist.

5.5. Parallelisierung und das Programmpaket UG

Ogleich die LES wesentlich weniger Elemente zur Auflösung der erforderlichen Skalen als die DNS erfordert, ist der Rechenbedarf nach wie vor sehr groß. Können einfache Problemstellungen (z.B. Navier-Stokes-Gleichungen auf (block-)strukturierten Gittern) mit schnellen, vorwiegend expliziten Lösungsverfahren, bereits auf einfachen PC's gelöst werden, so erfordern praxisrelevante Aufgabenstellungen verteiltes Rechnen. Da die parallelen Verfahren in dem hier verwendeten Softwarepaket *UG* implementiert sind, wird zunächst das Programmpaket selbst vorgestellt, bevor auf die Parallelisierung kurz eingegangen wird.

Die Simulationsumgebung *UG* (*unstrukturierte Gitter*) wurde und wird in der Arbeitsgruppe von G. Wittum entwickelt [15, 14]. Es verbindet prinzipiell drei Eigenschaften, die in vergleichbaren Softwarepaketen nicht anzutreffen sind:

- unstrukturierte Gitter
- lokal adaptive Verfeinerung
- parallele (lokale) Mehrgitterverfahren

Die erste zweidimensionale Version wurde von P. Bastian, J. Bey, N. Neuß und H. Rentz-Reichert entwickelt [10]. Darauf aufbauend wurde *UG* kontinuierlich zu einer mächtigen und sehr flexiblen Softwareumgebung ausgebaut [11, 12, 98]. Die von Hauser und Sterz [66] implementierte CAD- und Gitterschnittstelle ermöglicht die Behandlung auch geometrisch sehr komplexer Problemstellungen.

Die Vielseitigkeit liegt nicht zuletzt an dem modularen Aufbau. Hierbei wird *UG* in unterschiedliche Schichten eingeteilt. Die oberste Schicht beschreibt das Problem (bspw. inkompressible Navier-Stokes-Gleichungen oder Maxwell-Gleichungen), die darunter liegende Schicht die Problemklasse (Diskretisierungsverfahren wie FEM oder FVM). Die darunter liegenden Schichten sind problemunabhängig. Hier sind die Lösungsverfahren, die Geometrie- und Gitterorganisation und die Grafik implementiert. Die unterste Schicht stellt schließlich die parallele Funktionalität zur Verfügung und sorgt bspw. für die Konsistenz der Datenstrukturen als auch für den Datenaustausch zwischen den Prozessoren⁹. Die Verteilung der geometrischen Objekte (Abstrahierung geometrischer Größen wie Elemente, Kanten, Knoten, Seiten, etc.) erfolgt nach entsprechender Zerlegung in Partitionen. Hierbei wird das Gebiet in n Partitionen bzw. Teilprobleme eingeteilt und nach dem *distributed memory Paradigma* mit *Message Passing* abgearbeitet. Für eine ausführliche Beschreibung dieser Thematik sei auf [85] verwiesen.

⁹Als Datenaustausch können MPI, PVM oder plattformabhängige Kommunikationsbibliotheken verwendet werden.

6. Gitteradaption und Fehleranalyse

Bei LES-Rechnungen stellt sich die Frage, wie groß der Modellfehler des verwendeten LES-Modells ist. Besonders bei Diskretisierungsverfahren erster Ordnung, bei denen der numerische Fehler (oder die numerische Dissipation) der turbulenten Viskosität entspricht, ist die Interaktion dieser beiden Fehlerquellen von besonderer Bedeutung. Dieses Kapitel geht zunächst auf alle relevanten Fehlerquellen ein und zeigt schließlich Methoden, den Diskretisierungs- und Modellfehler separat numerisch abzuschätzen. Der zweite Teil widmet sich der adaptiven LES. Hier werden verschiedene Indikatoren vorgestellt und die Gitteradaption beschrieben. Ziel ist es hierbei, eine optimale Komplexität in Hinblick auf den Diskretisierungs- und Modellfehler durch Gitteradaption zu erreichen.

6.1. Fehlerzusammensetzung

Bei der numerischen Simulation physikalischer Vorgänge treten verschiedene Fehlerarten auf. Diese können nach physikalischen Approximations-, Rundungs-, Modell- und Konvergenzfehlern bei iterativen Lösungsverfahren und Diskretisierungsfehlern kategorisiert werden [118, 139, 62]:

6.1.1. Physikalischer und geometrischer Approximationsfehler

- Geometrischer Modellfehler
Inwieweit ein zu betrachtendes Gebiet für die diskrete Behandlung eingeschränkt bzw. abgegrenzt wird und welche Modellfehler sich daraus ergeben, hängt vom speziellen Problem ab. Die Abgrenzung der Geometrie der hier behandelten Problemstellungen ergibt sich auf Grund der physikalischen Gegebenheiten. Es verbleibt die Frage, wie die Ränder, die - wie beispielsweise ein Ausströmrand - keine physikalischen Ränder sind, modelliert werden.
- Physikalischer Modellfehler
Die Abbildung der komplexen Prozesse, wie sie in der Realität vorkommen, auf ein physikalisches und schließlich mathematisches Modell, setzt i.d.R. Vereinfachungen voraus, die wiederum einen Fehler implizieren. Das mathematische Modell zur Beschreibung reibungsbehafteter Strömungen, also die Navier-Stokes Gleichungen, kann in Standardwerken der Strömungsmechanik [121] nachgelesen werden. Die Annahme der Inkompressibilität bspw. beinhaltet einen physikalischen Fehler, der bei den hier vorliegenden geringen Machzahlen vernachlässigbar ist. Auf den physikalischen Fehler der Boussinesq Approximation wurde bereits in Kapitel 2.2 eingegangen. Der Fehler bei der Verwendung von Turbulenzmodellen ist ein Schwerpunkt in diesem Kapitel und wird in Abschnitt 6.2.1 behandelt.

6.1.2. Rundungsfehler

Der Rundungsfehler, der bei der durch die endliche Darstellungsgenauigkeit von Gleitkommazahlen auftritt und auf den heutigen Rechnern 32 Bit bzw. 64 Bit lang ist, ist verglichen mit den anderen Fehlern i.d.R. sehr klein. Prinzipiell können sich Rundungsfehler durch Auslöschungen so verstärken, dass diese einen nennenswerten Anteil am Gesamtfehler ausmachen [59]. Speziell

bei schlecht konditionierten Problemen können Rundungsfehler eine Rolle spielen. Bei den hier durchgeführten Rechnungen ist dieser Fehler vernachlässigbar klein ist.

6.1.3. Konvergenzfehler bei iterativen Verfahren

Die zu lösenden algebraischen Gleichungssysteme werden iterativ gelöst. Bei der Verwendung iterativer Lösungsverfahren wird der Lösungsprozess nach einer endlichen Iterationsfolge abgebrochen. Gegenüber der exakten Invertierung des Gleichungssystems verbleibt der Iterationsfehler. Der nichtlineare Defekt wird in dieser Arbeit typischerweise um 5 bis 8 Größenordnungen reduziert. Es hat sich in numerischen Experimenten gezeigt, dass der Iterationsfehler bei dieser Defektreduktion keinen nennenswerten Anteil am Gesamtfehler ausmacht. Bei einer nichtlinearen Defektreduktion um weniger als 5 Größenordnungen wurden allerdings signifikante Abweichungen bzw. fehlerhafte Ergebnisse festgestellt.

Beim linearen Iterationsfehler innerhalb der nichtlinearen Verfahren reicht allerdings eine Defektreduktion um eine Größenordnung, da diese lediglich eine Korrektur für den nichtlinearen Löser darstellt. Die Genauigkeit der linearen Lösung tritt in den Hintergrund, solange das nichtlineare Problem konvergiert.

6.1.4. Konvergenzfehler bei der Diskretisierung

Der Konvergenzfehler entsteht durch Diskretisierung der kontinuierlichen Differentialgleichungen und ist neben dem Modellfehler bei der Turbulenzmodellierung von größter Bedeutung. Der Konvergenzfehler tritt sowohl bei räumlicher als auch bei zeitlicher Diskretisierung auf.

Konvergenzfehler im Raum

- Konvergenzfehler der diskretisierten Differentialgleichungen
Ein Approximationsverfahren wird als konvergent bezeichnet, wenn der Diskretisierungsfehler, d.h. die Differenz zwischen der exakten Lösung des kontinuierlichen Differentialgleichungssystems u und der exakten Lösung des algebraischen Systems u_h mit kleiner werdender Gitterweite h verschwindet.

Definition 6 (Konvergenz). Ein Diskretisierungsverfahren heißt *konvergent* von der Ordnung k (in der diskreten Maximumnorm), wenn gilt

$$\|u - u_h\| \leq Ch^k. \quad (6.1)$$

Der Nachweis der Konvergenz führt über die Begriffe *Konsistenz* und *Stabilität*.

Definition 7 (Konsistenz). Ein Diskretisierungsverfahren heißt *konsistent* von der Ordnung k (in der diskreten Maximumnorm), falls

$$\|L_h R_h u - R_h L u\| \leq Ch^k, \quad (6.2)$$

wobei L der Differentialoperator, L_h der Diskretisierungsoperator und h der Diskretisierungsparameter ist. R_h beschränkt den Differentialoperator auf einen diskreten Raum.

Ein konsistentes Verfahren stellt also sicher, dass der Differentialoperator gut approximiert wird. Die Stabilität ermöglicht es, von der verfügbaren Größe

$$L_h u - L_h u_h$$

auf das Verhalten von $u - u_h$ zu schließen und ist folgendermaßen definiert:

Definition 8 (Stabilität). Folgt aus $L_h w_h = f_h$ die Ungleichung

$$\|w_h\| \leq C \|f_h\|, \quad (6.3)$$

so heißt das Verfahren *stabil*, wobei C von h unabhängig ist.

Näheres ist beispielsweise in [62, 43] nachzulesen.

- Konvergenzfehler bei krummen Rändern

Treten bei der räumlichen Diskretisierung krumme Ränder auf, so entsteht ein zusätzlicher Fehler. Die in Abschnitt 5.3.4 beschriebene Verfeinerung (siehe auch Abbildung 5.2) garantiert bei zulässiger Verfeinerung, dass das diskrete Gebiet mit kleiner werdender Gitterweite das kontinuierliche Gebiet beliebig gut approximiert. Für die konforme FEM mit linearen Ansätzen kann gezeigt werden, dass bei glatt berandeten Gebieten die a-priori Konvergenzabschätzung gilt [105]:

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq Ch^2 \|f\|_{L_2(\Omega)}, \quad (6.4)$$

mit der vom Gebiet, der Interpolation und Stabilität abhängigen aber h -unabhängigen Konstanten C und dem Diskretisierungsparameter h .

Die Abschätzung (6.4) gilt für das Poisson-Problem. Entsprechende Regularität vorausgesetzt, wird für die hier mit linearen Ansätzen diskretisierten Navier-Stokes-Gleichungen ebenfalls von einer Approximation im Sinne von (6.4) ausgegangen.

Konvergenzfehler in der Zeit

Der zeitliche Konvergenzfehler lässt sich analog zum räumlichen Konvergenzfehler beschreiben. Diese Abschätzungen sind a priori und hängen rein vom Diskretisierungsoperator und Gitter ab. Wohlgermerkt gilt (6.1) immer, bei nichttrivialen Strömungsproblemen kann C beliebig groß und der Nutzen der Aussage (6.1) beliebig klein werden. Desweiteren gibt es andere problemabhängige Faktoren, die die Konvergenzordnung beeinflussen. Werden beispielsweise Punktquellen nicht adäquat diskretisiert [110] oder gibt es eine einzige Zelle im Gitter, in der die Konvergenzordnung niedrig ist, so reduziert sich die globale Ordnung entsprechend [113].

Konsistenzabschätzungen können meist für die zu Grunde liegende Diskretisierung angegeben werden. Demgegenüber gibt es für nichttriviale Problemstellungen keine a-priori Stabilitätsaussage und somit keine Aussage über die Konvergenz. In diesen Fällen verbleiben schließlich nur a-posteriori Abschätzungen, die auf vorhandene Daten zurückgreifen. Dies setzt voraus, dass bereits Rechnungen mit unterschiedlichen Parametereinstellungen durchgeführt worden sind. In dieser Arbeit werden ausschließlich a-posteriori Fehlerabschätzungen betrachtet.

6.2. Verifikation der numerischen Verfahren und Lösungen

Nach Roach [110] und Salari et al. [113] wird unter *Verifikation* verstanden, ob ein Problem richtig gelöst wird. Demgegenüber steht der Begriff der *Validierung*, der besagt, ob man das richtige Problem löst. Beim letzteren wird davon ausgegangen, dass dies hier zutrifft, d.h. das mathematische Modell bildet das physikalische Modell richtig ab. Bei der Verifikation wird unterschieden in

- Verifikation des Computercodes und
- Verifikation einer konkreten Simulation

Für die Verifikation des Computercodes können auch physikalisch unsinnige Probleme verwendet werden. Die Verifikation des hier verwendeten FVM-Codes bezüglich des reinen Strömungslösers sind in [109] und [96] nachzulesen. Die Bibliotheken für die verschiedenen Lösungsverfahren und den Gittermanager von *UG* wurden und werden in vielen Applikationen verwendet und können als verifiziert angesehen werden [11].

6.2.1. Verifikation von LES-Rechnungen

Simulationen können prinzipiell analytischen bzw. experimentellen Ergebnissen oder auch anderen Simulationen gegenübergestellt werden. Für turbulente Strömungen existieren keine analytischen Lösungen. Es muss also entweder auf andere Simulationen oder auf Experimente zurückgegriffen werden. Bei der LES muss berücksichtigt werden, dass die zur Verfügung stehenden Größen gefiltert sind.

DNS als Referenzlösung

DNS-Ergebnisse werden häufig als Vergleich herangezogen. Bei einer DNS werden, wie bereits in Abschnitt 3.1 beschrieben, alle räumlichen und zeitlichen Skalen aufgelöst. Da kein Modell eingesetzt wird, gibt es auch keinen Modellfehler. Der Diskretisierungsfehler ist allerdings nach wie vor vorhanden, bei der erforderlichen hohen Gitterauflösung bzw. kleinen Gitterweite ist dieser normalerweise zu vernachlässigen. Werden LES-Rechnungen nun mit DNS-Rechnungen verglichen, so unterscheidet man zwischen *a-priori* und *a-posteriori* Tests¹. Bei *a-priori* Tests wird ein DNS-Datenfeld mit dem entsprechenden LES-Modell explizit gefiltert und mit dem aus der DNS-Rechnung bestimmten Spannungstensor τ_{ij} verglichen. Hierbei werden also keine LES-Rechnungen durchgeführt. *A-posteriori* Tests vergleichen die Ergebnisse aus LES- und DNS-Rechnungen, wobei je nach Vergleichsgröße die DNS-Daten auch explizit gefiltert werden müssen.

Vergleich mit Experimenten

Experiment und Simulation unterscheiden sich häufig durch leicht abweichende Randbedingungen, die u.U. großen Einfluss auf die Lösung haben können. Ein Beispiel hierfür sind turbulente Randbedingungen. Hierbei besitzt das vorgeschriebene Geschwindigkeitsprofil in aller Regel nicht dasselbe Spektrum wie das in der Simulation verwendete Einstromprofil.

Prinzipiell gilt, dass nur statistische Größen miteinander verglichen werden sollten [101]. Schließlich basieren auch LES-Modelle auf statistischen Argumenten. In dieser Arbeit werden die Geschwindigkeiten sowohl beim Experiment als auch bei den numerischen Berechnungen zeitlich gemittelt. Veynante und Knikker zeigen in [134], dass gemittelte Feldgrößen im Gegensatz zur Varianz² nicht vom Filteroperator abhängen.

6.3. Fehleranteile bei der Large Eddy Simulation

Bei der Analyse der LES muss prinzipiell zwischen dem Diskretisierungsfehler, der von der Diskretisierungsmethode und Gitterweite h abhängt, dem Modellfehler, der aus dem verwendeten

¹Es können auch experimentelle Daten verwendet werden. Da diese aber normalerweise in dem dafür erforderlichen Umfang nicht vorliegen, werden diese Tests nicht mit Experimenten sondern mit DNS-Rechnungen assoziiert.

²Um die Varianzen vergleichen zu können, müssen diese für den Vergleich entsprechend modelliert werden.

Turbulenzmodell resultiert, und dem Kommutationsfehler (3.13) unterschieden werden³. Konzentriert man sich auf die Filterung des konvektiven Terms $\partial_j(u_i u_j)$ und des Druckes $\partial_i p$, so kann der Gesamtfehler folgendermaßen dargestellt werden [52]:

$$\partial(\bar{u}_i \bar{u}_j) + \partial_i \bar{p} = [\delta_j(\bar{u}_i \bar{u}_j) + \delta_i \bar{p} + \mathcal{D}_i] + \partial_j \tau_{ij} \quad (6.5a)$$

$$= [\delta_j(\bar{u}_i \bar{u}_j) + \delta_i \bar{p} + \mathcal{D}_i] + [\partial_j m_{ij} + \mathcal{R}_i] \quad (6.5b)$$

$$= \delta_j(\bar{u}_i \bar{u}_j) + \delta_i \bar{p} + \delta_j m_{ij} + [\mathcal{D}_i + \mathcal{D}_i^{(m)} + \mathcal{R}_i]. \quad (6.5c)$$

\mathcal{D}_i bezeichnet den Diskretisierungsfehler, der durch die Anwendung des Diskretisierungsoperators δ_i auf den konvektiven Term entsteht. Zunächst wird also nach den einzeln gefilterten, diskretisierten Größen $\delta_j(\bar{u}_i \bar{u}_j)$ und $\delta_i \bar{p}$, dem Diskretisierungsfehler \mathcal{D}_i und dem zu modellierenden *sgs*-Tensor unterschieden (6.5a). Dieser wird wiederum in die Divergenz des Modellterms $\delta_j m_{ij}$ und in das Modellresiduum $\mathcal{R}_i = \partial_j(\tau_{ij} - m_{ij})$ unterteilt (6.5b). Zu den einzeln gefilterten Geschwindigkeiten bzw. gefiltertem Druck kommt schließlich das diskretisierte LES-Modell $\delta_j m_{ij}$ hinzu. Als Fehlerkomponenten bleiben nun der Diskretisierungsfehler \mathcal{D}_i , der den Modell- und Diskretisierungsfehler bezüglich des Modells beinhaltenden totalen Fehler $\mathcal{D}_i^{(m)}$ und das Modellresiduum (6.5c). Das Verhältnis des Diskretisierungsfehlers \mathcal{D}_i zum modellierten Fluss des Spannungstensors $\delta_j \tau_{ij}$ bestimmt weitgehend die Verlässlichkeit einer LES.

Eine gröbere Einteilung, die im Folgenden verwendet wird, sieht vor, nur noch den Diskretisierungsfehler *ed*, der sich aus \mathcal{D}_i und dem Diskretisierungsfehleranteil von $\mathcal{D}^{(m)}$ zusammensetzt und den Modellfehler *em*, der den Modellfehleranteil von $\mathcal{D}_i^{(m)}$ darstellt, zu betrachten⁴.

Bei einer konvergenten Diskretisierung (6.1) gilt für den Diskretisierungsfehler:

$$\lim_{h \rightarrow 0} ed = 0.$$

Bezüglich des Modellfehlers gilt in den allermeisten Fällen für den Modellfehler

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} em = 0. \quad (6.6)$$

In [52] wird für einen speziellen Fall am Beispiel des Skalenähnlichkeitsmodells gezeigt, dass (6.6) nicht gilt. Da hier für die Fehleranalyse ausschließlich das Smagorinsky-Modell verwendet wird, wird ein konvergentes Verhalten des LES-Modells gemäß (6.6) vorausgesetzt.

Die Lösung mit einer für ein bestimmtes Problem typischen Gitterweite h und einer ebenfalls für ein bestimmtes Problem typischen Filterweite⁵ wird mit $x_{\text{LES}}(\Delta, h)$ als *Produktions-LES-Rechnung* bezeichnet. Die Lösung auf einem feinen Gitter ($h \rightarrow 0$) mit einer für ein Problem typischen Filterweite Δ wird mit $x_{\text{LES}}(\Delta, 0)$ als *feine LES-Rechnung* bezeichnet. Da der Modellfehler in $x_{\text{LES}}(\Delta, h)$ und $x_{\text{LES}}(\Delta, 0)$ gleich ist, der Diskretisierungsfehler in letzterem aber verschwindet, kann der Diskretisierungsfehler mit

$$ed(x) = x_{\text{LES}}(\Delta, h) - x_{\text{LES}}(\Delta, 0) \quad (6.7)$$

bestimmt werden.

Beim Modellfehler wird zunächst eine DNS-Lösung mit dem Filteroperator $G(\Delta)$ explizit gefiltert:

$$x_{\text{DNS}}(\Delta) = x_{\text{DNS}} \circ G(\Delta).$$

³Hier zeigt sich der Unterschied zur impliziten LES (MILES), bei der ausschließlich der Diskretisierungsfehler betrachtet werden muss. Allerdings muss dieser auf die oben genannten Fehleranteile abgebildet werden. U.U. ist eine feinere Unterteilung und somit eine differenzierte Steuerung des Fehlers zu bevorzugen.

⁴Der bereits in Abschnitt 3.4.1 beschriebene Kommutationsfehler wird nicht weiter berücksichtigt wird.

⁵Zu den typischen Filterweiten zählt das Kontrollvolumen.

Wird eine feine LES-Lösung $x_{\text{LES}}(\Delta, 0)$, die nur noch einen kleinen Diskretisierungsfehler besitzt, und die explizit gefilterte DNS Lösung $x_{\text{DNS}}(\Delta)$, bei der sowohl der Diskretisierungs- als auch Modellfehler klein ist, miteinander verglichen, so kann der Modellfehler mit

$$em(x) = x_{\text{LES}}(\Delta, 0) - x_{\text{DNS}}(\Delta) \quad (6.8)$$

bestimmt werden.

Bei (6.7) und (6.8) handelt es sich um Aussagen, die nur in der Asymptotik gelten. In den meisten numerischen Simulationen ist dies nicht der Fall. Es handelt sich dann lediglich um den Fehler gitterkonvergenter Lösungen, wie sie im Kapitel 4.4 beschrieben werden. Die Fehler ed und em sind in diesem Sinne keine absoluten Fehlergrößen, sie zeigen lediglich ein Fehlerverhalten.

Für die praktischen Rechnungen werden also beim Diskretisierungsfehler zwei Lösungen auf unterschiedlichen Gitterebenen aber mit derselben Filterweite verglichen, die beide einen mehr oder weniger großen Diskretisierungsfehler besitzen. Beim Modellfehler werden zwei Lösungen auf demselben Gitter verglichen, wobei $x_{\text{LES}}(\Delta, 0)$ mit der Filterweite Δ implizit gefiltert wird, was einen Modellfehler in die Lösung einschleppt. Demgegenüber wird bei $x_{\text{DNS}}(\Delta)$ mit den - im besten Fall exakten - DNS-Daten die Modellparameter bestimmt. Sie besitzt somit einen kleineren Modellfehler.

Die in [52] für die zeitlich ungemittelte Größe x hergeleiteten und beschriebenen Fehlergleichungen (6.8) und (6.7) sind allerdings nur für ausgewählte Problemstellungen anwendbar. Besitzt das Strömungsfeld quasi-stationären Charakter, so sind auch die aufgelösten Skalen bei den verschiedenen Rechnungen $x_{\text{LES}}(\Delta, h)$, $x_{\text{LES}}(\Delta, 0)$ und $x_{\text{DNS}}(\Delta)$ zur selben Zeit am selben Ort. Die Fehlergleichungen besitzen in diesem Fall eine Aussagekraft. Ein Beispiel dafür ist das *Jet in Crossflow*-Problem, das in Abschnitt 7 näher untersucht wird. Bei isotroper Turbulenz, bei der die kleinen Skalen chaotischen Charakter besitzen und zeitlich stark variieren, müssen statistische Größen miteinander verglichen werden. In manchen Fällen, wie bei der turbulenten Strömung in einer hohen Nische (siehe Abschnitt 8.1), zeigt sich jedoch, dass bereits kleinste Änderungen am Gitter oder am Modell den zeitlichen Verlauf transienter kohärenter Strukturen⁶ stark beeinflussen. Werden nun zwei Lösungen, die auf unterschiedlichen Gittern berechnet werden und die einen unterschiedlichen zeitlichen Verlauf dieser kohärenten u.U. sehr energiereichen Strukturen aufweisen, gegenübergestellt, so erhält man einen sehr großen Abstand dieser beiden Lösungen. In diesem Fall macht man sich die Mehrgitterstruktur zunutze. Und zwar wird hier eine Rechnung auf höchster Gitterebene mit Filterweite Δ_i^k durchgeführt und das Ergebnis an bestimmten Zeitpunkten abgespeichert. In einem zweiten Schritt werden die Daten und Mehrgitterhierarchie eingelesen und auf die entsprechend tieferen Gitterebenen restringiert. Mit derselben Gitterweite wird die nun auf dem größeren Gitter existierende Lösung in der Zeit um zwei Schritte fortgepflanzt. Diese Lösung wird nun zur Bestimmung des Diskretisierungsfehler zu Grunde gelegt. Es muss darauf geachtet werden, dass der Interpolationsfehler durch Restriktion mindestens dieselbe Ordnung wie die Ansatzfunktionen besitzt.

Bei zeitabhängigen Rechnungen werden nach einer Adaption des Gitters zwei auf unterschiedlichen Gittern gegebene Lösungen über ein Zeitintegrationsschema miteinander verknüpft, was einen Interpolationsfehler mit sich führt. Es werden deswegen zwei Integrationschritte durchgeführt, bevor die für die Fehlerbestimmung verwendete Lösung abgespeichert wird (siehe Abschnitt 6.4).

Bisher wurde x als Lösung bezeichnet. Es stellt sich zunächst die Frage, welche Größe zur Fehlerbestimmung am geeignetsten ist. Prinzipiell bieten sich sowohl die primitiven Variablen u_i, p, T , nach denen tatsächlich auch gelöst wird, als auch abgeleitete Größen wie beispielsweise die Wirbelstärke ω (3.2), die kinetische Energie E_{kin} (3.29) oder die Subskalenaktivität S (3.34) an.

⁶Beispielsweise ein durch das Strömungsgebiet wandernder Turbulenzballen.

Notation

Werden die verschiedenen Lösungen miteinander verglichen, so ist u.a. auch die Fehlerfolge interessant, d.h. wie verhält sich der Modellfehler $em(x)$ (6.8) auf unterschiedlichen Gitterebenen. Dies impliziert jedoch, dass die zum Vergleich notwendige DNS-Rechnung nicht mehr unbedingt die Kolmogorovschen Skalen auflöst. Werden die kleinsten turbulenten Skalen nicht aufgelöst, dann spricht man von einer *Pseudo-DNS*. Im Folgenden wird nur noch der Begriff DNS verwendet, unabhängig davon, ob die Kolmogorovschen Skalen aufgelöst werden oder nicht.

Mit dem Superskript k von Δ_i^k , wird die Filterweite bezeichnet, die dem Kontrollvolumen auf der Gitterebene k entspricht. Der Subskript i bezeichnet die Gitterebene und die damit implizierte Gitterweite h , mit der das Kontrollvolumen aufgelöst wird. Es gilt stets $i \geq k$. Die Filterweite Δ_6^4 bezeichnet beispielsweise das Kontrollvolumen auf Gitterebene l_4 , das mit der der Gitterebene l_6 zugeordneten Gitterweite h_6 aufgelöst wird.

Bei der Analyse der durchgeführten Rechnungen wird für den Diskretisierungsfehler ed folgende Notation verwendet (siehe Abschnitt 4.3.1):

$$ed_{i,j}^k := x(\Delta_i^k) - x(\Delta_j^k), \quad i, j, k \in \mathbb{N}_0. \quad (6.9)$$

Der Fehler (6.9) ergibt sich also durch Subtraktion der Lösung $x(\Delta_j^k)$ auf Gitterebene l_j (mit der Filterweite Δ_j^k) von der Lösung $x(\Delta_i^k)$ auf Gitterebene l_i (mit derselben Filterweite Δ_i^k). Bei der Bestimmung des Modellfehlers wird zunächst die auf der Gitterebene l_i lebende DNS-Lösung mit der auf derselben Gitterebene lebenden Filterweite Δ_i^k explizit gefiltert:

$$x_{\overline{\text{DNS}}}(\Delta_i^k) := x_{\text{DNS}} \circ G(\Delta_i^k).$$

Wird von $x_{\overline{\text{DNS}}}(\Delta_i^k)$ nun die feine LES-Lösung $x_{\text{LES}}(\Delta_i^k)$ abgezogen, so resultiert daraus der Modellfehler:

$$em_i^k := x_{\overline{\text{DNS}}}(\Delta_i^k) - x(\Delta_i^k). \quad (6.10)$$

Mit (6.10) erhält man also den Modellfehler bezüglich der Filterweite Δ_i^k . Je größer das dafür verwendete Gitter ist (je kleiner also i), desto größer ist auch die Interferenz mit dem Diskretisierungsfehler.

Die Größe $x = x(\xi, t)$ ist orts- und zeitabhängig, wobei ξ die Ortsvariable in Ω_h und t die Zeitvariable im Zeitintervall $[t_0, t_N]$ darstellen. Wird zur Bestimmung des Fehlers em bzw. ed die kinetische Energie $E_{kin}(t) \in \Omega_h$ oder die Subskalendissipation $\epsilon^{sgs}(t) \in \Omega_h$ zu Grunde gelegt, ist $x = x(t)$ nur noch zeitabhängig. Werden die kinetische Energie und Subskalendissipation mit

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x(t_j)$$

zeitlich gemittelt zur Fehlerberechnung verwendet, so gilt für die beiden Fehlerkomponenten:

$$\begin{aligned} ed &= : ed_{i,j}^k(t) := \bar{x}(\Delta_i^k) - \bar{x}(\Delta_j^k) \\ em &= : em_i^k(t) := \bar{x}_{\overline{\text{DNS}}}(\Delta_i^k) - \bar{x}(\Delta_i^k). \end{aligned}$$

Darüberhinaus werden die Fehlerkomponenten auch entlang einer Geraden $\mathcal{L} \in \Omega_h$ bestimmt. Hierbei wird die zeitlich gemittelte Geschwindigkeit $x := \bar{u}_i(\xi)$ zu Grunde gelegt. Die Fehlerkomponenten sind dann folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} ed &= : ed_{i,j}^k(\xi) := \max(x(\Delta_i^k) - x(\Delta_j^k)) \\ em &= : em(\xi) := \max(x_{\overline{\text{DNS}}} - x(\Delta_i^k)). \end{aligned}$$

Es werden also die entlang der Geraden \mathcal{L} maximal auftretenden Fehler bestimmt. Welche der dargestellten Fehlerdefinitionen verwendet wird, ist jeweils aus dem Kontext ersichtlich. Bei den betrachteten Untersuchungen spielt weniger die Quantität des Diskretisierungs- bzw. Modellfehlers eine Rolle, als vielmehr das Verhältnis beider Fehlerkomponenten, das im Folgenden mit

$$q := ed/em$$

bezeichnet wird.

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass zur Bestimmung der beiden Fehlerkomponenten ausschließlich gemittelte oder quasi-stationäre Größen verwendet werden oder der Fehler über der Zeit aufgetragen wird. Insofern sind keine Normen für em und ed erforderlich.

6.4. Gitteradaption und adaptive LES

Ziel bei adaptiven Verfahren, bei denen lokal nach bestimmten Kriterien verfeinert oder vergrößert wird, ist es, den Diskretisierungs- und Modellfehler möglichst gleichmäßig zu verteilen und somit bezogen auf diese Fehler ein optimales Gitter zu erhalten.

Bei Fehlerabschätzungen ist man interessiert, wie groß die Differenz einer exakten Lösung u und der approximierten Lösung u_h in einer bestimmten Norm ist. Typischerweise besitzt die globale Fehlerabschätzung die Form

$$\|u - u_h\| \leq D\eta, \quad (6.11)$$

mit der von Diskretisierungsparametern unabhängigen Lipschitzkonstanten D und dem zunächst beliebigen Fehlermaß η . Die Abschätzung (6.11) geht auf das Lemma von Gronwall zurück, das ursprünglich zur Bestimmung der Schranken bei Differential- bzw. Integralungleichungen formuliert wurde. Wird u_h für die Abschätzung nicht verwendet, so spricht man von einer *a priori*-Fehlerabschätzung, wohingegen eine *a posteriori*-Fehlerabschätzung die Approximierte u_h mit einbezieht. Scharfe und somit praktisch verwertbare globale Fehlerabschätzungen sind nur für ganz bestimmte und meist stark vereinfachte Problemstellungen bestimmbar. Für die Navier-Stokes-Gleichungen verhält sich die Konstante mit $D \sim e^{Re}$ exponentiell. Für die hier betrachteten turbulenten Strömungen mit hohen Reynoldszahlen ist die Abschätzung (6.11) unbrauchbar. Johnson et al. zeigen in [75] für dual-gewichtete Fehlerindikatoren eine Abschätzung, bei der die Konstante mit $D \sim Re$ nur noch eine Funktion der Reynoldszahl selbst ist. In den meisten Fällen jedoch ist eine verwertbare globale Abschätzung nicht bekannt. Die globale Abschätzung (6.11) gibt ein Maß für das ganze betrachtete Gebiet Ω an. Da der Fehler typischerweise stark ortsabhängig ist, ist diese Abschätzung größtenteils zu pessimistisch. Um lokale Phänomene bei der Gitteradaption zu berücksichtigen, wird (6.11) in einzelne Terme gemäß

$$\eta = \left\{ \sum_{K \in \tau_h} \eta_K^2 \right\}^{1/2}$$

aufgegliedert. Typischerweise wird η_K auf einem Element ausgewertet. Adaptive Verfahren versuchen nun durch lokale Verfeinerung bzw. Vergrößerung des zu Grunde liegenden Gitters, den Fehler bezüglich einer Toleranz ϵ_η zu beschränken. Mit den beiden Parametern für die Verfeinerung C_{ref} und Vergrößerung C_{coa} mit $C_{ref} > C_{coa}$ wird im Falle

$$\eta_K > C_{ref}\epsilon_\eta \quad (6.12)$$

das Element verfeinert und bzw. wenn

$$\eta_K < C_{coa}\epsilon_\eta \quad (6.13)$$

vergrößert.

Bemerkung 9 (Zeitlicher Interpolationsfehler). Bei der Zeitintegration geht die Lösung des letzten Zeitschrittes mit ein. Wird das Gitter von einem Zeitschritt zum nächsten zum Zeitpunkt t_{n+1} adaptiert, so tritt ein Interpolationsfehler bezüglich der alten Lösung zum Zeitpunkt t_n auf. Da hier nach der Gitteradaption etliche Zeitintegrationsschritte durchgeführt werden, wird hier davon ausgegangen, dass innerhalb dieses Zeitraumes der Interpolationsfehler ohne nennenswerte Effekte ist und somit unberücksichtigt bleiben kann. Wagner [137] zeigt, wie mit Hilfe der Mehrgitterhierarchie diese Problematik behandelt werden kann.

6.4.1. Verfeinerungsstrategie

Eine Sequenz von Gittern wird erzeugt, indem zuerst ein Problem auf einem Anfangsgitter gelöst wird, der Fehler abgeschätzt, diesbezüglich Elemente verfeinert bzw. vergrößert werden (*Lösen* \rightarrow *Schätzen* \rightarrow *Verfeinern/Vergrößern*) und schließlich eine Lösung auf dem adaptierten Gitter neu berechnet wird. Dies wird solange durchgeführt, bis die lokalen Indikatoren η_K einen Schwellenwert ϵ_η nicht mehr überschreiten oder die Computerressourcen erschöpft sind. Hierbei wird entweder ein Gitter für die beste Lösung bei gegebenem Aufwand, oder ein Gitter für eine bestimmte Genauigkeit bei minimalem Aufwand gesucht.

In *UG* werden drei unterschiedliche Strategien zur Gitteradaption unterschieden, s.a. [48, 80]:

- *Gleichverteilungskriterium*

Die Anpassung des Gitters erfolgt mit dem Ziel, dass die lokalen Fehlerschätzer η_K für das angestrebte neue Gitter τ_h^{neu} den gleichen Wert über alle Elemente K annehmen. Es soll also gelten:

$$\eta_K^{neu} \approx \frac{\epsilon}{\sqrt{|\tau_h^{neu}|}} \quad \text{für alle } K \in \tau_h^{neu}.$$

Da in diesem Kriterium bereits das neu adaptierte Gitter eingeht, handelt es sich um eine implizite Strategie, die sich allerdings als relativ langsam erweisen kann.

- *Abschneidekriterium*

Es werden diejenigen Elemente verfeinert bzw. vergrößert, deren lokaler Schätzer η_K einen gewissen Wert über- bzw. unterschreitet. Dieser Wert wird als Parameter im Sinne von $\kappa\eta$ mit $\kappa \in (0, 1)$ festgelegt.

- *Reduktionskriterium*

Zunächst wird $\epsilon_\eta := \kappa\eta$ mit $\kappa \in (0, 1)$ als Parameter gesetzt. Danach werden einige Anpassungsschritte nach dem Gleichverteilungskriterium mit der Toleranz ϵ_η durchgeführt.

Bei den genannten Kriterien hat sich das Reduktionskriterium in vielen Anwendungen durchgesetzt. Die dort betrachteten Problemstellungen sind allerdings stationär bzw. quasi-stationär. Die hier auftretenden Problemstellungen unterscheiden sich diesbezüglich insofern, als dass sich das Problem von Zeitschritt zu Zeitschritt ändern kann. Insofern müssen die verwendeten Schranken C_{ref} und C_{coa} dynamisch, also während des Lösungsprozesses, bestimmt werden. Das hier dafür verwendete Kriterium ist die Elementanzahl. Es wird also nach jeder Gitteradaption geprüft,

inwieweit die geplante Elementanzahl über- bzw. unterschritten wird und die Parameter C_{ref} und C_{coa} mit

$$\begin{aligned} C_{ref}^{n+1} &= (1 + a) * C_{ref}^n && \text{Unterschreitung} \\ C_{coa}^{n+1} &= (1 - b) * C_{coa}^n && \text{Überschreitung} \end{aligned}$$

entsprechend geändert, wobei typischerweise $a = b = 0.5$ gesetzt wird. Es hat sich gezeigt, dass nur durch diese Art der Schwellenwertanpassung eine genaue Steuerung der Elementanzahl möglich ist. Es handelt sich also um ein dynamisches Reduktionskriterium.

Für den in *UG* implementierten Algorithmus werden die Parameter $l_{min}, l_{max}, C_{ref}, \epsilon_K, C_{coa}, \epsilon_K$ und η_K benötigt. l_{min} und l_{max} bestimmen den Bereich der Gitterebenen, der für die Adaption zur Verfügung steht. Nach der in Kapitel (5.3.4) beschriebenen rot-grün Verfeinerung wird noch unterschieden, ob ein Element rot bzw. grün oder gelb ist, schließlich können nur rote Elemente vergrößert bzw. verfeinert werden (siehe Algorithmus 4 im Anhang).

Im Gegensatz zum lokalen Mehrgitterverfahren, bei dem nur auf den neu erzeugten Gitterelementen⁷ geglättet wird, wird die Lösung auf dem *Oberflächengitter* (*surface grid*) dargestellt. Das Oberflächengitter wird aus den Elementen gebildet, die in der Gitterhierarchie zuoberst liegen. Es umfasst somit das ganze Gebiet.

6.4.2. Indikatoren

In dieser Arbeit werden der residuenbasierte, der hierarchische und der Maximum Indikator verwendet. Sie werden weiter unten näher beschrieben. Daneben gibt es noch eine Vielzahl anderer Indikatoren, die mehr oder weniger problemspezifisch sind. Der dual-gewichtete Fehlerindikator sei hier kurz erwähnt. Dieser bietet sich für Probleme an, bei denen ein Funktional minimiert werden soll [5], das prinzipiell beliebig aussehen kann und somit für einen breiten Anwendungsbereich formuliert werden kann. In den meisten Fällen wird eine globale Größe als Zielgröße verwendet. Im Kontext der LES hat Hoffman in [69] diesen Indikator für die Bestimmung des Widerstandes eines Würfels in einer Kanalströmung verwendet. Der Aufwand für diesen Indikator ist allerdings groß, da das duale Problem mit demselben Aufwand wie das originäre Problem gelöst werden muss. Für die hier betrachteten Problemstellungen ist die Formulierung eines dualen Problems nicht zwingend sinnvoll. Der größere Aufwand gegenüber anderen Indikatoren ist folglich nicht zu rechtfertigen, weswegen diese Indikatorenart nicht weiter verfolgt wird.

Residuenbasierter Fehlerindikator

Residuenbasierte Fehlerindikatoren wurden zur Abschätzung des Diskretisierungsfehlers konstruiert. Das Residuum, das im wesentlichen durch den Sprung des Gradienten über die Elementkanten gegeben ist, stellt hierbei ein natürliches Maß für den Diskretisierungsfehler dar [80]. Fehlerabschätzungen für die Stokes-Gleichungen gehen zurück auf Verfürth [132]. Die hierbei verwendete Norm ist die H^1 -Norm. Becker erweiterte in [16] die Abschätzung auf die Navier-Stokes-Gleichungen in der L_2 -Norm. Diese Abschätzung bezieht sich auf eine Galerkin-FEM mit linearen Ansätzen und stabilisiertem Stokes-Element, um die LBB-Bedingung zu erfüllen. Sie soll hier als Ausgangspunkt für die FVM dienen. Die rigorose Überführung dieser FEM-Abschätzung auf die FVM ist nicht Gegenstand dieser Arbeit und wird nicht weiter untersucht. Es ist allerdings davon auszugehen, dass die FEM-Abschätzungen ebenfalls für die FVM gelten [18]. Die

⁷Eine Schicht der umgebenden, nicht verfeinerten Elemente kommt hier allerdings noch hinzu.

FEM-Fehlerabschätzung nach [16] in der L_2 -Norm lautet:

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1} + \|p - p_h\|_{L_2} \leq \eta(\mathbf{u}_h, p_h),$$

mit

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{u}_h, p_h) \equiv C_s C_I & \left[\left\{ \sum_K h^4 \|\mathbf{f} - \mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{u}_h + \Delta \mathbf{u}_h - \nabla p_h\|_K^2 \right\}^2 \right. \\ & + \left\{ \sum_K h_K^3 \sum_{\Gamma \subset K} \left\| [p_h \cdot \mathbf{n} - \frac{\partial \mathbf{u}_h}{\partial \mathbf{n}}] \right\|_{L_2(\Gamma)}^2 \right\} + \left\{ \sum_K h_K^4 \|\nabla \cdot \mathbf{u}_h\|_K^2 \right\} \\ & \left. + \left\{ \sum_K \delta_K^2 \|\mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{u}_h + \nabla p_h - \mathbf{f}\|_K^2 \right\} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Der erste Term in (6.14) stellt das Residuum im einzelnen Element dar und konvergiert mit h^4 . Bei linearen Ansätzen verschwindet der diffusive Term $\Delta \mathbf{u}_h$. Der zweite Term beschreibt den Sprung der Geschwindigkeitsgradienten und des Drucks über die Kanten eines Elements und konvergiert mit h^3 , wobei der Sprung einer Größe Φ über einer Kante E eines Elements K in Richtung der Normalen \mathbf{n}_E definiert ist durch:

$$[\Phi]_E(x) = \lim_{\rho \rightarrow +0} \Phi(x + \rho \mathbf{n}_E) - \lim_{\rho \rightarrow +0} \Phi(x - \rho \mathbf{n}_E).$$

Der dritte Term in (6.14) berücksichtigt die Nebenbedingung $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Die Stabilisierung geht mit dem letzten Term ebenfalls in die Abschätzung mit ein. Da die Konstanten sowie die Konvergenzordnung für die FVM nicht bekannt sind, werden für die einzelnen Terme (6.15) Gewichte $\omega_i \in [0..1]$ eingeführt. Der Fehlerindikator η_K wird nun folgendermaßen berechnet:

$$\eta_K := \omega_r |\eta_{res}| + \omega_{ju} |\eta_{ju}| + \omega_d |\eta_d|. \quad (6.15)$$

Der Index r steht für das Residuum, ju für den Sprung über die Elementkante und d für die Divergenzfreiheit. Da der Stabilisierungsterm über die Integrationsgeschwindigkeiten in der Kontinuitätsgleichung enthalten ist, wird der Term für die Stabilisierung nicht explizit angeführt. Bei der vertex-centered FVM entsprechen die Kontrollvolumina nicht den Elementen. Die Fehlerindikatoren werden aber lokal elementweise ausgewertet. Im Sinne einer geeigneten Notation wird eine Umgebung sowohl für die ein Kontrollvolumen betreffenden Elemente und Knoten, als auch die eine Kante betreffenden Elemente definiert. Es sei:

$$\begin{aligned} \text{Elementumgebung: } U(K) & := \bigcup_{K': K' \cap K \neq \emptyset} K' \\ \text{Integrationspunktumgebung: } U(ip) & := \bigcup_{ip': ip' \cap KV(co), co \cap K \neq \emptyset} ip' \\ \text{Kantenumgebung: } U(E) & := U(\mathcal{E}_K), \end{aligned}$$

wobei \mathcal{E}_K die Menge der Kanten eines Elements, und $U(\mathcal{E}_K)$ die Umgebung davon darstellt. Die Elementumgebung $U(K)$ besteht aus der Vereinigung der Träger derjenigen nodalen Ansatzfunktionen, die den Eckpunkten von K zugeordnet sind. Die Integrationspunktumgebung $U(ip)$ ist die Menge aller Integrationspunkte, die denjenigen Kontrollvolumina KV angehören, welche wiederum einem Knoten co des Elements K zugeordnet sind.

Die einzelnen Terme werden nun mit der FVM bestimmt und sehen wie folgt aus:

- Residuum auf dem Element

$$\begin{aligned}
\eta_{res} &:= \|\mathbf{f} - \mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{u}_h + \nu \Delta \mathbf{u}_h - \nabla p_h\|_K \\
&\leq \|\mathbf{f}\|_K + \|-\mathbf{u}_h \cdot \nabla \mathbf{u}_h + \nu \Delta \mathbf{u}_h - \nabla p\|_K \\
&= \|\mathbf{f}\|_K + \|-\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_h \mathbf{u}_h + \nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_h - \mathbf{n} p_h\|_{bf(K)} \\
&= \int_K \mathbf{f} \, dV_K + \int_{bf(K)} -\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_h \mathbf{u}_h + \nu \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_h - \mathbf{n} p_h \, dS \\
&= \sum_{K' \subset U(K)} \left[\sum_{co' \subset K'} \mathbf{f}_{co'} |SKV|_{co'} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{ip' \subset U(ip)} \mathbf{n}_{ip} \sum_{co \subset K'} -N_{co'}(ip) \mathbf{u}_{co'} \mathbf{u}_{co'} + \nu \nabla N_{co'}(ip) \mathbf{u}_{co'} - N_{co'}(ip) p_{co'} \right],
\end{aligned}$$

wobei bf die Kanten der zum Element K gehörenden Kontrollvolumina und $|SKV|$ das Volumen eines Subkontrollvolumens bezeichnen.

- Sprung über die Elementkanten

$$\begin{aligned}
\eta_{ju} &:= \|[p_h \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_h]\|_{bf(K)} \tag{6.16} \\
&= \frac{1}{n_{\mathcal{E}_K}} \int_{E' \subset U(E)} (p_h \mathbf{n}_{E'} - p'_h \mathbf{n}_{E'}) - (\mathbf{n}_{E'} \cdot \mathbf{u}_h - \mathbf{n}_{E'} \mathbf{u}'_h) \, dS \\
&= \frac{1}{n_{\mathcal{E}_K}} \sum_{E' \subset U(E)} \sum_{co \subset K} \left[(N_{co}(ip_E) p_{co} \mathbf{n}_{E'} - N'_{co}(ip_E) p'_{co}) \right. \\
&\quad \left. - (\mathbf{n}_{E'} \cdot \nabla N_{co}(ip_E) \mathbf{u}_{co} - \mathbf{n}_{E'} \cdot \nabla N_{co}(ip_E) \mathbf{u}'_{co}) \right]
\end{aligned}$$

- Divergenz auf dem Element

$$\begin{aligned}
\eta_{div} &:= \|\nabla \cdot \mathbf{u}_h\|_K = \|\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_h + c(\mathbf{u}_h, p_h) \mathbf{n}\|_{bf(K)} \\
&= \int_{bf(K)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_h + c(\mathbf{u}_h, p_h) \mathbf{n} \, dS = \sum_{ip' \subset U(ip)} \mathbf{n}_{ip} \cdot \mathbf{u}_{ip'}
\end{aligned}$$

Bei den numerischen Experimenten in den kommenden Kapiteln wird der residuenbasierte Fehlerindikator mit η_r bezeichnet.

Hierarchischer Fehlerindikator

Bei der hierarchischen Fehlerabschätzung [133] wird die approximative Lösung $u_h \in V_h$ zu einer entsprechenden Approximation in einem erweiterten Ansatzraum W_h geschätzt, wobei $V_h \subset W_h \subset X$. Der erweiterte Raum W_h besteht aus Ansätzen höherer Ordnung bzw. wie hier angewendet, aus einem erweiterten Raum, der durch Gitterverfeinerung erzeugt wird. Es handelt sich also um eine Abschätzung des Diskretisierungsfehlers. Im hier vorliegenden Kontext des Mehrgitterverfahrens stellen die Ebenen in der Gitterhierarchie die unterschiedlich großen Ansatzräume dar. Gibt es keine krummen Ränder, so sind die diskreten Räume $V_{h,i}$, $i \in \mathcal{N}_0$ auf den Gitterebenen l_i geschachtelt, d.h. es gilt:

$$V_{h,1} \subset V_{h,2} \subset V_{h,3} \dots$$

Bei der Berücksichtigung krummer Ränder sind die Räume zwar nicht geschachtelt, konvergieren aber im Sinne von (6.4). Die Idee nun ist die Folgende: Sind zwei approximative Lösungen $u_1 := u_{h_1} \in V_{h,1}$ und $u_2 := u_{h_2} \in V_{h,2}$ mit $V_{h,1} \subset V_{h,2}$ vorhanden, und gilt in diesem Bereich eine uniforme Konvergenz für u_1 und u_2 , so gilt:

$$\|u - u_2\| < \|u - u_1\|;$$

die Lösung u_2 auf dem feineren Gitter τ_2 ist der exakten Lösung näher als die Lösung u_1 auf dem gröberen Gitter τ_1 . Nach dem *Lemma von Céa* kann der Fehler $\|u - u_h\|_{\Omega_K}$ auf dem Element K mit dem Interpolationsfehler $\|u - \Pi u\|_{\Omega_K}$ nach oben abgeschätzt werden, wobei Π den Interpolationsoperator darstellt. Für die hier verwendeten linearen Ansatzfunktionen gilt für eine Funktion $u \in H^2(\Omega_K)$ [108]:

$$\|u - \Pi u\|_{2,\Omega_K} \leq Ch \|u\|_{2,\Omega}.$$

Es liegt nun nahe, eine beliebige Größe bzw. Funktion ϕ_l , wie beispielsweise die turbulente Viskosität ν_t , auf dem Gitter τ_l mit ϕ_{l+1} auf dem Gitter τ_{l+1} zu vergleichen und die Differenz als Maß für einen Fehlerindikator zu verwenden. Die hier verwendeten hierarchischen Fehlerindikatoren sind nun definiert durch

$$\eta_{hi} = \|\phi_2 - \phi_1\|_{K,L_2} \quad \text{in der } L_2\text{-Norm}$$

bzw.

$$\eta_{hi} = \|\nabla \phi_2 - \nabla \phi_1\|_{K,H^1} \quad \text{in der } H^1\text{-Norm.}$$

Man betrachte nun das Element $K \in \tau_2$ und deren Vaterelement $F \in \tau_1$, wobei vorausgesetzt wird, dass mindestens zwei Gitterebenen vorhanden sind. Die Fehlerindikatoren auf dem Element K werden nun an dem Massenschwerpunkt ξ_K mit

$$\begin{aligned} \eta_{hi} &:= |K| |\phi_K(\xi_K) - \phi_F(\xi_F)| \\ &= |K| \left| \sum_{co,K}^{nco,K} N_{co,K}(\xi_K) \phi_{co,K} - \sum_{co,F}^{nco,F} N_{co,F}(\xi_F) \phi_{co,F} \right| \end{aligned}$$

bestimmt, wobei $|K|$ das Volumen des Elements K darstellt. Für $\nabla \phi$ gilt sinngemäß:

$$\begin{aligned} \eta_{hi\nabla} &:= |K| |\nabla \phi_K(\xi_K) - \nabla \phi_F(\xi_F)| \\ &= |K| \left| \sum_{co,K}^{nco,K} \nabla N_{co,K}(\xi_K) \phi_{co,K} - \sum_{co,F}^{nco,F} \nabla N_{co,F}(\xi_F) \phi_{co,F} \right|. \end{aligned} \tag{6.17}$$

Fehlerindikator für den Gradientensprung

Eine ebenfalls elementweise Abschätzung des Fehlers für die Poisson-Gleichung liefert Johnson et al. in [73, 74], wobei hier der Gradientensprung über die Elementkanten als Maß eines Fehlers verwendet wird. Obgleich dieser Fehlerindikator auf den oben beschriebenen residuenbasierten Fehlerindikator bei entsprechender Wahl der Gewichtungparameter überführt werden kann, wird dieser hier als eigenständiger Indikator verwendet. Mit dem dritten Term aus (6.14) lautet die Abschätzung des Fehlers bezüglich des Gradientensprunges über die Elementkanten folgendermaßen, wobei der Druckterm nicht berücksichtigt wird:

$$\eta_{ju}(\mathbf{u}_h) \equiv \sum_K h_K^4 \|\nabla \cdot \mathbf{u}_h\|_K^2.$$

Mit der hier verwendeten FVM lautet der Fehlerindikator schließlich analog zu (6.16):

$$\begin{aligned}
\eta_{ju} &:= \|\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_h\|_{bf(K)} \\
&= \frac{1}{n_{\mathcal{E}_K}} \int_{E' \subset U(E)} \mathbf{n}_{E'} \cdot \mathbf{u}_h - \mathbf{n}_{E'} \mathbf{u}'_h \, dS \\
&= \frac{1}{n_{\mathcal{E}_K}} \sum_{E' \subset U(E)} \sum_{co \subset K} \left[(\mathbf{n}_{E'} \cdot \nabla N_{co}(ip_E) \mathbf{u}_{co} - \mathbf{n}_{E'} \cdot \nabla N_{co}(ip_E) \mathbf{u}'_{co}) \right].
\end{aligned} \tag{6.18}$$

Maximum Indikator

Als besonders einfacher Indikator sei hier der Maximum Indikator η_{max} angeführt. Es gibt hier keine mathematisch rigorose Herleitung. Dieser heuristische Indikator detektiert elementweise eine entsprechende Größe, wie die turbulente Viskosität oder Wirbelstärke, oder Funktion ϕ nach ihrer Größe. Die Motivation für den Einsatz dieses Indikators liegt in der Annahme, dass dort, wo die turbulente Intensität oder kinetische Energie groß ist, auch entsprechend hohe Modellfehler anzutreffen sind. Die hohen Spannungen und teilweise hohen Gradienten legen wiederum die Vermutung nahe, dass dort auch der Diskretisierungsfehler groß ist. Insofern wird über eine turbulente Größe, die zunächst nicht mit der Diskretisierung zusammenhängt, ein Zusammenhang zum Diskretisierungsfehler hergestellt.

Der volumengemittelte Maximum Indikator ist nun folgendermaßen definiert:

$$\eta_{max} := \frac{1}{|K|} \sum_{co \in K} \phi_{co} \, scv_{co}, \tag{6.19}$$

wobei scv_{co} das Volumen des Subkontrollvolumens darstellt. Bei einem Vektor wie bspw. der Geschwindigkeit wird $\phi := \sqrt{\sum_{i=1}^n u_i}$ gesetzt, wobei n die Raumdimension bezeichnet. Liegt der durch (6.19) bestimmte Wert unterhalb der Schranke $C_{ref} \eta_K$, so wird dieses Element für die Verfeinerung markiert, bzw. liegt dieser Wert oberhalb der Schranke $C_{coa} \eta_K$, so wird dieses zur Vergrößerung markiert.

Bemerkung 10 (Indikator und Fehlerindikator). Der residuenbasierte Indikator ist ein echter Fehlerindikator, da dieser den Diskretisierungsfehler misst. Hierzu gehören ebenfalls η_{hi} und η_{ju} . Demgegenüber steht der Maximum-Indikator, der nicht einen Fehler, sondern ein beliebiges Maß bezüglich ihrer Größe misst. Insofern muss zwischen einem Indikator und einem Fehlerindikator unterschieden werden, obgleich sich beide Indikatorrentypen als Verfeinerungs- bzw. Vergrößerungskriterium eignen.

6.4.3. Maß für Indikatoren

Beim residuenbasierten Fehlerindikator sind die zu Grunde liegenden Größen aus der Herleitung die primitiven Variablen u_i und p . Für die Indikatoren η_{ju} , η_{hi} und η_{max} können beliebige Größen verwendet werden. In dieser Arbeit werden folgende Maße verwendet:

- Wirbelstärke
- Subskalenaktivität
- turbulente Viskosität

Die physikalische Bedeutung und deren mathematische Formulierung wurden bereits in Abschnitt 3.5 beschrieben. Als Maß für die verschiedenen Indikatoren liefern diese natürlich unterschiedliche Ergebnisse bei identischen Parametern. Es ist a priori nicht abschätzbar, welches Maß als Verfeinerungs- bzw. Vergrößerungskriterium am besten geeignet ist, den Modell- und Diskretisierungsfehler zu minimieren. Insofern werden diese auf unterschiedliche Problemstellungen angewandt und bewertet (Näheres in den Kapiteln 7 und 8).

Betrachtet man die Turbulenz vor dem Hintergrund der Wirbeldynamik (siehe Abschnitt 3.2), so bietet sich die Wirbelstärke ω als natürliches Turbulenzmaß an. In turbulenten Bereichen ist auch die Wirbelstärke ausgeprägter, im Wert also höher. Verfeinert man nun die Elemente mit lokal hoher Wirbelstärke bzw. wird das Gitter an Stellen geringerer Wirbelstärke vergrößert, so resultiert ein Gitter, auf dem die turbulenten Strukturen gleichmäßig aufgelöst werden; d.h. der Modellfehler, der einerseits mit zunehmender turbulenter Intensität und andererseits mit größer werdender Filterweite zunimmt, wird gleichmäßig über das Gitter verteilt. Der Maximum Indikator beispielsweise für die Wirbelstärke auf dem Element K ist folgendermaßen definiert:

$$\eta_{max}(\omega) := \|\omega\|_K = \frac{1}{|K|} \left| \int_K \nabla \times \mathbf{u} \, dV_K \right|.$$

Anstelle der Wirbelstärke kann auch entsprechend die turbulente Viskosität und Subskalenaktivität als Maß eingesetzt werden. Für die Indikatoren η_{ju} , η_{hi} und η_{max} sind in (6.17), (6.18) und (6.19) die Größen ϕ bzw. \mathbf{u} durch die oben erwähnten Maße zu ersetzen.

6.4.4. Qualität und Verlässlichkeit von LES

Obleich der bereits in der Einführung erwähnten positiven Zukunftsaussichten für die LES, seien hier ein paar Anmerkungen bezüglich der Güte von LES-Lösungen angebracht. Die Tatsache, dass es bereits Konferenzen gibt⁸, die sich ausschließlich mit der Frage beschäftigen, welche Güte die Lösung mit einem bestimmten LES-Modell aufweist, zeigt, dass die LES bereits fest etabliert ist, aber nach wie vor viele auch fundamentale Fragen offen sind. Es ist beispielsweise nicht klar, wie fein das Gitter bei einem bestimmten Modell sein muss. Manche Autoren gehen von 10η , andere von 6η aus, wobei η hier die Kolmogorovschen Skalen darstellen. Es kann auch vorkommen, dass die beiden Fehlerkomponenten Modell- und Diskretisierungsfehler sich gegenseitig aufheben und bei zunehmender Verfeinerung und konstanter Gitterweite die Lösung schlechter wird. Andererseits kann eine Verbesserung des Modells auch wiederum eine Verschlechterung der Gesamtlösung nach sich ziehen [90].

Einen interessanten Weg zeigen Addad et al. in [1], wo wesentlich weniger aufwendige RANS-Rechnungen als Präprozess zur Bestimmung eines für die LES optimalen Gitters verwendet werden.

Klein et al. zeigen in [79] eine Möglichkeit, mit einigen wenigen LES-Rechnungen, bei denen unterschiedliche Parameter verändert werden, diejenige mit den geringsten Fehlern zu bestimmen. Es gibt auch bereits Fehlerschätzer, die aus mathematisch rigoroser Sicht den Fehler schätzen. Ein Beispiel ist der dual-gewichtete Fehlerschätzer von Hoffman [70].

Es gibt eine Fülle von mehr oder weniger universell einsetzbaren Methoden. Die hier beschriebene und an einigen Beispielen demonstrierte Methode reiht sich einerseits ein in die klassische Fehlerabschätzung und kann somit auf ein theoretisches Gerüst und entsprechenden bereits vorhandenen Verfahren bzw. Algorithmen zurückgreifen. Zum anderen kann durch die oben gezeigten heuristisch motivierten Indikatoren unabhängig von mathematischer Rigorosität flexibel auf LES-Problemstellungen eingegangen und diese auch, wie weiter unten gezeigt wird, erfolgreich gelöst werden.

⁸z.B. QLES, Quality and Reliability on Large Eddy Simulations; Leuven, Belgien, 2007

7. Jet in Crossflow

Die vorgestellten numerischen Verfahren werden nun am *Jet in Crossflow*-Problem (*Strahl in Scherströmung*) in zwei Raumdimensionen untersucht. Es handelt sich hierbei um einen Strahl mit der Geschwindigkeit u_{jet} , der in eine Scherströmung der Geschwindigkeit u_{∞} mündet (Abbildung 7.1). Die Strömung wird als isotherm angenommen, womit also kein Auftriebsterm und keine zusätzliche Transportgleichung berücksichtigt werden müssen. Das uniforme (strukturiert) Gitter

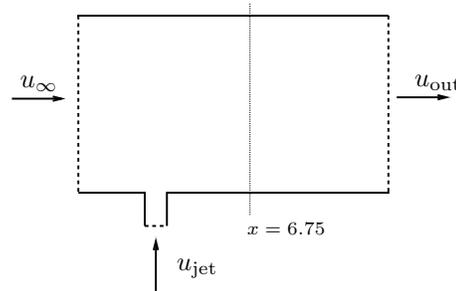


Abbildung 7.1.: Geometrie mit Ein- und Ausströmrandbedingung des *Jet in Crossflow*-Problems.

besteht aus 618 Vierecken. Durch sukzessive uniforme Verfeinerung wird eine Gitterhierarchie mit den Ebenen $l_0..l_4$ (siehe Tabelle 7.1) erzeugt. Das zu integrierende Zeitintervall beträgt $t = 160s$ und erfordert bei kleinen Zeitschrittweiten über 10000 Zeitintegrationsschritte. Die Einströmge-

Ebene i	h_i	#Vierecke	#Gitterpunkte	# Unbekannte
0	0.5	618	670	2010
1	0.25	2472	2575	7725
2	0.125	9888	10093	29664
3	0.0625	39552	39961	118656
4	0.03125	158208	159025	477075

Tabelle 7.1.: Gitterhierarchie des *Jet in Crossflow*-Problems.

schwindigkeit beträgt $u_{\text{jet}} = 3.0 \text{ m/s}$ für den Strahl und $u_{\infty} = 1.0 \text{ m/s}$ für die Scherströmung. Im Gegensatz zum Einströmrand wird am Ausströmrand der Druck als Dirichlet-Bedingung mit $p_{\text{ref}} = 0$ vorgeschrieben. Für die Wand werden mit $u_{i,w} = 0 \text{ m/s}$ Hafttrandbedingungen vorgegeben. Mit der kinematischen Viskosität von $\nu = 5.41e-3 \text{ m}^2/\text{s}$ beträgt die Reynoldszahl $Re = 555$. Es handelt sich um eine schwach turbulente Strömung [37]. Die geringe Reynoldszahl und somit geringe turbulente Intensität wurde gewählt, um einerseits eine DNS mit geringem Aufwand realisieren und andererseits laminare Randbedingungen verwenden zu können. Letzteres ist ein nicht zu unterschätzender Vorteil, da bei turbulenten Randbedingungen das Spektrum der Einströmgeschwindigkeiten unbekannt ist und abgeschätzt werden muss. Dies kann u.U. zu großen Abweichungen gegenüber Experimenten bzw. Vergleichssimulationen anderer Autoren führen.

Diese Konfiguration ist bezüglich der Turbulenz nicht mit dem Pendant in drei Raumdimensionen zu vergleichen, da die für die Anfachung der Turbulenz wichtigen Instabilitäten in der dritten Raumdimension fehlen. Für die Entwicklung der numerischen Methodik und die resultierenden Schlussfolgerungen ist die Betrachtung in zwei Raumdimensionen allerdings von großer Bedeutung, da durch die reduzierte Komplexität eine wesentlich umfangreichere Parameterstudie möglich ist. Trotzdem sei hier noch die Kolmogorovsche Längenskala (3.9a) mit $\eta = 0.026m$ und Zeitskala (3.9b) mit $\tau = 0.17s$ angegeben. Gitterebene l_4 löst die räumlichen Kolmogorovschen Skalen gerade nicht mehr auf, wohingegen mit der zweitgrößten Zeitschrittweite von $\Delta t = 0.1s$ die zeitlichen Kolmogorovschen Skalen aufgelöst werden.

Für die im folgenden systematischen Untersuchungen wird das klassische Smagorinsky-Modell verwendet. Wegen seiner Linearität lassen sich nichtlineare Effekte wie beim dynamischen oder Wirbelviskositätsmodell ausschließen.

Lösungsstrategie

Die beschriebene Problemstellung wird nun gemäß dem Lösungsalgorithmus 2 gelöst. Für die Zeitintegration wird das Alexander-Schema (5.3) verwendet. In jedem Zeitschritt muss das Problem gemäß (5.5)

$$F_{\Theta}^{j,j-1}(\tilde{\mathbf{x}}^{j-1}, \tilde{\mathbf{x}}^{j-1+\Theta}, \tilde{\mathbf{x}}^j) = 0$$

zweimal gelöst werden. Die nichtlineare Newton-Iteration wird beendet, falls gilt:

$$\|d_{\Theta}^j(\tilde{\mathbf{x}})\|_2 \leq 10^{-7} \|d_{\Theta}^{j-1}(\tilde{\mathbf{x}})\|_2.$$

Das linearisierte Problem (3.14a) und (3.14b) wird mit dem mit einem $V(2,2)$ Mehrgitterzyklus und ILU-Glätter präkonditionierten BiCGStab-Verfahren gelöst. Das lineare Verfahren benötigt ein bis zwei Iterationen bis die erforderliche Defektreduktion von einer Größenordnung erreicht wird.

7.1. Lösungsverlauf und Verifikation auf uniformen Gittern

In Abbildung 7.2 ist die axiale Geschwindigkeitskomponente u_1 auf Gitterebene l_2 zu drei Zeitpunkten dargestellt. Es bilden sich zuerst zwei Wirbel, die mit fortschreitender Zeit in mehrere

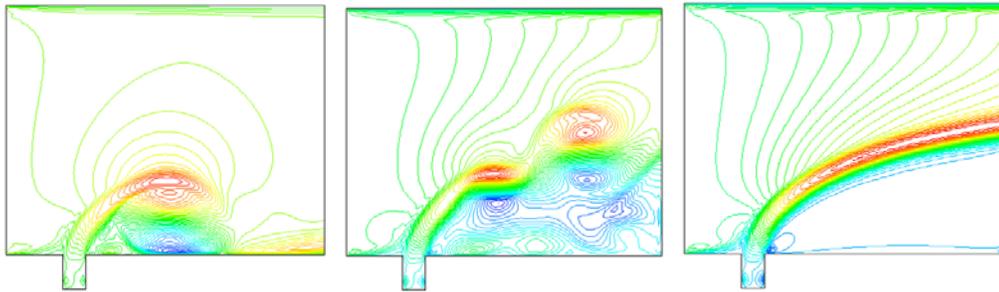


Abbildung 7.2.: u_1 nach $t_1 = 10s, t_2 = 70s, t_3 = 160s$ auf Gitterebene l_2 .

kleinere Wirbel zerfallen. Schließlich bildet sich eine quasi-stationäre Strömung aus. Da die kinetische Energie E_{kin} (3.29) eine wichtige Rolle für die weiteren Untersuchungen spielt, ist diese zu denselben Zeitpunkten in Abbildung 7.3 dargestellt.

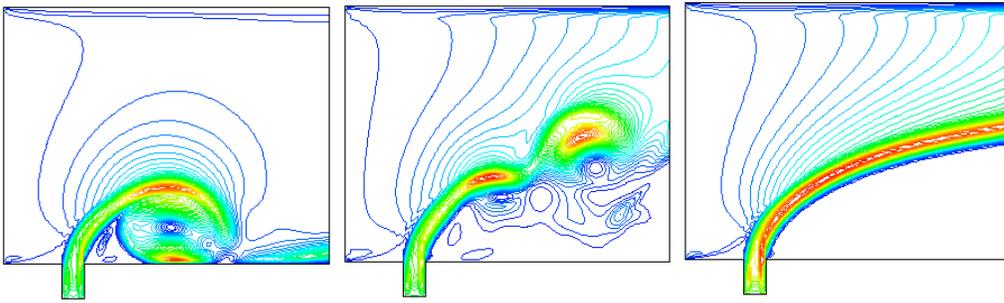


Abbildung 7.3.: E_{kin} nach $t_1 = 10s, t_2 = 70s, t_3 = 160s$ auf Gitterebene l_2 .

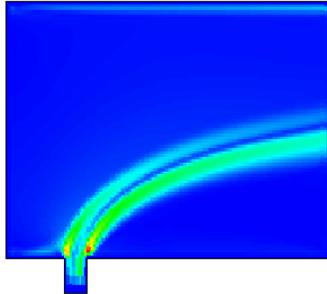


Abbildung 7.4.: Turbulente Viskosität im quasi-stationären Zustand auf Gitterebenen l_2 .

Die durch das Smagorinsky-Modell erzeugte turbulente Viskosität im quasi-stationären Zustand auf Gitterebenen l_2 ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Die höchste turbulente Viskosität tritt in den Eckbereichen des Freistrahles auf und folgt den Bereichen erhöhter kinetischer Energie.

Es sei nochmals angemerkt, dass es sich hier um keine wirklich turbulente Strömung handelt. Grundsätzliche Effekte können allerdings besonders gut untersucht werden, da keine aufwendige Zeitmittelung erforderlich ist.

Da wie in diesem Fall keine exakte Referenzlösung zur Verfügung steht, wird die Verifikation der Ergebnisse im Sinne der Gitterkonvergenz (siehe Kapitel 6.2) vorgenommen. Hierzu wurden diverse numerische Experimente durchgeführt, die sich durch uniforme Verfeinerung sowohl in der Zeit als auch im Raum unterscheiden. Im Folgenden wird zunächst die Konvergenz bezüglich der Zeitdiskretisierung und anschließend die Konvergenz der räumlichen Diskretisierung betrachtet.

7.1.1. Konvergenz in der Zeit

Der Einfluss der Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.1 s$, $\Delta t_2 = 0.05 s$, $\Delta t_3 = 0.025 s$, $\Delta t_4 = 0.0125 s$ und $\Delta t_5 = 0.00625 s$ auf Gitter τ_3 bez. der kinetischen Energie E_{kin} einmal im Zeit- und Frequenzraum ist in Abbildung 7.5 dargestellt. Im Zeitbereich ist die Zeitschrittweitenabhängigkeit der kinetischen Energie während des Einschwingvorganges deutlich zu erkennen. Es ist kein konvergentes Verhalten festzustellen. Auch im quasi-stationären Zustand ab etwa $t = 140 s$ kann keine Konvergenz festgestellt werden (Konsistenzordnung $p < 0 \rightarrow$ Divergenz (siehe Tabelle A.2)). Im Frequenzbereich ist zwar eine klarere Abgrenzung zwischen den unterschiedlichen Zeitschrittweiten zu erkennen, speziell der Graph Δt_5 zeigt allerdings deutlich, dass auch hier von keiner

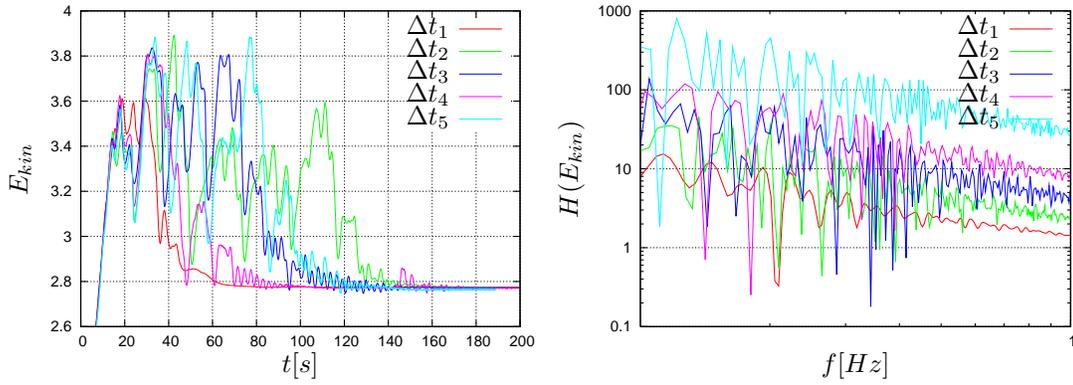


Abbildung 7.5.: Einfluss der Zeitschrittweiten Δt_1 , Δt_2 , Δt_3 , Δt_4 , Δt_5 auf E_{kin} auf Gitter τ_3 im Zeit-(links) und Frequenzraum (rechts).

konvergenten Folge gesprochen werden kann.

Ein ähnliches Bild zeigt sich bei der Subskalendissipation ϵ_{sgs} (3.33). Diese Größe gibt an, wie groß der Energietransfer von den großen zu den kleinen Skalen ist. Beim hier verwendeten Smagorinsky-Modell wird Energie ausschließlich von den großen zu den kleinen Skalen transportiert, also Energie aus dem aufgelösten Energiebereich entnommen; ϵ_{sgs} ist somit stets negativ. In Abbildung 7.6 ist diese auf Gitter τ_3 mit denselben Zeitschrittweiten wie bei der kinetischen Energie dargestellt. Mit zunehmender Zeitschrittweite nimmt die Subskalendissipation sowohl

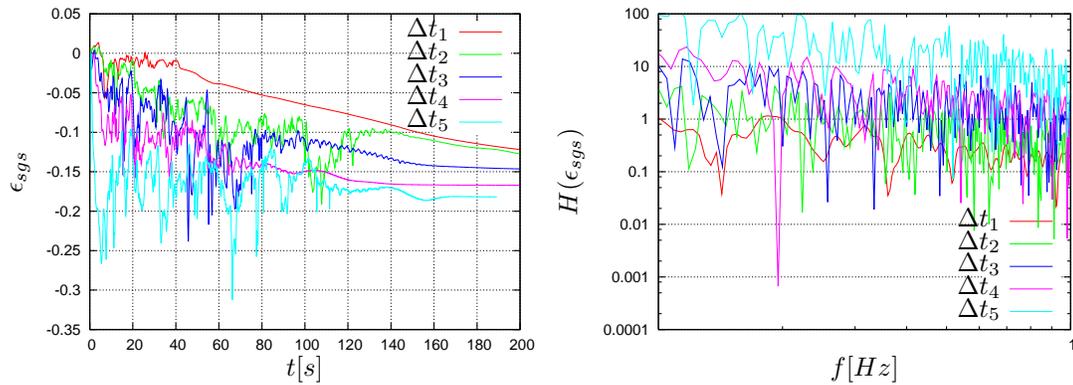


Abbildung 7.6.: Einfluss der Zeitschrittweiten Δt_1 , Δt_2 , Δt_3 , Δt_4 , Δt_5 auf ϵ_{sgs} auf Gitter τ_3 im Zeit-(links) und Frequenzraum (rechts).

im Zeitbereich auch als auch im Frequenzraum ab, doch nimmt der Abstand der Graphen mit kleiner werdender Zeitschrittweite nicht ab, sondern zu.

Zur Beurteilung der Zeitschrittweite auf unterschiedlichen Gitterebenen wird die zeitlich gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} auf den Gitterebenen l_1 , l_2 und l_3 für die oben genannten unterschiedlichen Zeitschrittweiten in Abbildung 7.7 betrachtet. Der Einfluss der Zeitschrittweite ist auf dem größten Gitter τ_1 am stärksten. Im Gegensatz zu den Gittern τ_2 und τ_3 , auf denen \bar{E}_{kin} mit zunehmender Schrittweite zunimmt, fällt auf τ_1 die kinetische Energie mit größer werdender Zeitschrittweite. Bezüglich der Gitterebenen ist eine konvergente Folge festzustellen.

Wird demgegenüber die zeitlich gemittelte maximale Subskalendissipation $\|\bar{S}\|_\infty$ (3.34) als Ver-

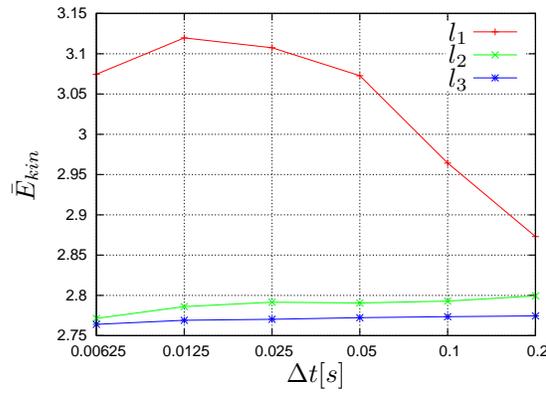


Abbildung 7.7.: Einfluss der Zeitschrittweiten auf \bar{E}_{kin} auf den Gittern τ_1 , τ_2 und τ_3 .

gleichsgröße herangezogen (siehe Abbildung 7.8), so kann hier auch keine zeitliche Konvergenz festgestellt werden. Die Größe weicht auf dem feinsten Gitter deutlich von den beiden anderen Gittern ab. Es ist also auch bezogen auf die Gitterebenen keine Konvergenz festzustellen. Ein

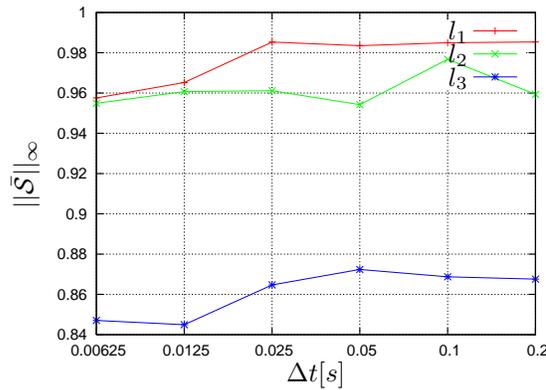


Abbildung 7.8.: Einfluss der Zeitschrittweiten auf die zeitlich gemittelte Subskalenaktivität $\|\bar{S}\|_\infty$ auf den Gittern τ_1 , τ_2 und τ_3 .

Ähnliches Verhalten zeigt sich somit bei der turbulenten Viskosität (skalierte Subskalenaktivität) ν_t und der Subskalendissipation ϵ_{sgs} .

Es sei hier nochmals angemerkt, dass ein nicht konvergentes Verhalten dadurch erklärt werden kann, dass mit kleiner werdender Zeitschrittweite mehr kleinskalige Bewegungen aufgelöst und somit mit unterschiedlicher Zeitschrittweite auch ein anderes Problem gelöst wird. Im schlechtesten Falle befindet sich eine Lösung erst dann im asymptotischen Bereich, wenn die Kolmogorovschen Skalen (DNS) aufgelöst werden. Eine andere Erklärung nahe an der Formulierung der turbulenten Viskosität könnte sein, dass der gesuchte Fixpunkt nicht im Einzugsbereich der gegebenen quadratischen Filterweite liegt (siehe Definition der turbulenten Viskosität beim Smagorinsky-Modell (3.17)).

Für die folgenden Betrachtungen mit Ausnahme der Gitterkonvergenz wird die konstante Zeitschrittweite $\Delta t = 0.1$ s verwendet. Bei dem hier verwendeten voll impliziten Verfahren wird

somit gegenüber kleineren Zeitschrittweiten die Anzahl der zur Integration eines gegebenen Zeitintervalles erforderlichen Zeitschritte reduziert. Zwar wird bei kleineren Δt der Grad der Nichtlinearität abgeschwächt, die Konvergenzrate verbessert und das Problem pro Zeitschritt etwas schneller gelöst, doch ist dieser Vorteil durch die Einsparung von Zeitschritten mehr als kompensiert. Beispielsweise werden bei $\Delta t = 0.2s$ auf τ_3 etwa 6, bei $\Delta t = 0.00625s$ durchschnittlich 4 nichtlineare Iterationen bei gleicher Defektreduktion benötigt. Bei kleinen Zeitschrittweiten werden 30% an nichtlinearen Iterationen eingespart, aber es sind $0.2/0.00625 = 32$ mal mehr Zeitintegrationsschritte erforderlich. Die CFL-Zahlen verändern sich von $CFL(\Delta t = 0.2s) = 12$ und $CFL(\Delta t = 0.00625s) = 0.4$ entsprechend.

Allerdings, wie bereits in Abschnitt 5.1.5 erwähnt, steigt die Notwendigkeit eines LES-Modells mit zunehmender CFL-Zahl.

Bemerkung 11 (Konvergenz auf Gitter τ_0). Auf niedrigster Gitterebene l_0 treten bei kleiner werdenden Zeitschrittweiten qualitativ unterschiedliche Lösungen auf. Eine Konvergenz bei der hier untersuchten Diskretisierung, die inhärent lokal ist, kann dann erwartet werden, wenn auch die Schwankungen an den Gitterpunkten nicht zu groß sind. Die Dynamik und damit die Transferate der Information von Gitterpunkt zu Gitterpunkt auf diesem groben Gitter ist zu groß, um diese adäquat mit dieser Diskretisierung zu erfassen. Bei numerischen Experimenten mit geringeren Reynoldszahlen und somit abgeschwächter Dynamik stellen sich demgegenüber konvergente Lösungen ein, was für eine ausreichende Auflösung des Informationsflusses spricht.

7.1.2. Räumliche Konvergenz: kinetische Energie

In Abbildung 7.9 ist die kinetische Energie E_{kin} über der Zeit für die durch sukzessive uniforme Verfeinerung entstehende Gitterfolge $\{\tau_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3\}$ aufgetragen. Es handelt sich hier um LES-

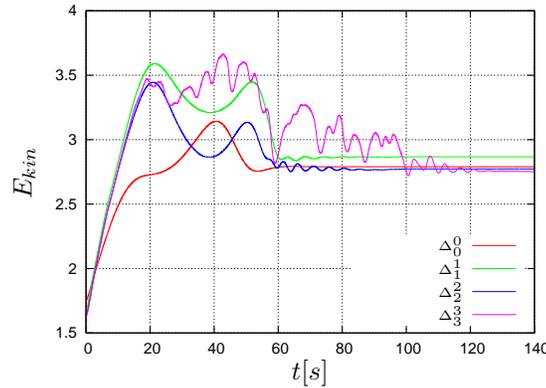


Abbildung 7.9.: E_{kin} auf Gitterebene l_0, l_1, l_2, l_3 mit entsprechend uniform verfeinerten Zeitschrittweiten.

Rechnungen mit der Filterweite Δ_l^l , für die Filterung wird also das Kontrollvolumen zu Grunde gelegt. Als Zeitschrittweite für das grobe Gitter wurde $\Delta t_0 = 0.25s$ gewählt. Die Zeitschrittweiten auf Gitterebene l_1, l_2 und l_3 ergeben sich durch Halbierung mit $\Delta t_1 = 0.125s$, $\Delta t_2 = 0.0625s$ und $\Delta t_3 = 0.03125s$.

Der Einschwingvorgang der jeweiligen Lösungen unterscheidet sich deutlich voneinander. Dies kann durch die Auflösung der unterschiedlichen Skalen sowohl in der Zeit als auch im Raum erklärt werden. Je kleiner die Maschenweite bzw. Zeitschrittweite, umso kleinere Skalen können aufgelöst werden. Im quasi-stationären Bereich allerdings, abgesehen von $x_{LES}(\Delta_0^0, h_0)$, die aus

oben genanntem Grund nicht für die Bewertung der Gitterkonvergenz verwendet wird, verringert sich der Abstand zwischen den Lösungen mit zunehmender Gitterebene, was auf eine konvergente Numerik deutet. Aus Tabelle A.4 ergibt sich eine Approximationsordnung in \bar{E}_{kin} von $p = 2.0$ (siehe Richardsonabschätzung (4.23)), was auch der theoretischen Gesamtordnung des numerischen Verfahrens entspricht.

Es stellt sich bezüglich der Konvergenz die Frage, wie sich die Lösungen auf einer Gitterebene mit unterschiedlichen Filterweiten verhalten. Da der Einfluss des Diskretisierungsfehlers somit konstant ist, zeigt sich das Konvergenzverhalten des LES-Modells. Dazu wurden numerische Experimente auf Gitterebene l_3 mit jeweils unterschiedlichen Filterweiten durchgeführt. Die Folge von Lösungen mit zukzessiv vergrößerten Filterweiten auf Gitterebene l_3 ist in Abbildung 7.10 dargestellt und besitzt die Ordnung $p = 1.1$ (siehe Tabelle A.5). Hier ist festzuhalten, dass das

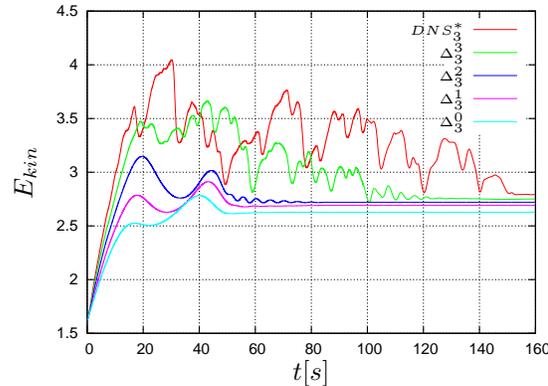


Abbildung 7.10.: E_{kin} auf Gitterebene l_3 mit den größer werdenden Filterweiten Δ_3^i , $i = 3, 2, 1, 0$.

System mit zunehmender Filterweite und die dadurch induzierte erhöhte turbulente Viskosität immer stärker gedämpft wird. Die kinetische Energie im System sinkt also. Dieses schlüssige Verhalten kann durch die Betrachtung im asymptotischen Bereich veranschaulicht werden: Im Grenzfall $\lim_{\Delta \rightarrow \Omega} \bar{u} = konst$ wird über das ganze Gebiet Ω gemittelt, was auf eine konstante Lösung hinausläuft. Auf der anderen Seite nähert sich die LES-Lösung mit $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \bar{u} = u$ der DNS-Lösung.

Rechnungen mit größer werdenden Filterweiten auf den Gitterebenen l_1 und l_2 zeigen ein ähnliches Verhalten.

In Abbildung 7.11 ist die kinetische Energie der Lösungen $x_{LES}(\Delta_1^1)$, $x_{LES}(\Delta_2^1)$, $x_{LES}(\Delta_3^1)$ dargestellt. Da die Filterweiten relativ zueinander konstant sind, ist der Einfluss des LES-Modells auch konstant. Es zeigen sich in erster Linie also Gittereffekte. Die Ordnung $p = 1.8$ folgt aus Tabelle A.6.

Bemerkung 12 (Kinetische Energie als Vergleichsmaß). Es wurden Lösungen auf unterschiedlichen Gitterebenen mit variierenden Filterweiten miteinander verglichen. Das Vergleichsmaß ist die kinetische Energie E_{kin} . Die Konvergenz des Gesamtverfahrens, also einerseits des Diskretisierungsverfahrens und andererseits des Turbulenzmodells, besitzt die Ordnung 2.016 (Abbildung 7.9). Die Konvergenzordnung des Turbulenzmodells mit $p = 1.1$ (Abbildung 7.10) ist etwa halb so groß und die der Diskretisierung mit $p = 1.8$ ist auch kleiner. Die Interaktion der beiden Fehleranteile für das Modell einerseits und die Diskretisierung andererseits erhöht offensichtlich die Ordnung des Gesamtverfahrens. Die unterschiedlichen Vorzeichen beider Fehlerkomponenten, die weiter unten noch näher betrachtet werden, können dies erklären.

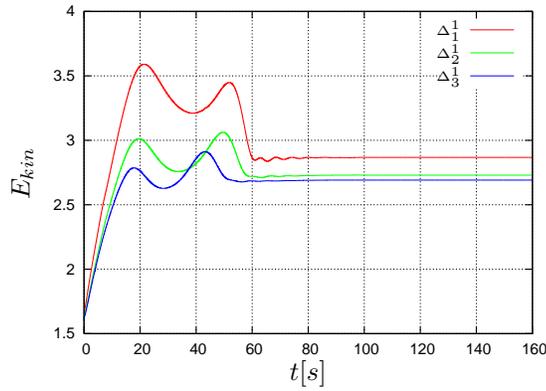


Abbildung 7.11.: E_{kin} auf den Gitterebenen l_i mit konstanter Filterweite Δ_i^1 , $i = 1, 2, 3$.

7.1.3. Räumliche Konvergenz: Subskalendissipation

Bisher wurde ausschließlich die kinetische Energie untersucht. Um genauere Informationen über das Turbulenzmodell und speziell über dessen dissipatives Verhalten zu gewinnen, wird nun die Subskalendissipation ϵ_{sgs} (3.33) herangezogen. In Abbildung 7.12 ist die Subskalendissipation für die Gitterebenen l_i mit den Filterweiten Δ_i^i für $i = 1, 2, 3$ dargestellt. Die Subskalendissipati-

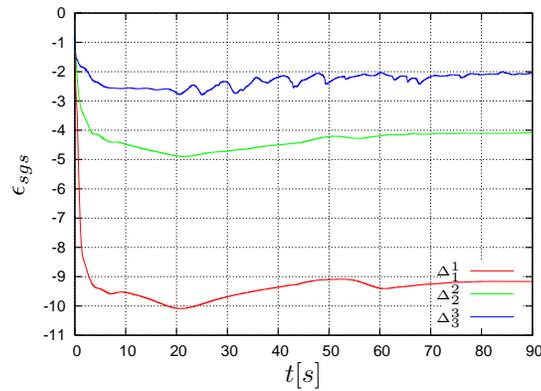


Abbildung 7.12.: ϵ_{sgs} auf Gitterebene l_i mit Filterweite Δ_i^i , $i = 1, 2, 3$.

on verringert sich erwartungsgemäß mit kleiner werdender Filterweite. Dies bestätigt prinzipiell das Verhalten der Subskalendissipation im asymptotischen Bereich, für den $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \epsilon_{sgs} = 0$ gilt. Führt man auch hier eine Richardson-Abschätzung (4.23) durch, so erhält man eine Approximationsordnung von $p = 1.3$ für das Gesamtverfahren (siehe Tabelle A.7).

Desweiteren wird die Subskalendissipation auf Gitterebene l_3 mit den Filterweiten Δ_3^i , $i = 3, 2, 1$ (siehe Abb. A.1) verglichen. Wie bereits erwähnt, lässt sich hierdurch der Einfluss des Modells extrahieren. Die Ordnung beträgt $p = 1.9$ (siehe Tabelle A.8).

Abschließend wird mit der konstanten Filterweite Δ_i^1 die Subskalendissipation auf den Gitterebenen l_i , $i = 1, 2, 3$ verglichen. Hierdurch wird der Einfluss des Modells konstant (siehe Abbildung A.2) gehalten und die Ordnung des Diskretisierungsfehlers kann mit $p = 4.8$ (siehe Tabelle A.9) angegeben werden.

Bemerkung 13 (Vergleichsmaß Subskalendissipation). Obwohl das Gesamtverfahren eine Ordnung von $p = 1.3$ aufweist, besitzen der Diskretisierungsfehler mit $p = 4.8$ und Modellfehler 1.9 höhere Ordnungen. Die Fehler verhalten sich also entgegengesetzt verglichen mit den Fehlern bei der kinetischen Energie. Die hohe Ordnung des Diskretisierungsfehlers weist darauf hin, dass die zur Ordnungsbestimmung verwendeten Lösungen sich nicht im asymptotischen Bereich befinden¹.

7.1.4. Diskretisierungs- und Modellfehler

Es wird zunächst der Frage nachgegangen, wie das Verhältnis Diskretisierungs- zu Modellfehler beim *Jet in Crossflow*-Problem aussieht. Hierzu wurden Produktionsrechnungen auf den Gitterebenen l_0, l_1, l_2 durchgeführt, die mit entsprechenden Lösungen auf höheren Gitterebenen verifiziert werden. Als Produktionsrechnung wird eine Rechnung bezeichnet, wenn eine für das gegebene Problem typische Gitterweite mit dem Kontrollvolumen als Filterweite verwendet wird (siehe Abschnitt 6.3).

Diskretisierungsfehler

Beim Vergleich der Diskretisierungsfehler werden grundsätzlich Lösungen verglichen, die dieselbe Filterweite besitzen. Der Modellfehler ist also derselbe und wird durch Subtraktion zweier Lösungen eliminiert. Werden nun die Diskretisierungsfehler für Produktionsrechnungen auf unterschiedlichen Gitterebenen mit Referenzlösungen auf höheren Gitterebenen mit derselben Filterweite gemäß (6.7) bestimmt, und wird die kinetische Energie E_{kin} für das Maß einer Lösung eingesetzt, so erhält man für das *Jet in Crossflow*-Problem die in in Abbildung 7.13 dargestellten Graphen. Zur Notation sei nochmals auf (6.9) und (6.10) verwiesen. Die unterschiedlichen Farben stellen die Verwendung von Produktionsrechnungen auf verschiedenen Gitterebenen dar. Die Referenzlösung befindet sich stets auf Gitterebene l_3 . Die zunehmenden Strichstärken geben die größeren Filterweiten wieder. Der rote Graph in Abbildung 7.13 beispielsweise zeigt den Diskretisierungsfehler $ed_{0,3}^0$, wobei die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_0 und Filterweite Δ_0^0 und die Referenzlösung auf Gitterebene l_3 mit der Filterweite Δ_3^0 miteinander verglichen werden. Die Filterweiten entsprechen sich also.

Betrachtet man nun zuerst die Diskretisierungsfehler $ed_{0,3}^0, ed_{1,3}^1$ und $ed_{2,3}^2$ (zur Notation siehe (6.10)), so stellt man eine Verringerung des Diskretisierungsfehlers fest. Da bei einem konvergenten Verfahren die Lösungen auf feineren Gittern der Referenzlösung näher sind, ist dies auch zu erwarten. Der rote Graph $ed_{0,3}^0$ besitzt einen nicht den Erwartungen entsprechenden geringeren Diskretisierungsfehler. Wie bereits erwähnt zeigen numerische Ergebnisse, dass die Lösung auf Gitterebene l_0 kein konvergentes Verhalten beispielsweise bezüglich der Zeit aufweist. Insofern ist die Lösung auf dieser Gitterebene von untergeordneter Bedeutung. Werden die beiden grünen Graphen $ed_{1,3}^1$ und $ed_{0,1}^1$ verglichen, so ist der Diskretisierungsfehler mit der größeren Filterweite $ed_{1,3}^1$ geringer als $ed_{0,1}^1$. Das gleiche Verhalten zeigen die blauen Graphen, die den Diskretisierungsfehler auf Gitterebene l_2 beschreiben. Mit größer werdender Filterweite reduziert sich der Diskretisierungsfehler. Durch die erhöhte turbulente Viskosität nähert sich das Navier-Stokes-Problem dem Stokes-Problem. Die Approximationsordnung des stärker parabolischen Problems (Stokes) ist höher.

Modellfehler

Wird nun der Modellfehler gemäß (6.8) und auch wieder die kinetische Energie E als Fehlermaß zu Grunde gelegt, so ergeben sich die Graphen in Abbildung 7.14. Die negativen Filterweiten

¹Das hier verwendete Diskretisierungsschema ist von zweiter Ordnung.

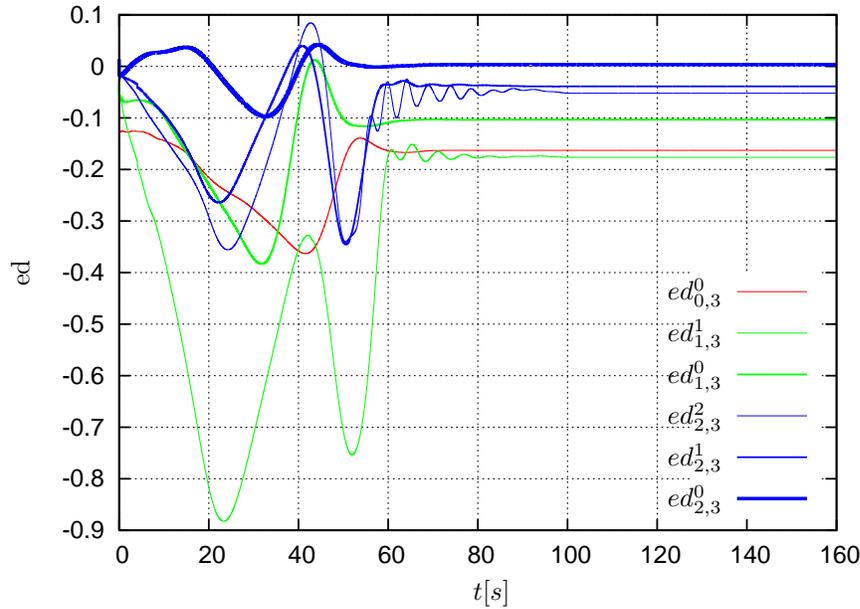


Abbildung 7.13.: Diskretisierungsfehler der Produktionsrechnung $x_{LES}(\Delta_0^0)$ (rot), $x_{LES}(\Delta_1^1)$ (grün) und $x_{LES}(\Delta_2^2)$ (blau).

ergeben sich aus der Definition der Filterweite. Eine Filterweite Δ_i^{-1} ist das Kontrollvolumen auf Gitterebene l_{-1} . Betrachtet man die Graphen mit derselben Farbe untereinander, also den Fehler auf gleicher Gitterebene mit unterschiedlichen Filterweiten, so ergibt sich ein erwartungsgemäßes Verhalten: mit zunehmender Filterweite steigt der Modellfehler. Dies ist durchgängig für die Produktionsrechnung auf allen Gitterebenen zu beobachten. Vergleicht man desweiteren die Graphen mit unterschiedlichen Farben aber gleicher Strichstärke, also die Lösungen mit derselben Filterweite auf unterschiedlichen Gitterebenen, so verringert sich der Modellfehler mit kleiner werdender Gitterweite. Dies liegt daran, dass die feine LES-Lösung $x_{LES}(\Delta, 0)$ auf den Gitterebenen l_0 und l_1 einen großen Diskretisierungsfehler aufweisen.

Vergleich Diskretisierungs- und Modellfehler

In Abbildung 7.15 ist der Modellfehler und Diskretisierungsfehler für die Produktionsrechnung auf dem Gitter τ_2 dargestellt.

Wie bereits beschrieben, sinkt der Diskretisierungsfehler mit zunehmender Filterweite. Der Modellfehler hingegen steigt mit zunehmender Filterweite. Die beiden Fehlerkomponenten verhalten sich mit ihren unterschiedlichen Vorzeichen also prinzipiell entgegengesetzt. Die Vorzeichen und somit die Art der Wahl für das Maß, das zum Vergleich herangezogen wird, entscheidet darüber, ob sich die Fehlerkomponenten teilweise auslöschen oder addieren. Dasselbe Verhalten ist für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_1 zu beobachten.

7.2. Adaptive LES

Ziel adaptiver Verfahren bei LES-Rechnungen ist das gleichmäßige Verteilen sowohl des Diskretisierungs- als auch des Modellfehlers. Das *Jet in Crossflow*-Problem wurde nun gemäß Abschnitt

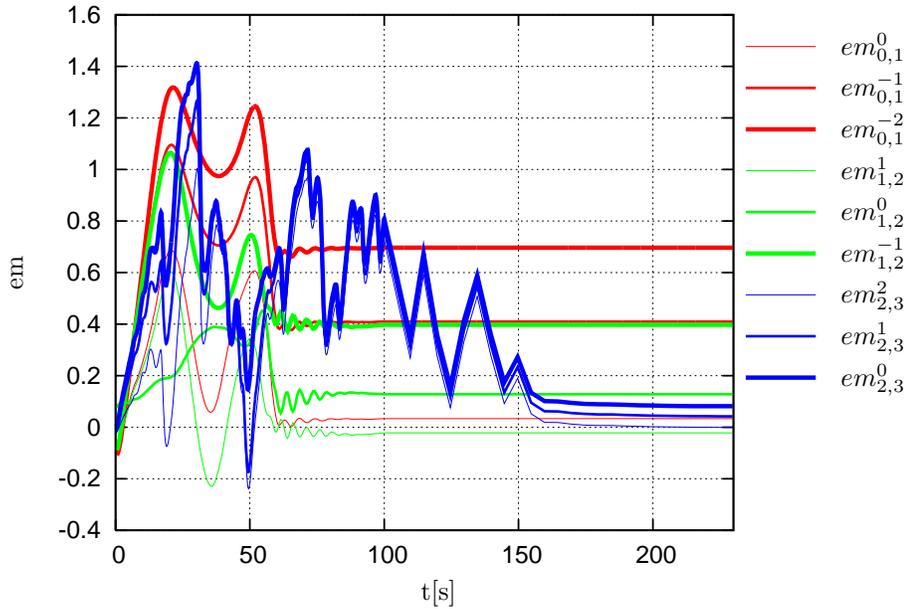


Abbildung 7.14.: Modellfehler der Produktionsrechnung $x_{LES}(\Delta_0^0)$ (rot), $x_{LES}(\Delta_1^1)$ (grün), $x_{LES}(\Delta_2^2)$ (blau).

6.4.2 mit folgenden Indikatoren gerechnet:

- Residuenbasierter Indikator η_r
- Hierarchischer Indikator in der kinetischen Energie $\eta_{hi}(E_{kin})$
- Maximalwert in der Wirbelstärke $\eta_{max}(\omega)$

Um bewusst einen vermeintlich schwachen Indikator als Vergleich mitzunehmen, werden auch Ergebnisse mit $\eta_{max}(\mathbf{x})$ dargestellt, wobei \mathbf{x} den Lösungsvektor $\{\mathbf{u}, p\}$ darstellt. Als Vergleichsmaß für die Beurteilung der verschiedenen Indikatoren dienen ebenfalls die kinetische Energie und Subskalendissipation. Im Folgenden wird zunächst auf die Lösungsstrategie und Gitteradaption eingegangen. Anschließend werden die Lösungen auf den adaptiven Gittern den auf uniformen Gittern bestimmten gegenübergestellt. Schließlich werden die Fehler in Bezug auf die uniformen Ergebnisse bestimmt.

7.2.1. Lösungsstrategie und Gitteradaption

Es werden dieselben Lösungsverfahren wie im uniformen Fall mit gleicher Parametereinstellung verwendet. Die Filterweite ist stets das Kontrollvolumen desselben Gitters. Durch die Adaption des Gitters werden also automatisch auch lokal unterschiedlich große Filterweiten erzeugt. Das Gitter wird nach jedem 10. Zeitschritt adaptiert, bis sich ein quasi-stationärer Zustand mit finalem Gitter einstellt. Zur Begrenzung der Verfeinerungs- und Vergrößerungstiefe wird eine untere Schranke bei l_2 und eine obere Schranke bei l_5 vorgegeben. In Tabelle 7.2 ist die Anzahl der Elemente auf diesem Gitter bezüglich der durch die drei beschriebenen Indikatoren adaptierten Gitter aufgelistet. Das dazugehörige Gitter ist in Abb. 7.16 dargestellt. Zunächst fällt auf, dass der residuenbasierte und hierarchische Indikator nicht mit lokalem Mehrgitterverfahren gelöst werden

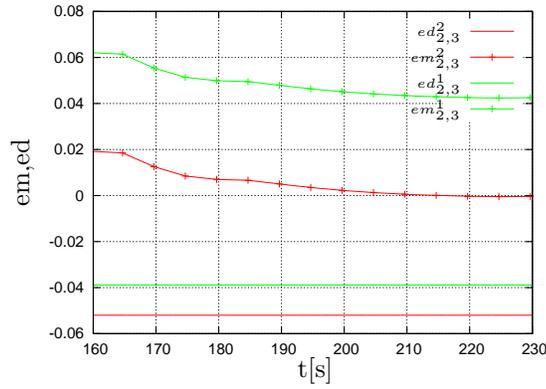


Abbildung 7.15.: Diskretisierungs- und Modellfehler auf Gitterebene l_2 .

Indikator	#Elemente
η_r	11105
$\eta_{hi}(E_{kin})$	16676
$\eta_{max}(\mathbf{x})$	12315
$\eta_{max}(\omega)$	13310

Tabelle 7.2.: Oberflächengitter bezüglich der verschiedenen Indikatoren und Vergleich mit den uniformen Gittern τ_1 , τ_2 und τ_3 .

kann. Die gelben Elemente stellen die von den darunterliegenden Gitterebenen auf die höchste Gitterebene kopierten Elemente dar. Nur beim Indikator $\eta_{max}(\omega)$ kann das lineare Problem mit einem lokalen Mehrgitter gelöst werden. Nur hier ist das Verfahren bezüglich der Komplexität optimal (siehe Abschnitt 5.3.4).

Wie gut zu erkennen ist, verfeinert der residuenbasierte Indikator sehr lokal innerhalb des abgelenkten Freistrahles. Demgegenüber wird beim hierarchischen Indikator der gesamte Bereich des Freistrahls verfeinert. Ähnlich verhält sich $\eta_{max}(\omega)$.

Abbildung 7.17 zeigt die kinetische Energie auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern. Die Richardson-Abschätzung kann für letztgenannte nicht angewendet werden, da das Verhältnis der Gitterweiten auf den unterschiedlichen Ebenen über das Gebiet variiert. Für die adaptiven Verfahren wurden Startlösungen, die auf dem uniformen Gitter τ_2 berechnet wurden, verwendet, weswegen im Bereich der Einschwingung uniforme und adaptive Ergebnisse nicht miteinander verglichen werden können (siehe Abbildung 7.17 links). In diesem Bereich liefert $\eta_{hi}(E_{kin})$ etwas höhere Energien als die beiden Indikatoren η_r und $\eta_{max}(\omega)$. Wird davon ausgegangen, dass die an der Lösung von Δ_3^3 am nächsten liegenden adaptiven Lösungen am genauesten ist, wird also Δ_3^3 als Referenzlösung verwendet, so liefert im quasi-stationären Zustand 7.17 (rechts) $\eta_{max}(\mathbf{x})$ erwartungsgemäß das schlechteste Ergebnis. Die Abweichung ist in der Größenordnung wie Δ_2^2 . Der Maximum Indikator in der Wirbelstärke, der hierarchische Indikator in der kinetischen Energie und der residuenbasierte Indikator liefern die besten Ergebnisse, wobei die beiden letztgenannten die geringste Abweichung liefern.

Werden die adaptiven Verfahren in Bezug auf die turbulente Größe Subskalendissipation ϵ_{esgs} bewertet, so zeigt sich in Abbildung 7.18 ein ähnliches Bild. Die beiden Indikatoren $\eta_{hi}(E_{kin})$ und $\eta_{max}(\omega)$ liefern bereits gute Ergebnisse. Der residuenbasierte Indikator allerdings trifft die Referenzlösung am besten.

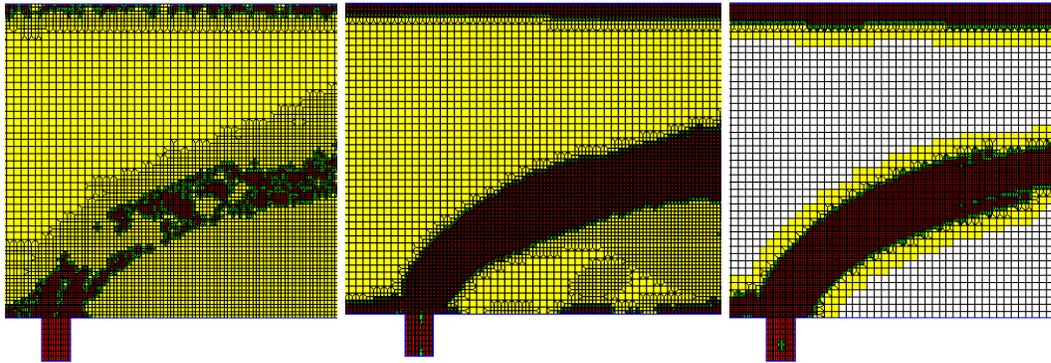


Abbildung 7.16.: Durch η_r (links), $\eta_{hi}(E_{kin})$ (mitte) und $\eta_{max}(\omega)$ (rechts) adaptierte Gitter.

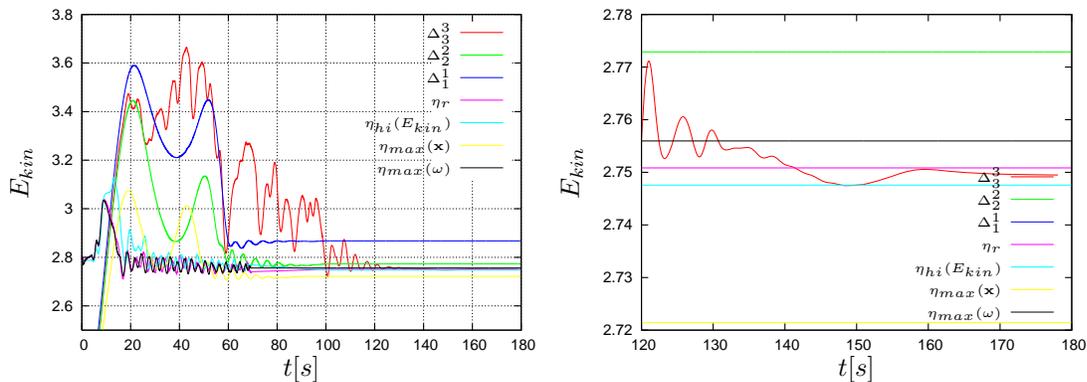


Abbildung 7.17.: Vergleich der kinetischen Energie E_{kin} auf adaptiv und uniform verfeinerten Gittern. Links ist der Zeitraum $t = 0..160s$ und rechts $t = 60..180s$ dargestellt.

Auswertungen bezüglich der turbulenten Viskosität liefern ähnliche Ergebnisse.

Neben der kinetischen Energie und der Subskalendissipation, die eine integrale Größe über das ganze Gebiet darstellen, soll noch die zeitlich gemittelte axiale Geschwindigkeitskomponente entlang einer vertikalen Geraden bei $x = 6.75$ (siehe Abbildung 7.1) bewertet werden. Dies entspricht einer Seminorm in u_1 . Abbildung 7.19 stellt die durch uniforme Verfeinerung den durch adaptive Verfeinerung errechneten axialen Geschwindigkeitskomponente gegenüber. Alle drei adaptiven Indikatoren liefern eine gute Näherung der Referenzlösung auf Δ_3^3 . Bezogen auf die Lösung auf Gitterebene l_4 fällt auf, dass die Maximalgeschwindigkeit von Δ_4^4 nicht ganz erreicht wird. Näheres hierzu im nächsten Abschnitt.

7.2.2. Fehleranalyse der adaptiven Verfahren

Es stellt sich nun die Frage, wie groß die Abweichung der adaptiven Verfahren gegenüber den uniformen Verfahren sind. Durch die flexible Datenstruktur von UG ist es möglich, die adaptiven

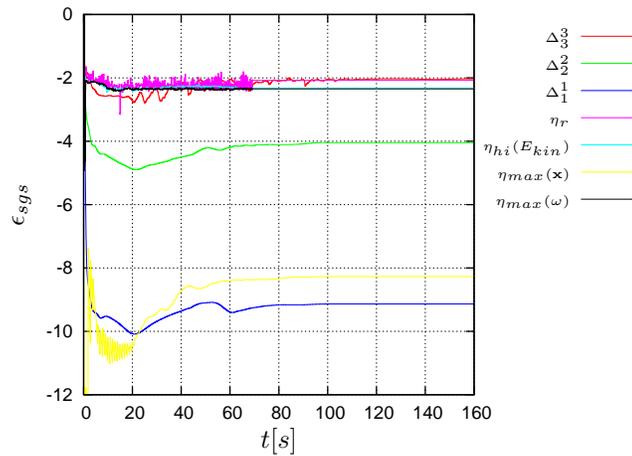


Abbildung 7.18.: Vergleich der Subskalendissipation ϵ_{sgs} auf adaptiv und uniform verfeinerten Gittern dargestellt.

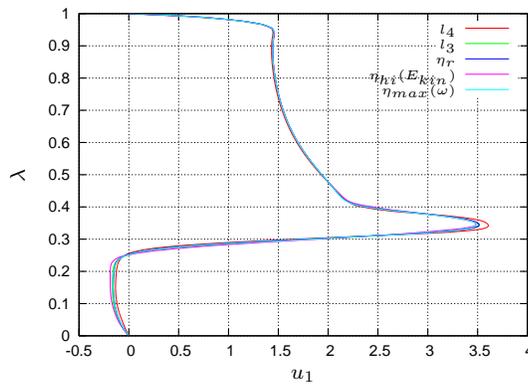


Abbildung 7.19.: Vergleich von $\|u_1\|_s$ auf uniformen und adaptiv verfeinerten Gittern.

Filterweiten für eine uniforme Berechnung einzulesen. Werden diese unstrukturierten Filterweiten für die Rechnung verwendet, so kann der begangene Diskretisierungsfehler bestimmt werden. Wird das uniforme Ergebnis mit diesen adaptiven Filterweiten explizit gefiltert, so kann der Modellfehler bestimmt werden. Tabelle 7.3 zeigt den Diskretisierungs-, Modell- und Gesamtfehler für die drei Indikatoren η_r , $\eta_{max}(\omega)$ und $\eta_{hi}(E_{kin})$ in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie \bar{E}_{kin} . Die Ausgangsdaten sind in Tabelle A.10 nachzusehen. Es sei hier nochmals betont, dass es sich bei den Fehleranteilen nicht um die tatsächlichen Diskretisierungs- bzw. Modellfehler handelt. Diese Größen stellen nur einen quantitativen Anhaltspunkt dar, insofern besitzt das Verhältnis der Fehleranteile eine größere Aussagekraft als die Größen an sich. Mit Hilfe von η_r , der zur Abschätzung des Diskretisierungsfehlers konzipiert ist, wird der Diskretisierungsfehler tatsächlich am stärksten reduziert. Die beiden anderen Indikatoren weisen einen um eine Größenordnung größeren Diskretisierungsfehler auf, wobei $\eta_{hi}(E_{kin})$ einen etwas geringeren Fehler aufweist. Bezüglich des Modellfehlers stechen die beiden Indikatoren $\eta_{max}(\omega)$ und $\eta_{hi}(E_{kin})$ heraus. Diese für den Modellfehler konstruierten Indikatoren sind η_r diesbezüglich überlegen. Betrachtet man den Gesamtfehler, so fällt auf, dass bei η_r die Vorzeichen für den Diskretisierungs-

Verfahren	ed	em	$ e $	$ q $
η_r	0.002898	-0.012845	0.009947	0.22
$\eta_{max}(\omega)$	-0.023432	-0.006707	0.030139	3.49
$\eta_{hi}(E_{kin})$	-0.017066	-0.005570	0.022636	3.06

Tabelle 7.3.: Modellfehler em , Diskretisierungsfehler ed und Gesamtfehler an Hand der kinetischen Energie \bar{E}_{kin} für die verwendeten Indikatoren.

und Modellfehler unterschiedlich sind, was zu einem kleinen Gesamtfehler führt. Der $\eta_{hi}(E_{kin})$ -Indikator weist einen etwa 30% geringeren Gesamtfehler als $\eta_{max}(\omega)$ auf. Betrachtet man den Verlauf entlang einer Geraden im \mathbb{R}^2 (siehe Abbildung 7.1) gemäß Abbildung 7.19, so ergeben sich die in Tabelle 7.4 aufgeführten Werte. Ähnlich wie bei der kinetischen

Verfahren	$ ed $	$ em $	$ ed + em $	q
η_r	0.009233	0.012222	0.021455	0.76
$\eta_{max}(\omega)$	0.043427	0.019443	0.062870	2.23
$\eta_{hi}(E_{kin})$	0.046615	0.012500	0.059115	3.73

Tabelle 7.4.: Modell- und Diskretisierungsfehler an Hand der axialen Geschwindigkeit entlang einer Geraden im \mathbb{R}^2 für die Indikatoren η_r , $\eta_{max}(\omega)$ und $\eta_{hi}(E_{kin})$.

Energie ist der Diskretisierungsfehler beim η_r -Indikator am geringsten. Diesmal ist allerdings der Modellfehler auch bei diesem Indikator am geringsten.

Fazit

Mit ca. 30% der Elemente gegenüber dem uniformen Gitter τ_3 und mit 7% der Elemente gegenüber dem uniformen Gitter τ_4 erreichen die Lösungen der drei Indikatoren² ähnliche Ergebnisse. Obwohl der residuenbasierte Indikator η_r beim Modellfehler in der kinetischen Energie gegenüber den anderen beiden Indikatoren etwas schlechter abschneidet, überzeugt dieser sowohl bezüglich des Diskretisierungs- in allen untersuchten Vergleichsgrößen als auch bezüglich des Modellfehlers in der Seminorm. Da dieser auch den Gesamtfehler durchweg am besten reduziert, ist der residuenbasierte Indikator für diese Problemstellung zu bevorzugen.

² $\eta_{max}(\mathbf{x})$ ist wegen unzureichender Qualität nicht mehr dargestellt.

8. Turbulenter Wärmetransport durch natürliche Konvektion in einer hohen Nische

Bisher wurden Probleme mit erzwungener Konvektion diskutiert. Bei der im Folgenden betrachteten natürlichen Konvektion stellen Dichteunterschiede den die Strömung antreibenden Mechanismus dar. Das Gegenstück zur Reynoldszahl bei erzwungener Konvektion ist die Grashofzahl, die mit der Gravitation g , dem Expansionskoeffizienten γ , der charakteristischen Temperaturdifferenz ΔT , der charakteristischen Länge L_0 und der kinematischen Viskosität ν , wie folgt definiert ist:

$$Gr = \frac{g\gamma\Delta TL_0^3}{\nu^2}. \quad (8.1)$$

Die Grashofzahl gibt das Verhältnis der Auftriebs- zu den viskosen Kräften an. Die für die Bestimmung der Kolmogorovschen Skalen erforderliche Referenzgeschwindigkeit wird gemäß (3.10) mit

$$u_0 = \sqrt{g\gamma\Delta TL_0} \quad (8.2)$$

abgeschätzt.

Turbulente Strömungen weisen hohe Grashofzahlen auf und entstehen durch große Temperaturunterschiede ΔT bzw. große Lauf- bzw. Referenzlängen L_0 . Wie bereits in Abschnitt 2.2 dargestellt, variieren bei großen Temperaturdifferenzen die Stoffgrößen wie Dichte, Viskosität oder spezifische Wärmekapazität sehr stark. Da hier isotherme Stoffgrößen zu Grunde gelegt werden, wird die Lauflänge so groß gewählt, dass der Temperaturbereich klein gehalten werden kann und die Boussinesq Approximation (siehe Abschnitt 2.2.1) noch gültig ist. Zum Zweck der Vergleichbarkeit und Validierung werden die Abmessungen und Randbedingungen so gewählt, dass das zu simulierende Problem dem Experiment von Betts und Bokhari [17] entspricht. In Abbildung 8.1 ist der hexaederförmige Behälter mit den Bezeichnungen für die Seitenwände dargestellt, wobei die Gravitation nach $-y$ zeigt. Die großflächigen Seitenwände besitzen unterschiedliche über die gesamte Fläche konstante Temperaturen. Sie stellen den Antrieb der Strömung dar. Alle anderen Wände sind adiabatisch. Mit den Abmessungen $H = 2.18m$, $W = 0.076m$, $D = 0.52m$, der Temperaturdifferenz $\Delta T = 19.6K$ und den physikalischen Größen $\nu = 5.2e-3m^2/s$, $\gamma = 3.0e-3K^{-1}$, beträgt die Grashofzahl $Gr = 0.86e+6$. Es kann somit mit Sicherheit von einer turbulenten Strömung ausgegangen werden. Mit (8.2) kann die Referenzgeschwindigkeit $u_0 = 1.12m/s$, die daraus folgende Reynoldszahl mit $Re = 1.13e+6$ und somit die Kolmogorovschen Längen- und Zeitskalen nach (3.9a) und (3.9b) mit $\eta = 3.15e-5m$ und $\tau = 0.0588s$ abgeschätzt werden.

Der Aufbau des restlichen Kapitels stellt sich folgendermaßen dar: Zunächst wird das Problem auf zwei Raumdimensionen reduziert, indem die Dimension Richtung z – *Achse* wegfällt. Es wird die zeitliche und räumliche Konvergenz (Diskretisierungs- und Modellkonvergenz) betrachtet. Nachdem der Diskretisierungs- und Modellfehler bestimmt wird, wird das Problem mit adaptiven Verfahren berechnet und den Ergebnissen auf uniformen Gittern gegenübergestellt. Der zweite Teil betrachtet das Problem in drei Raumdimensionen. Analog wird zuerst die Konvergenz in der Zeit, darauf folgend der Einfluss der Gitterweite und Filterweite untersucht und die

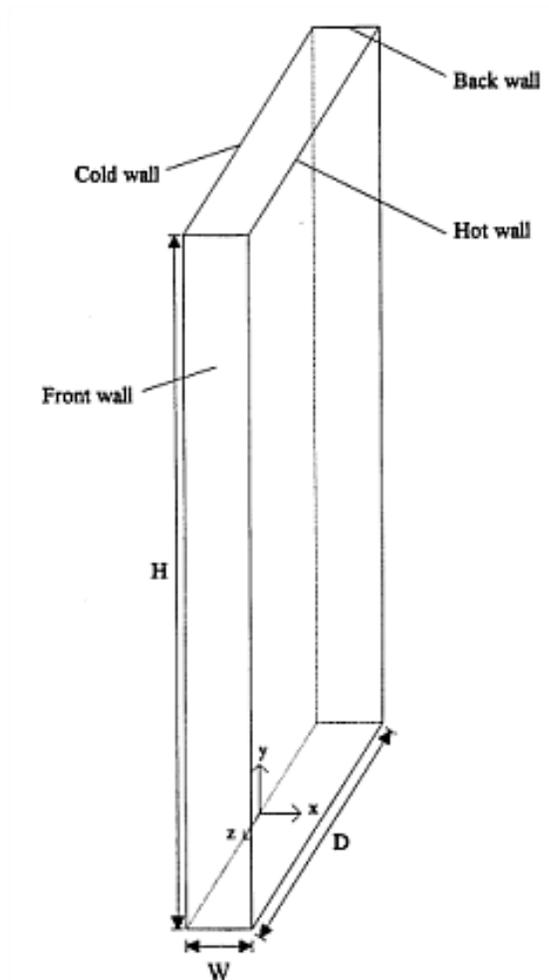


Abbildung 8.1.: Hohe Nische nach [17].

Diskretisierungs- und Modellfehler bestimmt. Abschließend wird das dreidimensionale Problem mit adaptiven Methoden berechnet und den experimentellen und den auf uniformen errechneten Ergebnissen gegenübergestellt.

8.1. Nischenströmung in zwei Raumdimensionen

Die Nischenströmung im \mathbb{R}^2 wird durch ein Rechteck $W \times H$ mit $W = 0.076m$ und $H = 2.18m$ entsprechend dem Problem im \mathbb{R}^3 beschrieben und ist schematisch in Abbildung 8.2 dargestellt. An den horizontalen (adiabaten) Wänden Γ_h gelten für die Temperatur homogene Neumann-Randbedingungen: $\nabla T \cdot \mathbf{n}_w = 0$, wobei \mathbf{n}_w die Flächennormale auf Γ_h darstellt. Für die Temperaturen an den vertikalen Wänden Γ_v werden Dirichlet-Randbedingungen mit $T_2 = 273K$ und $T_1 = 292.6K$ vorgegeben, womit die für die Berechnung relevante Temperaturdifferenz $\Delta T = 19.6K$ beträgt. Für die Geschwindigkeiten gelten generell Hafttrandbedingungen, d.h. homogene

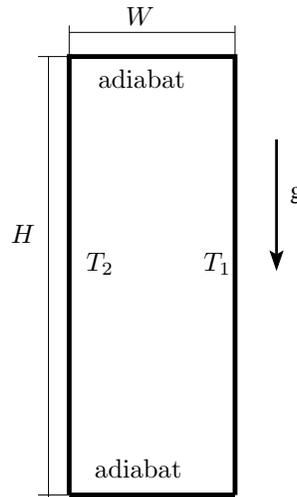


Abbildung 8.2.: Hohe Nische im \mathbb{R}^2 mit Randbedingungen.

Dirichlet-Randbedingungen ($\mathbf{u} = 0$).

Zunächst wird die Konvergenz bezüglich der Zeitdiskretisierung durch Variation der Zeitschrittweiten untersucht. Anschließend wird die räumliche Konvergenz des Gesamtverfahrens, die Gitterkonvergenz bei konstanter Filterweite und Filterkonvergenz eines Gitters gezeigt. Der Abschnitt wird durch die Betrachtung der adaptiv verfeinerten Gitter abgeschlossen.

Obgleich der Einfluss der beiden weit voneinander gelegenen Wände klein ist ($W \ll D$), zeigt sich, dass die Ergebnisse im \mathbb{R}^2 nur wenig mit der Situation im \mathbb{R}^3 zu tun hat. Die dritte Raumdimension für die betrachtete turbulente Strömung ist zwingend notwendig. Insofern stellen die hier durchgeführten Untersuchungen in zwei Raumdimensionen einen vereinfachten Testfall für die Nischenströmung in drei Raumdimensionen dar.

8.1.1. Lösungsverlauf und Verifikation auf uniformen Gittern

Die für die Simulation verwendete durch uniforme Verfeinerung erzeugte Gitterhierarchie mit den Ebenen $l_0..l_7$ ist in Tabelle 8.1 dargestellt. Die Kolmogorovschen Längenskalen würden auf

Ebene i	$\min h_i$	$\max h_i$	#Vierecke	#Gitterpunkte	# Unbekannte
0	7.517e-02	7.600e-02	29	60	240
1	3.759e-02	3.800e-02	116	177	798
2	1.879e-02	1.900e-02	464	585	2340
3	9.397e-03	9.500e-03	1856	2097	8388
4	4.698e-03	4.750e-03	7424	7905	31620
5	2.349e-03	2.375e-03	29696	30657	122628
6	1.175e-03	1.187e-03	118784	120705	482820
7	5.873e-04	5.937e-04	475136	478977	1.9151e+06

Tabelle 8.1.: Gitterhierarchie Hohe Nische $2D$.

Gitterebene l_8 aufgelöst.

Die Lösungsstrategie entspricht der für das *Jet in Crossflow*-Problem (siehe Abschnitt 7).

Das Geschwindigkeitsfeld, die Druck- und Temperaturverteilung nach Beendigung des Einschwingvorganges von ca. $\Delta t = 20s$ sind in Abbildung 8.3 dargestellt. In dieser Momentaufnahme sind

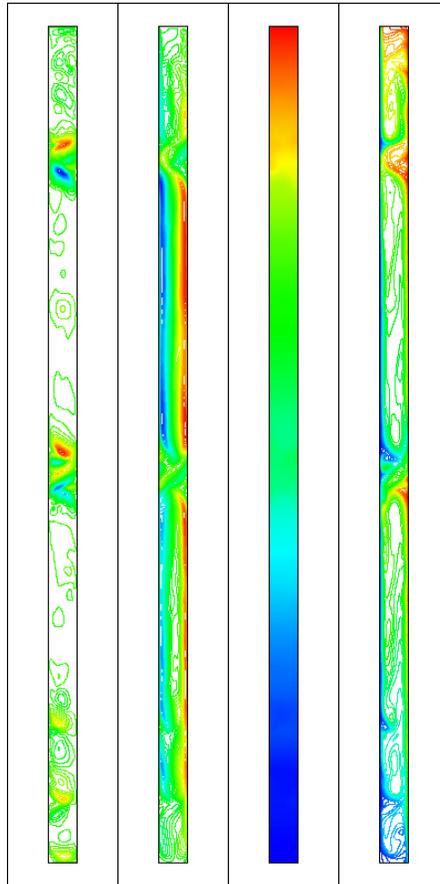


Abbildung 8.3.: Horizontale und vertikale Geschwindigkeits-, Druck- und Temperaturverteilung nach Beendigung des Einschwingvorganges (v.l.n.r.).

die einzelnen Wirbel (kohärente Strukturen) gut zu erkennen.

Für den Vergleich der Lösungen auf unterschiedlichen Gittern ist in Abbildung 8.4 zunächst der entsprechende zeitliche Verlauf der kinetischen Energie dargestellt. Sind die Fluktuationen von $x_{LES}(\Delta_5^5)$ gering bzw. von $x_{LES}(\Delta_4^4)$ kaum noch vorhanden, so stellt man bei $x_{LES}(\Delta_6^6)$ und $x_{LES}(\Delta_7^7)$ starke Oszillationen fest. Dies ist darin zu begründen, dass sich bei $x_{LES}(\Delta_6^6)$ und $x_{LES}(\Delta_7^7)$ große Wirbel durch das Gebiet bewegen, die auf größeren Gittern nicht vorhanden sind. Dieses Verhalten ist ein Beispiel dafür, dass sich mit zunehmender Verfeinerung auch das Problem ändern kann. Die Folge sind qualitativ unterschiedliche Ergebnisse, die nur schwer vergleichbar sind¹.

Um trotzdem eine Konvergenzordnung für das Gesamtverfahren angeben zu können, wofür nach der Richardson-Extrapolation mindestens drei Lösungen zur Verfügung stehen müssen, wird die

¹In Abschnitt 6.3 wird zwar eine Möglichkeit gezeigt, mit Hilfe der Mehrgitterhierarchie trotzdem den Fehler abzuschätzen. Hier wurde allerdings darauf verzichtet und für eine einfache Vergleichbarkeit der zu betrachtende Zeitraum entsprechend stark eingeschränkt.

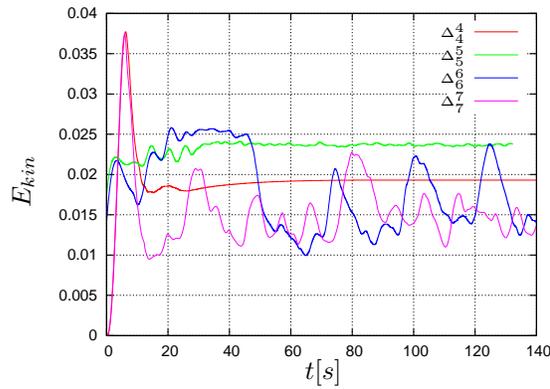


Abbildung 8.4.: Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie für $\Delta_4^4, \Delta_5^5, \Delta_6^6$ und Δ_7^7 .

Gittersequenz τ_4, τ_5, τ_6 nur innerhalb des Zeitintervalles $t = [20, 40]s$ betrachtet, in dem auch auf Gitterebene l_6 ein quasi-stationäres Verhalten in der kinetischen Energie beobachtet werden kann, bevor diese nach $t = 40s$ einbricht und als Vergleich nicht mehr zu verwenden ist. Aus Tabelle A.13 ist die Ordnung des Gesamtverfahrens $p = 2.3$ höher als die formale Konsistenzordnung (2. Ordnung). Wird darüberhinaus die Subskalendissipation herangezogen, so kann in dieser Größe mit der Ordnung $p = -1.6$ keine Konvergenz festgestellt werden.

Konvergenz in der Zeit

Analog zum *Jet in Crossflow*-Problem wird zunächst das konvergente Verhalten in der Zeit untersucht. Hierzu wird die kinetische Energie der auf dem Gitter τ_5 mit den sukzessiv verfeinerten Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.2s, \Delta t_2 = 0.1s, \Delta t_3 = 0.05s, \Delta t_4 = 0.01s$ durchgeführten Rechnungen miteinander verglichen (Abbildung 8.5 links). Das entsprechende Powerspektrum der kinetischen

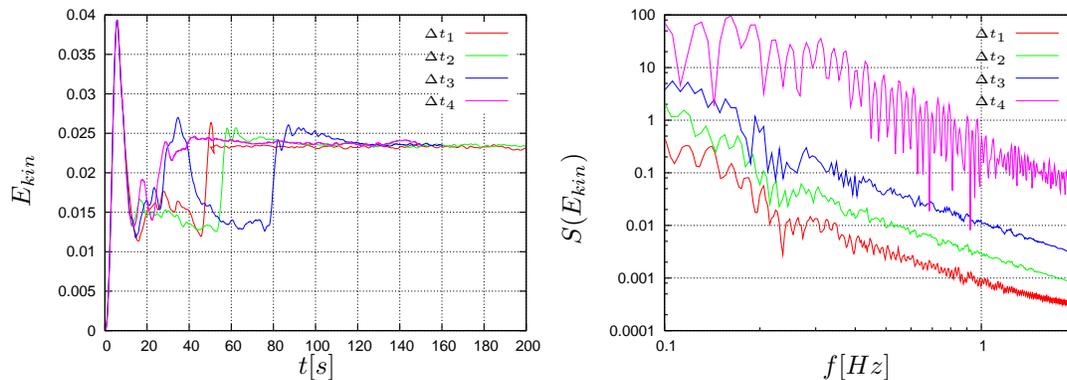


Abbildung 8.5.: Kinetische Energie E_{kin} (links) und dessen Powerspektrum $S(E_{kin})$ (rechts) der mit den Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.2 s, \Delta t_2 = 0.1 s, \Delta t_3 = 0.05 s, \Delta t_4 = 0.01 s$ durchgeführten Rechnungen.

Energie $S(E_{kin})$ ist in Abbildung 8.5 rechts dargestellt. Im Zeitbereich sind die Unterschiede innerhalb des Einschwingvorgangs bis etwa $t = 80s$ deutlich zu erkennen. Erwartungsgemäß wird mit zunehmender Zeitschrittweite die kinetische Energie stärker gedämpft, was gut im

Frequenzraum (Abbildung 8.5 rechts) zu erkennen ist. Die errechnete Ordnung des Zeitintegrationschemas beträgt $p = 1.0$ (siehe Tabelle A.11), die formelle zweite Ordnung des DIRK- bzw. Zweischritt- θ -Verfahrens (5.6) kann also nicht reproduziert werden.

Für die Mittelung der kinetischen Energie \bar{E}_{kin} werden Werte ab dem quasi-stationären Zustand bei $t = 140s$ verwendet (siehe (3.36)).

Analog zum *Jet in Crossflow*-Problem wird noch die Subskalendissipation bei unterschiedlichen Zeitschrittweiten verglichen. Abbildung 8.6 zeigt diese Größe bei denselben Zeitschrittweiten wie oben. Obgleich der Verlauf in etwa invers zur kinetischen Energie verläuft, kann auch im quasi-

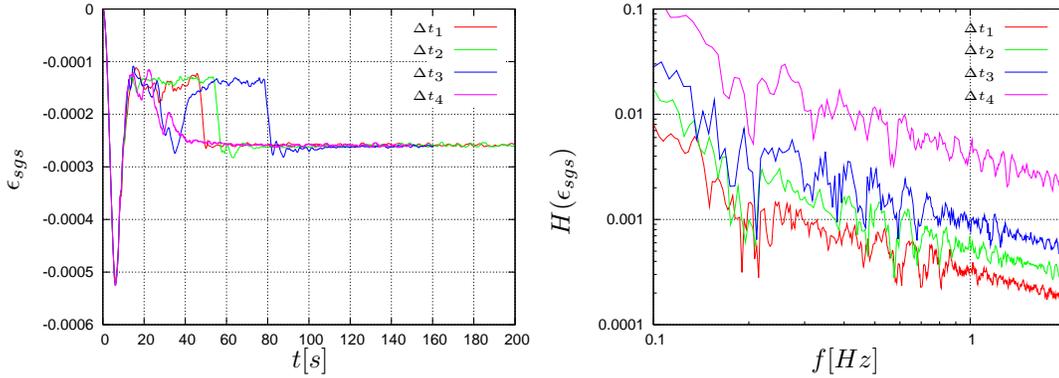


Abbildung 8.6.: Subskalendissipation ϵ_{sgs} (links) und dessen Powerspektrum $H(\epsilon_{sgs})$ (rechts) der mit den Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.2 s$, $\Delta t_2 = 0.1 s$, $\Delta t_3 = 0.05 s$, $\Delta t_4 = 0.01 s$ durchgeführten Rechnungen.

stationären Zustand wegen nicht vorhandenem konvergentem Verhalten (Tabelle A.12) auch keine positive Ordnung angegeben werden. Es ist auch bemerkenswert, dass im Zeitbereich während des Einschwingvorganges die ersten drei Zeitschrittweiten qualitativ auseinanderlaufen und die Energie bei Δt_4 schließlich wesentlich früher einbricht. Das Powerspektrum $H(\epsilon_{sgs})$ zeigt analog zur kinetischen Energie geringere Amplituden mit zunehmender Zeitschrittweite.

Einfluss der Filterweite und Gitterauflösung

Nach der Betrachtung der Zeitschrittweite wird nun der Einfluss der Gitterauflösung bei konstanter Filterweite untersucht. Abbildung 8.7 zeigt den zeitlichen Verlauf der kinetischen Energien der Rechnungen $x_{LES}(\Delta_4^4)$, $x_{LES}(\Delta_5^4)$ und $x_{LES}(\Delta_6^4)$ bei konstanter Filterweite Δ^4 und der Rechnungen $x_{LES}(\Delta_5^5)$, $x_{LES}(\Delta_6^5)$, $x_{LES}(\Delta_7^5)$ bei konstanter Filterweite Δ^5 . Betrachtet man zunächst die Rechnungen mit der Filterweite Δ^4 (dünne Strichstärke), so fällt auf, dass alle Energien sich uniform verhalten, also keine starken Schwankungen aufweisen. Dadurch lässt sich bei diesem Vergleich auch eine Konvergenzordnung nach Richardson (4.23) angeben. Mit $p = -0.8$ (siehe Tabelle A.14) wird hier ein divergentes Verhalten beobachtet. Demgegenüber steht eine Gitterkonvergenz mit der Ordnung $p = 1.1$ bei Filterweite Δ^5 (siehe Tabelle A.16). Obgleich sich bei der Lösung $x_{LES}(\Delta_7^5)$ anfänglich starke Schwankungen ausbilden, konvergiert die kinetische Energie gegen einen quasi-stationären Wert, welcher dann für Ermittlung der Ordnung verwendet wird. Es sei hier nochmals angemerkt, dass eine Ordnung von $p < 0$ ein divergentes Verfahren bedeutet. Im Zusammenhang mit zeitabhängigen, turbulenten Strömungsproblemen, bedeutet dies, dass sich innerhalb des betrachteten Zeitintervalls und der betrachteten räumlichen Auflösungen das Problem ändert. Die Lösungen befinden sich noch nicht im asymptotischen Bereich.

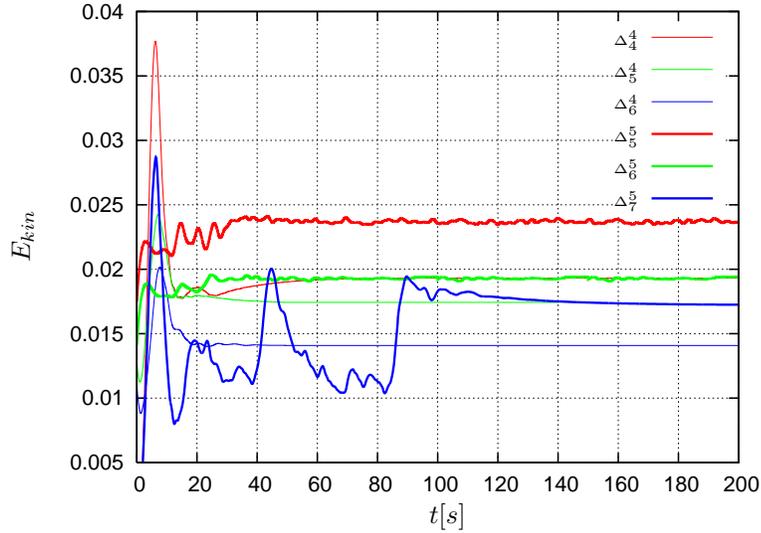


Abbildung 8.7.: Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie für die Filterweite Δ^4 (dünn) auf den Ebenen l_4, l_5, l_6 und die Filterweite Δ^5 auf den Gitterebenen l_5, l_6, l_7 (dick).

Die hier nicht dargestellte Subskalendissipation verhält sich invers, d.h. bei Δ^4 ist ein konvergentes und bei Δ^5 ein divergentes Verhalten zu beobachten.

Es stellt sich nun die Frage, wie sich unterschiedlich große Filterweiten auswirken. Hierzu werden auf den Gitterebenen l_5, l_6, l_7 jeweils drei unterschiedliche Filterweiten verwendet. Die kinetische Energie dieser Rechnungen ist in Abbildung 8.8 dargestellt. Auf Gitterebene l_5 zeigt sich ein uniformes Verhalten der kinetischen Energie. Leichte Fluktuationen werden mit zunehmender Filterweite gedämpft. Die Variation der Filterweiten mit $\Delta_5^5, \Delta_5^4, \Delta_5^3$ ergibt eine Konvergenzordnung in der kinetischen Energie von $p = -0.9$ und in der Subskalendissipation von $p = 1.1$ (siehe Tabelle A.17). Auf der darüberliegenden Ebene l_6 sind die Instabilitäten bei kleinster Filterweite so groß, dass ein qualitativ anderes Bild entsteht. Bei größerer Filterweite allerdings bildet sich wieder ein uniformer Verlauf aus. Auf Gitterebene l_7 schließlich sind für alle drei Filterweiten zunächst starke Oszillationen zu beobachten. Mit der größten Filterweite Δ_7^5 konvergiert die Energie innerhalb des betrachteten Zeitraumes gegen einen quasi-stationären Wert. Auf Gitter τ_6 kann innerhalb des eingeschränkten Zeitraumes von $t = 20..40s$ die Konvergenzrate $p = -0.04$ in der kinetischen Energie und $p = 1.1$ in der Subskalendissipation angegeben werden (siehe Tabelle A.18).

Diskretisierungs- und Modellfehler

Das qualitativ unterschiedliche Verhalten der kinetischen Energie auf den verschiedenen Gitterebenen gestaltet eine Fehleranalyse über den gesamten Zeitraum mit dem hier verwendeten Ansatz und den zur Verfügung stehenden Datensätzen schwierig. Letzterer Aspekt kann eventuell durch Fortführung der Rechnungen bis zu einem statistisch stationären Zustand umgangen werden. Dann bestünde die Möglichkeit, die gemittelten Größen miteinander zu vergleichen. Ersterer Aspekt aber lässt sich mit dem hier verwendeten Ansatz vor allem zur Bestimmung des Modellfehlers nur schlecht vereinbaren. Die Bestimmung des Modellfehlers erfordert die explizite Filterung der Lösungen auf feinen Gittern, die dann mit der qualitativ anderen Lösung auf den gröberen Gittern verglichen werden. Beim Diskretisierungsfehler hingegen gibt es dies-

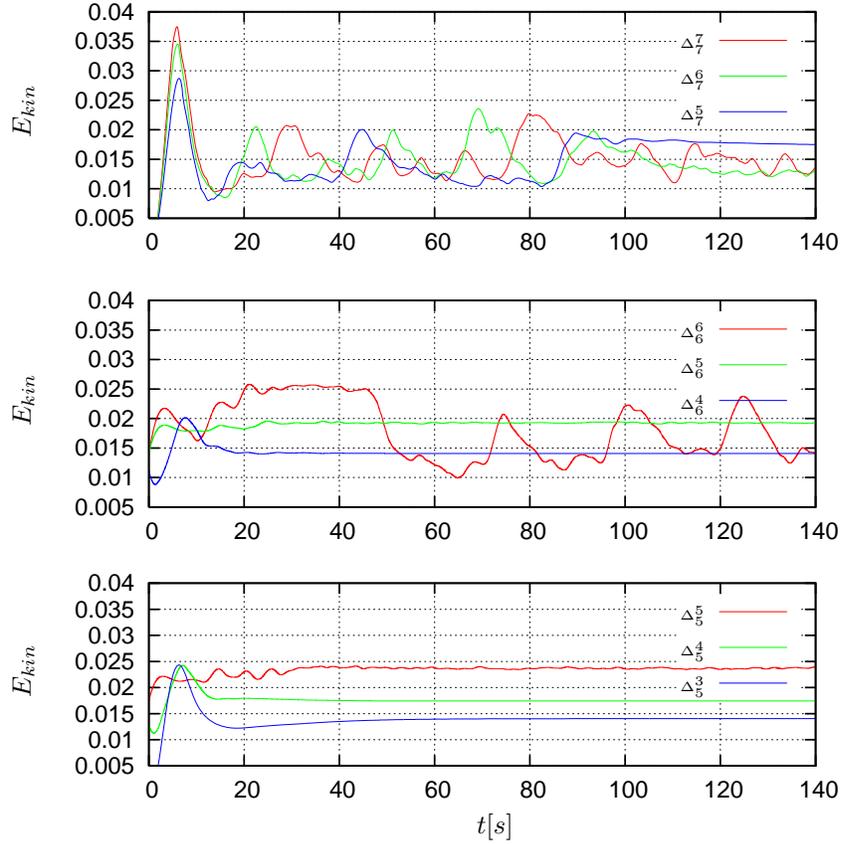


Abbildung 8.8.: Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie auf den Gittern l_i , $i = 5, 6, 7$ (von unten nach oben) für die Filterweite Δ_i^{i-j} , $j = 0, 1, 2$.

bezüglich keine Schwierigkeiten, da die auf feinen Gittern und entsprechend großen Filterweiten berechneten Lösungen sich qualitativ nicht von den Lösungen auf gröberen Gittern mit derselben Filterweite unterscheiden.

Zur Bestimmung des Diskretisierungsfehlers der beiden Produktionsrechnungen $x_{LES}(\Delta_4^4)$ und $x_{LES}(\Delta_5^5)$ dient die Lösung auf Gitterebene l_6 als Referenz. Die Fehlerbestimmung lautet analog zu (6.7):

$$\begin{aligned}
 ed_{4,6}^4 &= x_{LES}(\Delta_4^4) - x_{LES}(\Delta_6^4) \quad \text{bzw.} \\
 ed_{5,6}^5 &= x_{LES}(\Delta_5^5) - x_{LES}(\Delta_6^5).
 \end{aligned}$$

Als Maß wird die gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} verwendet, wobei nach dem Kriterium der maximalen Varianz (3.36) der Einschwingvorgang ausgeschlossen wird.

Beim Modellfehler wird aus oben genannten Gründen der Zeitraum auf das Intervall $t = [20, 40]s$ eingegrenzt, in welchem die Referenzlösung auf Gitter τ_6 einen quasi-stationären Zustand aufweist. Da dieser Zeitraum nur einen kleinen Ausschnitt des gesamten Verlaufes darstellt, ist der Modellfehler hier in erster Linie relativ zwischen den beiden Produktionsrechnungen zu bewerten, und nicht quantitativ dem Diskretisierungsfehler gegenüberzustellen.

Zur Bestimmung des Modellfehlers der Produktionsrechnungen $x_{LES}(\Delta_4^4)$ und $x_{LES}(\Delta_5^5)$ werden die beiden feinen LES-Rechnungen $x_{LES}(\Delta_6^4)$ bzw. $x_{LES}(\Delta_6^5)$ und die explizit gefilterten Pseudo-DNS-Rechnungen $x_{DNS}(\Delta_6^4)$ und $x_{DNS}(\Delta_6^5)$ analog zu (6.8) herangezogen und lauten wie folgt:

$$\begin{aligned} em_{4,6}^4 &= x_{LES}(\Delta_6^4) - x_{DNS}(\Delta_6^4) \quad \text{bzw.} \\ em_{5,6}^4 &= x_{LES}(\Delta_6^5) - x_{DNS}(\Delta_6^5). \end{aligned}$$

Tabelle 8.2 zeigt nun die entsprechenden Werte bezüglich der kinetischen Energie für die beiden Produktionsrechnungen.

$x_{LES}(\Delta_{4,6}^4)$	$x_{LES}(\Delta_{4,5}^4)$	$x_{LES}(\Delta_{5,6}^5)$
$ed_{4,6}^4 = 0.00522$	$ed_{4,5}^4 = 0.00188$	$ed_{5,6}^5 = 0.00438$
$em_{4,6}^4 = 0.009$	$em_{4,5}^4 = 0.004$	$em_{5,6}^5 = 0.004$

Tabelle 8.2.: Modell- und Diskretisierungsfehler in E_{kin} für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_4 und l_5 .

Erwartungsgemäß ist der Diskretisierungsfehler bei $x_{LES}(\Delta_4^4)$ größer als bei $x_{LES}(\Delta_5^5)$. Ebenfalls passt zu einer konvergenten Lösung, dass $ed_{4,5}^4 \rightarrow ed_{4,6}^4$. Ein ähnliches Bild zeichnet der Modellfehler, der auf Gitterebene l_5 geringer ist als auf Ebene l_4 .

8.1.2. Adaptive Berechnung

Die Nischenströmung in zwei Raumdimensionen wird nun mit adaptiven Verfahren berechnet. Am effizientesten haben sich für diese Problemstellung die folgenden fünf Indikatoren herausgestellt:

1. Maximale turbulente Viskosität: $\eta_{max}(\nu_t)$
2. Hierarchischer Indikator in der Geschwindigkeit: $\eta_{hi}(\mathbf{u})$
3. Hierarchischer Indikator in der turbulenten Viskosität: $\eta_{hi}(\nu_t)$
4. Gradientensprung in der turbulenten Viskosität: $\eta_{ju}(\nu_t)$
5. Residuenbasierter Indikator: η_r

Verfeinerungsstrategie

Zunächst wird die quasi-stationäre Lösung auf Gitter τ_4 als Startlösung verwendet und innerhalb der ersten 40s das Gitter mit uniformen Zeitabständen zehn mal adaptiert. Mit dem zuletzt adaptierten Gitter τ^{10} wird schließlich bis zum Ende des gesamten Zeitraumes gerechnet. Diese Strategie steht also im Gegensatz zu der für die Nischenströmung im \mathbb{R}^3 angewandten Methode, wo sich kein quasi-stationärer Zustand etabliert und über den ganzen Zeitraum das Gitter adaptiert werden muss (Näheres im nächsten Abschnitt 8.2).

Zur Begrenzung der Vergrößerungs- und Verfeinerungstiefe werden als untere Schranke Gitterebene l_3 und als obere Schranke Gitterebene l_6 gewählt. Die Parameter zur Bestimmung der Vergrößerungs- und Verfeinerungsschranke wurden so gewählt, dass die Anzahl der Elemente zwischen 15000 und 20000 liegt. Die genaue Anzahl der Elemente von τ^{10} und die tatsächlich höchste Gitterebene für die jeweiligen Indikatoren sind in Tabelle 8.3 aufgelistet. Die Anzahl der Elemente des durch uniforme Verfeinerung erzeugten Gitters τ_4 bzw. τ_5 beträgt 7424 bzw. 29696.

-	$\eta_{max}(\nu_t)$	$\eta_{hi}(\mathbf{u})$	$\eta_{hi}(\nu_t)$	$\eta_{ju}(\nu_t)$	η_r
#Elemente	17232	15378	19882	17876	17342
τ^{min} / τ^{max}	l_3/l_5	l_3/l_6	l_3/l_6	l_3/l_6	l_3/l_6

Tabelle 8.3.: Anzahl Elemente und τ^{min} bzw. τ^{max} der adaptierten Gitter.

Ergebnis

Abbildung 8.9 zeigt den zeitlichen Verlauf der kinetischen Energie auf den durch die verschiedenen Indikatoren adaptierten Gittern. Gegenübergestellt sind die auf uniformen Gittern berechneten

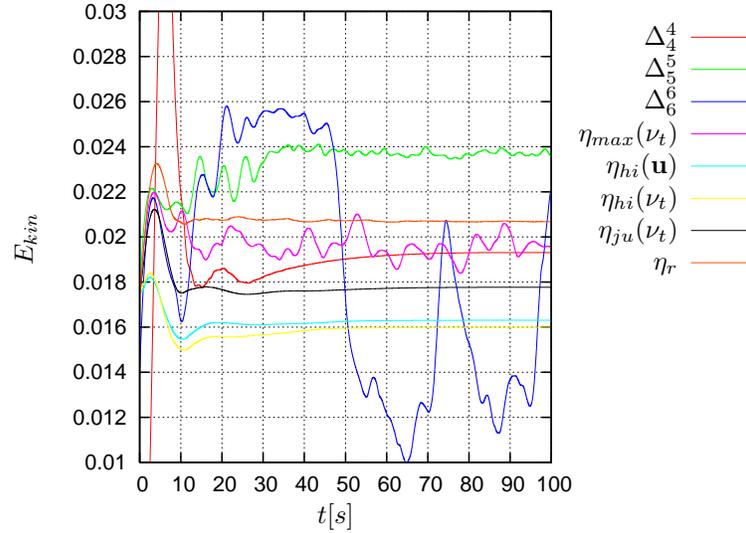


Abbildung 8.9.: Kinetische Energie auf uniformen und adaptiven Gittern.

Ergebnisse $x_{LES}(\Delta_4^4)$, $x_{LES}(\Delta_5^5)$ und $x_{LES}(\Delta_6^6)$.

Grundsätzlich ist festzustellen, dass keine der verwendeten Indikatoren in der Lage ist, die Instabilitäten, die bei uniformen Gittern $\geq \tau_6$ auftreten, abzubilden. Vor dem Hintergrund der relativ geringen Anzahl Elemente bei den adaptiven Verfahren entspricht dies allerdings den Erwartungen. Insofern scheint ein Vergleich bezüglich Δ_6^6 nicht sinnvoll.

Die beiden schlechtesten Indikatoren sind die hierarchischen $\eta_{hi}(\nu_t)$ und $\eta_{hi}(\mathbf{u})$. Sie weichen erheblich von der größten uniformen Lösung ab. Ähnlich schlecht präsentiert sich $\eta_{ju}(\nu_t)$. Wie bereits bei der *Jet in Crossflow*-Problemstellung und wie später noch bei der Nischenströmung im \mathbb{R}^3 gezeigt wird, sind der residenbasierte η_r und der Maximum Indikator $\eta_{max}(\nu_t)$ am leistungsfähigsten. Beide liegen zwischen Δ_4^4 und Δ_5^5 , wobei der residuenbasierte Indikator der Vorzug zu geben ist. Bei $\eta_{max}(\nu_t)$ fallen die Fluktuation auf, die sich erst ab Gitterebene l_5 bei uniformen Gittern einstellen.

8.2. Nischenströmung in drei Raumdimensionen

Die vorgestellte Nischenströmung wird nun im \mathbb{R}^3 gemäß Abbildung 8.1 betrachtet.

Entsprechend zur Nischenströmung im \mathbb{R}^2 gelten die folgenden Randbedingungen, wobei auf die

Notation in Abbildung 8.1 Bezug genommen wird. An den horizontalen (adiabaten) Wänden Γ_h sowie an den beiden Wänden *Back wall* und *Front wall* gelten für die Temperatur homogene Neumann-Randbedingungen: $\nabla T \cdot \mathbf{n}_w = 0$, wobei \mathbf{n}_w die Flächennormale der Wände darstellt. Für die Temperaturen an den Wänden *Cold wall* bzw. *Hot wall* werden Dirichlet-Randbedingungen mit $T_2 = 273K$ und $T_1 = 292.6K$ vorgegeben, womit die für die Berechnung relevante Temperaturdifferenz $\Delta T = 19.6K$ beträgt. Für die Geschwindigkeiten gelten generell Hafttrandbedingungen, also homogene Dirichlet-Randbedingungen ($\mathbf{u} = 0$).

Zuerst werden numerische Berechnungen und Analysen in der Zeit und im Raum auf uniformen Gittern durchgeführt. Im zweiten Teil dieses Kapitels werden schließlich adaptive Verfahren auf die Nischenströmung angewendet und analysiert.

8.2.1. Lösungsverlauf und Verifikation auf uniformen Gittern

Die Triangulierung des in Abbildung 8.1 dargestellten Gebietes besteht ausschließlich aus Hexaedern. Durch uniforme Verfeinerung wird eine Gitterhierarchie erzeugt. Die maximale Elementgröße, Anzahl der Elemente, Knoten und Unbekannten für die jeweilige Gitterebene ist in Tabelle 8.4 dargestellt. Wie bei derselben Problemstellung in zwei Raumdimensionen wird die

Gitterebene i	h_i	#Elemente	#Knoten	#Unbekannte
3	0.00950	8192	9945	49725
4	0.00475	65536	72369	361845
5	0.00238	524288	551265	2.75632e+06

Tabelle 8.4.: Durch uniforme Verfeinerung erzeugte Gitterhierarchie.

Strömung durch den Temperaturunterschied angetrieben. Da mit Nullwerten und der Referenztemperatur T_0 als Anfangsbedingung für die Geschwindigkeiten bzw. Temperaturen gestartet wird, ist zunächst ein Einschwingvorgang zu beobachten, bevor sich die eigentliche statistisch wiederkehrende turbulente Strömung einstellt.

Im Folgenden wird zunächst die Konvergenz in der Zeit und anschließend im Raum betrachtet. Bei letzterem wird noch in Gitter- und Filterkonvergenz unterschieden. Abschließend werden die besprochenen adaptiven Verfahren angewendet und mit den experimentellen Ergebnissen von Bokhari et al. verglichen.

8.2.2. Konvergenz in der Zeit

Zur Untersuchung der Sensitivität bezüglich der Zeitschrittweiten werden drei unterschiedliche Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.1s$, $\Delta t_2 = 0.05s$, $\Delta t_3 = 0.025s$ verwendet. Die entsprechenden durchschnittlichen CFL-Zahlen belaufen sich auf $CFL(\Delta t_1) = 2.7$, $CFL(\Delta t_2) = 1.4$, $CFL(\Delta t_3) = 0.7$. Bei Δt_3 könnten auch explizite Verfahren verwendet werden, da bei $CFL < 1$ das Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium erfüllt ist. Um auch den Einfluss des LES-Modells bezüglich der Zeitschrittweiten zu erfassen, werden sowohl Rechnungen mit LES-Modell als auch ohne LES-Modell durchgeführt. Abbildung 8.10 zeigt die kinetische Energie E_{kin} auf Gitterebene l_4 für die unterschiedlichen Zeitschrittweiten. Der Einfluss der Zeitschrittweiten ist bei LES-Rechnungen geringer gegenüber denen ohne LES-Modell. Dies ist zu erwarten, da der Einfluss der Massenmatrix auf die Systemmatrix mit höherer Viskosität (LES) geringer ist. Das Konvergenzverhalten (qualitativ) allerdings ist ähnlich: beide Varianten konvergieren mit $\Delta t_1 = 0.1s$ bzw. $\Delta t_2 = 0.05s$ gegen die Lösung mit der kleinsten Zeitschrittweite $\Delta t_3 = 0.025s$, was auf eine konvergente Formulierung deutet. Quantitativ unterschieden sich beide Varianten. Formal beträgt die Ordnung

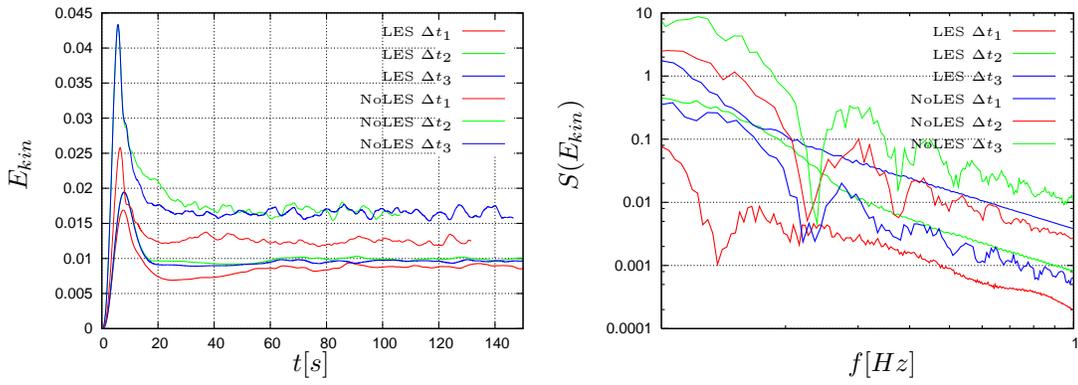


Abbildung 8.10.: Kinetische Energie (links) und dessen Powerspektrum (rechts) auf Gitterebene l_4 mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten mit (dick) und ohne LES (dünn).

$p(\text{LES}) = 2.1$ für die Rechnung mit und $p(\text{NoLES}) = 4.5$ (siehe Tabelle A.19) für die Rechnung ohne LES-Modell.

Im Frequenzraum (Powerspektrum) werden erwartungsgemäß bei kleineren Zeitschrittweiten höhere Frequenzen aufgelöst. Auch die Tatsache, dass das Spektrum mit der mittleren Zeitschrittweite zwischen den beiden anderen Spektren liegt, weist auf eine konvergente Lösung.

In Abbildung A.6 ist die Subskalendissipation ϵ_{sgs} für die drei unterschiedlichen Zeitschrittweiten dargestellt. Im Zeitbereich ist für die kleineren Zeitschrittweiten Δt_2 und Δt_3 kaum ein Unterschied festzustellen. Demgegenüber ist der dämpfende Charakter größer werdender Zeitschrittweiten deutlich im Frequenzraum zu beobachten.

Der Vergleich der aufgelösten Energie E_{res} ist in Abbildung A.5 dargestellt und liefert ein ähnliches Ergebnis. Bemerkenswert ist, dass die Energie auf den kleinsten Skalen wieder leicht zunimmt. Dies passt prinzipiell nicht zu den Aussagen in Abschnitt 3.3, wo konstatiert wird, dass die kleinen Skalen auch die geringste Energie aufweisen.

Abschließend soll noch der Einfluss der Zeitschrittweiten auf die vertikale Geschwindigkeitskomponente am Ortspunkt $P(0.7W, 0.5D, 0.8H)$ betrachtet werden. In Abbildung 8.11 ist diese im Zeitbereich und Frequenzbereich gegenübergestellt. Ähnlich den oben gezeigten Vergleichsgrößen

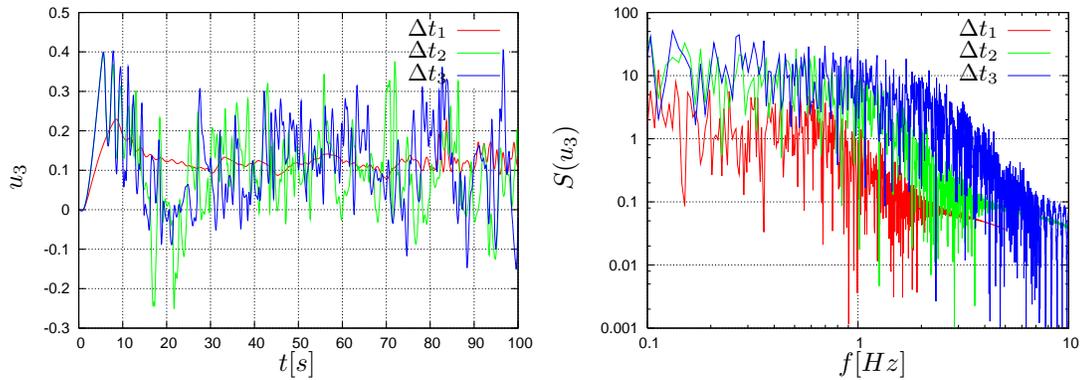


Abbildung 8.11.: Vertikale Geschwindigkeitskomponente (links) und dessen Powerspektrum (rechts) auf Gitterebene l_4 mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten.

ist auch hier der Unterschied im Zeitbereich bei den kleineren Zeitschrittweiten gering, wohingegen im Frequenzbereich die Dämpfung mit zunehmender Zeitschrittweite klar zu erkennen ist. Die formale Ordnung von u_3 in P beträgt $p = 1.2$ (siehe Tabelle A.21).

Konvergenzraten

Tabelle 8.5 zeigt die Konvergenzraten für verschiedene Zeitschrittweiten mit und ohne LES. Es ist festzuhalten, dass erwartungsgemäß die Anzahl der nichtlinearen Iterationen bei kleiner werdender Zeitschrittweite abnimmt, da der Grad der Nichtlinearität ebenfalls wegen der höheren Viskosität² abnimmt. Bei LES-Rechnungen wird durchschnittlich eine Iteration weniger als bei Rechnungen ohne LES benötigt, um die erforderliche Reduktion des nichtlinearen Defekts von $1e-6$ zu erreichen. Da der lineare Defekt in jeder nichtlinearen Iteration nur um eine Größenord-

Δt	LES		No LES	
	$\bar{\rho}_{nl}$	$\bar{\rho}_{lin}$	$\bar{\rho}_{nl}$	$\bar{\rho}_{lin}$
0.1	0.119	0.215	0.139	0.211
0.05	0.063	0.215	0.100	0.211
0.025	0.032	0.215	0.063	0.211

Tabelle 8.5.: Konvergenzraten bei unterschiedlichen Zeitschrittweiten auf Gitterebene l_4 .

nung reduziert wird, reichen für alle Rechnungen zwei oder drei Iteration des linearen Lösers aus (Näheres zu den hier verwendeten Lösungsverfahren in Abschnitt 5.3).

8.2.3. Einfluss der Filterweite und Gitterauflösung

Im Folgenden wird der Einfluss der Filterweiten einerseits und der Gitterauflösung andererseits auf die kinetische Energie E_{kin} gezeigt. Hierzu werden für die Triangulierung τ_l mit $l = 3, 4, 5$ die Filterweite von der Größe des Kontrollvolumens Δ_l^l , über die der an einen Knoten angrenzenden Elementvolumina Δ_l^{l-1} bis schließlich zur Größe der zusätzlich an diese angrenzenden Elemente hinzukommenden Volumina Δ_l^{l-2} (siehe Konstruktion der Filterweite in Abschnitt 4.3.1) variiert. Abbildung 8.12 zeigt den zeitlichen Verlauf von E_{kin} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit unterschiedlichen Filterweiten. Die jeweiligen Gitter sind mit rot (τ_3), grün (τ_4) bzw. blau (τ_5) und die größer werdenden Filterweiten mit breiteren Strichstärken dargestellt. Werden zunächst $x_{LES}(\Delta_l^l)$ betrachtet, so schwächen sich die Schwankungen mit zunehmender Gitterauflösung ab. Mit zunehmender Filterweite sinkt die kinetische Energie erwartungsgemäß auf den Gitterebenen l_3 und l_4 , da schließlich auch mehr Viskosität in das System gebracht wird. Demgegenüber steht die Filtersequenz auf Gitterebene l_5 , bei welcher die Lösung mit kleinster Filterweite nicht die höchste kinetische Energie aufweist. Typischerweise korreliert die kinetische Energie mit der turbulenten Energie bzw. Dissipation. In diesem Fall allerdings trifft dies nicht zu.

Wird nun die turbulente Energie E_{res} (Definition siehe 3.31) als Vergleichsmaß herangezogen, so ergibt sich ein etwas anderes, im Sinne der Konvergenz, konsistentes Bild. Abbildung 8.13 zeigt E_{res} analog zu Bild 8.12 auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit den Filterweiten $\Delta_l^l, \Delta_l^{l-1}, \Delta_l^{l-2}$. Die Energien mit den jeweils gleichen relativen Filterweiten $\Delta_l^l, \Delta_l^{l-1}$ und Δ_l^{l-2} weisen ein gitterkonvergentes Verhalten auf. So streben die Energien auf den Gitterebenen l_3 und l_4 für die Filterweite Δ_l^l gegen die Lösung auf der höchsten Gitterebene l_5 . Das Gleiche gilt für die Filterweite Δ_l^{l-1} und Δ_l^{l-2} .

²Da bei diesen Rechnungen ausschließlich das Smagorinsky-Modell ($\nu_t \geq 0$) verwendet wird, gilt für die gesamte Viskosität $\nu + \nu_t \geq \nu$.

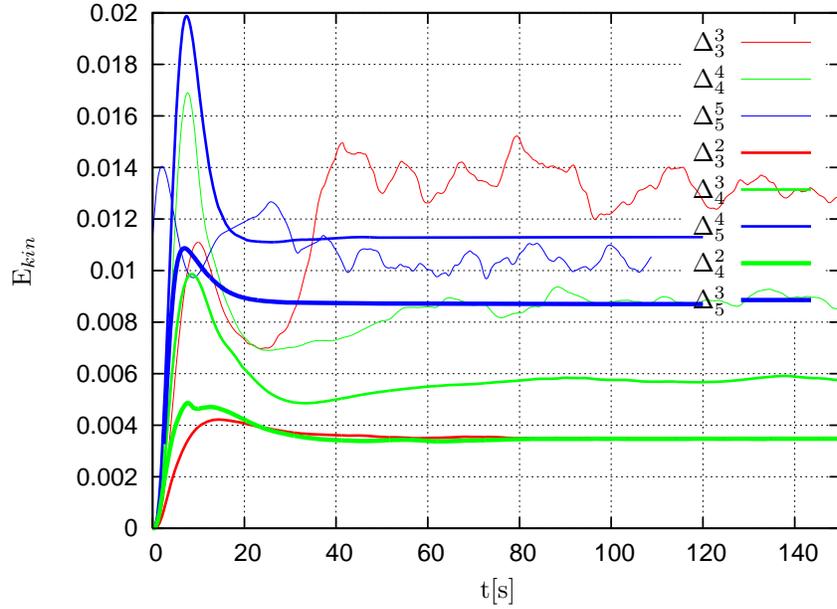


Abbildung 8.12.: Zeitlicher Verlauf von E_{kin} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit den Filterweiten $\Delta_l^l, \Delta_l^{l-1}, \Delta_l^{l-2}$.

Auf der anderen Seite nimmt erwartungsgemäß die Energie mit zunehmender Filterweite auf allen drei Gitterebenen ab. Das gleiche konsistente Verhalten kann auch für die Subskalendissipation beobachtet werden (siehe Abbildung A.7).

Bezogen auf die turbulente kinetische Energie konvergieren die Lösungen sowohl in der Gitter- als auch in der Filterweite. Die in Tabelle 8.6 angegebenen gemittelten Energien \bar{E}_{res} zeigen dies nochmals quantitativ. Mit Hilfe der Richardson-Extrapolation gemäß (4.23) kann die Ordnung für die Gitterkonvergenz p_h und für die Filterkonvergenz p_Δ bestimmt werden. Das Diskretisie-

Gitterebene/Filterweite	0	1	2	p_Δ
3	0.153904	0.055487	-	-
4	0.065843	0.043045	0.034121	1.35
5	0.058149	0.041059	0.025006	0.09
p_h	3.52	2.65	-	

Tabelle 8.6.: Gemittelte turbulente Energie \bar{E}_{res} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit der daraus bestimmten Ordnung des Diskretisierungs- und Filteroperators.

rungsverfahren konvergiert wesentlich schneller als das LES-Modell. Im nächsten Abschnitt zeigt sich dieses Verhalten auch im separat erfassten Modell- und Diskretisierungsfehler.

8.2.4. Modell- und Diskretisierungsfehler

Gemäß dem Ansatz zur Separation der beiden Fehlerkomponenten (siehe Abschnitt 6.3) wird hier nun am Beispiel der dreidimensionalen Nischenströmung der Modell- und Diskretisierungsfehler bestimmt. Es sei wiederholt betont, dass es sich hierbei nicht um den tatsächlichen Fehler

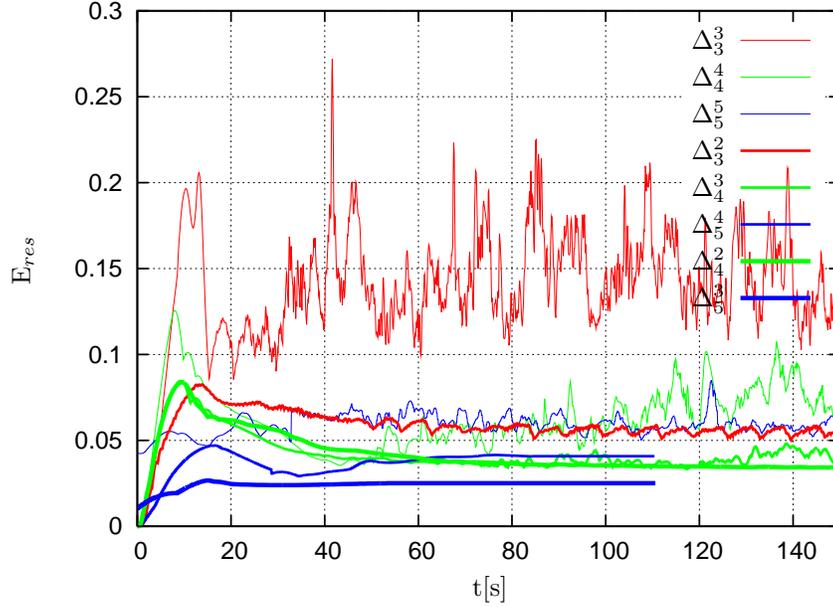


Abbildung 8.13.: E_{res} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit den Filterweiten $\Delta_{l,0}, \Delta_{l,1}, \Delta_{l,2}$ -Zeitschrittweiten.

handelt. Dieser Ansatz zeigt lediglich das qualitativ und zueinander quantitativ bewertbare Verhalten der beiden Fehleranteile. Der Informationsgewinn liegt in erster Linie im Verhältnis beider Fehlerkomponenten.

Für die Produktionsrechnung $x_{LES}(\Delta_3^3)$ werden die Referenzlösungen auf Gitterebene l_4 und l_5 verwendet. Dieser Vergleich wird mit $x_{LES}(\Delta_{3,4}^3)$ bzw. $x_{LES}(\Delta_{3,5}^3)$ bezeichnet. Für die Produktionsrechnung $x_{LES}(\Delta_4^4)$ wird die Referenzlösung auf Gitterebene l_5 verwendet. Dieser Vergleich wird mit $x_{LES}(\Delta_{4,5}^4)$ bezeichnet. Neben der Variation der Filterweiten ist zur Bestimmung des Modellfehlers eine explizite Filterung mit dem Filteroperator $G(\Delta^i)$ mit $i = \{3, 4\}$ erforderlich (6.8).

Für die Bestimmung der Fehleranteile wird die gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} verwendet. In Tabelle 8.7 sind die diesbezüglichen Zahlenwerte gezeigt. Da die Referenzlösung $x(\Delta_5^3)$ in

$x_{LES}(\Delta_{3,5}^3)$	$x_{LES}(\Delta_{3,4}^3)$	$x_{LES}(\Delta_{4,5}^4)$
$ed_{3,5}^3 = 0.0047$	$ed_{3,4}^3 = 0.0076$	$ed_{4,5}^4 = 0.0025$
$em_{3,5}^3 = 0.0005$	$em_{3,4}^3 = 0.0069$	$em_{4,5}^4 = 0.0021$
$q = 9.4$	$q = 1.1$	$q = 1.2$

Tabelle 8.7.: Modell- und Diskretisierungsfehler in E_{kin} für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_3 und l_4 .

der kinetischen Energie E_{kin} keine filterkonvergente Folge ist (siehe vorherigen Abschnitt 8.2.3), ist die Beurteilung der Fehlerkomponenten diesbezüglich u.U. irreführend. Es ist festzuhalten, dass der Modellfehler durchweg geringer ist und beide Fehlerkomponenten etwa gleich schnell konvergieren ($q = 1.1 \rightarrow q = 1.2$).

Im Vergleich dazu wird nun die turbulente kinetische Energie E_{res} betrachtet, bei der, wie bereits oben gezeigt, eine sowohl gitter- als auch filterkonvergente Folge festzustellen ist. In Tabelle 8.8 sind die diesbezüglichen Zahlenwerte dargestellt. Der Diskretisierungsfehler ist durchweg eine

$x_{LES}(\Delta_{3,5}^3)$	$x_{LES}(\Delta_{3,4}^3)$	$x_{LES}(\Delta_{4,5}^4)$
$ed_{3,5}^3 = 0.1281$	$ed_{3,4}^3 = 0.1111$	$ed_{4,5}^4 = 0.0283$
$em_{3,5}^3 = 0.0110$	$em_{3,4}^3 = 0.0068$	$em_{4,5}^4 = 0.0044$
$q = 11.6$	$q = 16.3$	$q = 6.4$

Tabelle 8.8.: Modell- und Diskretisierungsfehler in E_{res} für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_3 und l_4 .

Größenordnung größer als der Modellfehler. Desweiteren konvergiert der Diskretisierungsfehler schneller als der Modellfehler, was am Quotient $q := ed/em$ für den Vergleich $x_{LES}(\Delta_{3,5}^3)$ und $x_{LES}(\Delta_{4,5}^4)$ abgelesen werden kann. M.a.W. überwiegt bei immer feinerem Gitter schließlich der Modellfehler.

Für adaptive Verfahren bedeutet dies, dass mit Indikatoren, die für die Bestimmung des Modellfehlers konstruiert sind, u.U. der Gesamtfehler am Besten reduziert werden kann.

8.2.5. Adaptive LES

Die Nischenströmung in drei Raumdimensionen wird nun mit adaptiven Verfahren berechnet. Hierzu werden folgende Indikatoren verwendet:

- Gradientensprung der turbulenten Viskosität: $\eta_{ju}(\nu_t)$
- Vertikaler Gradientensprung (hierarchisch) der turbulenten Viskosität: $\eta_{hi}(\nu_t)$
- Maximale turbulente Viskosität: $\eta_{max}(\nu_t)$
- Residuenbasierter Indikator: η_r

Aus umfangreichen Voruntersuchungen, bei denen verschiedenste Indikatoren verwendet wurden, haben sich die oben genannten als die effizientesten Indikatoren herausgestellt. Das Ziel in diesem Kapitel ist es, den besten Indikator für dieses Problem zu finden, und nicht die Leistungsfähigkeit der Indikatoren im \mathbb{R}^2 (siehe Abschnitte 7 und 8.1) und \mathbb{R}^3 zu vergleichen.

Zur Begrenzung der Vergrößerungs- bzw. Verfeinerungstiefe werden als untere Schranke Gitterebene l_3 und als obere Schranke Gitterebene l_6 gewählt. Die Rechnungen werden auf bis zur uniform verfeinerten Gitterebene l_3 gestartet. Nach jedem zehnten Zeitschritt wird das Gitter verfeinert bzw. vergrößert. Der Zeitpunkt der Adaption einmal für den Zeitraum $t = [40, 110]s$ und $t = [60, 75]s$ ist in Abbildung 8.14 (links und rechts) dargestellt. Abbildung 8.15 zeigt ein zu einem Zeitpunkt adaptiertes Gitter mit den grünen, gelben und roten Elementen. Für das hier verwendete *DIRK*-Zeitschrittverfahren wird stets mit der konstanten Zeitschrittweite $\Delta t = 0.1s$ gerechnet. Der nichtlineare Defekt wird innerhalb jedes Zeitschrittes um sechs Größenordnungen reduziert. Das linearisierte Problem wird mit einem $V(2, 2)$ Mehrgitterzyklus und ILU-Glätter präkonditioniertem BiCGStab-Verfahren gelöst, wobei der lineare Defekt um eine Größenordnung reduziert wird.

Da bei lokaler Glättung (lokales Mehrgitterverfahren) keine Konvergenz und somit keine optimale Komplexität gemäß Abschnitt 5.3.4 erzielt werden kann, werden auch die für die Verfeinerung nicht markierten Elemente auf die nächst höher gelegene Stufe kopiert (gelbe Elemente).

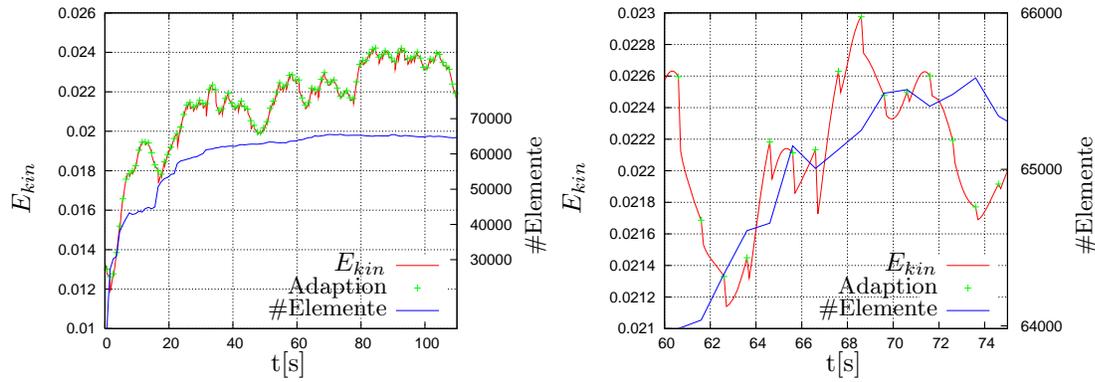


Abbildung 8.14.: Zeitpunkte der Gitteradaption mit entsprechender Anzahl Elemente für zwei Zeitintervalle.

Kinetische Energie

Abbildung 8.16 zeigt die kinetische Energie E_{kin} auf den mit den oben beschriebenen vier Indikatoren adaptierten Gittern. Gegenübergestellt werden die Ergebnisse auf den uniform verfeinerten Gittern τ_3, τ_4 und τ_5 . Die Indikatoren $\eta_{ju}(\nu_t)$ und $\eta_{hi}(\nu_t)$, die einmal den Gradientensprung der turbulenten Viskosität und einmal die Differenz der turbulenten Viskosität auf zwei Gitterebenen berücksichtigen, weichen stark von den Ergebnissen auf den feineren uniform verfeinerten Gitterebenen l_4 und l_5 ab. Demgegenüber liegen die kinetischen Energien auf den durch $\eta_{max}(\nu_t)$ und η_r adaptierten Gittern zwischen den kinetischen Energien auf den uniform verfeinerten Gittern τ_4 und τ_5 .

Abbildung 8.17 zeigt nun die turbulente kinetische Energie E_{res} entsprechend der oben gezeigten kinetischen Energie. Es zeigt sich ein prinzipiell ähnliches Bild wie bei der kinetischen Energie. Die beiden Indikatoren $\eta_{ju}(\nu_t)$ und $\eta_{hi}(\nu_t)$ weichen stark von den beiden Referenzergebnissen auf den Gitterebenen l_4 und l_5 ab, wohingegen die Indikatoren $\eta_{max}(\nu_t)$ und η_r zwischen den Lösungen $x_{LES}(\Delta_4^4)$ und $x_{LES}(\Delta_5^5)$ liegen.

In den beiden Energien E_{kin} und E_{res} sind der residuenbasierte η_r und der Maximum Indikator $\eta_{max}(\nu_t)$ den anderen beiden vorzuziehen. Ein etwas anderes Bild zeigt sich im Frequenzraum. Hierzu ist das Powerspektrum der turbulenten Energie auf uniformen und adaptierten Gittern in Abbildung 8.18 dargestellt. Hier löst $\eta_{max}(\nu_t)$ die Frequenzen am genauesten auf, wohingegen der residuenbasierte Indikator η_r die Frequenzen nicht kontinuierlich auflöst.

Vor diesem Hintergrund kann konstatiert werden, dass mit den beiden Indikatoren $\eta_{ju}(\nu_t)$ und $\eta_{hi}(\nu_t)$ die kinetischen Energien sowohl im Zeitraum als auch im Frequenzraum stark von den Referenzlösungen Δ_5^5 und Δ_4^4 abweichen. Auf der anderen Seite zeigt sich für die beiden zu präferierenden Indikatoren η_r und $\eta_{max}(\nu_t)$ ein ambivalentes Bild. Gibt der residuenbasierte Indikator η_r die Energien im Zeitraum am besten wieder, so löst der Maximum Indikator $\eta_{max}(\nu_t)$ die Skalen im Frequenzraum am besten auf.

Vergleich mit Experiment

Als abschließende Beurteilung der Ergebnisse werden nun diese den experimentellen Untersuchungen von Bokhari et al. gegenübergestellt. Dazu wird die vertikale Geschwindigkeit entlang einer Geraden im \mathbb{R}^3 aufgetragen. Diese Gerade verläuft horizontal von der kalten zur warmen Wand bei $0.7H$ und $0.5D$ (siehe Abbildung 8.1). Der Verlauf der zeitlich gemittelten Geschwin-

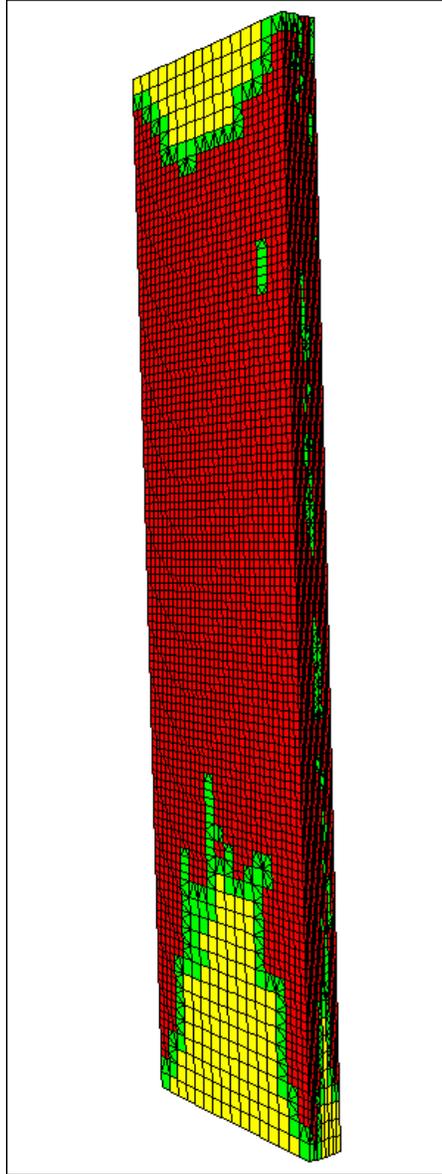


Abbildung 8.15.: Adaptiv verfeinertes Gitter.

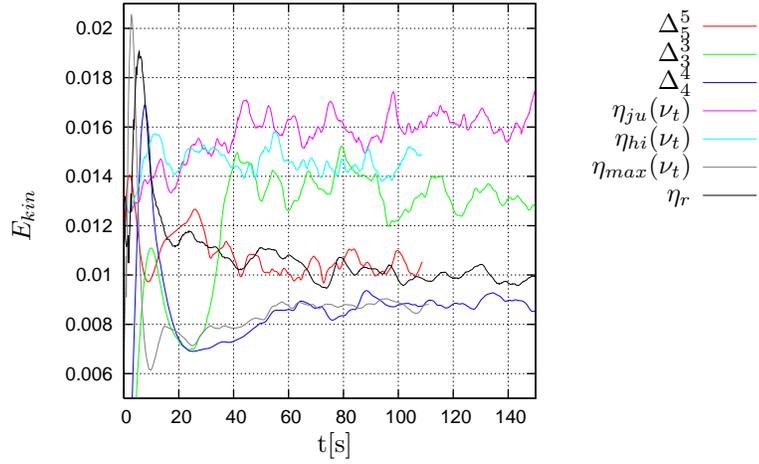


Abbildung 8.16.: Kinetische Energie E_{kin} auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern.

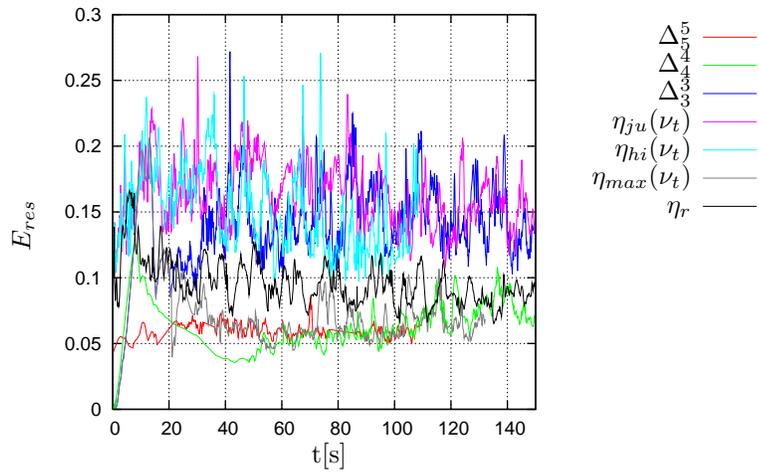


Abbildung 8.17.: Turbulente kinetische Energie E_{res} auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern.

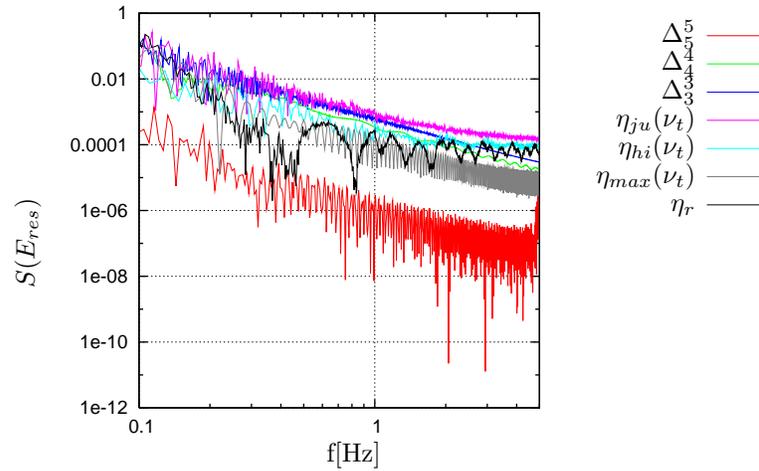


Abbildung 8.18.: Powerspektrum der turbulenten kinetischen Energie $S(E_{res})$ auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern.

digkeiten \bar{u}_3 ist in Abbildung 8.19 dargestellt. Es fällt auf, dass die Geschwindigkeiten von Δ_4^4 näher am Experiment sind, als die genaueste Rechnung Δ_5^5 . Auch bei den adaptiven Verfahren trifft keine der Graphen die Experimente. Der Grund hierfür liegt in erster Linie an der Anzahl der für die Mittelung verwendeten Datenpunkte. Wie bereits erwähnt ist zu beobachten, dass große Wirbel sich relativ langsam durch das Gebiet bewegen. Um diesen Einfluss statistisch zu erfassen, müsste ein längeres Zeitintervall betrachtet werden. Als weiterer Grund ist das in den Berechnungen verwendete Smagorinsky-Modell anzuführen, auf dessen Schwächen bereits in Abschnitt 3.4.3 eingegangen wurde.

Wird aber die Lösung von Δ_5^5 als Referenz herangezogen, so weicht der hierarchische Indikator $\eta_{hi}(\nu_t)$ am stärksten ab, gefolgt von $\eta_{jum}(\nu_t)$. Die wie bereits in den letzten Untersuchungen sind die Indikatoren $\eta_{max}(\nu_t)$ und η_r am effizientesten.

Fazit

Der residuenbasierte und der Maximum Indikator bez. der turbulenten Energie erreichen mit weniger als 30% (τ_4) bzw. 10% (τ_5) der Elemente auf einem uniformen Gitter ähnlich gute Ergebnisse sowohl in der kinetischen Energie, der turbulenten Energie und in der Seminorm $\|u_3\|$ (Geschwindigkeitskomponente entlang einer Geraden). Was die absolute Richtigkeit angeht, so ist festzuhalten, dass alle Verfahren im Vergleich zum Experiment nennenswerte Abweichungen aufweisen, was vermutlich an dem zu kurzen für die Mittelung verwendeten Zeitintervall liegt.

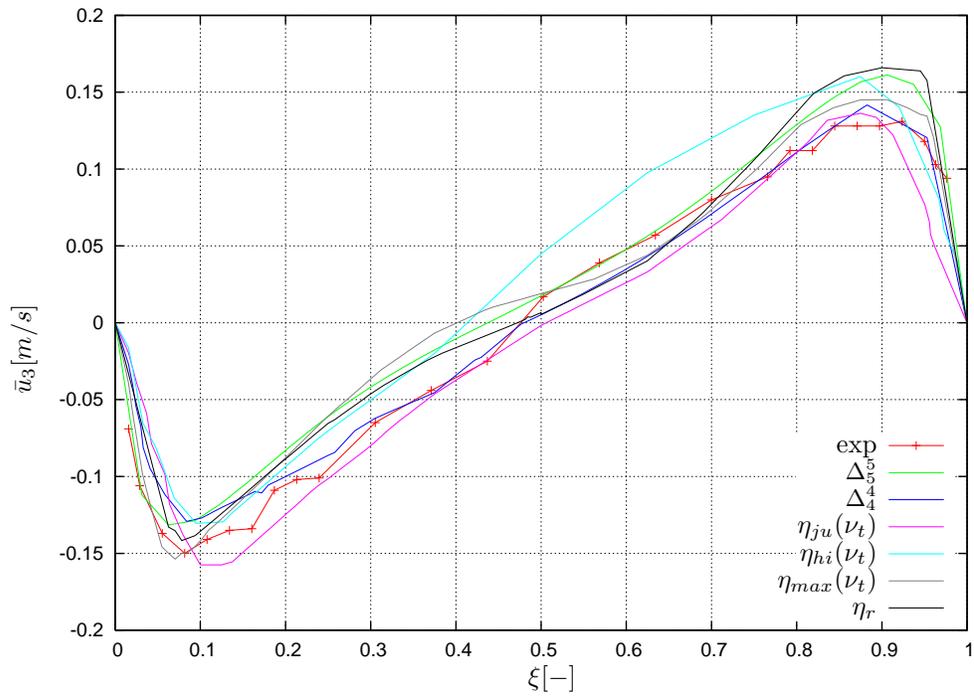


Abbildung 8.19.: Vertikale Geschwindigkeit entlang einer horizontalen Geraden. Vergleich der Ergebnisse auf adaptiven und uniformen Gittern mit Experiment.

9. Turbulente Strömung in einem statischen Mischer

Die in den vorhergehenden Kapiteln beschriebenen Methoden und Verfahren werden nun auf einen statischen Mischer angewendet. Statische Mischer spielen bei der Vermischung von Stoffen verschiedenster Zähigkeiten, speziell in der Verfahrenstechnik, eine bedeutende Rolle. Wurden statische Mischer ursprünglich für die laminare Vermischung hochviskoser Schmelzen eingesetzt, werden diese heute u.a. zum Homogenisieren, Emulgieren, Begasen und Wärmetauschen auch dünnflüssiger Stoffe verwendet. Aufgabe eines statischen Mixers ist es schließlich, anfängliche Konzentrationsunterschiede auszugleichen und eine möglichst große Homogenität der Ausgangsstoffe zu erhalten. Dies führt gegebenenfalls zu einer höheren Produktqualität, eines besseren chemischen oder biologischen Umsatzes bzw. zu einem optimaleren Wärmeaustausch. Der Wirkungsgrad eines Mixers misst sich am Verhältnis der erzielten Mischgüte¹, zum Druckverlust, der durch die Kanalwand und Einbauten im Strömungskanal verursacht wird. Innerhalb des DFG-Schwerpunktprogrammes 1141 Mischen [145] wurde der in Abbildung 9.1 dargestellte Mischer sowohl experimentell (Bild links) als auch numerisch (Bild rechts) untersucht. Ebenfalls

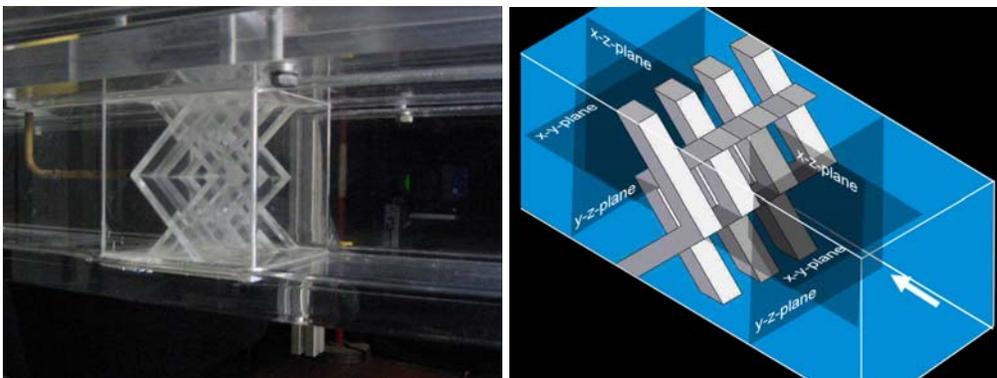


Abbildung 9.1.: Statischer Mischer mit Injektionsdüse im experimentellen Betrieb (links). Mischer als CAD-Geometrie mit drei für die Auswertung der Ergebnisse verwendeten Laserebenen (rechts).

dargestellt sind die für die experimentelle Vermessung (siehe weiter unten) erforderlichen Laserebenen.

Ziel dieser Untersuchung ist es in erster Linie, die numerischen Verfahren an einer nichttrivialen Problemstellung zu verifizieren. Im Vordergrund steht nicht, die Leistungsfähigkeit des verwendeten Mixers im Vergleich zu anderen statischen Mixern zu beurteilen.

Dieses Kapitel gliedert sich nun wie folgt. Zunächst wird das Problem beschrieben und anschließend kurz auf die experimentellen Messmethoden eingegangen. Der Schwerpunkt stellt die

¹Wie homogen ist der zu vermischende Stoff schließlich verteilt.

numerische Simulation des Strömungsvorganges und des Stofftransportes mit den weiter oben bereits verwendeten Verfahren dar. Abschließend werden die numerischen und experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt.

Da der am Einströmrand hinzugefügte Tracer vom Strömungsfeld und den Stoffgrößen in der dafür notwendigen Transportgleichung abhängt, wird zuerst das Strömungsfeld und anschließend die Verteilung des Tracers betrachtet.

9.1. Problembeschreibung

Der betrachtete statische Mischer besteht aus einem Ein- und Ausströmrand. Als Fluid wird Wasser verwendet, dem mittig am Einströmrand durch eine kleine Öffnung ein Tracer zuge-
setzt wird (siehe Abbildung 9.1 links). Das eingebaute Mischelement mit den sieben Winkeln sorgt für die Verwirbelung und Vermischung der davor herrschenden Strömungsverhältnisse und Stoffverteilung.

Die Ergebnisse sowohl der Experimente als auch der Simulationen werden in drei Ebenen quer zur Strömungsrichtung ausgewertet, wobei sich der Koordinatenursprung mittig im Mischelement befindet und die x -Achse in Strömungsrichtung zeigt. Die Querschnitte liegen bei $x_0 = -121.0$, $x_1 = -60.5$, $x_2 = 60.5$ und $x_3 = 121.0$ ($y - z$ -Ebene in Abbildung 9.1). Der Querschnitt bei x_0 entspricht dem Einströmrand bei der numerischen Simulation.

9.2. Experiment

Die Experimente wurden an der Universität Magdeburg durchgeführt und werden hier nur kurz beschrieben. Die Details sind [145] zu entnehmen. Der prinzipielle Versuchsaufbau ist in 9.2 dargestellt. Eine Pumpe fördert das Wasser in einen 10m höher gelegenen Behälter, von wo aus die

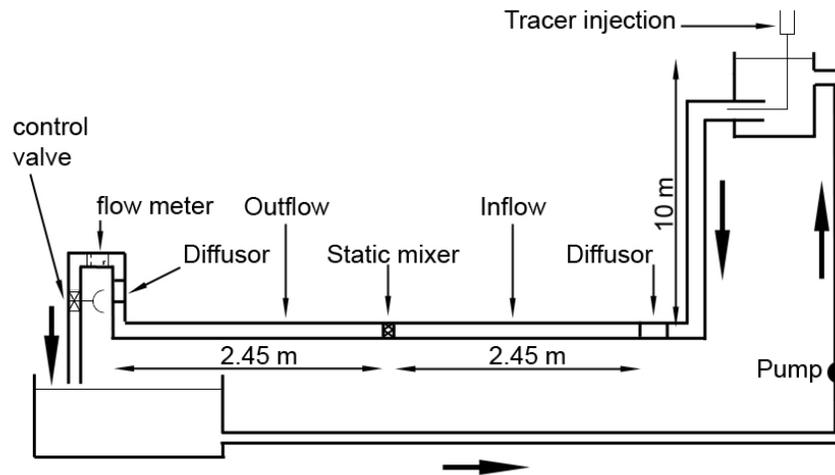


Abbildung 9.2.: Versuchsaufbau.

Strömung durch die Fallhöhe angetrieben wird. Der Massefluss und somit die Geschwindigkeit wird an einem Ventil am Ende der Versuchsstrecke geregelt. Das Wasser strömt zunächst durch

einen Diffusor, wo dieses gebremst wird (Druckerhöhung), bevor schließlich die eigentliche Messstrecke durchlaufen wird. Entlang dieser Strecke ist mittig der statische Mischer installiert, wo sich auch die optischen Messgeräte befinden.

Für die verwendeten messtechnischen Verfahren werden axial Laserebenen ($x - z$ -Ebene in Abbildung 9.1) angeleuchtet, auf denen dann die Partikel bzw. deren reflektiertes Licht mit einer Kamera aufgenommen werden. Für die Strömungen wurden LDA und PIV-Messungen durchgeführt. LDA steht für *Laser Doppler Anemometry*. Hierbei wird ein Laserstrahl mit Hilfe eines Strahlteilers in zwei Strahlen aufgeteilt. Am Messpunkt kreuzen sich diese Strahlen und ein Detektor misst das vom Partikel, das in die Strömung eingebracht wird, reflektierte Streulicht. Die Geschwindigkeit kann durch Überlagerung der beiden Streulichter durch eine Frequenzverschiebung (Doppler-Effekt) errechnet werden. Die zeitliche Auflösung ist bis zu 1 kHz möglich. Allerdings kann nur ein Partikel zu einem Zeitpunkt gemessen werden. Die messtechnische Erfassung einer ganzen Fläche erfordert also eine stationäre Strömung. Bei turbulenter Strömung ist die Strömung instationär, weswegen viele Versuchsdurchläufe durchgeführt werden müssen, damit ausreichend viele Daten für die Mittelung vorhanden sind.

Das zweite für die Erfassung der Geschwindigkeit verwendete Verfahren ist die Messung mit der *Particle Image Velocimetry*-Methode (PIV). Hierbei werden dem Fluid ebenfalls Partikel zugesetzt. Ein Laserstrahl beleuchtet eine Ebene zweimal kurz nacheinander. Das von den Partikeln reflektierte Licht der beiden Pulse wird mit einer Kamera aufgenommen. Die Zugehörigkeit und Geschwindigkeiten der Partikel werden schließlich durch Kreuzkorrelationsfunktionen in benachbarten Bildbereichen errechnet. Bei diesem Verfahren wird also eine ganze Fläche simultan messtechnisch erfasst. Es können also sehr gut instationäre Strömungen gemessen werden. Die zeitliche Auflösung reicht allerdings nur bis maximal 15 Hz.

Für die Messung der Konzentrationen kommt die *Laser Induced Fluorescence*-Methode (LIF) zum Einsatz. Hierbei wird ein zur Fluoreszenz neigender Stoff durch einen Laserstrahl angeregt. Die Intensität der induzierten Fluoreszenz ist direkt proportional zur Leistung des Lasers. Die Stoffkonzentrationen können somit bestimmt werden.

9.3. Numerische Simulation

Für die numerische Simulation musste zunächst die als CAD-Datei vorhandene Mischergeometrie mit dem in [66] beschriebenen Verfahren trianguliert und in *UG* eingelesen werden. Für die Simulation wurde die in Abschnitt 4.2.3 beschriebene Finite-Volumen Diskretisierung mit dynamischen LES-Modell verwendet. Im Gegensatz zu den Berechnungen in den vorhergehenden Kapiteln, bei denen das Smagorinsky-Modell wegen der vereinfachten Handhabung verwendet wurde, steht hier die auch aus der Sicht der Modellierung möglichst genaue Lösung im Vordergrund. Die Filterweite beim dynamischen Modell ist stets das Kontrollvolumen (siehe Abschnitt 3.4.3).

9.3.1. Gitterhierarchie und Adaptivität

Die Anfangstriangulierung ist in Abbildung 9.3 und die durch uniforme Verfeinerung erzeugte und schließlich ab Gitter τ_4 adaptiv verfeinerte Gitterhierarchie in Tabelle 9.1 dargestellt. Zur Markierung der zu verfeinernden bzw. vergrößernden Elemente wird der in Abschnitt 6.4.2 beschriebene Maximum Indikator $\eta_{max}(\nu_t)$ in der turbulenten Viskosität ν_t verwendet. Mit den weiter unten beschriebenen Randbedingungen resultiert eine niedrige Reynoldszahl von $Re = 555$, womit zwar im Nachlauf des Mischelementes schwach turbulente Strukturen auftreten, das Strömungsverhalten aber nahezu quasi-stationär ist. Die Reynoldszahl wurde so gering gewählt, um laminare Einströmrandbedingungen annehmen und somit experimentelle Ergebnisse besser als Vergleich

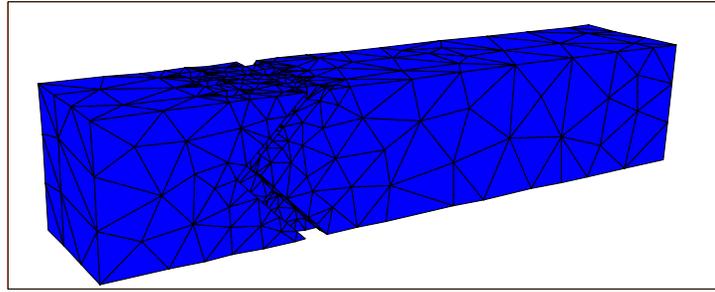


Abbildung 9.3.: Anfangstriangulierung des statischen Mischers mit 3913 Tetraedern.

Ebene i	#Tetraeder	#Knoten	#Unbekannte	h_{min}	h_{max}
0	3913	1086	4344	2.73	68.62
1	31304	6975	27900	1.84	34.31
2	2.5e+5	48766	1.95e+5	0.83	17.15
3	2.0e+6	3.62e+5	1.45e+6	0.41	8.58
4	1.6e+7	2.78e+6	1.40e+7	0.20	4.29
5	1.71e+7	2.89e+6	1.44e+7	0.03	4.29

Tabelle 9.1.: Durch uniforme und adaptive Verfeinerung erzeugte Gitterhierarchie.

heranziehen zu können². Die Strömungsstrukturen werden als nahezu unveränderlich sowohl in der Zeit als auch im Raum angenommen, womit nur einmal eine Gitteradaption erforderlich ist. Insofern ist diese Problemstellung zwar geometrisch komplexer, hinsichtlich der Adaption aber einfach³.

9.3.2. Randbedingungen

Für die physikalischen Ränder (Wände) Γ_w werden für die Geschwindigkeiten u_i und die Konzentration c homogene Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben:

$$u_{i,\Gamma_w} = 0 \quad c_{\Gamma_w} = 0, .$$

Beim Ausströmrand Γ_a wird eine Konvektions-Diffusionsgleichung gemäß Abschnitt 4.2.7 für die Geschwindigkeiten und die Konzentration gelöst und homogene Dirichlet-Bedingungen für den Druck mit $p_a = 0$ vorgegeben werden.

Am Einströmrand Γ_i hat sich bei den Experimenten gezeigt, dass sich vor dem Mischelement ein leicht verzogenes Strömungsprofil ausbildet. Die Begründung dafür liegt in der Umlenkung des Fallrohres auf die waagerechte Versuchsstrecke, die für eine starke Zentrifugalkraft sorgt. Diese Zentrifugalkraft beschleunigt die in radialer Richtung weiter außen liegenden Partikel stärker, womit das nach unten gedrückte Profil (siehe Abbildung 9.4 (links)) erklärt werden kann. Die Rohdaten wurden wegen unzureichender messtechnischer Auflösung vorallem im unteren Rand durch einen Tiefpassfilter geglättet, bevor diese schließlich als Einströmprofil für die Numerik (siehe Abbildung 9.4 (rechts)) verwendet wurden.

²Das bei turbulenten Einströmrandern vorhandene Frequenzspektrum ist zwischen Experiment und Simulation schwer abzugleichen.

³Im Gegensatz zur Nischenströmung im \mathbb{R}^3 , bei dem das Gitter alle 10 Zeitschritte adaptiert werden musste, da sich das Strömungsfeld zeitlich und räumlich stark verändert hat.

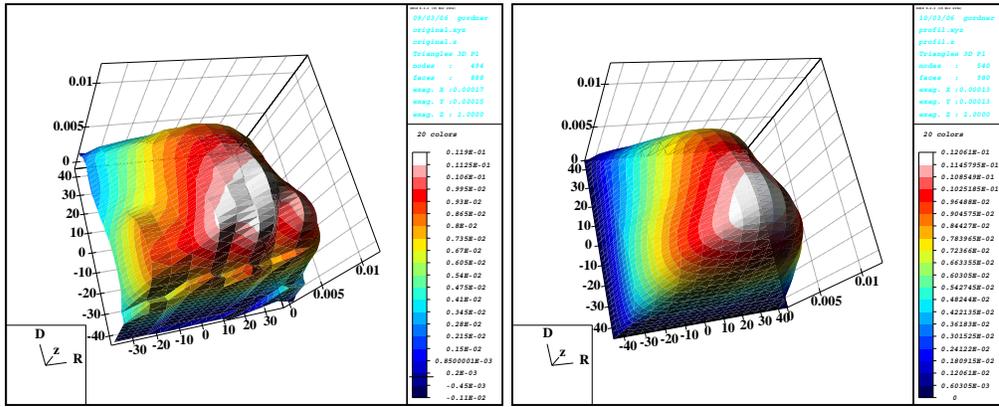


Abbildung 9.4.: Gemessenes (links) und geglättetes Einströmprofil (rechts).

9.3.3. Lösungsstrategie

Für die Zeitintegration wird das Alexander-Schema (5.3) verwendet. Gemäß (5.5) müssen also innerhalb eines Zeitschrittes zwei nichtlineare Probleme gelöst werden. Diese werden mit Hilfe des Newton-Verfahrens gelöst, das endet, falls der nichtlineare Defekt \mathbf{d}_Θ^j um sieben Größenordnungen reduziert wird, d.h. wenn gilt:

$$\|\mathbf{d}_\Theta^j(\tilde{\mathbf{x}})\|_2 \leq 10^{-7} \|\mathbf{d}_\Theta^{j-1}(\tilde{\mathbf{x}})\|_2.$$

Auf dem feinsten Gitter τ_5 beträgt die durchschnittliche nichtlineare Konvergenzrate $\bar{\rho}_{nl} \approx 0.15$ bei einer maximalen und durchschnittlichen CFL-Zahl von $CFL_{max} = 31$ bzw. $CFL_{durch} = 1.5$. Für die Lösung eines nichtlinearen Problems werden also etwa 7 Iterationen benötigt. Da es sich hierbei um ein Quasi-Newton-Verfahren handelt, die Konvergenzrate also maximal linear ist, wird die Jacobi-Matrix hier nur einmal innerhalb eines Zeitschrittes für das Lösen des nichtlinearen Problems aufgestellt. Jedes nichtlineare Problem erfordert wiederum das Lösen eines linearen Gleichungssystems, das mit dem durch das Mehrgitterverfahren (V(1,1)-Zyklus mit ILU als robusten Glätter) vorkonditionierten BiCGStab-Verfahren durchgeführt wird. Eine Reduktion des linearen Defekts um eine Größenordnung ist für den nichtlinearen Löser ausreichend. Das Grobgitterproblem wird, wie bereits in Abschnitt 5.3.4 geschildert, mit dem ILU mehrmals geglättet. Mit einer linearen Konvergenzrate $\bar{\rho} = 0.014$ benötigt der lineare Löser eine Iteration, um den linearen Defekt um eine Größenordnung zu reduzieren.

Zunächst wird eine Rechnung auf Gitterebene l_1 durchgeführt, die nach Erreichen eines quasi-stationären Zustandes als Startlösung für die darüberliegende Gitterebene l_2 verwendet wird. Die auf dieser Ebene auskonvergierte Lösung wird wiederum als Startlösung für die Gitterebene l_3 verwendet. Die auf Gitterebene l_3 auskonvergierte Lösung ist schließlich Startlösung auf der höchsten uniform verfeinerten Gitterebene l_4 . Das uniform verfeinerte Gitter τ_4 wird schließlich mit dem Indikator $\eta_{max}(\nu_t)$ einmal adaptiert. Die Lösungen werden stets durch lineare Interpolation (siehe Gittertransferoperatoren in Abschnitt 5.3.4) auf die nächst höhere Gitterebene prolongiert.

Für die Durchführung der Rechnungen dienten *distributed memory*-Parallelrechner unterschiedlicher Architekturen. Die Rechnungen auf Gitterebene l_2 wurden mit 64 Prozessoren auf dem Parallelrechner der Gruppe Technische Simulation am IWR in Heidelberg durchgeführt. Es handelt sich hier um einen klassischen Beowulf-Cluster mit 80 Knoten mit jeweils einem 450 MHz

Intel Pentium II Prozessor mit 512 MB Arbeitsspeicher.

Die Rechnungen auf Gitterebene l_3 wurden mit 64 Prozessoren des HP XC6000 Cluster in Karlsruhe durchgeführt. Es handelt sich hierbei um einen Parallelrechner mit 1.5 GHz Intel Itanium2-Prozessoren mit 12 GB Hauptspeicher pro Knoten, wobei ein Knoten zwei Prozessoren besitzt. Das Zeitintervall $T = [0..35]s$ wurde mit einer festen Zeitschrittweite von $\Delta t = 0.01$ in 3500 Schritten integriert, wobei die reine Rechenzeit (Wall Time) ca. 20 Tage betrug.

Die Rechnungen auf Gitterebene l_4 und l_5 wurden mit 256 Prozessoren des System X Cluster am Virginia Tech/USA durchgeführt. System X ist eines der wenigen Parallelrechner mit dem Mac OS X Betriebssystem. Es besteht aus 1100 Apple Xserve G5 Knoten mit 4 GB Hauptspeicher, die aus meistens zwei Dual 2.3 GHz PowerPC 970FX Prozessoren zusammengesetzt sind. Das Zeitintervall $[0..28]s$ wurde mit adaptiven Zeitschrittweiten $\Delta t_{min} = 0.005 \leq \Delta t \leq \Delta t_{max} = 0.05s$ integriert. Die gesamte Rechenzeit belief sich hierbei auf ca. 40 Tage.

9.3.4. Numerische Ergebnisse

In Abbildung 9.5 sind die axialen Geschwindigkeitskomponenten in der Draufsicht ($z = 0$) und Seitenansicht ($y = 0$) dargestellt, wobei es sich hier um eine Momentaufnahme einer voll ausgeprägten Strömung handelt. Besonders in der Draufsicht ist das erwartungsgemäß laminare

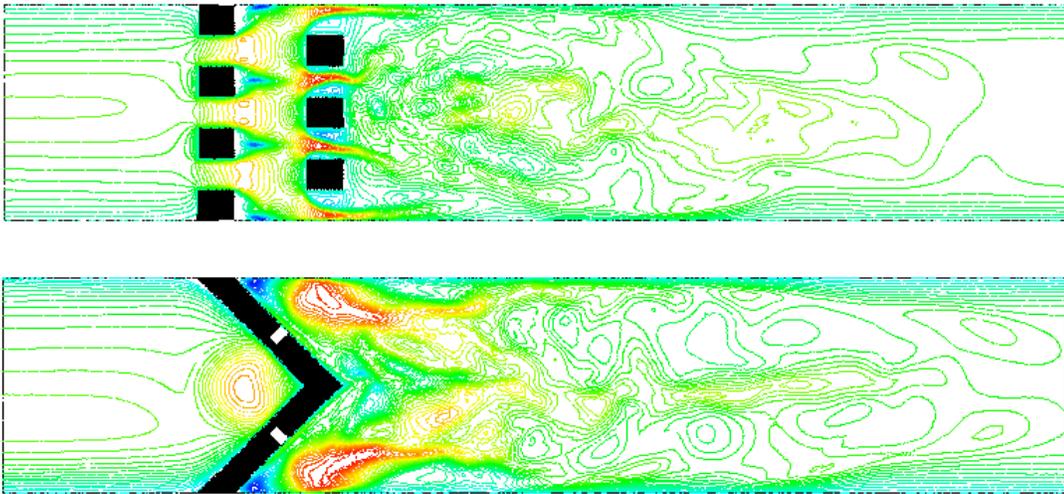


Abbildung 9.5.: Momentaufnahme der axialen Geschwindigkeitskomponente in der Draufsicht (oben) und Seitenansicht (unten).

und fast uniforme Geschwindigkeitsprofil im Einströmbereich gut zu erkennen. Vor dem Mischelement etabliert sich ein Staubereich mit dazugehörigem Wirbel (Seitenansicht). Je geringer/größer die Reynoldszahl, desto ausgeprägter/weniger ausgeprägt der Staubereich. Innerhalb des Mischelementes wird der Strömungsquerschnitt verringert und somit (nach Bernoulli) die Strömungsgeschwindigkeit entsprechend erhöht. Nach dem Mischelement formen sich zwei instationäre Wirbelzöpfe (in der Seitenansicht gut zu erkennen).

Die entsprechende Verteilung der turbulenten Viskosität ist in Abbildung 9.6 dargestellt und zeigt auch, dass die Größe der Geschwindigkeitsgradienten nicht mit der turbulenten Aktivität korrelieren muss. Beispielsweise sind zwischen den drei geschnittenen Lamellen die Geschwindig-

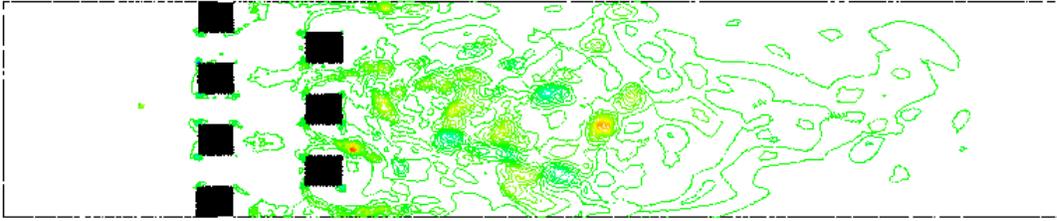


Abbildung 9.6.: Momentaufnahme der turbulenten Viskosität in der Draufsicht.

keitsgradienten sehr hoch, die turbulente Viskosität aber nicht. In Abbildung 9.7 ist qualitativ die axiale Geschwindigkeitskomponente in den vier Querschnitten bei x_0, x_1, x_2, x_3 dargestellt. Vor dem Mischelement ist praktisch keine Veränderung des Eingangsprofils festzustellen, was

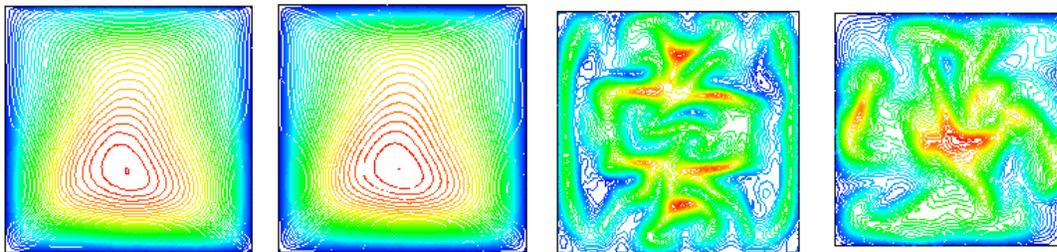


Abbildung 9.7.: Momentaufnahme der axialen Geschwindigkeitskomponente in den Querschnitten vor (bei x_0 und x_1) und den beiden Querschnitten nach dem Mischelement (bei x_2 und x_3).

auf ein gut approximiertes Einströmprofil schließen lässt, da der geometrische Verlauf vor dem Einströmrand bis vor das Mischelement bei x_1 konstant bleibt. Nach dem Mischelement ist erwartungsgemäß eine starke Verwirbelung festzustellen, die aber immer noch sehr ausgeprägte kohärente Strukturen aufweist. Das gleiche gilt für den etwas stromabwärts liegenden Querschnitt bei x_3 .

Die Konzentrationsverteilung in den Querschnitten ist in Abbildung 9.8 dargestellt. Ausgehend

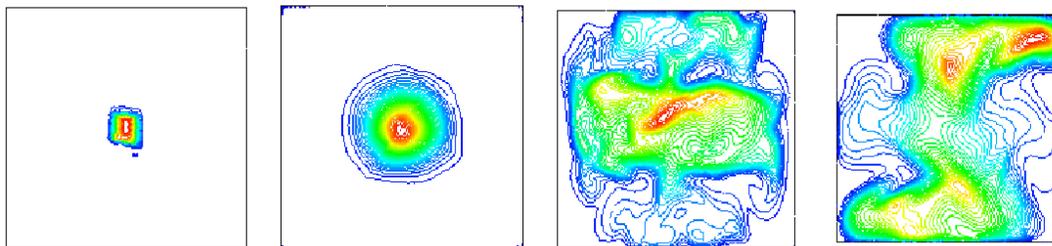


Abbildung 9.8.: Momentaufnahme der Konzentrationsverteilung in den Querschnitten bei x_0, x_1, x_2, x_3 (v.l.n.r.).

von einer kreisförmigen Eindüsung des Farbstoffes breitet sich dieser zunächst gleichmäßig in radialer Richtung aus. Durch das Mischelement wird die Ausgangsverteilung entsprechend stark verteilt, wobei keine homogene Verteilung stattfindet.

Die maximale Konzentration beträgt $\theta = 1.001$, was einem Approximationsfehler des konvektiven Terms in der Transportgleichung von 1‰ entspricht.

Einen Eindruck des Gittereinflusses gibt Abbildung 9.9. Hier werden die axialen Geschwindigkeiten auf den Gitterebenen l_2, l_3 und l_5 (adaptiv) gegenübergestellt. Bemerkenswerterweise

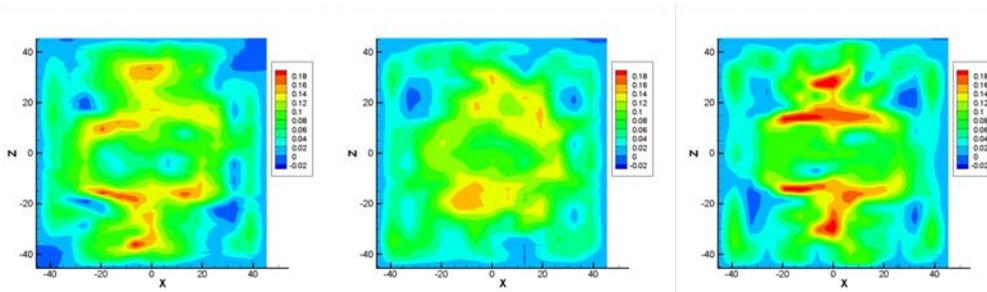


Abbildung 9.9.: Vergleich der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement auf den Gitterebenen l_2, l_3, l_5 .

stimmen die Ergebnisse auf Gitterebene l_2 und l_5 gut überein, wohingegen das Ergebnis auf Gitterebene l_3 nicht dazu passt. Dies gilt sowohl quantitativ als auch qualitativ.

Für eine weitere Beurteilung der auf unterschiedlichen Gittern durchgeführten Berechnungen ist zuerst die axiale Geschwindigkeitskomponente entlang einer in axialer Richtung in der Mitte des statischen Mischers gezogenen Geraden aufgetragen. Es werden sowohl die über den Zeitraum von $t = 5.0s$ gemittelten als auch die dazugehörige Bandbreite (Maximal- und Minimalwert) betrachtet (siehe Abbildung 9.10). Vor dem Mischelement sind die Geschwindigkeiten erwartungsgemäß deckungsgleich. Gut ist auch die Geschwindigkeitsreduzierung im Staubereich vor dem Mischelement bei $x/L = 0.16$ zu erkennen. Im Mischelement treten auf der größten Gitterebene die maximale Geschwindigkeit auf. Nach dem Mischelement etablieren sich Geschwindigkeiten, die mehr oder weniger von Gitterebene zu Gitterebene stark voneinander abweichen. Die Korrelation der Geschwindigkeiten direkt nach dem Mischelement sind zwischen l_2 und l_5 größer als bei l_2 und l_3 bzw. l_3 und l_5 . Dieses Phänomen, dass die Lösung l_3 nicht zwischen den beiden Lösungen l_2 und l_5 liegt, zeigt sich auch beim Vergleich mit den Experimenten weiter unten. Von einer gitterkonvergenten Lösung kann hier nicht gesprochen werden. Desweiteren ist die Schwankungsbreite auf Ebene l_2 und l_3 in derselben Größenordnung, wohingegen die Abweichungen auf der höchsten Gitterebene l_5 wesentlich größer sind. Der Einfluss der numerischen Dissipation, die auf τ_5 am geringsten ist, könnte hier eine Rolle spielen. Ein ähnliches Bild zeigt sich bei der vertikalen bzw. transversalen Geschwindigkeitskomponente, dargestellt in Abbildung 9.11, wobei die relativen Abweichungen auf dem feinsten Gitter noch größer sind. Interessant ist bei diesen Geschwindigkeitskomponenten auch wieder, dass die Korrelation der Lösungen auf Gitterebene l_3 bezüglich der anderen Lösungen am geringsten ist.

9.4. Vergleich Simulation Experiment

Im Folgenden werden die numerischen Ergebnisse experimentellen Untersuchungen gegenübergestellt. Bei den durchgeführten Experimenten von Leschka et al. [87] ist von einer Messgenauigkeit

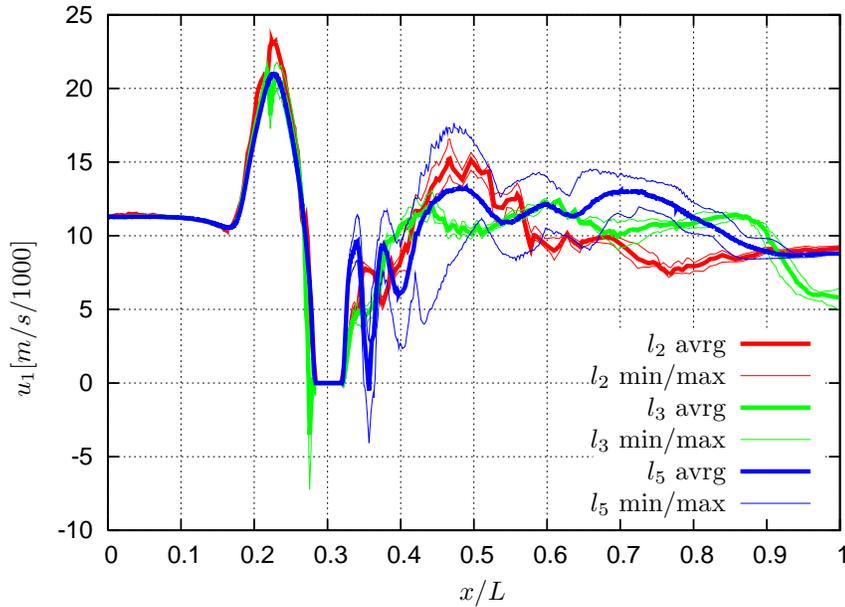


Abbildung 9.10.: Axiale Geschwindigkeitskomponente u_1 entlang der Längsachse für die Gitterebenen l_2, l_3, l_5 , wobei die Maximal- und Minimalwerte mit dünner Strichstärke dargestellt sind.

im Promillebereich auszugehen, der durch mehrfache Realisierungen festgestellt werden kann. Der inhärente Fehler, der unabhängig von der Anzahl der Realisierungen und schwer oder gar nicht zu erfassen ist, kann dabei allerdings wesentlich größer sein (siehe auch kritische Bemerkung in Abschnitt 6.2.1).

Das Profil der axialen Geschwindigkeitskomponenten im Querschnitt vor dem Mischelement bei x_1 aus den Experimenten und Simulationen ist in Abbildung 9.12 dargestellt. Im Gegensatz zur numerischen Simulation ist das gemessene Geschwindigkeitsprofil stark verzerrt. Der kurze Verlauf vom Einströmquerschnitt bei x_0 bis zum Querschnitt vor dem Mischelement bei x_1 , der geometrisch uniform ist, lässt eine Extrusion und somit Konstanz des Einströmprofils erwarten. Die experimentell gemessenen Profile bei x_0 und x_1 unterscheiden sich allerdings nennenswert, was an der Qualität der Experimente zweifeln lässt.

In Abbildung 9.13 ist die axiale Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement bei x_2 aus dem Experiment (links) und der Simulation (rechts) dargestellt. Es fällt auf, dass das Experiment nur eine Symmetrieachse (horizontal) besitzt. Der qualitative Verlauf auf der rechten Seite ($y = [0, 20]$) korreliert mit den numerischen Ergebnissen, wohingegen die linke Seite ($y = [-20, 0]$) qualitativ anders aussieht. Quantitativ stimmen die Maximal- und Minimalwerte der Geschwindigkeiten gut überein.

Betrachtet man die transversalen (in y -Richtung) Geschwindigkeiten in Abbildung 9.14, so kann nicht von einer guten Übereinstimmung gesprochen werden. Vielmehr ist auch bei der Simulation keine Symmetrie auszumachen. Lediglich die Maximal- und Minimalwerte stimmen überein. Die Sensitivität ist im Vergleich zu den axialen Geschwindigkeiten allerdings auch eine andere, da die transversalen wie die vertikalen Geschwindigkeiten betragsmäßig um zwei Drittel kleiner sind. Schließlich sind in Abbildung 9.15 noch die vertikalen Geschwindigkeiten dargestellt. Hier korrelieren die beiden Ergebnisse sowohl qualitativ als auch quantitativ. Beide Konturbilder weisen

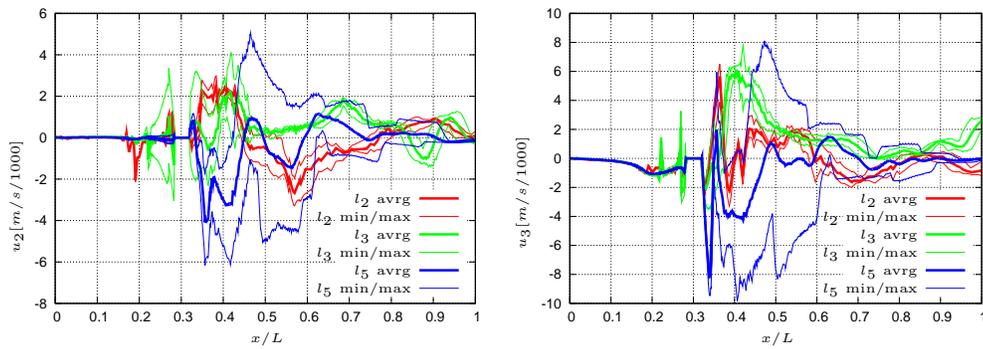


Abbildung 9.11.: Vertikale (links) und transversale (rechts) Geschwindigkeitskomponente u_2 bzw. u_3 entlang der Längsachse für die Gitterebenen l_2, l_3, l_5 , wobei die Maximal- und Minimalwerte mit dünner Strichstärke dargestellt sind.

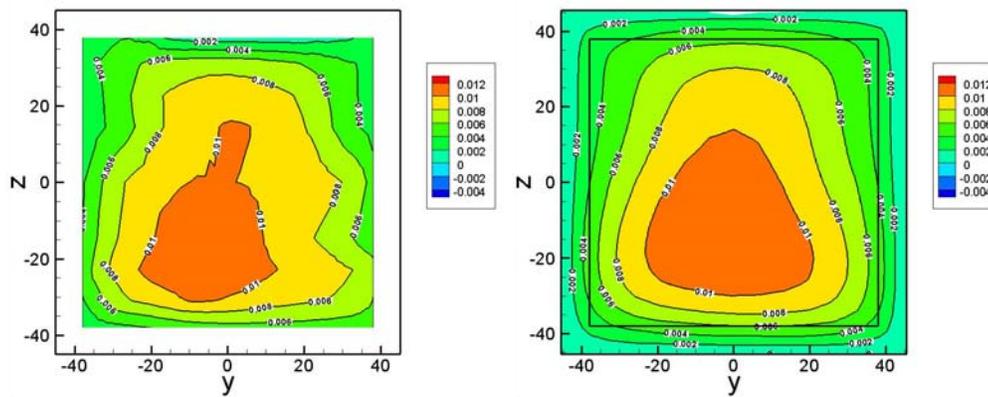


Abbildung 9.12.: Vergleich der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeitskomponente vor dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).

drei Maxima und zwei Minima (am Rand) im oberen und zwei Minima bzw. zwei Maxima (im Randbereich) im unteren Bereich auf.

Kritik

Die axialen Geschwindigkeiten, die am größten und somit weniger sensibel als die transversalen bzw. vertikalen Geschwindigkeiten sind, liefern ein plausibles Bild. Das nahezu symmetrische Profil steht in Einklang mit der symmetrischen geometrischen Anordnung. Nach dem Mischelement ist der Einfluss des verzogenen Einstömprofils nicht mehr zu erkennen. Die transversalen Geschwindigkeiten sind für Störungen wegen ihrer geringen Größe wesentlich anfälliger und weisen kein zu dem Mischelement korrelierendes Profil auf. Die vertikalen Geschwindigkeiten demgegenüber lassen den Einfluss des Mischelementes wieder erahnen.

Aus numerischer Sicht ist vor allem der Vergleich der axialen Geschwindigkeiten auf den drei Gitterebenen l_2, l_3, l_5 bedenklich, da sich das Profil von l_3 nicht mit dem auf Gitterebene l_2 und l_5 deckt. Da die Rechnungen der drei Gitterebenen auf drei verschiedenen Clustern gerechnet

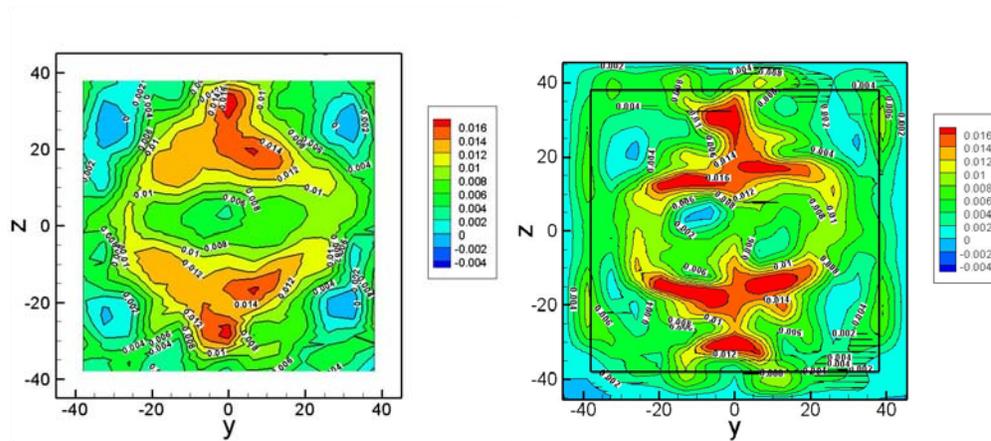


Abbildung 9.13.: Vergleich der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).

worden sind, könnte hier ein hardwareabhängiges Problem die Ursache sein.

Der Hauptkritikpunkt richtet sich allerdings an die experimentellen Ergebnisse und hier in erster Linie am fehlenden symmetrischen Strömungsfeld vor allem bezüglich der vertikalen Symmetrielinie. Ein Indiz für die Schwächen der durchgeführten Experimente ist auch das stark verzerrte Einströmprofil. Wird davon ausgegangen, dass die Fehlergenauigkeit der Qualität des in Abbildung 9.4 dargestellten Einströmprofils entspricht, so scheinen die größeren Ungenauigkeiten beim Vergleich Experiment zu Simulation auf Seiten der Experimente zu liegen.

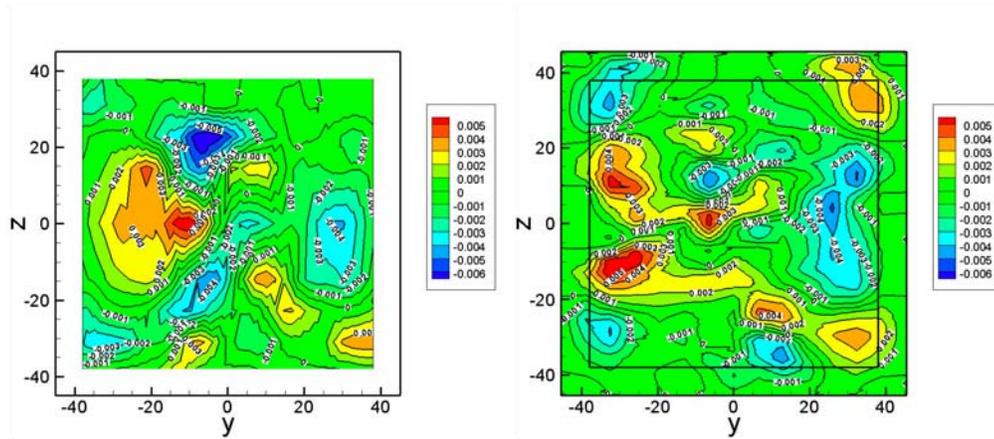


Abbildung 9.14.: Vergleich der zeitlich gemittelten transversalen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).

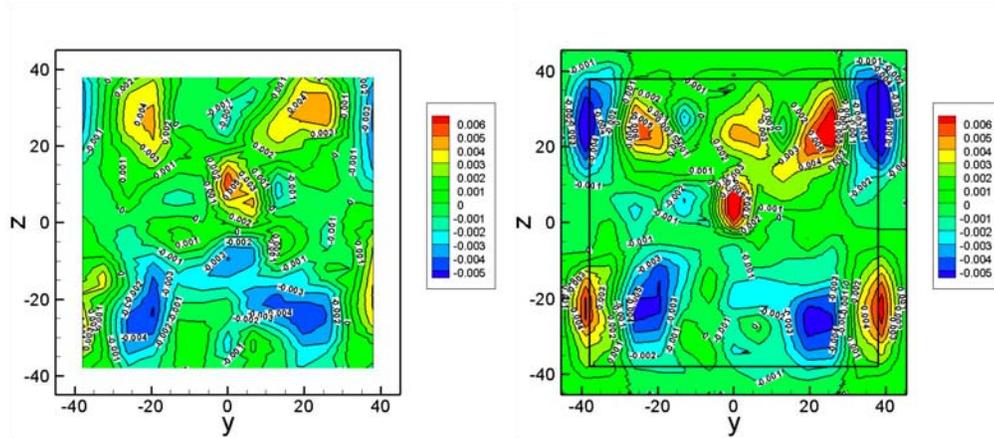


Abbildung 9.15.: Vergleich der zeitlich gemittelten vertikalen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).

10. Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit hat sich mit den Aspekten der Berechnung turbulenter Strömungen mit Hilfe der Large Eddy Simulation auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern beschäftigt.

Es wurde, neben der Darstellung der zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen und der Eigenschaften turbulenter Strömungen, auf die klassischen LES-Modelle eingegangen und vor allem die zur Bestimmung der Fehlerkomponenten erforderlichen variablen Filterweiten betrachtet.

Nachdem die Grundlagen für die numerischen Verfahren dargelegt wurden, standen vor allem die verschiedenen Fehlerquellen einer LES im Vordergrund. Insbesondere wurden die Konvergenzraten sowohl in der Zeit als auch bezüglich der räumlichen Diskretisierung und der Filterweiten untersucht. Hierbei wurden Konvergenzordnungen für die betrachteten Größen E_{kin} , E_{res} und ϵ_{sgs} bestimmt. Die auftretenden divergenten Lösungsfolgen sind auf einzelne Lösungen zurückzuführen, die sich noch nicht im asymptotischen Bereich befinden.

Durch Variation der Filter- und Gitterweiten konnte der Einfluss des Diskretisierungs- und Modellfehlers gezeigt werden.

Bemerkenswert sind die unterschiedlichen Vorzeichen der Fehlerkomponenten, die sich u.U. auslösen und die Ordnung des Gesamtverfahrens somit erhöhen. Bei der Betrachtung der Fehlerkomponenten ist festzuhalten, dass für die betrachteten Räume der Modellfehler tendenziell kleiner als der Diskretisierungsfehler ist, letzterer aber schneller konvergiert.

Bei der Untersuchung adaptiver Verfahren hat sich herausgestellt, dass der residuenbasierte Fehlerindikator und Maximum-Indikator (in der turbulenten Viskosität) am effizientesten sind. Diese Aussage betrifft alle drei betrachteten Problemstellungen. Mit diesen beiden Indikatoren werden die Gitter derart adaptiert, dass mit weniger als 30% der Elemente im Vergleich zu uniform verfeinerten Gittern ähnlich gute Ergebnisse erzielt werden können. Schließlich wurden die beschriebenen Verfahren für die Beschreibung des turbulenten Stofftransportes in einem statischen Mischer erfolgreich eingesetzt.

Die folgenden Aspekte dienen als mögliche Anhaltspunkte, die durchgeführten Arbeiten weiter auszubauen und zu verbessern.

Die durchgeführten Analysen und Aussagen über Konvergenzraten stützen sich in erster Linie auf die kinetische Energie und Subskalendissipation. Die Erweiterung auf andere Größen, wie bspw. die primitiven Variablen, könnten die hier gewonnenen Ergebnisse auf eine breitere Grundlage stellen.

Obwohl etliche Indikatoren bzw. Verfeinerungskriterien untersucht worden sind, bieten sich noch weitere interessante Kandidaten an. Als Verfeinerungskriterium ist bspw. die von Huerdemann [71] eingeführte durch die Geschwindigkeit reduzierte Wirbelstärke $\frac{\nabla \times \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|}$ zu nennen.

Neben den gezeigten numerischen Simulationen sollten speziell die adaptiven Methoden auf weitere Problemstellungen angewendet und entsprechend evaluiert werden.

Für den statischen Mischer ist geplant, einerseits höhere Reynoldszahlen zu realisieren und andererseits die Adaptionstiefe zu vergrößern. Da auch experimentelle Untersuchungen durchgeführt werden sollen, könnte diese Problemstellung als komplexer LES-Benchmark etabliert werden.

Anhang A.

Anhang

A.1. Stabilität und Verstärkungsfaktor

Mit

$$\Phi' = M \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \text{ und } \Phi = A(\mathbf{x}, t) - b \quad (\text{A.1})$$

kann (5.12) im Sinne der Anfangswertaufgabe

$$\Phi' = f(\Phi(t), t)$$

umformuliert werden.

Man wendet nun ein entsprechendes Schema auf die skalare Testgleichung

$$\Phi'(t) = q\Phi(t), \quad q \in \mathbb{C}, \quad \Phi(t) = e^{qt}\Phi(0)$$

an, die einer linearen Anfangswertaufgabe entspricht und erhält

$$\Phi^{n+1} = R(\Delta tq)\Phi^n$$

mit dem Stabilitäts- bzw. Verstärkungsfaktor $R(\Delta tq)$. Dieser ist dabei notwendig eine Approximation des Exponentialausdrucks

$$R(\Delta tq) = e^{\Delta tq} + \mathcal{O}(h^{r+1}) \quad (\text{A.2})$$

mit der Ordnung $r \geq 1$ des Verfahrens. Im folgenden wird $\lambda := \Delta tq$ gesetzt.

Die Funktion $R(\lambda)$ definiert ein Stabilitätsgebiet in der komplexen Ebene. Die Stabilitätsfunktion für das Einschritt- Θ -Verfahren lautet

$$R_{\Theta}(\lambda) = \frac{1 + (\Theta - 1)\lambda}{1 - \Theta\lambda} = e^{\lambda} + \mathcal{O}((\Theta - 0.5)|\lambda|^2 + |\lambda|^3), \quad |\lambda| \leq 1 \quad (\text{A.3})$$

und für das Mehrschritt- Θ -Verfahren gilt

$$R_{\Theta}(\lambda) = \frac{(1 + \alpha\Theta'\lambda)(1 + \beta\Theta\lambda)^2}{1 - \alpha\Theta\lambda)^2(1 - \beta\Theta'\lambda)} = e^{\lambda} + \mathcal{O}(|\lambda|^3), \quad |\lambda| \leq 1.$$

A.2. Lösungsverfahren

Algorithmus 3 (Das präkonditionierte BiCGStab-Verfahren).

```

(1)  $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^0$ 
(2) Wähle  $\tilde{\mathbf{r}}$ 
(3) for  $i = 1, 2, \dots$ 
(4)    $\rho_{i-1} = \tilde{\mathbf{r}}^T \mathbf{r}^{i-1}$ 
(5)   if  $\rho_{i-1} = 0$    Verfahren fehlgeschlagen
(6)   if  $i = 1$ 
(7)      $\mathbf{p}^i = \mathbf{r}^{i-1}$ 
(8)   else
(9)      $\beta_{i-1} = (\rho_{i-1}/\rho_{i-2})(\alpha_{i-1}/\omega_{i-1})$ 
(10)     $\mathbf{p}^i = \mathbf{r}^{i-1} + \beta_{i-1}(\mathbf{p}^{i-1} - \omega_{i-1}\mathbf{v}^{i-1})$ 
(11)   Löse  $M\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^i$    Präkonditionierung
(12)    $\mathbf{v}^i = A\hat{\mathbf{p}}$ 
(13)    $\alpha_i = \rho_{i-1}/\tilde{\mathbf{r}}^T \mathbf{v}^i$ 
(14)    $\mathbf{s} = \mathbf{r}^{i-1} - \alpha_i \mathbf{v}^i$ 
(15)   if  $\mathbf{s} < tol$ 
(16)      $\mathbf{x}^i = \mathbf{x}^{i-1} + \alpha_i \hat{\mathbf{p}}$ 
(17)   stop
(18)   Löse  $M\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{s}$    Präkonditionierung
(19)    $\mathbf{t} = A\hat{\mathbf{s}}$ 
(20)    $\omega_i = \mathbf{t}^T \mathbf{s} / \mathbf{t}^T \mathbf{t}$ 
(21)    $\mathbf{x}^i = \mathbf{x}^{i-1} + \alpha_i \hat{\mathbf{p}} + \omega_i \hat{\mathbf{s}}$ 
(22)    $\mathbf{r}^i = \mathbf{s} - \omega_i \mathbf{t}$ 
(23)   if  $\mathbf{r} < tol$ 
(24)     stop
(25)   if  $\omega_i = 0$ 
(26)     stop

```

Ebene l_i	ohne BiCGStab			mit BiCGStab		
	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock	#iter	$\bar{\rho}$	Wall Clock
0	6	0.21	41.22	3	0.04	56.41
1	12	0.44	88.17	6	0.21	107.10
2	34	0.746	2251			

Tabelle A.1.: Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (3D, instationär) mit präkonditioniertem BiCGStab als Grobgitterlöser.

A.3. Strahl in Scherströmung 2D

Zeitschrittweite i	Δt_i	\bar{E}_{kin}
1	0.1	2.7736
2	0.05	2.7723
3	0.025	2.7703
4	0.0125	2.7690
5	0.00625	2.7640
p	-1.94	

Tabelle A.2.: Gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung auf Gitterebene l_3 .

Gitterebene l_i	$\Delta t(l_i)$	$\bar{E}_{kin}(l_i, \Delta t)$	$\bar{S}(l_i, \Delta t)$	$maxS(l_i, \Delta t)$
1	0.2	2.8730	0.041685	0.957549
	0.1	2.964248	0.060040	0.965211
	0.05	3.072759	0.048921	0.985308
	0.025	3.107365	0.046041	0.983491
	0.0125	3.119688	0.043029	0.984966
	0.00625	3.074467	0.048855	0.985334
2	0.2	2.79934	0.001648	0.95487
	0.1	2.79281	0.000821	0.96070
	0.05	2.79055	0.002257	0.96117
	0.025	2.79143	-0.00099	0.95424
	0.0125	2.78599	-0.001337	0.97675
	0.00625	2.77134	-0.001137	0.95932
3	0.2	2.7745	0.000467	0.847055
	0.1	2.7736	-0.00310	0.844959
	0.05	2.7723	-0.000002	0.8647
	0.025	2.7703	0.000753	0.87239
	0.0125	2.7690	0.000200	0.86872
	0.00625	2.7640	0.000201	0.86759

Tabelle A.3.: Einfluss der Zeitschrittweiten Δt auf die gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} auf den Gitterebenen l_1 , l_2 und l_3 .

Gitterebene l_i	E_{kin}
0	2.79021
1	2.86748
2	2.77287
3	2.74948
p	2.016

Tabelle A.4.: \bar{E}_{kin} und resultierende Konvergenzordnung für die Gitterebenen l_i und Filterweiten Δ_i^i mit $i = 0, 1, 2, 3$.

Filterweite Δ_3^i	E_{kin}
0	2.74948
1	2.720871
2	2.691082
3	2.627331
p	1.094

Tabelle A.5.: \bar{E}_{kin} und resultierende Konvergenzordnung für die Gitterebene l_3 mit den Filterweiten Δ_3^i , $i = 0, 1, 2, 3$.

Gitterebene l_i	E_{kin}
1	2.867489
2	2.729997
3	2.691082
p	1.822

Tabelle A.6.: \bar{E}_{kin} und resultierende Konvergenzordnung für die Gitterebenen l_i mit konstanter Filterweite Δ_i^1 , $i = 1, 2, 3$.

Gitterebene i	$\bar{\epsilon}_{sgs,i}$
1	-9.154799
2	-4.088719
3	-2.070541
p	1.331

Tabelle A.7.: $\bar{\epsilon}_{sgs}$ und resultierende Konvergenzordnung für das Gesamtverfahren auf den Gitterebenen l_i mit den Filterweiten Δ_i^i , $i = 1, 2, 3$.

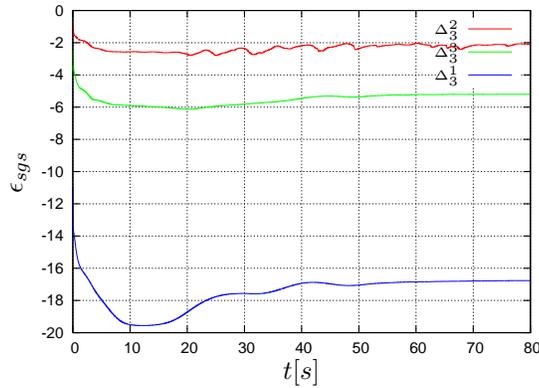


Abbildung A.1.: ϵ_{sgs} auf Gitterebene l_3 mit den Filterweiten Δ_3^i , $i = 3, 2, 1$.

Δ_i	$\epsilon_{sgs,i}$
3	-2.085250
2	-5.198209
1	-16.766851
p	1.893

Tabelle A.8.: $\bar{\epsilon}_{sgs}$ mit resultierender Konvergenzordnung für das Modell auf Gitterebene l_3 mit den Filterweiten Δ_3^i , $i = 1, 2, 3$.

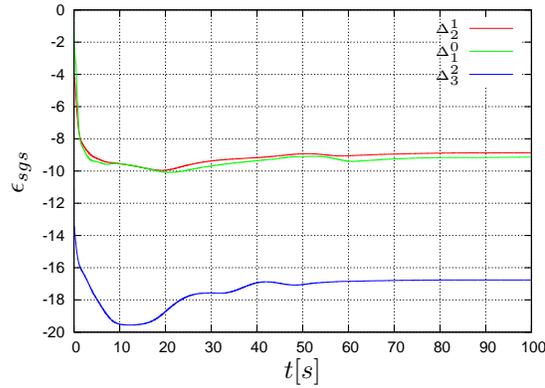


Abbildung A.2.: ϵ_{sgs} mit konstanter Filterweite Δ_i^3 auf den Gitterebenen l_i mit $i = 1, 2, 3$.

Gitterebene i	Δ_i	$\bar{\epsilon}_{sgs,i}$
1	1	-8.867888
2	1	-9.146731
3	1	-16.761399
p	4.819	

Tabelle A.9.: $\bar{\epsilon}_{sgs}$ und resultierende Konvergenzordnung für die Diskretisierung auf den Gitterebenen l_i und konstanter Filterweite Δ_i^1 , $i = 1, 2, 3$.

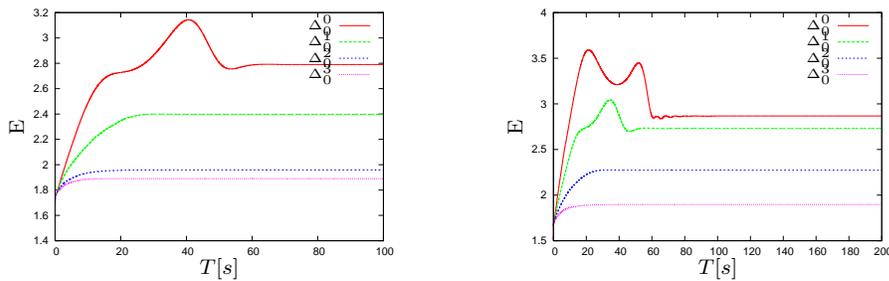


Abbildung A.3.: E auf Gitterebene l_0 (links) und Gitterebene l_1 (rechts) mit unterschiedlichen Filterweiten.

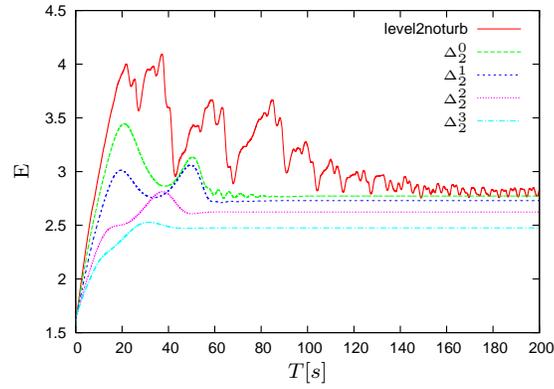


Abbildung A.4.: E auf Gitterebene 2 mit unterschiedlichen Filterweiten.

Verfahren	$x_{LES}(\Delta, h)$	$x_{LES}(\Delta, 0)$	$x_{DNS}(\Delta)$	ϵ_d	ϵ_m	$ \epsilon $
uniform l_3	2.798709	-	-	-	-	-
RB	2.756496	2.753598	2.78586	0.002898	-0.012845	0.009947
VM	2.754889	2.778321	2.79200	-0.023432	-0.006707	0.030139
VG	2.754775	2.771841	2.79314	-0.017066	-0.005570	0.022636

Tabelle A.10.: Modell- und Diskretisierungsfehler in der kinetischen Energie \bar{E}_{kin} für die Indikatoren η_r , $\eta_{max}(\omega)$ und $\eta_{hi}(E_{kin})$.

A.4. Nischenströmung

Zeitschrittweite i	Δt_i	\bar{E}_{kin}
1	0.2	0.023290
2	0.1	0.023465
3	0.05	0.023552
4	0.01	0.023749
p		1.01

Tabelle A.11.: Gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung (berechnet ausschließlich aus den ersten drei Zeitschrittweiten).

Zeitschrittweite i	Δt_i	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
1	0.2	-0.000258
2	0.1	-0.000260
3	0.05	-0.000262
4	0.01	-0.000259
p		0.00

Tabelle A.12.: Gemittelte Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{sgs}$ mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung.

Gitterebene i	Δ	\bar{E}_{kin}	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
4	4	0.0193	-0.000290
5	5	0.0237	-0.000260
6	6	0.0246	-0.000155
p		2.25	-1.63

Tabelle A.13.: Konvergenz des Gesamtverfahrens für den ausgewählten Bereich $t = [20, 40]s$ in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation.

Gitterebene i	Δ	\bar{E}_{kin}	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
4	4	0.0193	-0.000290
5	4	0.0174	-0.000532
6	4	0.0141	-0.000745
p		-0.82	0.15

Tabelle A.14.: Gitterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation bei konstanter Filterweite Δ^4 .

Gitterebene i	Δ	\bar{E}_{kin}	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
5	5	0.0237	-0.000260
6	5	0.0193	-0.000347
7	5	0.0172	-0.001254
p		1.08	-3.38

Tabelle A.15.: Gitterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendisipation bei konstanter Filterweite Δ^5 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.

Gitterebene i	Δ	\bar{E}_{kin}	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
5	5	0.0237	-0.000260
6	5	0.0193	-0.000347
7	5	0.0172	-0.001254
p		1.08	-3.38

Tabelle A.16.: Gitterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendisipation bei konstanter Filterweite Δ^5 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.

Gitterebene i	Δ	\bar{E}_{kin}	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
5	5	0.0237	-0.000260
5	4	0.0174	-0.000532
5	3	0.0140	-0.001104
p		-0.89	1.07

Tabelle A.17.: Filterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendisipation auf Gitter τ_5 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.

Gitterebene i	Δ	\bar{E}_{kin}	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
6	6	0.0246	-0.000155
6	5	0.0193	-0.000347
6	4	0.0141	-0.000749
p		-0.03	1.07

Tabelle A.18.: Filterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendisipation auf Gitter τ_6 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.

A.5. Gitteradaption

Algorithmus 4 (Gitteradaption). SurfaceIndicator(Lösung x , l_{\max} , l_{\min} , Gewichte w):

```

(1) max = 0.0; min = 1e20; nel = 0
(3) for l = 0 to l_max do
(4)   for t = 0 to #elem(l) do
(5)     el = elList[t]
(6)     if EstimateHere(el)
(7)       est = ElementIndicator(el,x,w)
(8)       min = MIN(min,est)
(10)      max = MAX(max,est)
(12)      List[nel++] = est
(14) rf = max *  $\epsilon_r$ ; cr = max *  $\epsilon_c$ ; nel = 0
(17) for l = l_min to l_max do
(18)   for t = 0 to #elem(l) do
(19)     el = elList[t]
(20)     if EstimateHere(el)
(21)       est = List[nel++]
(23)       if (ECLASS(t)=REDCLASS) &( est > rf) &( k < l_max)
(25)         MarkForRefinement(t,RED,0)
(27)         mfr ++
(29)       if (ECLASS(t)=GREENCLASS) &( est > rf) &( k ≤ l_max)
(31)         MarkForRefinement(t,RED,0)
(33)         mfr ++
(35)       if (ECLASS(t)=YELLOWCLASS) &( est > rf) &( k ≤ l_max)
(37)         MarkForRefinement(t,RED,0)
(39)         mfr ++
(41)       if (ECLASS(t)=REDCLASS) &( est < cr) &( k > l_min)
(43)         MarkForRefinement(t,COARSE,0)
(45)         mfc ++
(47) refine/coarsen

```

A.6. Turbulenter Wärmetransport durch natürliche Konvektion in einer hohen Nische

Zeitschrittweite i	Δt_i	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
1	0.1	0.008821
2	0.05	0.009913
3	0.025	0.009649
p	2.05	
1a	0.1	0.012376
2a	0.05	0.016729
3a	0.025	0.016538
p	4.51	

Tabelle A.19.: Gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung mit LES- und ohne LES-Modell (a).

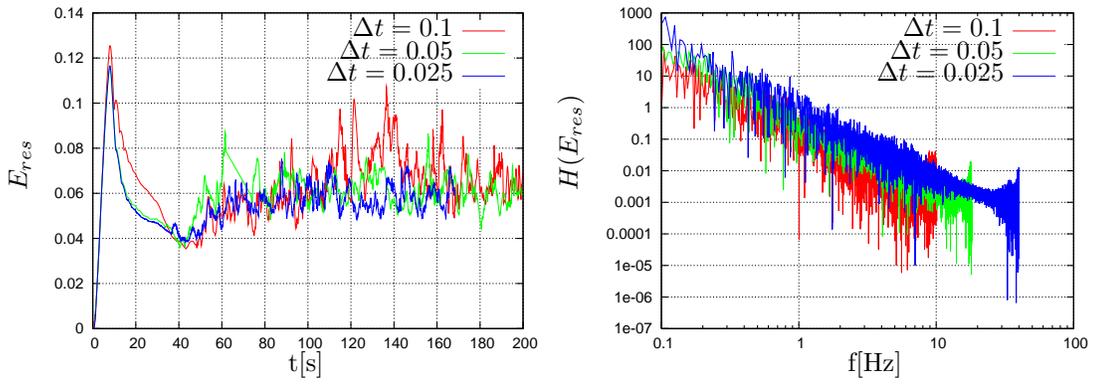


Abbildung A.5.: Turbulente kinetische Energie auf Gitterebene l_4 bei unterschiedlichen Zeitschrittweiten.

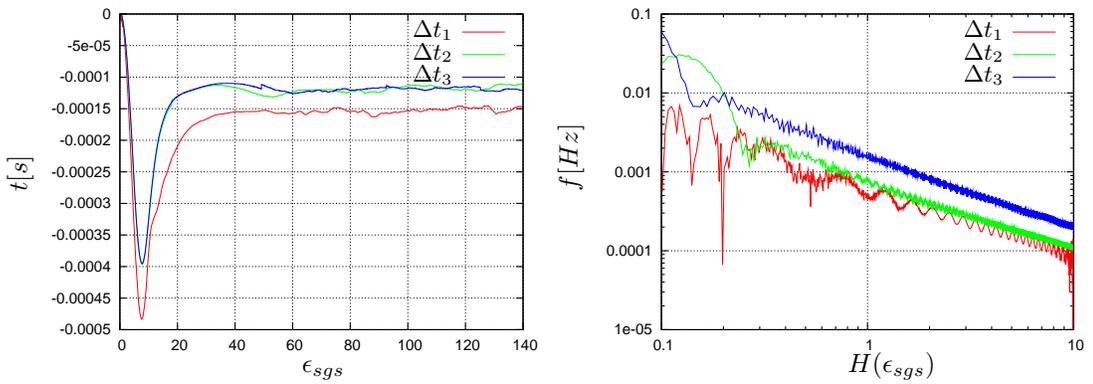


Abbildung A.6.: Subskalendissipation (links) und dessen Powerspektrum (rechts) auf Gitterebene l_4 mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten.

Zeitschrittweite i	Δt_i	$\bar{\epsilon}_{sgs}$
1	0.1	-0.000151
2	0.05	-0.000122
3	0.025	-0.000120
p	3.86	

Tabelle A.20.: Gemittelte Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{sgs}$ mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung.

Zeitschrittweite i	Δt_i	$\bar{u}_3(P(0.7W, 0.5D, 0.8H))$
1	0.1	0.124686
2	0.05	0.104915
3	0.025	0.09621
p	1.18	

Tabelle A.21.: Gemittelte vertikale Geschwindigkeit \bar{u}_3 im Punkt P mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung.

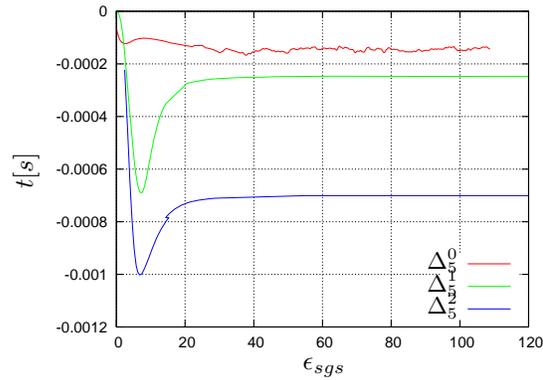


Abbildung A.7.: Subskalendissipation auf Gitterebene l_5 mit unterschiedlichen Filterweiten.

Tabellenverzeichnis

5.1. Maximale Zeitschrittweiten und CFL-Zahlen	66
5.2. Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (2D, stationär).	85
5.3. Konvergenzraten des Problems <i>Natürliche Konvektion in einer hohen Nische</i> (2D, instationär, mit LES-Modell).	85
5.4. Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (3D, stationär).	85
5.5. Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (3D, instationär, LES-Modell).	86
7.1. Gitterhierarchie des <i>Jet in Crossflow</i> -Problems.	105
7.2. Oberflächengitter bezüglich der verschiedenen Indikatoren und Vergleich mit den uniformen Gittern τ_1 , τ_2 und τ_3	116
7.3. Modellfehler em , Diskretisierungsfehler ed und Gesamtfehler an Hand der kinetischen Energie \bar{E}_{kin} für die verwendeten Indikatoren.	119
7.4. Modell- und Diskretisierungsfehler an Hand der axialen Geschwindigkeit entlang einer Geraden im \mathbb{R}^2 für die Indikatoren η_r , $\eta_{max}(\omega)$ und $\eta_{hi}(E_{kin})$	119
8.1. Gitterhierarchie Hohe Nische 2D.	123
8.2. Modell- und Diskretisierungsfehler in E_{kin} für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_4 und l_5	129
8.3. Anzahl Elemente und τ^{min} bzw. τ^{max} der adaptierten Gitter.	130
8.4. Durch uniforme Verfeinerung erzeugte Gitterhierarchie.	131
8.5. Konvergenzraten bei unterschiedlichen Zeitschrittweiten auf Gitterebene l_4	133
8.6. Gemittelte turbulente Energie \bar{E}_{res} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit der daraus bestimmten Ordnung des Diskretisierungs- und Filteroperators.	134
8.7. Modell- und Diskretisierungsfehler in E_{kin} für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_3 und l_4	135
8.8. Modell- und Diskretisierungsfehler in E_{res} für die Produktionsrechnung auf Gitterebene l_3 und l_4	136
9.1. Durch uniforme und adaptive Verfeinerung erzeugte Gitterhierarchie.	146
A.1. Konvergenzraten des Problems Natürliche Konvektion in einer hohen Nische (3D, instationär) mit präkonditioniertem BiCGStab als Grobgitterlöser.	158
A.2. Gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung auf Gitterebene l_3	159
A.3. Einfluss der Zeitschrittweiten Δt auf die gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} auf den Gitterebenen l_1, l_2 und l_3	159
A.4. \bar{E}_{kin} und resultierende Konvergenzordnung für die Gitterebenen l_i und Filterweiten Δ_i^i mit $i = 0, 1, 2, 3$	159

A.5.	\bar{E}_{kin} und resultierende Konvergenzordnung für die Gitterebene l_3 mit den Filterweiten Δ_3^i , $i = 0, 1, 2, 3$.	160
A.6.	\bar{E}_{kin} und resultierende Konvergenzordnung für die Gitterebenen l_i mit konstanter Filterweite Δ_i^1 , $i = 1, 2, 3$.	160
A.7.	$\bar{\epsilon}_{sgs}$ und resultierende Konvergenzordnung für das Gesamtverfahren auf den Gitterebenen l_i mit den Filterweiten Δ_i^i , $i = 1, 2, 3$.	160
A.8.	$\bar{\epsilon}_{sgs}$ mit resultierender Konvergenzordnung für das Modell auf Gitterebene l_3 mit den Filterweiten Δ_3^i , $i = 1, 2, 3$.	161
A.9.	$\bar{\epsilon}_{sgs}$ und resultierende Konvergenzordnung für die Diskretisierung auf den Gitterebenen l_i und konstanter Filterweite Δ_i^1 , $i = 1, 2, 3$.	161
A.10.	Modell- und Diskretisierungsfehler in der kinetischen Energie \bar{E}_{kin} für die Indikatoren η_r , $\eta_{max}(\omega)$ und $\eta_{hi}(E_{kin})$.	162
A.11.	Gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung (berechnet ausschließlich aus den ersten drei Zeitschrittweiten).	163
A.12.	Gemittelte Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{sgs}$ mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung.	163
A.13.	Konvergenz des Gesamtverfahrens für den ausgewählten Bereich $t = [20, 40]s$ in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation.	163
A.14.	Gitterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation bei konstanter Filterweite Δ^4 .	164
A.15.	Gitterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation bei konstanter Filterweite Δ^5 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.	164
A.16.	Gitterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation bei konstanter Filterweite Δ^5 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.	164
A.17.	Filterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation auf Gitter τ_5 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.	164
A.18.	Filterkonvergenz in der zeitlich gemittelten kinetischen Energie und Subskalendissipation auf Gitter τ_6 für den ausgewählten Zeitraum $t = [20, 40]s$.	164
A.19.	Gemittelte kinetische Energie \bar{E}_{kin} mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung mit LES- und ohne LES-Modell (a).	165
A.20.	Gemittelte Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{sgs}$ mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung.	167
A.21.	Gemittelte vertikale Geschwindigkeit \bar{u}_3 im Punkt P mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten und die resultierende Ordnung.	167

Abbildungsverzeichnis

2.1. Wärmetransport bei natürlicher Konvektion.	14
3.1. Kohärente Strukturen in turbulenter Strömung [33].	22
3.2. Klassische Energiekaskade	24
4.1. FVM nach dem Schwerpunktverfahren: Kontrollvolumen im \mathbb{R}^2 (links) und Subkontrollvolumen im \mathbb{R}^3 (rechts).	44
4.2. Bilineare Ansatzfunktion auf einem Referenzviereck.	47
4.3. Geometrische Größen eines Subkontrollvolumens eines Dreieckelementes.	47
4.4. Full upwinding	53
4.5. Skewed Upwinding	53
4.6. LPS Upwinding	53
4.7. Standard-Filterweiten auf einem unstrukturierten Gitter $\tau_l \in \mathbb{R}^2$: Filterweite als Kontrollvolumen (feine Schraffur) und als an den Knoten \mathbf{x}_j angrenzende Elementvolumina (grobe Schraffur).	56
4.8. Rekursive Bestimmung der Filterweite τ_l auf einem uniformen Vierecksgitter $\tau_l \in \mathbb{R}^2$. Mit der Rekursionstiefe $d = 0$ wird das Kontrollvolumen, mit $d = 1$ die an den Knoten \mathbf{x}_j angrenzenden Elementvolumina beschrieben. Mit $d = 2$ werden die an das Volumen, das mit $d = 1$ definiert ist, angrenzenden Elementvolumina hinzugenommen.	57
4.9. Rekursive Bestimmung der Filterweite auf einem unstrukturierten Dreiecksgitter $\tau_l \in \mathbb{R}^2$ mit $d = 0$ (links), $d = 1$ (mitte) und $d = 2$ (rechts).	57
4.10. Bestimmung der Filterweite mit Hilfe der Gitterhierarchie.	58
5.1. Frequenzspektrum der kinetischen Energie beim Rückwärts-Euler (BE), Alexander (DIRK) und Teilschritt- Θ (FRACT).	66
5.2. Verbesserte Gebietsapproximation durch sukzessive durchgeführte reguläre Verfeinerung.	77
5.3. 2D-Gitterhierarchie mit lokalen (links) und globalen Gittern (rechts).	80
7.1. Geometrie mit Ein- und Ausströmrandbedingung des <i>Jet in Crossflow</i> -Problems.	105
7.2. u_1 nach $t_1 = 10s, t_2 = 70s, t_3 = 160s$ auf Gitterebene l_2	106
7.3. E_{kin} nach $t_1 = 10s, t_2 = 70s, t_3 = 160s$ auf Gitterebene l_2	107
7.4. Turbulente Viskosität im quasi-stationären Zustand auf Gitterebenen l_2	107
7.5. Einfluss der Zeitschrittweiten $\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3, \Delta t_4, \Delta t_5$ auf E_{kin} auf Gitter τ_3 im Zeit-(links) und Frequenzraum (rechts).	108
7.6. Einfluss der Zeitschrittweiten $\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3, \Delta t_4, \Delta t_5$ auf ϵ_{sgs} auf Gitter τ_3 im Zeit-(links) und Frequenzraum (rechts).	108
7.7. Einfluss der Zeitschrittweiten auf \bar{E}_{kin} auf den Gittern τ_1, τ_2 und τ_3	109
7.8. Einfluss der Zeitschrittweiten auf die zeitlich gemittelte Subskalenaktivität $\ \bar{S}\ _\infty$ auf den Gittern τ_1, τ_2 und τ_3	109

7.9. E_{kin} auf Gitterebene l_0, l_1, l_2, l_3 mit entsprechend uniform verfeinerten Zeitschrittweiten.	110
7.10. E_{kin} auf Gitterebene l_3 mit den größer werdenden Filterweiten Δ_3^i , $i = 3, 2, 1, 0$	111
7.11. E_{kin} auf den Gitterebenen l_i mit konstanter Filterweite Δ_i^1 , $i = 1, 2, 3$	112
7.12. ϵ_{sgs} auf Gitterebene l_i mit Filterweite Δ_i^i , $i = 1, 2, 3$	112
7.13. Diskretisierungsfehler der Produktionsrechnung $x_{LES}(\Delta_0^0)$ (rot), $x_{LES}(\Delta_1^1)$ (grün) und $x_{LES}(\Delta_2^2)$ (blau).	114
7.14. Modellfehler der Produktionsrechnung $x_{LES}(\Delta_0^0)$ (rot), $x_{LES}(\Delta_1^1)$ (grün), $x_{LES}(\Delta_2^2)$ (blau).	115
7.15. Diskretisierungs- und Modellfehler auf Gitterebene l_2	116
7.16. Durch η_r (links), $\eta_{hi}(E_{kin})$ (mitte) und $\eta_{max}(\omega)$ (rechts) adaptierte Gitter.	117
7.17. Vergleich der kinetischen Energie E_{kin} auf adaptiv und uniform verfeinerten Gittern. Links ist der Zeitraum $t = 0..160s$ und rechts $t = 60..180s$ dargestellt.	117
7.18. Vergleich der Subskalendissipation ϵ_{sgs} auf adaptiv und uniform verfeinerten Gittern dargestellt.	118
7.19. Vergleich von $\ u_1\ _s$ auf uniformen und adaptiv verfeinerten Gittern.	118
8.1. Hohe Nische nach [17].	122
8.2. Hohe Nische im \mathbb{R}^2 mit Randbedingungen.	123
8.3. Horizontale und vertikale Geschwindigkeits-, Druck- und Temperaturverteilung nach Beendigung des Einschwingvorganges (v.l.n.r.).	124
8.4. Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie für $\Delta_4^4, \Delta_5^5, \Delta_6^6$ und Δ_7^7	125
8.5. Kinetische Energie E_{kin} (links) und dessen Powerspektrum $S(E_{kin})$ (rechts) der mit den Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.2 s$, $\Delta t_2 = 0.1 s$, $\Delta t_3 = 0.05 s$, $\Delta t_4 = 0.01 s$ durchgeführten Rechnungen.	125
8.6. Subskalendissipation ϵ_{sgs} (links) und dessen Powerspektrum $H(\epsilon_{sgs})$ (rechts) der mit den Zeitschrittweiten $\Delta t_1 = 0.2 s$, $\Delta t_2 = 0.1 s$, $\Delta t_3 = 0.05 s$, $\Delta t_4 = 0.01 s$ durchgeführten Rechnungen.	126
8.7. Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie für die Filterweite Δ^4 (dünn) auf den Ebenen l_4, l_5, l_6 und die Filterweite Δ^5 auf den Gitterebenen l_5, l_6, l_7 (dick).	127
8.8. Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie auf den Gittern l_i , $i = 5, 6, 7$ (von unten nach oben) für die Filterweite Δ_i^{i-j} , $j = 0, 1, 2$	128
8.9. Kinetische Energie auf uniformen und adaptiven Gittern.	130
8.10. Kinetische Energie (links) und dessen Powerspektrum (rechts) auf Gitterebene l_4 mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten mit (dick) und ohne LES (dünn).	132
8.11. Vertikale Geschwindigkeitskomponente (links) und dessen Powerspektrum (rechts) auf Gitterebene l_4 mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten.	132
8.12. Zeitlicher Verlauf von E_{kin} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit den Filterweiten $\Delta_l^l, \Delta_l^{l-1}, \Delta_l^{l-2}$	134
8.13. E_{res} auf den Gitterebenen l_3, l_4, l_5 mit den Filterweiten $\Delta_{l,0}, \Delta_{l,1}, \Delta_{l,2}$. Zeitschrittweiten.	135
8.14. Zeitpunkte der Gitteradaption mit entsprechender Anzahl Elemente für zwei Zeintintervalle.	137
8.15. Adaptiv verfeinertes Gitter.	138
8.16. Kinetische Energie E_{kin} auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern.	139
8.17. Turbulente kinetische Energie E_{res} auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern.	139
8.18. Powerspektrum der turbulenten kinetischen Energie $S(E_{res})$ auf uniform und adaptiv verfeinerten Gittern.	140

8.19. Vertikale Geschwindigkeit entlang einer horizontalen Geraden. Vergleich der Ergebnisse auf adaptiven und uniformen Gittern mit Experiment.	141
9.1. Statischer Mischer mit Injektionsdüse im experimentellen Betrieb (links). Mischer als CAD-Geometrie mit drei für die Auswertung der Ergebnisse verwendeten Lasebenen (rechts).	143
9.2. Versuchsaufbau.	144
9.3. Anfangstriangulierung des statischen Mixers mit 3913 Tetraedern.	146
9.4. Gemessenes (links) und geglättetes Einströmprofil (rechts).	147
9.5. Momentaufnahme der axialen Geschwindigkeitskomponente in der Draufsicht (oben) und Seitenansicht (unten).	148
9.6. Momentaufnahme der turbulenten Viskosität in der Draufsicht.	149
9.7. Momentaufnahme der axialen Geschwindigkeitskomponente in den Querschnitten vor (bei x_0 und x_1) und den beiden Querschnitten nach dem Mischelement (bei x_2 und x_3).	149
9.8. Momentaufnahme der Konzentrationsverteilung in den Querschnitten bei x_0, x_1, x_2, x_3 (v.l.n.r.).	149
9.9. Vergleich der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement auf den Gitterebenen l_2, l_3, l_5	150
9.10. Axiale Geschwindigkeitskomponente u_1 entlang der Längsachse für die Gitterebenen l_2, l_3, l_5 , wobei die Maximal- und Minimalwerte mit dünner Strichstärke dargestellt sind.	151
9.11. Vertikale (links) und transversale (rechts) Geschwindigkeitskomponente u_2 bzw. u_3 entlang der Längsachse für die Gitterebenen l_2, l_3, l_5 , wobei die Maximal- und Minimalwerte mit dünner Strichstärke dargestellt sind.	152
9.12. Vergleich der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeitskomponente vor dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).	152
9.13. Vergleich der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).	153
9.14. Vergleich der zeitlich gemittelten transversalen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).	154
9.15. Vergleich der zeitlich gemittelten vertikalen Geschwindigkeitskomponente nach dem Mischelement (links: Experiment, rechts: Simulation auf Gitterebene l_5).	154
A.1. ϵ_{sgs} auf Gitterebene l_3 mit den Filterweiten $\Delta_3^i, i = 3, 2, 1$	160
A.2. ϵ_{sgs} mit konstanter Filterweite Δ_3^3 auf den Gitterebenen l_i mit $i = 1, 2, 3$	161
A.3. E auf Gitterebene l_0 (links) und Gitterebene l_1 (rechts) mit unterschiedlichen Filterweiten.	161
A.4. E auf Gitterebene 2 mit unterschiedlichen Filterweiten.	162
A.5. Turbulente kinetische Energie auf Gitterebene l_4 bei unterschiedlichen Zeitschrittweiten.	166
A.6. Subskalendissipation (links) und dessen Powerspektrum (rechts) auf Gitterebene l_4 mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten.	166
A.7. Subskalendissipation auf Gitterebene l_5 mit unterschiedlichen Filterweiten.	167

Notation

In dieser Arbeit wird sowohl die symbolische als auch Tensorschreibweise verwendet. Die Tensorschreibweise bietet sich im Hinblick auf die Implementierung als Darstellung an. Bei der Tensorschreibweise wird stets die Einsteinsche Summenkonvention angewendet: Terme mit gleichen Indizes werden aufsummiert. Im \mathbb{R}^3 laufen die Summationsindizes dabei von 1 bis 3:

$$P = F_i u_i = \sum_{i=1}^3 F_i u_i$$

$$t_i = \tau_{ji} n_j = \sum_{j=1}^3 \tau_{ji} n_j$$

$$\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i$$

Größe	Beschreibung
A	Arbeit
A^t	Jacobi-Matrix zum Zeitpunkt $t = t_n$
B_j	Kontrollvolument
C	LES-Modellparameter
c_p	Wärmekapazität bei konstantem Druck
C_{coa}	Parameter zur Justierung der Vergrößerungsschranke
C_{ref}	Parameter zur Justierung der Verfeinerungsschranke
C_S	Smagorinsky-Konstante
CFL	Courant-Friedrichs-Levy Zahl
d	Defekt
D	Datenpunkte, Gitterpunkte
DNS	Direkte Numerische Simulation
$\frac{D}{Dt}$	substantielle Ableitung
g	Gravitation
e	Energiedichte
E	Kante oder Seite
$ed_{i,j}^d$	Diskretisierungsfehler
e_{ij}	Dehnungstensor
e_k	Kommutationsfehler
E_{kin}	kinetische Energie
$em_{i,j}^d$	Modellierungsfehler
E_{res}	turbulente oder aufgelöste kinetische Energie
\mathbf{F}	Nichtlineare Funktion
FDM	Finite-Differenzen-Methode
FEM	Finite-Elemente-Methode
f_i	Kraftdichte

FVM	Finite-Volumen-Methode
G	Filteroperator
\mathbf{G}	Einfache nichtlineare Funktion
\mathcal{G}	Multilevelgitter
G_k	Gitter der Stufe k
$G(A)$	Graph der Matrix A
Gr	Grashofzahl
h	Diskretisierungsparameter, Gitterweite
H_0^1	Sobolevraum
\mathcal{H}	Fouriertransformierte
ILU	Unvollständige Dreieckszerlegung
J	Jacobi-Determinante
K	Element
ker	Kern einer Funktion
L_0^2	Hilbertraum
L_0 oder l_0	Referenzlänge
\mathcal{L}_{ij}	Leonard-Term
Le	Lewiszahl
LES	Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation)
m	Masse
M^{GS}	Iterationsmatrix des Gauß-Seidel-Verfahrens
M^{jac}	Iterationsmatrix des Jacobi-Verfahrens
M^{ZG}	Iterationsmatrix des Zweigitterverfahrens
\mathcal{M}	Multileveltriangulierung
$N(\xi)$	Ansatzfunktionen
\mathbb{N}	Menge der natürlichen Zahlen
\mathbb{N}_0	$\mathbb{N} \cup \{0\}$
p	dynamischer Druck
p	Prolongationsoperator
p_0 oder p_{stat}	statischer Druck
Pr	Prandtlzahl
q	Verhältnis von Diskretisierungs- zu Modellfehler: ed/em
q_i	Wärmefluss
Q	Wärme
r	Restriktionsoperator
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
Ra	Raleighzahl
\mathbb{R}^n	n -dimensionaler Raum
\mathbb{R}^I	$\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ mit Zusatzbedingung $\ \mathbf{p}\ _2 = 1$
Re	Reynoldszahl
R	allgemeine Gaskonstante
S	Subskalenaktivität
S	Powerspektrum
Sc	Schmidtzahl
sgs	Feinskalen/Subskalen oder <i>subgrid scale</i>
$SKVF$	Fläche des Subkontrollvolumens
t	Zeit
T	Temperatur
ΔT	Temperaturdifferenz
δ_T	thermische Grenzschicht
U	geometrische Umgebung

\mathbf{u}	Geschwindigkeitsvektor
u_i	Geschwindigkeitsvektor
u_0	Referenzgeschwindigkeit
\bar{u}_i	gefilterte Geschwindigkeit
$\langle u \rangle$	gemittelte Geschwindigkeit
$\ u\ _{L_2}$	L_2 -Norm
V	Volumen
V^*	Dualer Raum von V
x	analytische bzw. kontinuierliche Lösung
x_h	diskrete Lösung
x'_h	diskrete Lösung auf Gitterebene l
x_i	Ortskoordinate in i -ter Richtung
x^n	Iterierte zum Zeitpunkt $t = t_n$
δ	viskose Grenzschicht
Δ_l^d	Filter mit der Filterweite d auf Gitterebene l
$\Delta_{d,l}$	Filter mit der Filterweite d auf Gitterebene l
$\hat{\Delta}$	Testfilter
ϵ	Energiedissipation
ϵ_η	Fehlertoleranz
ϵ_{ijk}	Levi-Civita-Symbol
ϵ_{sgs}	Subskalendissipation
η	Kolmogorovsche Längenskala
η_D	Druckzähigkeit
η_{hi}	hierarchischer Indikator
η_K	Indikator auf Element K
η_{ju}	Indikator bez. Gradientensprünge über Elementkanten
η_{max}	Maximum Indikator
η_r	residuenbasierter Fehlerindikator
γ	Volumenexpansionskoeffizient
Γ	Zirkulation
Γ	Gebietsrand von Ω
κ	Wärmediffusivität
κ_t	turbulente Diffusivität
κ	Wellenzahl
λ	Komprimierbarkeitskoeffizient
λ	Wärmeleitfähigkeit
μ	dynamische Viskosität
ν	kinematische Viskosität
ν_t	turbulente Viskosität
ω_i	Wirbelstärke
Ω	betrachtetes Gebiet
$ \Omega_{KV} $	Kontrollvolumen
Ω_{KV}	Gebiet des Kontrollvolumens
ω	Dämpfungsparameter
$\bar{\Omega}$	betrachtetes Gebiet inklusive Rand
∂	partielle Ableitung
ϕ	Skalar
Π	Energieproduktion
ρ	Dichte

$\rho(M)$	Konvergenzrate einer Iterationsmatrix
σ	Varianz
τ	Kolmogorovsche Zeitskala
τ_i	Triangulierung der Gitterebene l_i
τ_0	Anfangstriangulierung
τ_J	Endtriangulierung
τ_{ij}^R oder τ_{ij}	Reynoldscher Spannungstensor
τ_{ij}	Spannungstensor
Θ	skalierte Temperatur
ξ	Teilchen

Literaturverzeichnis

- [1] Y. Addad, U. Gaionde, and D. Laurence. Optimal unstructured meshing for large eddy simulation. In *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations*. Springer, 2007.
- [2] K. Akselvoll and P. Moin. Large eddy simulation of backward facing step flow. *Eng. Turbulence Modelling & Experiments 2*, pages 303–323, 1993. Elsevier Science Publishers.
- [3] R.K. Akula, B. Wegner, A. Sadiki, and J. Janicka. Study of the performance of anisotropic sgs-models in large eddy simulation. In *Proc. of CMFF'03*, 2003. Budapest, Hungary.
- [4] R. Alexander. Diagonally implicit runge-kutta methods for stiff o.d.e's. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14:1006–1021, 1977.
- [5] W. Bangerth and R. Rannacher. *Adaptive Finite Element Methods for Differential Equations*. Birkhäuser, Lectures in Mathematics, ETH Zürich, 2003.
- [6] R. Bank, T. Dupont, and H. Yserentant. The hierarchical basis multigrid method. *Numer. Math.*, 52(4):427–458, 1988.
- [7] R. E. Bank, A. H. Sherman, and A. Weiser. Refinement algorithms and data structures for regular mesh refinement. In *Scientific Computing: 10. IMACS World Conference on System Simulation and Scientific Computing*, 1983.
- [8] R. E. Bank and J. Xu. The hierarchical basis multigrid method and incomplete lu decomposition. In *Domain Decomposition Methods in Scientific and Engineering Computing: Proceedings of the Seventh International Conference on Domain Decomposition*, 1994.
- [9] J. Bardina, J.H. Ferziger, and W.C. Reynolds. Improved subgrid scale models for large-eddy simulation. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut.*, 80, 1980.
- [10] P. Bastian. *Parallele adaptive Mehrgitterverfahren*. PhD thesis, Universität Heidelberg, 1994.
- [11] P. Bastian, K. Birken, K. Johannsen, S. Lang, K. Eckstein, N. Neuss, H. Rentz-Reichert, and C. Wieners. UG - a flexible software toolbox for solving partial differential equations. *Computing and Visualization in Science*, 1:27–40, 1997.
- [12] P. Bastian, K. Birken, K. Johannsen, S. Lang, V. Reichenberger, C. Wieners, G. Wittum, and C. Wrobel. Parallel solutions of partial differential equations with adaptive multi-grid methods on unstructured grids, 1999. High performance computing in science and engineering II.
- [13] P. Bastian, W. Hackbusch, and G. Wittum. Additive and multiplicative multi-grid - a comparison. *Computing*, 60:345–368, 1998.
- [14] P. Bastian and G. Wittum. Adaptive multigrid methods: The UG concept. In *Proceedings of the 9th GAMM Seminar Kiel*, Notes on Numerical Fluid Mechanics. Vieweg, 1994.

- [15] P. Bastian and G. Wittum. On robust and adaptive multigrid methods. In P. Wesseling and P. Hemker, editors, *Proc. of the 4th European Multigrid Conference*. Birkhäuser, 1994.
- [16] R. Becker. *An Adaptive Finite Element Method for the Navier-Stokes Equations on Time-dependent Domains*. PhD thesis, University of Heidelberg, 1995.
- [17] P. L. Betts and I. H. Bokhari. Experiments on turbulent natural convection in an enclosed tall cavity. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21:675–683, 2000.
- [18] J. Bey. *Finite-Volumen- und Mehrgitter-Verfahren für elliptische Randwertprobleme*. Teubner, 1998.
- [19] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. Wiley & Sons, 2002.
- [20] B. Boersma, M. Kooper, F. Niewstadt, and P. Wesseling. Local grid refinement in Large-Eddy Simulations. *Journal of Engineering Mathematics*, 32:161–175, 1997.
- [21] J.P. Boris, F.F. Grinstein, E.S. Oran, and R.L. Kolbe. New insights into large eddy simulation. *Fluid Dyn. Res.*, 10:199–228, 1992.
- [22] V. Borue and S.A. Orszag. Numerical study of three-dimensional kolmogorov flow at high reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, 306:293–323, 1996.
- [23] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer, 1997.
- [24] A. Brandt. Multigrid techniques: 1984 guid with applications to fluid dynamics. Technical report, Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung, 1984.
- [25] M. Breuer and W. Rodi. Large-eddy simulation of turbulent flow through a straight square duct and a 180° bend. *Fluid Mechanics and its Applications*, 26:273–285, 1994.
- [26] W. Briggs. *A Multigrid Tutorial*. SIAM, 1999.
- [27] M.O. Bristeau, R. Glowinski, and J.Periaux. Numerical methods for the navier-stokes equations: applications to the simulation of compressible and incompressible viscous flows. *Comput. Phys. Reports*, 6:73–187, 1987.
- [28] C. Canuto. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer, 1988.
- [29] D. Carati, S. Ghosal, and P. Moin. On the representation of backscatter in dynamic localization models. *Phys. Fluids*, 7(3):606–616, 1995.
- [30] D. Carati and A.A. Wray. Time filtering in large eddy simulations. *Proceedings of the Summer Program 2000*, 91:99–165, 1993. Center for Turbulence Research.
- [31] H. Choi and P. Moin. Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow. *Journal of Computational Physics*, 113:1–4, 1994.
- [32] R. Cocle, R. Dufresne, and G. Winckelmans. Investigation of multiscale subgrid models for les of instabilities and turbulence in wake vortex systems. *Lecture Notes in Computational science and engineering*, 56:141–160, 1999.
- [33] P.A. Davidson. *turbulence*. Oxford Press, 2004.
- [34] J.W. Deardoff. On the magnitude of the subrid scale eddy viscosity coefficient. *J. Comp. Phys.*, 7:120–133, 1971.

- [35] J.W. Deardoff. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*, 18:495–527, 1980.
- [36] James W. Demmel, Stanley C. Eisenstat, John R. Gilbert, Xiaoye S. Li, and Joseph W. H. Liu. A supernodal approach to sparse partial pivoting. *SIAM J. Matrix Analysis and Applications*, 20(3):720–755, 1999.
- [37] J. Denev, J. Fröhlich, and H. Bockhorn. Benchmark test 'jet in cross-flow (jicf)'. Theoretische Methoden zur Vorhersage von Strömungs- und Konzentrationsfeldern, DFG-SPP 1141.
- [38] J.E. Dennis and J.J. Moré. Quasi-newton methods, motivation and theory. *SIAM Review*, 19(1):46–89, 1977.
- [39] J.A. Domaradzki and E.M. Saiki. A subgrid-scale model based on the estimation of unresolved scales of turbulence. *Phys. Fluids*, 9:1–17, 1997.
- [40] A. Sh. Dorfman. Influence of turbulent prandtl number on heat transfer of a flat plate. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 25(4):572–575, 1984.
- [41] M. S. Engelmann, G. Strang, and K.-J. Bathe. The application of quasi-newton methods in fluid mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17:707–718, 1981.
- [42] S. Ertem-Müller. *Numerical Efficiency of Implicit and Explicit Methods with Multigrid for Large Eddy Simulation in Complex Geometries*. PhD thesis, Universität Darmstadt, 2003.
- [43] G. Evans, J. Blackledge, and P. Yardley. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Springer, 2000.
- [44] J.H. Ferziger. Large eddy simulation: An introduction and perspective. Technical report, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1997.
- [45] J.H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1999.
- [46] M. Frigo and S.G. Johnson. Fastest fourier transform in the west. www.fftw.org.
- [47] J. Fröhlich. *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner, 2006.
- [48] P. Frolkovic, P. Knabner, C. Tapp, and K. Thiele. d3f - ein programmpaket zur modellierung von dichtestromungen. 1998. GRS-139, Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit (GSR) mbH, Braunschweig.
- [49] G.P. Galdi. *An Introduction to the Mathematical Theory of the Navier-Stokes Equations*, volume I/II of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer, 1994.
- [50] M. Germano, M. Piomelli, U. Moin, and P. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3:1760–1765, 1991.
- [51] K. Gersten and H. Herwig. *Strömungsmechanik*. Vieweg, 1992.
- [52] B.J. Geurts. *Elements of direct and large-eddy simulation*. Edwards, 2004.
- [53] B.J. Geurts and J. Fröhlich. Numerical effects contaminating les; a mixed story. In B.J. Geurts and R.T. Edwards Inc., editors, *Modern simulation strategies for turbulent flow*, 2001. Philadelphia.

- [54] B.J. Geurts and J. Fröhlich. A framework for predicting accuracy limitations in large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 14(6):41–44, 2002.
- [55] S. Ghosal, T.S. Lund, P. Moin, and K. Akselvoll. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 286:229–255, 1995.
- [56] S. Ghosal and P. Moin. The basic equations for the large eddy simulation of turbulent flows in complex geometry. *Journal of Computational Physics*, 118:24–37, 1994.
- [57] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*. Springer, 1986.
- [58] R. Glowinski. Viscous flow simulations by finite element methods and related numerical techniques. in *Progress in Supercomputing in Computational Fluid Dynamics*, pages 173–210, 1985.
- [59] D. Goldberg. What every computer scientist should know about floating-point arithmetic. *Computing Surveys*, 3, 1991.
- [60] G. Golub and J.M. Ortega. *Scientific Computing*. Academic Press, 1996.
- [61] D.D. Gray and A. Giorgino. The validity of the boussinesq approximation for liquids and gases. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 19:545–551, 1975.
- [62] C. Großmann and H.-G. Roos. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Teubner, 1994.
- [63] G. Grötzbach. Spatial resolution requirements for direct numerical simulation of the rayleigh-bénard convection. *Journal of Computational Physics*, 49:241–264, 1983.
- [64] W. Hackbusch. *Multigrid Methods and Applications*. Springer, 1985.
- [65] W. Hackbusch. *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. Teubner, 1992.
- [66] A. Hauser and O. Sterz. UG-interface for CAD geometries. Technical Report 05, Forschungsverbund WiR-Baden Württemberg, 2004.
- [67] M. R. Hestens and E. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *NBS J. Res.*, pages 409–436, 1952.
- [68] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. Wiley & Sons, 1966.
- [69] J. Hoffman. Adaptive finite element methods for les: Computation of the mean drag coefficient in a turbulent flow around a surface mounted cube using adaptive mesh refinement. *Chalmers Finite Element Center*, 22, 2003. preprint.
- [70] J. Hoffman. Analysis of uniform and adaptive les in natural convection flow. In *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations*. Springer, 2007.
- [71] B. Huurdeman. *Numerische Simulation inkompressibler turbulenter Strömungen mit Mehrgitterverfahren auf unstrukturierten Gittern*. PhD thesis, Universität Heidelberg, 1999.
- [72] K. Johannsen. *Robuste Mehrgitterverfahren für Konvektions-Diffusions-Gleichung mit wirbelbehafteter Konvektion*. Teubner, 2000.

- [73] C. Johnson. Numerical solution of partial differential equations by the finite element method, 1987. Studentenliteratur.
- [74] C. Johnson and J. Eriksson. Adaptive finite element methods for parabolic problems i: A linear model problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28:43–77, 1991.
- [75] C. Johnson, R. Rannacher, and M. Boman. Numerics and Hydrodynamic Stability: Toward Error Control in Computational Fluid Dynamics. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 32(4):1058–1079, 1995.
- [76] S. Karimian and G. Schneider. Pressure-based control-volume finite element method for flow at all speeds. *AIAA Journal*, 33:1611–1618, 1995.
- [77] R. Kettler. Analysis and comparison of relaxation schemes in robust multi-grid and preconditioned conjugate gradient methods. In W. Hackbusch and U. Trottenberg, editors, *Multi-grid Methods, Lecture Notes in Math. 960*. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [78] M.P. Kirkpatrick, N.N. Mansour, A.S. Ackermann, and D.E. Stevens. Dynamic turbulence modelling in large-eddy simulations of the cloud-topped atmospheric boundary layer. *Annual Research Briefs*, 2003. Center of Turbulence Research.
- [79] M. Klein, J. Meyers, B.J. Geurts, and J. Jannicka. Assessment of les quality measures using the error landscape approach. In *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations*. Springer, 2007.
- [80] P. Knabner and L. Angermann. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Springer, 2000.
- [81] A.N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in an incompressible fluid with very large reynolds numbers. *Proc. Roy. Soc. London*, 434:1890, 1991. (First published: 1941, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **30**, **301**).
- [82] N.V. Kornev, I.V. Tkatchenko, and E. Hassel. A simple clipping procedure for the dynamic mixed model based on taylor series approximation. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 2005. in press.
- [83] D. Kwak, W.C. Reynolds, and J.H. Ferziger. Three-dimensional time depondent computation of turbulent flow. Technical report, Standford, 1975.
- [84] L.D. Landau and L.M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, 1959.
- [85] S. Lang. *Parallele Numerische Simulation instationärer Probleme mit adaptiven Methoden auf unstrukturierten Gittern*. PhD thesis, Universität Stuttgart, 2001.
- [86] A. Leonard. Energy cascade in large eddy simulations of turbulent fluid flows. *Adv. Geophys.*, 18A:237, 1974.
- [87] S. Leschka, D. Thévenin, and K. Zähringer. Fluid dynamics and mixing behaviour of a smx-type static mixer. *Journal of Visualization*, 10(4), 1988.
- [88] D.K. Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, 4:633–635, 1991.
- [89] M.D. Love. Subgrid modelling studies with burgers’ equation. *J. Fluid Mech.*, 100:87–110, 1980.

- [90] P. Mason. Grids, filters, surface matching and sub-grid models in large eddy simulation of the planetary boundary layer. In *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations*. Springer, 2007.
- [91] A. Meister. *Numerik linearer Gleichungssysteme. Eine Einführung in moderne Verfahren*. Vieweg, 1999.
- [92] M. Metzner. *Mehrgitterverfahren für die kompressiblen Euler- und Navier-Stokes-Gleichungen mit besonderer Betrachtung des schwach kompressiblen Falles*. PhD thesis, IWR, Universität Heidelberg, 2003.
- [93] J. Meyers, B.J. Geurts, and M. Baelmans. Database analysis of errors in large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 15(9):2740–2755, 2003.
- [94] P. Moin, W.C. Reynolds, and J.H. Ferziger. Large eddy simulation of incompressible turbulent channel flow. Technical report, Dept. of Mech. Eng. Rep. TF12, Stanford University, 1978.
- [95] E. Montreuil, P. Sagaut, and O. Labbe. Assessment of non-fickian sub-grid-scale models for passive scalar in a channel flow. *Workshop on Direct and Large Eddy Simulation*, May 1999. Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences.
- [96] S. Nägele. *Mehrgitterverfahren für die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen im laminaren und turbulenten Regime unter Berücksichtigung verschiedener Stabilisierungsmethoden*. PhD thesis, IWR, Universität Heidelberg, 2004.
- [97] X. Normand and M. Lesieur. Numerical experiments on transition in the compressible boundary layer. *Theor. Comp. Fluid Dyn.*, 3:231–252, 1992.
- [98] B. Paech and G. Wittum. On the verge of scientific software engineering: the development of UG. Technical report, Simulation in Technology, University of Heidelberg, 2007.
- [99] O. Pironneau. Conditions aux limites sur la pression pour les équations de stokes et de navier-stokes. *C.R. Acad. Sc. Parais*, 303(9):403–406, 1986.
- [100] S. B. Pope. PDF methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11:119–192, 1985. Provided by the SAO/NASA Astrophysics Data System.
- [101] S. B. Pope. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6:35, 2004.
- [102] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterling. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1992.
- [103] T. Probst. *Mehrgitterverfahren für Konvektionsdiffusionsgleichungen*. PhD thesis, Universität Kiel, 1999.
- [104] G. Raithby and K.E. Torrance. Upstream weighted differencing schemes and their application to elliptic problems involving fluid flow. *Journal of Computers and Fluids*, 2:191–206, 1974.
- [105] R. Rannacher. Numerische methoden für partielle differentialgleichungen, 2000/2001. Vorlesungsskript.

- [106] R. Rannacher. Numerische methoden für probleme der strömungsmechanik, 2001. Vorlesungsskript.
- [107] M. Raw. *A New Control-Volume-Based Finite Element Procedure for the Numerical Solution of the Fluid Flow and Scalar Transport*. PhD thesis, University of Waterloo, 1985.
- [108] B.D. Reddy. *Introductory Functional Analysis*. Springer, 1998.
- [109] H. Rentz-Reichert. *Robuste Mehrgitterverfahren zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichung: ein Vergleich*. PhD thesis, IWR, Universität Heidelberg, 1996.
- [110] P.J. Roache. Need for control of numerical accuracy. *Journal of Spacecraft Rockets*, 27(2):98–102, 1990.
- [111] H.G. Roos, M. Stynes, and L. Tobiska. *Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations*. Springer, 1996.
- [112] S.G. Saddoughi and S.V. Veeravalli. Local isotropy in turbulent boundary layers at high reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 286:333–372, 1994.
- [113] K. Salari, R.L. Blaine, K. Economy, and P.J. Roache. Grid resolution studies of radionuclide transport in fractured porous media. *FED-ASME*, 213:25–30, 1995.
- [114] H.-J. Schlüter, A. Haas, D. Shala, and C. Weißenborn. Finite-element-methode, 1999. Vorlesungsskript.
- [115] G.E. Schneider and M.J. Raw. A skewed, positive influence coefficient upwinding procedure for control-volume-based finite-element convection-diffusion computation. *Numerical Heat Transfer*, 9:1–26, 1986.
- [116] G.E. Schneider and M.J. Raw. Control volume finite-element method for heat transfer and fluid flux using colocated variables. *Numerical Heat Transfer*, 11:363–390, 1987.
- [117] W. Schönauer and T. Adolph. Fdem: how we make the fdm more flexible than the fem. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 158(1):157–167, 2003.
- [118] H. Schwetlick and H. Kretzschmar. *Numerische Verfahren für Naturwissenschaftler und Ingenieure*. Fachbuchverlag Leipzig, 1991.
- [119] J.C. Slattery. *Advanced Transport Phenomena*. Cambridge Series in Chemical Engineering. Cambridge, 1999.
- [120] J. Smagorinsky. General circulation epxeriments with the primitve equations, i, the basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, 91:99–165, 1963.
- [121] H. Spurk. *Strömungslehre*. Springer, 1996.
- [122] O. Sterz. *Modellierung und Numerik zeitharmonischer Wirbelstromprobleme in 3D*. PhD thesis, IWR-Simulation in Technology, University of Heidelberg, 2004.
- [123] O. Sterz and A. Hauser. Gekoppelte berechnung von strom- und temperaturverteilung und der kühlströmung bei anlagen der elektrischen energietechnik, 2003. Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen.
- [124] O. Sterz, A. Hauser, and G. Wittum. Adaptive local multigrid methods for the solution of eddy current problems. *IEEE Transactions on Magnetics*, 42(2):309–318, 2006.

- [125] D.B. Spalding S.V. Patankar. A calculation procedure of heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:1787–1806, 1972.
- [126] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. The MIT Press, 1972.
- [127] D.J. Tritton. *Physical Fluid Dynamics*. Oxford Science Publications, 1988.
- [128] S. Turek. *Efficient Solvers for Incompressible Flow Problems. An Algorithmic and Computational Approach*. Springer, 1999.
- [129] H. Van der Vorst. Bi-cgstab: a fast and smoothly converging variant of bigc for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J Sci Stat Comp*, 13:631–644, 1992.
- [130] R. S. Varga. Factorizations and normalized iterative methods. *Boundary Problems in Differential Equations*, pages 121–142, 1960. University Wisconsin Press, Madison Wisconsin.
- [131] O.V. Vasilyev, T.S. Lund, and P. Moin. A general class of commutative filters for les in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 146:82–104, 1998.
- [132] R. Verfürth. A posteriori error estimators for the stokes equations. *Num. Math.*, 55:309–325, 1989.
- [133] R. Verfürth. *A Review of A Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh-Refinement Techniques*. Wiley Teubner, 1996.
- [134] D. Veynante and R. Knikker. Comparison between les results and experimental data in reacting flows. *Journal of Turbulence*, 7(35), 2007.
- [135] A.W. Vreman. *Direct and large-eddy simulation of the compressible turbulent mixing layer*. PhD thesis, University of Twente, 1995.
- [136] B. Vreman, B.J. Geurts, and H. Kuerten. Comparison of numerical schemes in large-eddy simulations of the temporal mixing layer. *International Journal for Numerical Methods*, 22:297–311, 1996.
- [137] C. Wagner. Numerical methods for diffusion-reaction-transport processes in unsaturated porous media. *Computing and Visualization in Science*, 1:97–104, 1998.
- [138] W.P. Wang and R.H. Pletcher. On the large eddy simulation of turbulent channel flow with significant heat transfer. *Physics of Fluids*, 8(12):3354–3366, 1996.
- [139] F. Weller. *Numerische Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaften*. Vieweg, 1996.
- [140] P. Wesseling. A robust and efficient multigrid method. In W. Hackbusch and U. Trottenberg, editors, *Multi-grid Methods, Lecture Notes in Math. 960*. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [141] F.M. White. *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1995.
- [142] G. Wittum. *Distributive Iterationen für indefinite Systeme als Glätter in Mehrgitterverfahren am Beispiel der Stokes- und Navier-Stokes-Gleichungen mit Schwerpunkt auf unvollständige Zerlegungen*. PhD thesis, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 1986.

- [143] G. Wittum. On the robustness of ilu smoothing. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10(4):699–717, 1989.
- [144] G. Wittum. On the convergence of multi-grid methods with transforming smoothers. *Numer. Math.*, 57:15–38, 1990.
- [145] G. Wittum, D. Thévenin, A. Hauser, and S. Leschka. Numerische Simulation statischer Strömungsmischer mit experimenteller Validierung, 2006. DFG Schwerpunktprogramm 1151, *Analyse, Modellbildung und Berechnung von Strömungsmischern mit und ohne chemische Reaktionen*, Abschlussbericht.
- [146] V. Wong and D. Lilly. A comparison of two dynamic subgrid closure methods for turbulent thermal convection. *Phys. Fluids*, 6:1016–1023, 1994.
- [147] H. Yserentant. *Über die Aufspaltung von Finite-Element-Räume in Teilräume verschiedener Verfeinerungsstufen*. PhD thesis, Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, 1984.
- [148] T.A. Zang, R.B. Dahlburg, and J.P. Dahlburg. Direct and large-eddy simulations of three-dimensional compressible navier-stokes turbulence. *Phys. Fluids A*, 4:127–140, 1992.
- [149] Y. Zang, R.L. Street, and J. Koseff. A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. *Phys. Fluids A*, 5:3186–96, 1993.
- [150] W. Zulehner. A class of smoothers for the saddle point problems. *Computing*, 65(3):227–246, 2000.