

INAUGURAL - DISSERTATION

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

vorgelegt von
Diplom-Mathematikerin Sandra Nägele
aus Schwäbisch Gmünd

Tag der mündlichen Prüfung: 25.11.2003

Mehrgitterverfahren für die inkompressiblen
Navier-Stokes Gleichungen
im laminaren und turbulenten Regime
unter Berücksichtigung
verschiedener Stabilisierungsmethoden

Gutachter: Prof. Dr. Gabriel Wittum
Prof. Dr. Peter Bastian

Vorwort

Die vorliegende Arbeit hat im Rahmen meiner wissenschaftlichen Tätigkeit am Institut für Computeranwendungen der Universität Stuttgart begonnen. Anschließend erfolgte ein halbjährlicher Aufenthalt an der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich (ETHZ), der mich persönlich und wissenschaftlich sehr viel weitergebracht hat. Ich möchte mich daher bei allen Verantwortlichen bedanken, Prof. Jeltsch und Prof. Wittum, die mir die Möglichkeit für diesen Aufenthalt gegeben haben. Die weitere Entwicklung der Arbeit erfolgte dann am Institut für Informatik der Universität Heidelberg im Rahmen des SFB 359 - Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport. Auch der zweimonatige Forschungsaufenthalt in den USA war für die Weiterentwicklung der Arbeit richtungweisend. Daher möchte ich mich auch für diese Möglichkeit ganz herzlich bei meinem Betreuer Prof. Wittum bedanken und auch dafür, daß mir sehr viel freie Hand gelassen wurde bei der Ausrichtung meiner Arbeit.

Entscheidend für das Gelingen dieser Arbeit war die Zusammenarbeit, Unterstützung und Hilfsbereitschaft innerhalb der Arbeitsgruppe Technische Simulation. Viele Fragen bezüglich Schnittstellen und Fehlerquellen im Programmpaket *UG* konnten dadurch schnell beantwortet bzw. beseitigt werden. Insbesondere möchte ich dabei meine beiden Zimmer-Kollegen, Achim Gordner und Michael Metzner, hervorheben, die sehr geduldig mit mir waren in all den Jahren und durch hilfreiche Diskussionen stets für neue Anregung und Motivation sorgten. Vor allem das Arbeitsklima im Büro zeichnete sich durch humorvolles Beisammensein aus, so daß die „trockene Wissenschaft“ deutlich davon profitieren konnte. Auch meinem ehemaligen Kollegen Bernhard Huurdeman möchte ich danken. Er hat mir während der Stuttgarter Zeit viele hilfreiche Tipps geben können, die mir die Arbeit deutlich erleichtert haben. Ein spezieller Dank gilt auch meinem Kollegen Stefan Lang, der mir sowohl beim Konzept als auch bei der Implementierung der periodischen Ränder sehr viel Unterstützung gegeben hat.

Nicht zuletzt möchte ich einen ganz besonderen Dank an meine Familie richten, die mich stets unterstützt und angetrieben hat. Ohne deren Hilfe wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen.

Inhaltsverzeichnis

Notation	iii
Einleitung	1
1 Die Bewegungsgleichungen und das Turbulenzmodell	5
1.1 Die Navier-Stokes Gleichungen	5
1.2 Turbulenzmodellierung	6
1.3 Die Grobstruktursimulation	6
1.3.1 Wirbelviskositätsmodell von Smagorinsky	8
1.3.2 Dynamisches Modell von Germano/Lilly	9
1.3.3 Gemischtes Modell von Zang/Street/Koseff	10
1.3.4 LES Gleichungssystem	12
2 Diskretisierung	13
2.1 Zeitschrittverfahren	13
2.2 Schwache Formulierung und Linearisierung	16
2.3 Das Finite Volumen Verfahren	18
2.4 Approximation der einzelnen Terme	22
2.4.1 Impulserhaltung	22
2.4.2 Massenerhaltung	23
2.5 Stabilisierung	24
2.5.1 Aufwindifferenzen	25
2.5.2 Diffusion	28
2.5.3 Resultat der Stabilisierung	32
2.5.4 Modifikation der Stabilisierung	37
2.5.5 Verhalten der Stabilisierungen im Grenzfall	39
2.6 Spezielle Behandlung der Konvektion	41
2.7 Randbedingungen	43
2.8 Zusammenfassung	49
3 Diskretisierung des Turbulenzmodells	51
3.1 Diskrete Filteroperatoren	51
3.2 Berechnung der Spannungstensoren	53
3.3 Mittelung des Modellparameters	54
3.4 Transport der turbulenten Daten auf grobe Gitter	55
3.5 Auswertungsroutinen	56
3.5.1 Mittelung in periodische Richtungen	56
3.5.2 Wirbelstärkedicke	58

3.5.3	Impulsdicke	58
3.5.4	Totale kinetische Energie	59
3.5.5	Subskalendissipation	59
4	Das Lösungsverfahren	61
4.1	Zeititeration	61
4.2	Nichtlineare Iteration	63
4.3	Lineare Iterationsverfahren	64
4.3.1	Klassische Iterationsverfahren	65
4.3.2	Unvollständige Dreieckszerlegungen	67
4.3.3	Blockung	68
4.3.4	Das Mehrgitterverfahren	68
4.3.5	Druckprojektion	73
4.3.6	Krylov-Raum-Verfahren	73
5	Numerische Resultate	79
5.1	Laminare Testfälle	80
5.1.1	Kanalströmung	81
5.1.2	Driven Cavity – angetriebene Nischenströmung	94
5.1.3	Benchmark-Problem Zylinder	99
5.1.4	Zylinderproblem in drei Raumdimensionen	104
5.1.5	Chorin's abklingende Wirbel	110
5.2	Turbulente Testfälle	114
5.2.1	Mixing Layer in zwei Raumdimensionen	115
5.2.2	Mixing Layer in drei Raumdimensionen	121
	Zusammenfassung und Ausblick	139
A	Diffusionslänge in drei Raumdimensionen	143
A.1	Ansatz (1)	144
A.2	Ansatz (2)	145
B	Kanalströmung in zwei Raumdimensionen	147
B.1	Stokes-Fall	147
B.2	Navier-Stokes-Fall bei $Re=100$	152
C	Chorin's abklingende Wirbel	157
D	Mixing Layer	165
D.1	in zwei Raumdimensionen	165
D.2	in drei Raumdimensionen	171
	Literaturverzeichnis	181

Notation

Obere Indizes

dn	Approximation am Abwindpunkt
k	Wert am Knoten k
o	Approximation zum alten Zeitpunkt
up	Approximation am Aufwindpunkt

Untere Indizes

i	i -te Komponente bzw. i -ter Punkt
kk	Spur eines Tensors
x, y, z	Komponenten in entsprechende Koordinatenrichtung

Abkürzungen

(1), (2), (2) _{korr}	Diffusionsapproximationen für die Stabilisierung (siehe Abschnitt 2.5.2)
2d, 3d	zwei bzw. drei Raumdimensionen
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung
DIRK(2)	diagonal implizites Runge-Kutta-Verfahren (siehe Gleichung (2.5))
FIELDS	Stabilisierung nach Raw (siehe Gleichung (2.16))
FLOW	Stabilisierung nach Karimian (siehe Gleichung (2.23))
ILU	Unvollständige Dreieckszerlegung
KP	Gitter- oder Knotenpunkt
KV	Kontrollvolumen
LES	Large Eddy Simulation
LPS	Linear Profile Skewed Upwind (siehe Abschnitt 2.5.1)
PAC	Physical Advection Correction (siehe Gleichung (2.25))
POS	positives Aufwindverfahren (siehe Abschnitt 2.5.1)
Raw	Diffusionsapproximation für die Stabilisierung (siehe Abschnitt 2.5.2)
RCB	Rekursive Koordinatenbisketion
SKV	Teilkontrollvolumen
SKVF	Teilkontrollvolumenfläche
$\langle \cdot \rangle$	Ebenenmittelung
$\ \cdot \ $	Norm oder Maß einer Größe

Griechische Bezeichnungen

δ	Wirbelstärkendirke
δ_{ij}	Kroneckersymbol
Δ	Filterweite des Gitterfilters bzw. Laplace-Operator
$\hat{\Delta}$	Filterweite des Testfilters

Δt	Zeitschrittweite
ε_{SGS}	Subskalendissipation
κ	lineare Konvergenzrate
λ	Dämpfungsparameter
μ	Impulsdicke
ν	kinematische Viskosität
ν_t	turbulente Viskosität
σ	Seitenverhältnis
τ_{ij}	Subskalenspannungstensor
ω	Wirbelstärke
Ω	Gebiet (Rechengebiet)
Ω_Δ	Trägerbereich der Filterfunktion
Ω_{KV_k}	Gebiet des Kontrollvolumens k
Ψ	nichtlineare Konvergenzrate

Lateinische Bezeichnungen

bip	Randintegrationspunkt
co	Knotenpunkt des Gitters
C	Modellparameter
C_{U_i}, C_P, C_f, C_t	Koeffizienten der Stabilisierung
d	Dimension des zugrundeliegenden Raumes \mathbb{R}^d
\bar{f}, \hat{f}	gemittelte Größen
G_Δ	Kern der Filterfunktion
ip	Integrationspunkt
L_c	Konvektionslänge
L_d^2	Diffusionslänge
L_{ij}	Leonard-Term
\mathcal{L}_{ij}^m	Skalenähnlichkeitsterm
\mathbf{n}	äußerer Normalenvektor
n_{co}	Knotenanzahl eines Elementes
n_{KP}	Anzahl Gitterpunkte
n_{SKV}	Anzahl der Teilkontrollvolumina eines Kontrollvolumens
n_{SKVF}	Anzahl der Teilkontrollvolumenflächen eines Kontrollvolumens
N_k	Ansatzfunktion
$\mathcal{N}(\mathbf{u})$	nichtlinearer Operator, Konvektionsoperator
M, B, G	Master-, Border- bzw. Ghost-Priorität
p, p^*	Druckvariable, modifizierte Druckvariable
$S_{ij}, S $	Schubspannungstensor und dessen Norm
t, t_n	Zeitvariable, diskreter Zeitpunkt
\mathcal{T}	Triangulierung
$\mathbf{u} = (u, v, w)^T$	Geschwindigkeitsvektor
$\tilde{u}_i, \tilde{\mathbf{u}}$	Approximation, Näherungslösung
u_n	normale Geschwindigkeit
$\mathbf{x}, \mathbf{x}^\gamma$	Lösungsvektor des Gleichungssystems, zum Zeitpunkt γ
\mathbf{y}	Ortsvektor, Iterierte

Einleitung

Strömungen, die in freier Natur vorkommen, sind meist von turbulentem Charakter, z.B. bei der Umströmung von Körpern oder auch bei Mischungsprozessen. Sie sind wenig geordnet und beinhalten auch zufällige Zustände, die sehr schwer zu modellieren sind. Ein geeignetes Turbulenzmodell zu entwickeln gestaltet sich daher schwierig. Eine Möglichkeit stellen die statistischen Turbulenzmodelle dar, die jedoch nur statistisch stationäre Phänomene gut simulieren können. Dabei werden wichtige und auch interessante Zwischenzustände durch die Mittelung entfernt, da das Interesse nur auf die zeitlich gemittelten Größen gelegt wird. Oft handelt es sich jedoch um Strömungen, die eine Entwicklung in der Zeit beinhalten. Diese können durch die zeitgemittelten Modelle nur schlecht behandelt werden. Der direkte Ansatz, d.h. kein Turbulenzmodell einzufügen, dafür aber eine sehr feine Auflösung in Raum und Zeit zu benützen, ist nicht immer möglich. Je nach Problemfall wird dabei eine so feine Auflösung benötigt, um alle Strukturen darstellen zu können, daß selbst heute verfügbare Rechnerkapazitäten dafür nicht ausreichen. Dies ist v.a. dann der Fall, wenn Grenzschichten involviert sind und die dort auftretenden Strömungsgradienten adäquat aufgelöst werden müssen. Ein Kompromiß zwischen den beiden Extremen, alle turbulenten Strukturen zu modellieren bzw. aufzulösen, stellt ein Turbulenzmodell dar, das unter dem Namen Grobstruktursimulation bzw. im Englischen unter Large Eddy Simulation (LES) bekannt ist. Dieses Modell basiert auf lokal raumgemittelten Größen. Dadurch ist eine zeitliche Historie der Strömungsstrukturen darstellbar, wobei kleine räumliche Variationen ausgemittelt werden. Diese kleinskaligen Variationen werden durch ein Modell ersetzt. Dadurch fällt der Anteil der modellierten Strukturen wesentlich geringer aus als bei den klassischen statistischen Modellen. Allerdings können im Vergleich zu den statistischen Modellen nur relativ kleine Reynoldszahlen realisiert werden, jedoch größere als es beim direkten Ansatz möglich wäre. Die Beschränkung der Reynoldszahl Re resultiert dabei aus der benötigten Auflösung h des Rechengitters, die wiederum direkt mit der Reynoldszahl gekoppelt werden kann. Für eine direkte Simulation ohne Wandeinfluß ist z.B. eine Auflösung von $h \approx O(Re^{-\frac{3}{4}})$ erforderlich. Dies kann bei einer LES deutlich reduziert werden, jedoch ist die Auflösung immer noch sehr fein bei großen Reynoldszahlen. Beschränkt man sich also auf Strömungsprobleme, die keine allzu großen Reynoldszahlen erfordern, ist die Grobstruktursimulation eine sehr interessante und attraktive Möglichkeit, komplizierte Strömungen zu simulieren und dabei eine relativ genaue Darstellung der Phänomene zu erhalten. Eine Einführung hierzu findet sich in dem Buch von Sagaut [Sag02].

Turbulenzmodelle enthalten Parameter, die in geeigneter Weise bestimmt werden müssen. Auch die Grobstruktursimulation besitzt einen Modellparameter, der bei der klassischen Variante von Smagorinsky [Sma63] als konstant über das gesamte Rechengebiet gewählt wird. Naheliegender bei dem lokalen Ansatz der LES-Modellierung ist es jedoch, den im Modell enthaltenen Parameter ebenfalls lokal zu bestimmen, um räumliche Unterschiede zu berücksichtigen. Hierzu sind viele Ansätze in der Literatur zu finden, wie das dynamische Modell von Germano [Ger92] oder auch ein gemischter Ansatz von Zang et al. [ZSK93]. Diese beiden Modelle

haben sich bereits bewährt und wurden auf vielerlei Probleme angewandt. Hierzu zählen die Umströmung eines Zylinders [RFBP97], [Vok97], [Frö98], die angetriebene Nischenströmung [ZSK93] und auch die Umströmung eines Hindernisses in einem Kanal [YF93]. In dieser Arbeit werden diese Turbulenzmodelle eingesetzt, um die nicht aufgelösten räumlichen Strukturen zu modellieren. Das Interesse liegt dabei aber nicht auf den physikalischen Eigenschaften der Modelle und auch nicht auf deren Weiterentwicklung oder Modifikation, sondern vielmehr auf dem Zusammenspiel der Diskretisierung mit den Turbulenzmodellen. Darunter ist zu verstehen, daß im Falle einer turbulenten Simulation andere Anforderungen an die Diskretisierung gestellt werden, als dies im laminaren Bereich der Fall ist. Dazu gehört die Approximation des Konvektionsoperators, der möglichst wenig bis keine numerische Diffusion enthalten sollte, sowie die Stabilisierung des diskreten Gleichungssystems, die auch im turbulenten Fall gewährleistet sein muß. Je nach Einstellung der Diskretisierung können sich dabei drastische Unterschiede ergeben.

Zu einer erfolgreichen turbulenten oder auch laminaren Simulation ist also eine ausreichend genaue Diskretisierung erforderlich. Insbesondere ist es unerlässlich die besonderen Eigenschaften der eingesetzten Diskretisierung zu kennen. Die in dieser Arbeit durchgeführten Strömungssimulationen beruhen auf einem inkompressiblen Ansatz, d.h. die Grundgleichungen bestehen aus den inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen in primitiven Variablen. Die Anordnung der Unbekannten auf dem Gitter ist dabei nicht-gestaffelt, wodurch ein unphysikalisches Schachbrettmuster in der Drucklösung entstehen kann. Durch Einfügen einer Stabilisierung kann dieser Effekt verhindert werden. Hierzu sind diverse Möglichkeiten vorhanden, vom Hinzufügen eines kleinen künstlichen Diffusionstermes in der Kontinuitätsgleichung bis hin zu speziellen Interpolationen der Geschwindigkeiten in Abhängigkeit vom Druck. Letztere Möglichkeit wird in dieser Arbeit zugrunde gelegt, wobei die verwendeten Ansätze auf Raw [Raw85] und Karimian [KS95] zurückgehen. Diese Ansätze bestimmen die Interpolation in Abhängigkeit der Impulsgleichung, welche gerade die Beziehung zwischen Druck und Geschwindigkeitskomponenten enthält. Es wird dadurch ebenfalls eine Art künstliche Diffusion in die Kontinuitätsgleichung eingebracht, wobei deren Größe jedoch nicht im Vorfeld festgelegt wird, sondern lokal aus der Strömungssituation heraus entsteht. Die Massenerhaltungsgleichung kann zur Stabilisierung zusätzlich berücksichtigt werden und führt zu einer leicht modifizierten Interpolation im Vergleich zum ersten Ansatz. Das Resultat sind zwei unterschiedliche Arten von Kopplungen zwischen den Geschwindigkeitskomponenten und dem Druck, die wiederum zu leicht abweichenden Eigenschaften des resultierenden Gleichungssystems führen. Das Besondere an den beiden Interpolationen ist der rein lokale Charakter, so daß sich von Gitterpunkt zu Gitterpunkt leichte Variationen ergeben können. Es gehen insbesondere auch keine globalen vordefinierten Größen ein, wie es bei einer ad hoc eingefügten künstlichen Diffusion der Fall ist.

Durch den Vergleich der beiden Stabilisierungsvarianten anhand einfacher Testfälle, wie z.B. der Poiseuille-Strömung oder aber auch der angetriebenen Nischenströmung, werden die jeweiligen Eigenschaften der Varianten herausgearbeitet. Bei der Poiseuille-Strömung ergibt sich kaum ein Unterschied. Im Falle der Nischenströmung entstehen jedoch, bedingt durch die Wirbelstrukturen und die beiden enthaltenen Eckensingularitäten, deutliche Unterschiede. Das Verhalten hängt also sehr stark vom Charakter der Strömung ab, bei der die Stabilisierung angewandt wird. Ebenso sind die verschiedenen Möglichkeiten die Konvektion zu behandeln von entscheidender Bedeutung, um sinnvolle Ergebnisse zu erhalten. Auch der Beitrag eines Quellterms wie er bei einem der verwendeten Turbulenzmodelle auftritt, kann die Ursache

für unterschiedliche Verhaltensweisen der Stabilisierung sein. Aber nicht nur allein die äußeren Umstände der Strömung an sich tragen zu eventuellen Schwierigkeiten bei, sondern auch die durch das Gitter produzierten Probleme, die z.B. durch Vergrößerung des Elementseitenverhältnisses erzeugt werden. Auch in dieser Hinsicht muß eine Diskretisierung stabil bleiben, so daß hier eine Untersuchung durchgeführt wird.

Durch die Stabilisierung, gleich welcher Form, wird ein Fehler in der Massenerhaltung erzeugt. Hier muß ein Kompromiß gefunden werden, bei dem der Störterm und damit der Massenerhaltungsfehler minimiert wird und gleichzeitig eine ausreichende Stabilisierungsstärke vorliegt, so daß das System gelöst werden kann. Als Lösungsverfahren werden dabei effiziente iterative Methoden bevorzugt. Zu dieser Kategorie gehören Mehrgitterverfahren, mit deren Hilfe das Gleichungssystem schnell gelöst werden kann. Dies hat auch in Bezug auf die Zeitintegration den Vorteil, implizite Methoden in Betracht ziehen zu können. Diese unterliegen keiner Beschränkung durch die CFL-Bedingung, wodurch größere Zeitschrittweiten möglich sind als bei einem expliziten Ansatz. Allerdings sind dafür schnelle Lösungsverfahren für die resultierenden Gleichungssysteme erforderlich, die durch die eingesetzten Mehrgittermethoden bereits vorliegen. Desweiteren muß bei einem impliziten Ansatz beachtet werden, daß dadurch eine zeitliche Mittelung eingefügt wird. Viele Forscher präferieren daher explizite Methoden, wenn sie sich mit zeitgenauen Simulationen beschäftigen, wie es z.B. bei einer LES der Fall ist. Jedoch ist der Einfluß des impliziten Ansatzes bei Zeitschritten moderater Weiten als gering einzustufen, sofern man die entscheidenden Entwicklungen ausreichend fein auflöst. Dies trifft auch auf laminare Simulationen zu, die eine zeitliche Evolution beinhalten. Auch dort würde eine zu grobe zeitliche Auflösung genausowenig zum Ziel führen wie eine zu grobe räumliche Auflösung, die die in der Strömung vorhandenen Strukturen nicht darstellen kann. Jedoch möchte man bei einer impliziten Diskretisierung zumindest $CFL > 1$ erfüllen, um sich etwas von den expliziten Verfahren abzugrenzen, die maximal $CFL = 1$ benutzen können. Als Beispiel für den Einsatz eines impliziten Verfahrens im turbulenten Fall, kann die Arbeit von John [Joh02] herangezogen werden.

Die Bewertung des Diskretisierungsverfahrens inklusive der Stabilisierungsmethoden bei unterschiedlichsten Anwendungsproblemen ist das Hauptaugenmerk dieser Arbeit. Als Kriterien werden dazu der Diskretisierungsfehler, v.a. der Massenerhaltungsfehler, das Konvergenzverhalten des iterativen Lösungsverfahrens sowie der Vergleich mit der exakten Lösung bzw. mit Ergebnissen aus der Literatur herangezogen. Auch die Zeitintegration ist ein wichtiger Anhaltspunkt, da auch die Stabilisierung vom Zeitschritt abhängt und dadurch einen großen Einfluß auf das Ergebnis der Simulation ausübt. Im laminaren Regime werden dazu sowohl lineare, nichtlineare, stationäre als auch instationäre Fälle betrachtet, um die Eigenschaften der Diskretisierung und die Auswirkungen auf die Ergebnisse herauszuarbeiten. Nach diesen grundlegenden Tests im laminaren Bereich, kann die Diskretisierung schließlich auch im turbulenten Fall überprüft werden. Dabei wird vor allem das Verhalten der beiden Stabilisierungsansätze in Kombination mit den betrachteten Turbulenzmodellen untersucht.

Diese Untersuchungen der Diskretisierungsverfahren im laminaren und turbulenten Regime werden mit Hilfe des in der Arbeitsgruppe Wittum entstandenen Programmpakets *UG* durchgeführt, dessen Struktur z.B. in [BBJ⁺97] und [BBJ⁺98] vorgestellt wird. In [BJL⁺01] sind einige Anwendungsbeispiele enthalten, die die Möglichkeiten des Pakets demonstrieren. Die Basis des Pakets sind unstrukturierte Gitter in zwei und drei Raumdimensionen, sowie ein flexibles Datenmanagement. Es werden alle für die Gittergenerierung und Modifikation erforderlichen

Routinen zur Verfügung gestellt. Auch die Portierung auf unterschiedlichste Rechnertypen ist enthalten, insbesondere auf verschiedene Parallelrechnerarchitekturen. Die Parallelisierung ist bei Simulationen in drei Raumdimensionen entscheidend, da die erforderliche Gitterfeinheit wegen dem dafür benötigten Speicher- und Zeitaufwand ansonsten nicht erreicht werden könnte. Vielfältige Applikationen sind bereits in dem Programmpaket *UG* enthalten, unter anderem die Problemklasse der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen [HNRR99]. Die parallelen Simulationen dieser Arbeit erfolgten auf einem Beowulf-Cluster der Arbeitsgruppe Wittum, bestehend aus 80 Prozessoren, bzw. auf dem Heidelberger Linux Cluster System HELICS (<http://helics.uni-hd.de>) mit 512 Prozessoren.

Zusammenfassend liegt der Schwerpunkt der Arbeit auf der Untersuchung des Diskretisierungsverfahrens, insbesondere der verschiedenen Möglichkeiten der Stabilisierung. Zur Einordnung der unterschiedlichen Möglichkeiten wird hierfür neben Fehleruntersuchungen auch die Konvergenz des Lösungsverfahrens herangezogen. Diese Studien werden schließlich auf den turbulenten Fall ausgedehnt. Besonders im Hinblick auf weitere Strömungsprobleme wie z.B. die Zylinderumströmung oder auch die Strömung in statischen Mischern, ist es dringend erforderlich, die Konsequenzen der unterschiedlichen Diskretisierungsvarianten zu kennen. Dann kann schon im Vorfeld entschieden werden, welches Verfahren überhaupt in Frage kommt. Allein durch die Wahl der Diskretisierung des Konvektionsoperators, der im turbulenten Fall von großer Bedeutung ist, kann ein völlig anderes Ergebnis resultieren, wenn zuviel numerische Diffusion enthalten ist. Daher erfolgen diverse Untersuchungen im laminaren als auch turbulenten Bereich, um die Eigenschaften der Diskretisierung inklusive der Stabilisierungen herauszuarbeiten.

Der Aufbau dieser Arbeit sieht wie folgt aus. Die zugrunde liegenden Gleichungen inklusive der Turbulenzmodelle und die Veränderungen bzw. Anforderungen an das Gleichungssystem werden in Kapitel 1 vorgestellt. Die Diskretisierung mit besonderer Konzentration auf die Stabilisierungsvarianten und deren Besonderheiten, sowie die Art der Linearisierung und Zeitintegration sind Gegenstand des zweiten Kapitels. Die diskrete Darstellung der Turbulenzmodelle und der zugehörigen Mittelungsoperatoren werden in Kapitel 3 beschrieben. Dazu gehören auch Auswertungsroutinen zur Aufbereitung der Ergebnisse. Wichtig in dem Zusammenhang sind die Modifikationen des Lösungsalgorithmus, die sich auf den Transport der turbulenten Daten beziehen. Das Lösungsverfahren selbst, bestehend aus der Zeititeration, nichtlinearer und linearer Iteration, wird in Kapitel 4 vorgestellt. Die lineare Iteration erfolgt dabei durch ein geometrisches Mehrgitterverfahren mit Standardtransferrountinen. Auch Krylov-Raum-Methoden werden vorgestellt, die zur Beschleunigung des Mehrgitterverfahrens dienen. Kapitel 5 schließlich, ist den numerischen Resultaten und deren Diskussion gewidmet.

1 Die Bewegungsgleichungen und das Turbulenzmodell

1.1 Die Navier-Stokes Gleichungen

Zur Beschreibung der Strömungsphänomene in inkompressiblen Fluiden dienen die Erhaltungsgleichungen für den Impuls und die Masse. In allgemeiner Form lauten sie:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla(\rho \nu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}^T) + \nabla p = \mathbf{f}$$

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0$$

oder in komponentenweiser Notation:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = f_i$$

$$\sum_{j=1}^d \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0.$$

Die Herleitung dieser Navier-Stokes Gleichungen ist in gängiger Literatur zu finden und wird in dieser Arbeit nicht weiter ausgeführt. Eine Einführung ist etwa in [Wes01],[HC93], klassisch in [LL66] oder auch in [FP97] zu finden. Dabei bezeichne ν die kinematische Viskosität, u_i mit $i = 1, \dots, d$ sind die Geschwindigkeitskomponenten des Geschwindigkeitsvektors $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d)^T$ in kartesischer Anordnung im d -dimensionalen Raum \mathbb{R}^d , p ist der Druck und $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_d)^T$ eine mögliche rechte Seite. Die Dichte ρ wird wegen der Inkompressibilitätsannahme als konstant im gesamten Gebiet angenommen und kann daher auf 1 normiert werden. Das Gleichungssystem ändert sich durch diese Normierung nicht in seiner Gestalt. Das Resultat ist:

$$(1.1) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla(\nu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}^T) + \nabla p = \mathbf{f}$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$$

bzw. in komponentenweiser Notation:

$$(1.2) \quad \frac{\partial u_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = f_i$$

$$\sum_{j=1}^d \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0.$$

In allen in dieser Arbeit betrachteten Fällen wird der Kraftterm in der Impulsgleichung vernachlässigt. Insbesondere spielt die Erdbeschleunigung keine entscheidende Rolle bei den untersuchten Strömungsproblemen und wird daher nicht mit einbezogen. Desweiteren wird auch keine Temperaturabhängigkeit der Strömung vorausgesetzt, wodurch sich die Berechnung der Transportgleichung für die Temperatur erübrigt.

1.2 Turbulenzmodellierung

In laminaren Fällen, bei denen die Strömungsstruktur eher geordnet ist, reichen die oben beschriebenen Gleichungen aus, um die Simulation durchzuführen. Im turbulenten Fall muß noch ein geeignetes Modell für die nicht adäquat aufgelösten Strukturen hinzugefügt werden. Hierfür gibt es verschiedene Möglichkeiten. Einerseits ist es theoretisch möglich, die Auflösung fein genug zu machen, um alle Strukturen darstellen zu können. Andererseits sind dann nur sehr spezielle Probleme und vor allem keine großen Reynoldszahlen realisierbar, da selbst bei den heutigen Großrechnern die Kapazität nicht ausreicht, um alle Strukturen darstellen zu können. Es bleibt also nur die Möglichkeit, relativ einfache Probleme mittels dieses direkten Ansatzes zu modellieren, oder aber die Reynoldszahl so klein zu halten, daß noch alle relevanten Phänomene darstellbar sind. Vor allem wenn man auch Wandeffekte simulieren will, kann man diesen direkten Ansatz, auch Direkte Numerische Simulation (DNS) genannt, nicht anwenden. Die Anforderung an die Auflösung der Randschicht sind dann viel zu hoch.

Eine weitere Möglichkeit ist es, nur die zeitlich gemittelten Phänomene zu betrachten. Dann benötigt man die zeitlich gemittelten Gleichungen (Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS)) und ein statistisches Modell, um die turbulenten Größen zu approximieren. Dieser Ansatz ist weit verbreitet und wird vor allem für praktische Probleme im Ingenieurwesen angewandt. Allerdings kann man mit diesem Ansatz keine zeitliche Entwicklung der Strömung darstellen. Im Normalfall ist man dabei auch nur an einer stationären Lösung interessiert und nicht an der zeitlichen Entwicklung. Will man jedoch den Entwicklungsprozeß abbilden, muß eine andere Methode angewendet werden. Daher wurde ein weiterer Ansatz entwickelt, der ungefähr zwischen den letzten beiden Möglichkeiten angeordnet werden kann. Er basiert darauf, die Gleichungen im Raum zu mitteln und soweit wie möglich die Strukturen aufzulösen. Nur die kleinen Anteile der Strömung, die durch den Mittelungsprozeß verloren gegangen sind, werden durch ein Modell ersetzt. Dieses Vorgehen ist bekannt unter dem Namen Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation (LES)) und wird im folgenden Abschnitt erläutert.

1.3 Die Grobstruktursimulation

Die Basis der Grobstruktursimulation ist die räumliche Mittelung, um die großen von den kleinen Strukturen zu trennen. Dazu werden die Erhaltungsgleichungen (1.1) zunächst im Raum gemittelt. Der Operator, der die Mittelung leistet, ist ein Faltungsintegral der Form

$$\bar{f}(x, t) = \int_{\Omega} G_{\Delta}(x, y) f(y, t) dV,$$

wobei mit Δ die Filterweite bezeichnet wird. Sie charakterisiert die Größe des lokalen Trägers des Kerns $G_\Delta(x, \cdot)$. Der Filteroperator muß außerdem folgende Eigenschaft erfüllen:

$$\int_{\Omega} G_\Delta(x, y) dV = 1,$$

da natürlich konstante Funktionen durch diese Mittelung nicht verändert werden dürfen. In dieser Arbeit wird ein Box-Filter eingesetzt, d.h. der Kern ist von folgender Form:

$$(1.3) \quad G_\Delta(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega_\Delta(x)|} & y \in \Omega_\Delta(x) \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Filterweite ist dabei definiert durch $\Delta = \sqrt[d]{|\Omega_\Delta|}$, wobei mit d die Raumdimension und mit $|\Omega_\Delta|$ das Volumen des Trägerbereichs des Filters bezeichnet seien.

Der Filteroperator wird auf das Gleichungssystem angewendet und unter der Annahme, daß sich Integration und Mittelungsprozeß vertauschen lassen, erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j}) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} &= 0 \\ \sum_{j=1}^d \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} &= 0. \end{aligned}$$

Der ungeschlossene Konvektionsterm $\sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j})$ muß ersetzt werden durch $\sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j)$, der nur von bekannten Größen abhängt. Um das Gleichungssystem nicht zu verändern, ergibt sich als Korrekturterm der Subskalenspannungstensor

$$\tau_{ij} := \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j.$$

Die Impulsgleichung sieht nun wie folgt aus:

$$(1.4) \quad \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} = 0.$$

Der Subskalenspannungstensor τ_{ij} muß nun geeignet modelliert werden. Dabei geht man davon aus, daß sich die nicht darstellbaren Strömungsstrukturen annähernd isotrop verhalten und daher leichter zu modellieren sind. Im Vergleich zu den statistischen Turbulenzmodellen sind die Ansätze dadurch einfacher, da nicht das gesamte Turbulenzspektrum modelliert werden muß, sondern nur der nicht darstellbare Anteil davon.

Es gibt verschiedene Ansätze, um die kleinen Strukturen zu modellieren, unter anderem Wirbelviskositäts- oder Skalenähnlichkeitsmodelle. Erstere versuchen, die kleinen Strukturen durch einen diffusiven Term abzubilden. Die Skalenähnlichkeitsmodelle dagegen gehen davon aus, daß die kleinen unaufgelösten Strukturen durch die kleinsten darstellbaren Strukturen modelliert werden können. Desweiteren gibt es auch gemischte Modelle, die beide Ansätze miteinander kombinieren.

Das älteste bekannte Modell wurde von Smagorinsky [Sma63] eingeführt und ist ein reines Wirbelviskositätsmodell. Modifikationen dieses Modelles, die eine dynamische Bestimmung des Modellparameters C erlauben, wurde von Germano [Ger92] vorgestellt und später von Lilly [Lil92] modifiziert. Eine gemischte Variante stammt von Zang et al. [ZSK93]. Alle bereits erwähnten Modelle werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

In der Literatur sind wesentlich mehr Modelle zu finden, mit unterschiedlichsten Ansätzen. Darunter ist ein Modell von Stolz und Adams [SA99, SAK01], das auf der inversen Abbildung des Filteroperators beruht, um die unaufgelösten Strukturen zu approximieren. Die Idee dabei ist, daß man die nicht aufgelösten Strukturen durch die Anwendung der Inversen des Filteroperators auf die gefilterten Größen gewinnen kann. Diese Inverse wird approximiert, und man erhält dadurch eine Näherung der ungefilterten Strukturen, die in das Gleichungssystem ähnlich wie beim Skalenähnlichkeitsmodell eingesetzt werden können. Allerdings wurde dieses Modell nur für kartesische Gitter getestet.

Ein weiteres Modell wurde von Hughes, Mazzei und Jansen [HMJ00] vorgestellt. Dieses modelliert nicht den kompletten Subskalenspannungstensor, sondern nur den Anteil darin, der von den kleinen unaufgelösten Strukturen stammt. Die anderen Skalen werden dabei exakt bestimmt. Desweiteren gibt es auch ein Modell, das möglichst die Verbindung zu den statistischen Turbulenzmodellen und zur direkten Simulation abdecken will. Es wurde von Magagnato [MG00] entwickelt und adaptiert je nach Auflösung und Strömungssituation die statistischen Modelle bzw. sogar eine DNS. Allerdings werden dafür zwei weitere Gleichungen benötigt mit diversen Parametern, die geeignet bestimmt werden müssen.

1.3.1 Wirbelviskositätsmodell von Smagorinsky

Das von Smagorinsky 1963 eingeführte Turbulenzmodell setzt für die nicht aufgelösten Strukturen einen diffusiven Term der Form

$$(1.5) \quad \tau_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk} = -2C\Delta^2|\bar{S}|\bar{S}_{ij}$$

ein. Dabei wird der Schubspannungstensor $\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i}\right)$ und dessen Norm definiert durch $|\bar{S}| = \sqrt{\sum_{i,j=1}^d 2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$ eingesetzt. Desweiteren definiert τ_{kk} den isotropen Anteil des Modellterms, bei dem die Einsteinsche Summenkonvention zur Verkürzung der Notation verwendet wird $\tau_{kk} := \sum_{j=1}^d \tau_{jj}$. Diese Konvention wird auch im Folgenden bei wiederholtem Index k stets zugrunde gelegt.

Der Modellparameter C ist bei diesem Modell positiv und über das gesamte Gebiet konstant. Da von einem inkompressiblen Ansatz ausgegangen wird, kann nur der anisotrope Anteil durch den Spannungstensor \bar{S}_{ij} modelliert werden. Der isotrope Beitrag τ_{kk} wird zum Druck addiert. Dadurch erhält man einen leicht modifizierten Druck gegenüber dem direkten Ansatz (siehe Abschnitt 1.3.4).

Definition: Ein Modell heißt *dissipativ*, falls für die Subskalendissipation

$$\varepsilon_{SGS} := \sum_{i,j=1}^d \tau_{ij}\bar{S}_{ij} \text{ gilt:}$$

$$\varepsilon_{SGS} \leq 0.$$

Dieses Phänomen wird auch als „forwardscatter“ bezeichnet, da Energie von großen zu kleinen Strukturen fließt.

Da beim Smagorinsky-Modell der Modellparameter positiv ist, liegt also ein rein dissipatives Modell vor. Insbesondere den Energiefluß von kleinen zu großen Strukturen, der als „backscatter“ bezeichnet wird, kann dadurch nicht abgebildet werden.

1.3.2 Dynamisches Modell von Germano/Lilly

Germano [GPMC91],[Ger92] führte eine Variante des Smagorinsky-Modelles ein, bei dem der Modellparameter nicht mehr konstant über das gesamte Gebiet gewählt, sondern dynamisch und rein lokal bestimmt wird. Der Modellansatz lautet:

$$(1.6) \quad \tau_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk} = -2C(x,t)\Delta^2|\bar{S}|\bar{S}_{ij}$$

mit einem vom Ort und der Zeit abhängigen Modellparameter $C(x,t)$. Selbstverständlich sind auch der Schubspannungstensor \bar{S}_{ij} , und damit dessen Norm $|\bar{S}|$ vom Ort und der Zeit abhängig. Um die Notation zu kürzen, wurde aber auf einen expliziten Hinweis dieser Abhängigkeiten verzichtet. Wichtig ist nur darauf hinzuweisen, daß im Gegensatz zum Smagorinsky-Modell aus (1.5) der Parameter in Raum und Zeit variiert.

Die Idee beim dynamischen Modell ist, daß man durch eine zweite gröbere Filterung des Gleichungssystems und Vergleich mit der ersten Filterung den Modellparameter bestimmen kann. Zunächst definiert man eine größere Filterweite $\hat{\Delta} = \sqrt[3]{|\Omega_{\hat{\Delta}}|} > \Delta$ mit zugehörigem Kern $G_{\hat{\Delta}}$. Zur Veranschaulichung des Trägerbereichs der beiden Filter sei auf Abbildung 1.1 verwiesen, die die Träger der Filter der Weite Δ und $\hat{\Delta}$ darstellt. Angedeutet ist dabei ein Teil eines diskreten Gitters inklusive des zugehörigen dualen Gitters, um die Realisierung der Filteroperatoren auf unstrukturierten Gittern, wie es in dieser Arbeit erfolgen wird, zu veranschaulichen.

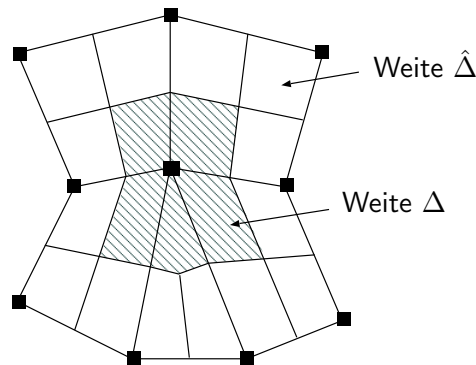


Abbildung 1.1: Trägerbereiche der Filter G_{Δ} und $G_{\hat{\Delta}}$

Das mit $G_{\hat{\Delta}} \circ G_{\Delta}$ gefilterte Gleichungssystem lautet damit:

$$(1.7) \quad \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{u}_i \hat{u}_j) + \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ij} = 0.$$

Dabei wurde bereits der Modellterm, in diesem Falle der Testspannungstensor T_{ij} , eingefügt:

$$T_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j.$$

Dieses System kann nun mit dem mit G_{Δ} gefilterten Gleichungssystem (1.4) verglichen werden:

$$(1.8) \quad \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\widehat{u_i u_j}) + \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\tau_{ij}} = 0.$$

Durch Subtraktion der beiden Gleichungen (1.7)-(1.8) erhält man folgende Beziehung:

$$(1.9) \quad T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}} = \widehat{u_i u_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j =: L_{ij}.$$

Die rechte Seite der Gleichung wird als Leonard-Term bezeichnet und hängt nur von bekannten Größen ab. Insbesondere ist diese Beziehung unabhängig vom Modell erfüllt.

Setzt man jedoch das Wirbelviskositätsmodell ein und verwendet denselben Modellparameter C für den Subskalenspannungstensor, erhält man:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} &= -2C(x, t) \Delta^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} \\ T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} &= -2C(x, t) \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij} \\ L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} &= -2C(x, t) \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij} + 2C(x, t) \Delta^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} =: C(x, t) M_{ij}. \end{aligned}$$

Für die Bestimmung des einzigen Parameters C erhält man hiermit ein System von 6 Gleichungen, das somit überbestimmt ist. Als Ausweg schlug Lilly [Lil92] vor, folgenden Ausdruck im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate zu minimieren:

$$\begin{aligned} Q &= \left(L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} - 2C(x, t) (\Delta^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} - \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij}) \right)^2 \\ &= \left(L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} - C(x, t) M_{ij} \right)^2 \end{aligned}$$

und erhält

$$(1.10) \quad C(x, t) = \frac{\sum_{i,j=1}^d L_{ij} M_{ij}}{\sum_{k,l=1}^d M_{kl} M_{kl}}.$$

1.3.3 Gemischtes Modell von Zang/Street/Koseff

Das gemischte Modell von Zang et al. [ZSK93] enthält außer einem Wirbelviskositätsansatz auch einen Skalenähnlichkeitsterm \mathcal{L}_{ij}^m , der definiert ist durch:

$$\mathcal{L}_{ij}^m := \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j.$$

Dieser Term ähnelt sehr dem Subskalenspannungstensor $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$ und entsteht durch die Ersetzung der unbekanntenen Geschwindigkeiten u_i durch ihre gemittelten Werte \bar{u}_i . Die

Annahme dabei ist, daß die kleinsten aufgelösten oder darstellbaren Strukturen die nicht darstellbaren, zu modellierenden Strukturen der Strömung am besten abbilden können, da sich ihr Verhalten nicht allzu sehr vom Verhalten der kleinsten Strömungsphänomene unterscheidet. Dieser Ansatz allein kann allerdings die Energiedissipation von großen zu kleinen Wirbeln nicht so gut darstellen. Daher wurde auch ein dissipativer Anteil durch das Wirbelviskositätsmodell beigefügt. Ähnlich wie im vorigen Abschnitt wird auch hier ein nicht konstanter Modellparameter $C = C(x, t)$ eingesetzt, der sich durch einen entsprechenden dynamischen Prozeß bestimmen läßt. Zunächst wird als Modell für den anisotropen Anteil des Subskalenspannungstensors folgendes angesetzt:

$$(1.11) \quad \tau_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk} = -2C(x, t)\Delta^2|\overline{S}|\overline{S}_{ij} + \mathcal{L}_{ij}^m - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathcal{L}_{kk}^m.$$

Setzt man nun in die Beziehung (1.9) die Modelle auf Subskalen- und Testebene ein:

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

erhält man:

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

Mit Hilfe der Tensoren:

$$\begin{aligned} H_{ij} &:= \widehat{\overline{u_i}}\widehat{\overline{u_j}} - \widehat{\overline{u_i}}\widehat{\overline{u_j}} && \text{Skalenähnlichkeitsbeitrag} \\ I_{kk} &:= L_{kk} + \widehat{\mathcal{L}_{kk}^m} - \mathcal{L}_{kk}^M && \text{isotroper Anteil} \\ M_{ij} &:= -2\hat{\Delta}^2|\hat{S}|\hat{S}_{ij} + 2\Delta^2|\overline{S}|\overline{S}_{ij} && \text{Wirbelviskositätsbeitrag} \end{aligned}$$

läßt sich nun folgende Beziehung ableiten:

$$L_{ij} - H_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}I_{kk} = C(x, t)M_{ij}.$$

Wiederum entsteht ein System von 6 Gleichungen für den skalaren Parameter C , der durch Minimierung des folgenden Ausdrucks im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate bestimmt wird:

$$Q = (L_{ij} - H_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}I_{kk} - C(x, t)M_{ij})^2.$$

Man erhält als Parameter:

$$(1.12) \quad C(x, t) = \frac{\sum_{i,j=1}^d (L_{ij} - H_{ij})M_{ij}}{\sum_{k,l=1}^d M_{kl}M_{kl}}.$$

Da sich das hier beschriebene Modell nur durch den Skalenähnlichkeitsterm vom vorigen Modell unterscheidet, sind auch die dynamisch bestimmten Modellparameter C miteinander korreliert. Aufgrund der Ähnlichkeit von L_{ij} und H_{ij} wird erwartet, daß der in Gleichung (1.10) bestimmte Parameter größer ist als der aus Gleichung (1.12).

1.3.4 LES Gleichungssystem

Nachdem die Modellparameter bestimmt sind, können die Modelle in das Gleichungssystem (1.4) eingesetzt werden. Dabei wird die turbulente Viskosität zur Vereinfachung der Notation eingeführt. Sie ist definiert durch:

$$(1.13) \quad \nu_t := C\Delta^2|\bar{S}|.$$

Bei allen vorgestellten Modellen ist zu beachten, daß der isotrope Anteil des Wirbelviskositätsmodelles indirekt zum Druck addiert wird:

$$p^* := \bar{p} + \frac{1}{3}\tau_{kk}.$$

Da ein inkompressibler Ansatz vorliegt, läßt sich der isotrope Anteil nicht durch den Spannungstensor modellieren. Allerdings stellt der modifizierte Druckwert kein Problem beim Lösen des Gleichungssystems dar. Weiterhin ist insgesamt der Druck nur bis auf eine Konstante bestimmt, wie im laminaren Fall.

Es ergeben sich also folgende turbulente Gleichungssysteme, die gelöst werden müssen:

- für die Wirbelviskositätsmodelle:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial p^*}{\partial x_i} &= 0 \\ \sum_{j=1}^d \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} &= 0. \end{aligned}$$

- für das gemischte Modell:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial p^*}{\partial x_i} &= - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \mathcal{L}_{ij} \\ \sum_{j=1}^d \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} &= 0. \end{aligned}$$

Im Folgenden wird darauf verzichtet, die Drücke \bar{p} und p^* zu unterscheiden. Es geht aus dem Zusammenhang hervor, welcher Druckwert gemeint ist.

Im Falle des gemischten Modells liefert der Skalenähnlichkeitsterm einen Beitrag zur rechten Seite, da er zweifach gemittelte Terme enthält, die den Stern der diskreten Darstellung vergrößern würden. Es wird im weiteren Verlauf stets auf diesen Term Bezug genommen, wenn bei der Impulsgleichung von einem Quell- bzw. Modellterm gesprochen wird.

2 Diskretisierung

In diesem Kapitel soll die Diskretisierung des Systems (1.1) beschrieben werden, das zur einfacheren Notation in gekürzter Form dargestellt wird. Alle Zeitableitungen werden im Vektor

$$\frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} := \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix}$$

zusammengefaßt. Alle anderen Terme seien dann im Operator

$$K(\mathbf{x}, t) := \begin{pmatrix} -\nabla(\nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)) + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) + \nabla p \\ \nabla \cdot \mathbf{u} \end{pmatrix}$$

und der rechten Seite $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ 0 \end{pmatrix}$ enthalten, mit $\mathbf{x} := \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix}$. Das zu diskretisierende System lautet damit:

$$(2.1) \quad \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} + K(\mathbf{x}, t) = \mathbf{b}.$$

Es wird zunächst das Zeitdiskretisierungsverfahren eingeführt, anschließend die schwache Formulierung inklusive der Behandlung der Nichtlinearität und zum Schluß die Ortsdiskretisierung vorgestellt. Letztere gliedert sich aus didaktischen Gründen in mehrere Abschnitte. Dazu wird zunächst ganz allgemein das Finite Volumen Verfahren vorgestellt, bevor die Approximation der einzelnen Terme behandelt wird. Ein weiterer Abschnitt befaßt sich mit der Stabilisierung des Systems, die auch für die Behandlung der Konvektion wichtig ist, die anschließend vorgestellt wird. Im letzten Abschnitt schließlich werden die Randbedingungen beschrieben.

2.1 Zeitschrittverfahren

Die Verfahren zur Zeitdiskretisierung werden von Verfahren für steife gewöhnliche Differentialgleichungen abgeleitet. Aus Gründen der Effizienz werden dabei allerdings keine expliziten Varianten eingesetzt, da diese in der Regel nur sehr kleine Zeitschrittweiten Δt erlauben. Die Einschränkung wird durch die CFL-Bedingung beschrieben:

$$\text{CFL} = \frac{\max\|\mathbf{u}\|\Delta t}{\Delta x} \leq 1.$$

Dabei sei Δx ein Maß für die Gitterweite des zugrundeliegenden Rechengitters, und $\|\mathbf{u}\|$ eine Norm für die Geschwindigkeit. Da die Weiten innerhalb eines unstrukturierten Gitters sehr unterschiedlich sein können, kann dies bedeutende Einschränkungen bezüglich der Wahl des

Zeitschritts bedeuten. Bei impliziten Verfahren besteht diese Einschränkung nicht, daher werden sie bevorzugt.

Zur Zeitdiskretisierung werden also ausschließlich implizite Methoden eingesetzt. Hierfür sind zahlreiche Verfahren anwendbar, wie die Mehrschrittverfahren oder Runge-Kutta-Verfahren. Eine klassische Methode ist das implizite Euler-Verfahren, das sehr einfach zu implementieren ist, aber nur ein Verfahren erster Ordnung darstellt. Ein klassisches Verfahren zweiter Ordnung ist das Crank-Nicolson-Verfahren, bei dem allerdings unter Umständen sehr kleine Zeitschritte gewählt werden müssen, um Oszillationen zu vermeiden. Daher werden unter anderem das Mehrschrittverfahren „Backward Difference Formula“ von zweiter Ordnung (BDF(2)) oder das diagonal implizite Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung (DIRK(2)) eingesetzt, die beide stabil sind und keine so restriktiven Anforderungen an den Zeitschritt haben. Zusammengefaßt lauten die Verfahren für einen konstanten Zeitschritt Δt vom Zeitpunkt $t = t_n$ nach $t = t_n + \Delta t = t_{n+1}$:

- Implizites Euler:

$$(2.2) \quad T(\mathbf{x}^{t_{n+1}}) - T(\mathbf{x}^{t_n}) + \Delta t K(\mathbf{x}^{t_{n+1}}, t_{n+1}) = \Delta t \mathbf{b}.$$

- Crank-Nicolson:

$$(2.3) \quad T(\mathbf{x}^{t_{n+1}}) - T(\mathbf{x}^{t_n}) + \frac{1}{2} \Delta t (K(\mathbf{x}^{t_{n+1}}, t_{n+1}) + K(\mathbf{x}^{t_n}, t_n)) = \Delta t \mathbf{b}.$$

- BDF(2):

$$(2.4) \quad T(\mathbf{x}^{t_{n+1}}) - \frac{4}{3} T(\mathbf{x}^{t_n}) + \frac{1}{3} T(\mathbf{x}^{t_{n-1}}) + \frac{2}{3} \Delta t K(\mathbf{x}^{t_{n+1}}, t_{n+1}) = \frac{2}{3} \Delta t \mathbf{b}.$$

- DIRK(2):

$$(2.5) \quad \begin{aligned} T(\mathbf{x}^{t_{n+\alpha}}) - T(\mathbf{x}^{t_n}) + \alpha \Delta t K(\mathbf{x}^{t_{n+\alpha}}, t_{n+\alpha}) &= \alpha \Delta t \mathbf{b} \\ T(\mathbf{x}^{t_{n+1}}) - T(\mathbf{x}^{t_{n+\alpha}}) + (1 - 2\alpha) \Delta t K(\mathbf{x}^{t_{n+\alpha}}, t_{n+\alpha}) \\ &\quad + \alpha \Delta t K(\mathbf{x}^{t_{n+1}}, t_{n+1}) = (1 - \alpha) \Delta t \mathbf{b}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichne \mathbf{x}^γ den Lösungsvektor zum Zeitpunkt γ und $t_{n+\alpha} := t_n + \alpha \Delta t$ sei ein Zeitpunkt zwischen t_n und t_{n+1} . Hergeleitet werden die Gleichungen durch verschiedene Ansätze. Dies kann am besten erläutert werden, wenn man von einer gewöhnlichen Differentialgleichung der Form:

$$(2.6) \quad \Phi' = f(\Phi(t), t)$$

ausgeht, die zum vorherigen Gleichungssystem (2.1) in Bezug gebracht werden kann durch

$$\Phi' = \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} \quad \text{und} \quad f(\Phi(t), t) = K(\mathbf{x}, t) - \mathbf{b}.$$

Integriert man Gleichung (2.6) von $t = t_n$ bis $t = t_{n+1} = t_n + \Delta t$, ergibt sich:

$$(2.7) \quad \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi' dt = \Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\Phi(t), t) dt.$$

Wird nun die rechte Seite approximiert durch $\Delta t f(\Phi(t_{n+1}), t_{n+1})$, erhält man das implizite Euler-Verfahren:

$$\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n) = \Delta t f(\Phi(t_{n+1}), t_{n+1}).$$

Wählt man den Anfangspunkt des Zeitintervalls $[t_n, t_{n+1}]$ zur Approximation, erhält man das explizite Euler-Verfahren:

$$\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n) = \Delta t f(\Phi(t_n), t_n).$$

Benützt man die Trapezregel, dann resultiert daraus das Crank-Nicolson-Verfahren:

$$\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n) = \frac{1}{2} \Delta t (f(\Phi(t_n), t_n) + f(\Phi(t_{n+1}), t_{n+1})).$$

Die bisher beschriebenen Verfahren beruhen darauf, die Information von zwei Zeitpunkten einzubeziehen. Möchte man mehr Information berücksichtigen, dann gelangt man zu den Mehrschrittverfahren, die mehr als zwei Zeitpunkte zur Diskretisierung der Zeitableitung benötigen. Dabei wird die Zeitableitung mittels einer Differenzenformel approximiert (im Gegensatz zum bisherigen Integrationsansatz der vorangegangenen Beispiele). Man interpoliert dazu die Funktionswerte an den k Stellen $\Phi(t_{n+1}), \dots, \Phi(t_{n-k+1})$ durch ein Polynom p vom Grad k :

$$p(t) = \Phi(t_{n+1}) + \frac{\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)}{\Delta t} (t - t_{n+1}) \\ + \frac{1}{2!} \frac{\Phi(t_{n+1}) - 2\Phi(t_n) + \Phi(t_{n-1}))}{(\Delta t)^2} (t - t_{n+1})(t - t_n) + \dots$$

und fordert, daß

$$p'(t_{n+1}) = f(\Phi(t_{n+1}), t_{n+1})$$

erfüllt ist (vergleiche Formel (2.6)). Für $k = 2$ erhält man damit das BDF-Verfahren zweiter Ordnung:

$$\frac{3}{2} \Phi(t_{n+1}) - 2\Phi(t_n) + \frac{1}{2} \Phi(t_{n-1}) = \Delta t f(\Phi(t_{n+1}), t_{n+1}).$$

Setzt man $k = 1$ ein, erhält man wiederum das implizite Euler-Verfahren.

Die Runge-Kutta-Verfahren approximieren dagegen wiederum das Integral in Gleichung (2.7). Sie benutzen hierfür die Quadraturpunkte τ_1, \dots, τ_q mit den Gewichten b_1, \dots, b_q und die Quadraturformel:

$$(2.8) \quad \Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n) = \Delta t \sum_{i=1}^q b_i f(\Phi(t_{n+\tau_i}), t_{n+\tau_i})$$

mit $t_{n+\tau_i} = t_n + \tau_i \Delta t$. Für die Berechnung der $\Phi(t_{n+\tau_i})$ wird ebenso obige Quadraturformel mit denselben Quadraturpunkten und den Gewichten a_{ij} verwendet:

$$(2.9) \quad \Phi(t_{n+\tau_i}) - \Phi(t_n) = \Delta t \sum_{j=1}^q a_{ij} f(\Phi(t_{n+\tau_j}), t_{n+\tau_j}).$$

Die Formeln (2.8) und (2.9) definieren zusammen eine Runge-Kutta-Methode, die in folgendem Schema dargestellt werden kann:

$$(2.10) \quad \begin{array}{ccc|c} a_{11} & \cdots & a_{1q} & \tau_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{q1} & \cdots & a_{qq} & \tau_q \\ \hline b_1 & \cdots & b_q & \end{array} .$$

Wiederum läßt sich das implizite Euler- und das Crank-Nicolson-Verfahren in diesem Schema darstellen:

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline 1 & \end{array} \quad \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \end{array} .$$

Implizites Euler Crank-Nicolson.

Die klassischen Formeln von Runge und Kutta waren explizit, d.h. $a_{ij} = 0$ für $i \leq j$. Somit können die q Schritte des Verfahrens nacheinander bearbeitet werden. Die impliziten Runge-Kutta Methoden mit voller Matrix a_{ij} erfordern allerdings das simultane Lösen von q impliziten und nichtlinearen Gleichungen pro Zeitschritt. Um das zu umgehen, wurden die semi-impliziten Verfahren eingeführt, die sich durch eine untere Dreiecksmatrix a_{ij} auszeichnen und somit in q sukzessiven Schritten realisiert werden können. Das Schema von Alexander [Ale77], das in dieser Arbeit verwendet wird, kann wie folgt charakterisiert werden:

$$(2.11) \quad \begin{array}{cc|c} \alpha & 0 & \alpha \\ 1 - \alpha & \alpha & 1 \\ \hline 1 - \alpha & \alpha & \end{array} \quad \text{mit } \alpha = 1 - \frac{1}{2}\sqrt{2}.$$

Dieses Verfahren ist von zweiter Ordnung und stabil. Der Nachweis ist in [Ale77] zu finden.

2.2 Schwache Formulierung und Linearisierung

Das kontinuierliche System wurde bereits in Abschnitt 2.1 bezüglich der Zeitvariablen diskretisiert. Es verbleibt nun das System sowohl in Bezug auf die Nichtlinearität als auch im Raum zu diskretisieren. Zunächst geht man von einem schwachen Ansatz aus, um die Regularität der Lösung zu reduzieren. Das System (2.1) wird dafür mit einem Testvektor \mathbf{v} aus einem Testraum V multipliziert, d.h. für alle $\mathbf{v} \in V$ gilt:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} + K(\mathbf{x}, t) - \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{v} \, dV &= \int_{\Omega} \left(\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) - \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{v} \, dV \\ &\quad + \int_{\Omega} \left(-\nabla(\nu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) + \nabla p \right) \cdot \mathbf{v} \, dV \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV + \int_{\partial\Omega} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)\mathbf{n} + \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{n} + p\mathbf{n} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v} \, dS \\ &\quad - \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \mathbf{u}\mathbf{u}^T + p\mathbf{I} \\ \mathbf{u}^T \end{pmatrix} \cdot \nabla \mathbf{v} \, dV = 0. \end{aligned}$$

Wenn man für die Lösung \mathbf{x} hinreichende Glattheit voraussetzt, kann die Integration über Ω und die partielle Differentiation nach der Zeit vertauscht werden. Somit läßt sich die Zeitdiskretisierung exakt wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben durchführen mit den Operatoren

$$K = \int_{\partial\Omega} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)\mathbf{n} + \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{n} + p\mathbf{n} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v} \, dS$$

$$- \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) + \mathbf{u}\mathbf{u}^T + p\mathbf{I} \\ \mathbf{u}^T \end{pmatrix} \cdot \nabla\mathbf{v} \, dV$$

und $T = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v} \, dV$ und der rechten Seite $\int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV$.

Durch partielle Integration erhält man sowohl Volumen- als auch Oberflächenintegrale, wobei der Testraum V dabei noch näher spezifiziert werden muß. Wählt man z.B. für V den Raum der Funktionen, die

$$\mathbf{v}(x) \equiv 0 \text{ für } x \in \partial\Omega$$

erfüllen und einen kompakten Träger haben, erhält man eine Finite Elemente Methode. Dabei verschwindet das Randintegral in obiger Formel. Zu lösen ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) + \mathbf{u}\mathbf{u}^T + p\mathbf{I} \\ \mathbf{u}^T \end{pmatrix} \cdot \nabla\mathbf{v} \, dV = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV$$

$\forall \mathbf{v} \in V_{FE}$.

Eine Einführung in die Finite Elemente Methoden kann z.B. in dem einführenden Buch von Braess [Bra97] nachgelesen werden.

Wählt man für V den Raum der auf einer Zerlegung $\mathcal{Z} = \{\Omega_k : k = 0, \dots, \infty\}$ von Ω stückweise konstanten Funktionen \mathbf{v} mit $\mathbf{v}|_{\Omega_k} = \text{const}$, $\Omega = \bigcup_{k=0}^{\infty} \Omega_k$ und $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ für $i \neq j$, kann man die partielle Integration wie folgt ausführen (o.B.d.A. $\mathbf{v}|_{\Omega_k} = 1$):

$$\sum_k \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_k} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix} \, dV + \int_{\partial\Omega_k} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)\mathbf{n} + \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{n} + p\mathbf{n} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \, dS = \sum_k \int_{\Omega_k} \mathbf{b} \, dV.$$

Dies ist erfüllt, wenn für alle k gilt:

$$(2.12) \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_k} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix} \, dV + \int_{\partial\Omega_k} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)\mathbf{n} + \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{n} + p\mathbf{n} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \, dS = \int_{\Omega_k} \mathbf{b} \, dV,$$

d.h. man erhält eine Finite Volumen Methode.

Unabhängig vom gewählten Verfahren wird weniger Regularität der Lösung gefordert, als dies in der starken Formulierung der Fall ist. Man definiert also als Lösungsraum:

Definition: Der Sobolevraum, in dem die Lösung \mathbf{x} zum Zeitpunkt t liegt, sei definiert durch:

$$W := H^1(\Omega) \times L_2(\Omega).$$

Das in W definierte Skalarprodukt sei das übliche L_2 -Skalarprodukt:

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, dV.$$

Das resultierende System (2.12) ist jedoch nichtlinear. Der Term $\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{n}$ muß noch geeignet linearisiert werden. Ausgangsbasis hierfür ist die Taylorentwicklung um eine Näherung $\tilde{\mathbf{u}}$, die nach dem Term erster Ordnung abgebrochen wird:

$$(2.13) \quad \begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{u}) &:= \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{n} = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{u}}) + \frac{\partial\mathcal{N}(\tilde{\mathbf{u}})}{\partial\mathbf{u}}(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) + O((\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})^2) \\ &= \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}^T\mathbf{n} + \underbrace{\tilde{\mathbf{u}}^T\mathbf{n}(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})}_{(1)} + \underbrace{\tilde{\mathbf{u}}\mathbf{n}^T(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})}_{(2)} + O((\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})^2). \end{aligned}$$

Äquivalent dazu lautet die Formel in komponentenweiser Notation mit $d = 2, 3$:

$$(2.14) \quad \begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{u}) &= \left(\sum_{j=1}^d u_i u_j n_j \right)_{i=1}^d \\ &= \left(\sum_{j=1}^d \tilde{u}_i \tilde{u}_j n_j + \underbrace{\sum_{j=1}^d \tilde{u}_j n_j (u_i - \tilde{u}_i)}_{(1)} + \underbrace{\sum_{j=1}^d \tilde{u}_i n_j (u_j - \tilde{u}_j)}_{(2)} \right)_{i=1}^d + O((u_i - \tilde{u}_i)^2)_{i=1}^d. \end{aligned}$$

Prinzipiell hat man nun mehrere Möglichkeiten, die Linearisierung umzusetzen, d.h. die Jacobi-Matrix $\frac{\partial\mathcal{N}(\mathbf{u})}{\partial\mathbf{u}}$ zu approximieren.

- Eine Möglichkeit ist selbstverständlich, obige Form einzusetzen. Das resultierende Verfahren wird dann als vollständige Newton-Approximation bezeichnet. Dabei beeinflußt aber der Beitrag des alten Geschwindigkeitsgradienten (2) die Eigenschaften der Jacobi-Matrix, da die Diagonale dadurch geschwächt wird. Andererseits erreicht man durch diese Strategie gute nichtlineare Konvergenz im späteren Iterationsverfahren, sofern man eine gute Ausgangslösung hat.
- Eine andere Möglichkeit ist ein einfaches Fixpunktverfahren oder auch Quasi-Newton-Verfahren. Dabei wird nur der Beitrag (1) der Taylor-Entwicklung berücksichtigt. Das Resultat ist eine schwächere nichtlineare Approximation, da die Geschwindigkeitskomponenten bei dieser Strategie nicht direkt miteinander gekoppelt sind. Die nichtlineare Konvergenz wird verlangsamt, aber das Verfahren konvergiert dabei in der Regel ohne Schwierigkeiten.
- Die letzte Alternative ist, die Jacobi-Matrix numerisch statt analytisch zu bilden. Diese Variante wird allerdings in dieser Arbeit nicht eingesetzt, da eine analytische Jacobi-Matrix vorliegt und kein Bedarf an weiteren Approximationen besteht.

Bei allen Varianten liegt nun ein lineares System vor, das durch Iterationsverfahren gelöst werden kann. Es verbleibt, die Diskretisierung des Systems (2.12) zu beschreiben. Diese wird in den folgenden Abschnitten erläutert.

2.3 Das Finite Volumen Verfahren

Zur vollständigen Beschreibung eines Randwertproblems auf dem Gebiet Ω mit dem Rand $\Gamma = \partial\Omega$ werden noch geeignete Randbedingungen RB benötigt. Beispiele dafür sind Wandrandbedingungen, Vorgabe des Einflußprofils, Vorgaben an Ausflußrändern, periodische und

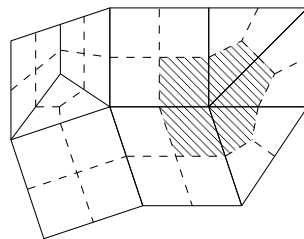
Symmetrierandbedingungen oder Gleitrandbedingungen. Somit liegt folgendes Problem vor, das diskretisiert und gelöst werden muß:

Problem: Suche $\forall t \in [0, T]$ ein $\mathbf{x} \in W := H^1(\Omega) \times L_2(\Omega)$, so daß

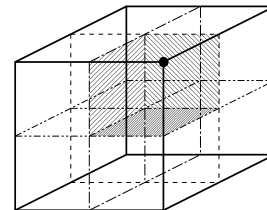
$$\left(\frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} + K(\mathbf{x}, t), \mathbf{v} \right) = (\mathbf{b}, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in V \text{ in } \Omega$$

und $\mathbf{x} = RB$ auf $\Gamma = \partial\Omega$.

Die Diskretisierung dieses Systems soll möglichst flexibel auch auf unstrukturierten Gittern sein. Daher scheiden Finite Differenzen Verfahren von vorneherein aus, da sie auf strukturierte Gitter angewiesen sind. Schwache Ansätze wie die Finite Elemente oder Finite Volumen Verfahren lassen sich elementweise aufbauen, wodurch nicht unbedingt Information über den Nachbarn erforderlich ist. Das hier gewählte Verfahren ist ein Finite Volumen Verfahren, das bezüglich des Aufbaus und der Strategie sehr ähnlich zu Finite Element Ansätzen ist. Eingeführt wurde das Verfahren von Raw [SR87],[Raw85] und eine Erweiterung stammt von Karimian [KS95],[Kar94]. Es beruht auf einem Finite Elemente Gitter, wie in Abbildung 2.1 skizziert. Die Kontrollvolumina werden durch das zugehörige duale Gitter gebildet. Mit Hilfe der Abbildung 2.1 erkennt man leicht, daß das duale Gitter einfach konstruiert werden kann, indem man die Seitenmittelpunkte mit dem Schwerpunkt verbindet. Ganz analog geht man vor, um in drei Raumdimensionen die Kontrollvolumina zu konstruieren. In Abbildung 2.1 ist für ein Hexaeder-Element die Konstruktion des dualen Gitters skizziert und das zum markierten Gitterpunkt gehörende Teilkontrollvolumen hervorgehoben.



Gitter und das zugehörige duale Gitter
(schwarze bzw. gestrichelte Linien)



Hexaeder mit einem Beispielknoten
und sein Teilkontrollvolumen

Abbildung 2.1: Konstruktion der dualen Gitter in zwei und drei Raumdimensionen

Sowohl das Finite Elemente Gitter als auch die so konstruierten Kontrollvolumina definieren auf ganz natürliche Weise eine zulässige Triangulierung \mathcal{T} des Gebietes Ω , die folgende Eigenschaften erfüllen muß:

Definition: Eine Triangulierung \mathcal{T} des Gebietes Ω mit

$$\mathcal{T} = \{T_k : T_k \text{ ein geschlossener Polygonzug} \wedge T_k \subset \Omega\}$$

heißt zulässig, falls folgende Eigenschaften erfüllt sind:

$$(a) \quad \Omega = \bigcup_{k=1}^n T_k$$

$$(b) \quad \forall k \neq j \text{ gilt: } T_k \cap T_j = \begin{cases} \emptyset \\ \text{ein Knoten} \\ \text{eine Kante} \\ \text{eine Seite (nur in 3 Raumdimensionen)}. \end{cases}$$

Die unbekanntenen Größen u_1 , u_2 , u_3 und p sind in den Knoten des Gitters lokalisiert. Sie lassen sich im Unbekanntenvektor $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix}$ zusammenfassen. Es liegt also eine gekoppelte Anordnung vor, wodurch für alle Unbekannten dasselbe Kontrollvolumen verwendet werden kann. Der Nachteil dieser Anordnung ist, daß es zu einer Entkopplung der Geschwindigkeiten vom Druck führen kann und somit ein Schachbrettmuster im Druck entsteht, sofern das System nicht stabilisiert wird. Die Stabilisierung des Gleichungssystems zur Vermeidung dieses Effektes wird in Abschnitt 2.5 erläutert.

Testraum

Der diskrete Testraum V besteht nun aus Indikatorfunktionen I über den n_{KP} Kontrollvolumina Ω_{KV_k} der gewählten Zerlegung $\mathcal{T}_{\text{KV}} = \{\Omega_{\text{KV}_k} : k = 1, \dots, n_{\text{KP}}\}$ von Ω :

$$I_k(y) = \begin{cases} 1 & \text{für } y \in \Omega_{\text{KV}_k} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Ansatzraum

Der diskrete Ansatzraum besteht aus stückweise linearen, bilinearen bzw. trilinearen Funktionen auf der Zerlegung \mathcal{T}_E , bestehend aus allen n_E Elementen des zugrunde liegenden Gitters:

$$\mathcal{T}_E = \{E_k : E_k \text{ ein Element des Gitters} \wedge k = 1, \dots, n_E\}.$$

Die stückweise (bi-/tri-) linearen Funktionen können durch eine nodale Basis dargestellt werden. Diese Basisfunktionen oder auch Hutfunktionen erfüllen folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} N_k(\text{co}_i) &= \delta_{ik} && \text{für } 1 \leq i, k \leq n_{\text{KP}} \text{ und } \text{co}_i \text{ ein Knotenpunkt des Gitters,} \\ N_k &&& \text{stückweise (bi-/tri-)linear,} \\ N_k &\equiv 0 && \text{außerhalb des kompakten Trägers.} \end{aligned}$$

Der Trägerbereich jeder Hutfunktion N_k ist definiert durch die am Gitterpunkt co_k anliegenden Elemente. In Abbildung 2.2 ist eine Hutfunktion skizziert.

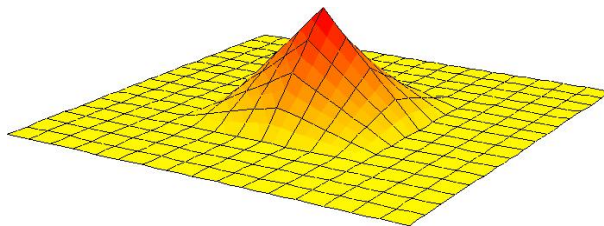


Abbildung 2.2: Skizze einer Hutfunktion bei anliegenden Viereckselementen

Obige Eigenschaften führen zu linearen Funktionen auf Dreieckselementen und Tetraedern, zu bilinearen auf Vierecken und auf Hexaedern wiederum zu trilinearen Funktionen.

Der Ansatzraum für den Lösungsvektor \mathbf{x} ist dann:

$$W = \text{span}(S)^{(d+1)}, \quad S = \{N_1, \dots, N_{n_{\text{KP}}}\}$$

mit d der Raumdimension und n_{KP} der Anzahl der Gitterpunkte.

Damit lassen sich alle Werte an den für die Diskretisierung relevanten Punkten y durch

$$f(y) = \sum_{k=1}^{n_{\text{KP}}} N_k(y) f(co_k)$$

darstellen, wobei co_k ein Gitterpunkt ist und f eine beliebige Funktion darstellt. Ganz analog läßt sich damit auch ein Gradient (z.B. am Integrationspunkt ip) approximieren, sofern der Punkt nicht auf einer Kante der Ansatzfunktion liegt (vergleiche Skizze):

$$\nabla f(y) = \sum_{k=1}^{n_{\text{KP}}} \nabla N_k(y) f(co_k) \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial f}{\partial x_i}(y) = \sum_{k=1}^{n_{\text{KP}}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i}(y) f(co_k).$$

Die Approximation der verschiedenen Terme in der diskreten Form von Gleichung (2.12) wird im Folgenden erläutert. Zur einfacheren Notation werden noch ein paar wichtige Bezeichnungen für die Diskretisierung eingeführt. Die Volumenintegration über ein Kontrollvolumen Ω_{KV_k} läßt sich als Summe über die $n_{\text{SKV}(k)}$ Teilkontrollvolumina (SKV) darstellen:

$$\int_{\Omega_{\text{KV}_k}} f(y) dV = \sum_{j=1}^{n_{\text{SKV}(k)}} \int_{\text{SKV}_j} f(y) dV.$$

Das Integral über den Rand des Kontrollvolumens wird dann aufgeteilt in eine Summe von $n_{\text{SKVF}(k)}$ Integrationen über die Teilkontrollvolumenflächen (SKVF):

$$\int_{\partial\Omega_{\text{KV}_k}} f(y) dS = \sum_{j=1}^{n_{\text{SKVF}(k)}} \int_{\text{SKVF}_j} f(y) dS.$$

Für die Integrationen über die nun entstandenen ebenen Flächen läßt sich die Mittelpunktsregel als Quadraturformel 2. Ordnung anwenden.

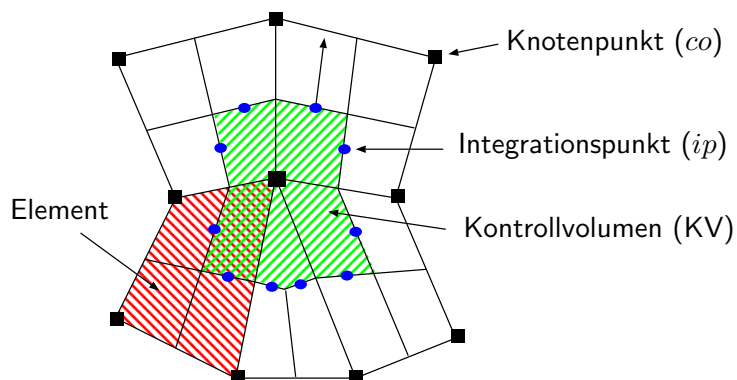


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Gitters inklusive wichtiger Punkte

Der Schwerpunkt einer Teilkontrollvolumenfläche bzw. der Integrationspunkt wird mit ip bezeichnet. Der Knoten- oder Gitterpunkt sei mit co bezeichnet. Zur Veranschaulichung der Positionen von allen relevanten Punkten dient Abbildung 2.3, in der Gitter- und Integrationspunkte sowie das zugehörige Kontrollvolumen skizziert sind. Zur Verdeutlichung sei noch

darauf hingewiesen, daß der doppelt schraffierte Bereich ein Teilkontrollvolumen SKV darstellt. Seine beiden Integrationspunktflächen werden jeweils mit SKVF bezeichnet. Mit diesen Bezeichnungen und der Mittelpunktsregel können die Volumen- und Randintegrale für das Kontrollvolumen Ω_{KV_k} approximiert werden durch:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n_{SKV(k)}} \int_{SKV_j} f(y) dV &\approx \sum_{j=1}^{n_{SKV(k)}} |SKV_j| f(co_k) \\ \sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} \int_{SKVF_j} f(y) dS &\approx \sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} |SKVF_j| \sum_{i=1}^{n_{KP}} N_i(ip_j) f(co_i). \end{aligned}$$

2.4 Approximation der einzelnen Terme

Nachdem die Ansatzfunktionen definiert worden sind, gilt es die Diskretisierung der einzelnen Terme zu beschreiben. In diskreter Form stellt sich das Gleichungssystem (2.12) dar als:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{j=1}^{n_{SKV(k)}} \int_{SKV_j} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ 0 \end{pmatrix} dV - \sum_{j=1}^{n_{SKV(k)}} \int_{SKV_j} \mathbf{b} dV \\ + \sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} \int_{SKVF_j} \begin{pmatrix} -\nu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \mathbf{n} + \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} + p \mathbf{n} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} dS = 0. \end{aligned}$$

Aus Gründen der einfacheren Lesbarkeit werden die Beiträge separat beschrieben.

2.4.1 Impulserhaltung

Die Impulsgleichung wird in diffusive, konvektive, druckabhängige und zeitabhängige Terme unterteilt. Dabei wird mit co_i der Gitterknoten i bezeichnet, \mathbf{n}_j ist bezüglich des zugehörigen Kontrollvolumens die äußere Normale skaliert mit der Fläche $|SKVF_j|$ und ip_j ist der zu dieser Teilfläche gehörende Integrationspunkt. Mit diesen Bezeichnungen sehen die Approximationen wie folgt aus.

Diffusion:

$$\begin{aligned} - \sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} \int_{SKVF_j} \nu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \mathbf{n} dS \\ \approx - \sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} \sum_{i=1}^{n_{KP}} \nu(\nabla N_i(ip_j) \mathbf{u}(co_i) + (\nabla N_i(ip_j) \mathbf{u}(co_i))^T) \mathbf{n}_j \end{aligned}$$

Konvektion:

$$\sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} \int_{SKVF_j} \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{n} dS \approx \sum_{j=1}^{n_{SKVF(k)}} \mathbf{u}(ip_j) \mathbf{u}(ip_j)^T \mathbf{n}_j$$

Druckgradient:

$$\sum_{j=1}^{n_{\text{SKVF}(k)}} \int_{\text{SKVF}_j} p \mathbf{n} \, dS \approx \sum_{j=1}^{n_{\text{SKVF}(k)}} \sum_{i=1}^{n_{\text{KP}}} N_i(ip_j) p(co_i) \mathbf{n}_j$$

Zeitterm:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{j=1}^{n_{\text{SKV}(k)}} \int_{\text{SKV}_j} \mathbf{u} \, dV \approx \frac{\partial}{\partial t} \sum_{j=1}^{n_{\text{SKV}(k)}} |\text{SKV}_j| \mathbf{u}(co_k)$$

Quellterm:

$$\sum_{j=1}^{n_{\text{SKV}(k)}} \int_{\text{SKV}_j} \mathbf{f} \, dV \approx \sum_{j=1}^{n_{\text{SKV}(k)}} |\text{SKV}_j| \mathbf{f}(co_k)$$

Außer im konvektiven Beitrag sind bereits alle Werte, die ursprünglich am Integrationspunkt ausgewertet werden mußten, durch Knotenwerte ersetzt worden. Speziell der konvektive Term enthält natürlich die verschiedenen Möglichkeiten der Linearisierung, wie bereits in Abschnitt 2.2 beschrieben. Hier wurde explizit auf eine spezielle Variante verzichtet, um die Darstellung klar zu gestalten. Allerdings hängt der Beitrag noch von Integrationspunktvariablen ab und muß geeignet auf Knotenwerte abgebildet werden. Da es sich um eine Konvektion handelt, liegt es nahe, Aufwindifferenzen einzusetzen oder zentrale Differenzen zu verwenden. Zentrale Differenzen entstehen dann, wenn man die Ansatzfunktionen N_k zur Approximation verwendet. Aufwindifferenzen benötigen eine kompliziertere Darstellung und werden in Abschnitt 2.5 näher erläutert. Anschließend wird in Abschnitt 2.6 die genaue Behandlung der Konvektion dargestellt.

Bei laminaren Berechnungen ist der Quellterm nicht vorhanden. Allerdings liefert bei turbulenten Simulationen mittels des gemischten Modells aus Abschnitt 1.3.3 der Skalenähnlichkeitsterm einen Beitrag zur rechten Seite, der auf die oben beschriebene Weise diskretisiert wird.

2.4.2 Massenerhaltung

Für die Divergenzbedingung erhält man:

$$(2.15) \quad \sum_{j=1}^{n_{\text{SKVF}(k)}} \int_{\text{SKVF}_j} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx \sum_{j=1}^{n_{\text{SKVF}(k)}} \mathbf{u}(ip_j) \cdot \mathbf{n}_j$$

mit \mathbf{n}_j der äußeren Flächennormalen bezogen auf das zugehörige Kontrollvolumen und skaliert mit der Fläche $|\text{SKVF}_j|$. Damit muß nur noch die Integrationspunktvariable $\mathbf{u}(ip_j)$ in Abhängigkeit der Knotenwerte gebracht werden. Entscheidend dabei ist, dies in einer Weise zu tun, daß die Geschwindigkeit und der Druck nicht entkoppeln und kein Schachbrettmuster im Druck entsteht. Hier kommt die Stabilisierung zum Einsatz, die im nächsten Abschnitt beschrieben wird. Sie modifiziert die Divergenzbedingung, indem sie eine Druckabhängigkeit einführt, die mit kleiner werdender Gitterweite verschwindet.

2.5 Stabilisierung

Im vorangegangenen Abschnitt blieben die Integrationspunktgeschwindigkeiten $\mathbf{u}(ip)$ unbestimmt. Sie müssen in Abhängigkeit zu den Unbekannten in den Knoten gebracht werden. Dies soll so geschehen, daß die Geschwindigkeit und der Druck nicht entkoppeln und somit das System instabil wird. Die hier angewandte Stabilisierung beruht auf einer Idee von Raw [Raw85] bzw. einer Modifikation von Karimian [KS95]. Diese basieren darauf, auf Elementebene eine Kopplung zwischen den $\mathbf{u}(ip_i)$ und den Knotenwerte der Geschwindigkeit und des Drucks zu konstruieren, um das System zu stabilisieren. In Abbildung 2.4 ist ein Beispiелеlement dargestellt, worin alle relevanten Punkte eingetragen sind: die Integrationspunkte ip_1, \dots, ip_4 und ein Aufwindpunkt up .

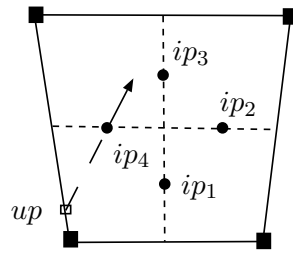


Abbildung 2.4: Beispiелеlement

Um nun eine Abhängigkeit der $\mathbf{u}(ip_j)$ zu den Knotenwerten zu bekommen, approximiert man lokal auf jedem Element, in jedem Integrationspunkt eine Finite Differenzen Darstellung der Impulsgleichung der vereinfachten Form:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \nu \Delta u_i + \sum_{j=1}^d u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = f_i.$$

Dabei geht man für den konvektiven Term von einer einfachen Fixpunkt-Linearisierung um eine Näherungslösung $\tilde{\mathbf{u}}$ aus:

$$\sum_{j=1}^d u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \approx \sum_{j=1}^d \tilde{u}_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{\partial u_i}{\partial s} \quad \text{mit} \quad s = \frac{1}{\|\tilde{\mathbf{u}}\|} \tilde{\mathbf{u}}.$$

Damit erhält man am Integrationspunkt ip_l die Approximation:

$$(2.16) \quad \underbrace{\frac{u_i - u_i^o}{\Delta t}}_{\text{Zeitterm}} - \underbrace{\nu \frac{\sum_k N_k U_i^k - u_i}{L_d^2}}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i - u_i^{up}}{L_c}}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k}_{\text{Druckgradient}} = \underbrace{f_i}_{\text{Quell-, Modellterm}} \Big|_{ip_l},$$

deren Diffusions- und Konvektionsterm im Folgenden genauer betrachtet werden.

Es bezeichnen Großbuchstaben Werte an den Knoten und Kleinbuchstaben Werte an den Integrationspunkten. Zur Verkürzung der Notation wird dabei $U_i^k := U_i(co_k)$ und entsprechend

$P^k = P(co_k)$ definiert. Die alte Integrationspunktgeschwindigkeit zum vorangegangenen Zeitpunkt wird mit u_i^o bezeichnet und u_i^{up} sei die Aufwindgeschwindigkeit wie in Abbildung 2.4 für den Integrationspunkt ip_4 skizziert. L_c und L_d^2 sind die Konvektions- und Diffusionslängen. Schließlich bezeichne n_{co} die Anzahl der Ecken des Elementes. Setzt man für alle Integrationspunkte Gleichung (2.16) an, erhält man für das Beispielement ein System von 8 Gleichungen für die $u_i(ip)$, die lokal gelöst werden müssen. Das Lösen stellt kein Problem dar, da es sich um ein diagonaldominantes Gleichungssystem handelt. Die Nebendiagonaleinträge können allenfalls durch den konvektiven Term entstehen:

$$-\|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i^{up}}{L_c} \quad \rightarrow \quad -\frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c},$$

der durch die Aufwinddifferenz je nach Verfahren auch Abhängigkeiten von anderen Integrationspunkten liefern kann. Die Diagonale dagegen wird gebildet durch:

$$\frac{u_i}{\Delta t} + \nu \frac{u_i}{L_d^2} + \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i}{L_c} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\Delta t} + \frac{\nu}{L_d^2} + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} > \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}.$$

Damit ist die Diagonale stets größer als die Nebendiagonale und das System kann problemlos invertiert werden. Es handelt sich um ein sehr kleines System, daher wird zu diesem Zweck eine Gauß-Elimination durchgeführt. Nach dem Lösen erhält man eine Darstellung der Form:

$$(2.17) \quad u_i(ip) = \sum_{k=1}^{n_{co}} \left(C_{U_i}(co_k) \cdot U_i^k + C_P^i(co_k) \cdot P^k \right) + C_f f_i + C_t u_i^o$$

mit Koeffizienten $C_{U_i}(co_k)$, die die Abhängigkeit von den Knotengeschwindigkeiten U_i^k des Elementes beschreiben, und Koeffizienten $C_P^i(co_k)$, die die Abhängigkeit von den Druckwerten in den Knoten wiedergeben. C_f und C_t sind entsprechende Faktoren für den Quell- bzw. Modellterm und die alte Integrationspunktgeschwindigkeit im instationären Fall.

Diese Approximation der Integrationspunktgeschwindigkeit u_i , man kann es auch als spezielle Interpolation auffassen, erzeugt also eine Abhängigkeit von der i -ten Komponente des Geschwindigkeitsvektors in den Knoten und von den Knotendruckwerten. Eine Beziehung zu den weiteren Geschwindigkeitskomponenten wird jedoch nicht erzeugt. In Abschnitt 2.5.4 wird dagegen eine Modifikation dieser Interpolation vorgestellt, die Abhängigkeiten zu allen Geschwindigkeitskomponenten liefert.

2.5.1 Aufwinddifferenzen

Für die Bestimmung der Aufwinddifferenzen gibt es verschiedene Möglichkeiten mit jeweils unterschiedlichen Eigenschaften bzw. Auswirkungen auf die resultierende Lösung. Als einfachstes Beispiel, einen geeigneten Aufwindpunkt für den diskretisierten Konvektionsterm zu finden, kann das volle Aufwindverfahren angeführt werden. Dabei wird zwischen den beiden Gitterpunkten der nächstgelegenen Elementkante derjenige gewählt, der in Aufwindrichtung liegt. In Abbildung 2.5(d) ist eine Beispielsituation eingetragen, aus der folgende Wahl für den Aufwindpunkt hervorgeht:

$$\mathbf{u}^{up} = \mathbf{U}_3.$$

Dieses Verfahren ist sehr einfach zu implementieren, allerdings enthält es einen großen Anteil an künstlicher Diffusion und ist daher nicht unbedingt das Verfahren der Wahl. Eine weitere sehr einfache Möglichkeit bietet das Skewed Upwinding, bei dem sich die Suche auf alle Punkte des Elementes erstreckt und derjenige Knoten als Aufwindpunkt gewählt wird, der am ehesten in Aufwindrichtung liegt. Im angegebenen Beispiel in Abbildung 2.5(c) resultiert dies in:

$$\mathbf{u}^{up} = \mathbf{U}_0.$$

Auch bei diesem Verfahren ist die künstliche Diffusion sehr hoch, da es wiederum nur von erster Ordnung ist.

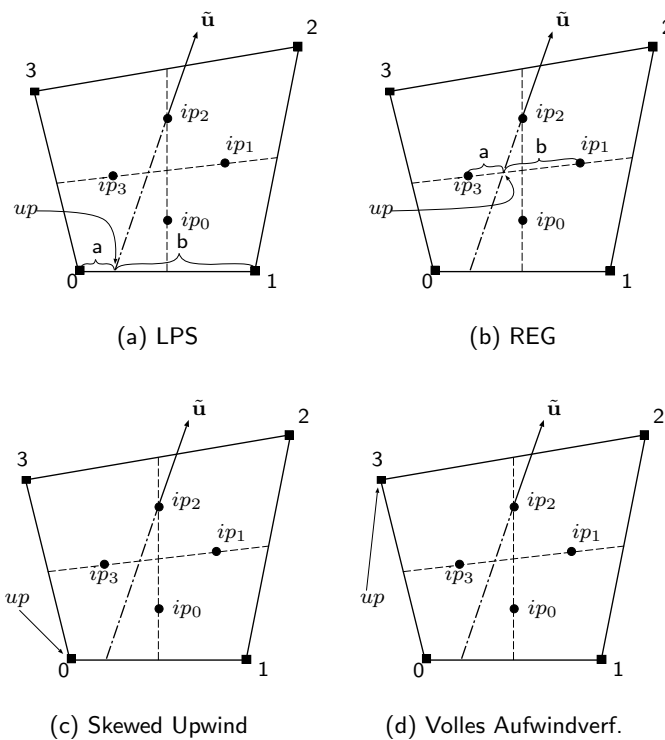


Abbildung 2.5: Verschiedene Aufwindverfahren

Ein etwas aufwendigeres Verfahren stellt das Linear Profile Skewed Upwinding dar, das im weiteren Verlauf mit LPS bezeichnet wird. Dabei wird der Aufwindpunkt gesucht, indem die Strömungsrichtung am Integrationspunkt zurückverfolgt wird, bis eine Elementkante geschnitten wird. Im Beispiel in Abbildung 2.5(a) ergibt sich als Approximation für den Aufwindpunkt:

$$\mathbf{u}^{up} = \frac{b}{a+b} \mathbf{U}_0 + \frac{a}{a+b} \mathbf{U}_1.$$

Dieses Verfahren kann negative Koeffizienten in die Matrix eintragen, allerdings ist die Approximationsordnung höher als bei den ersten beiden Verfahren.

Bei den bisher vorgestellten Möglichkeiten, den Aufwindpunkt zu approximieren, werden nur Knoten- und keine Integrationspunkte berücksichtigt, wodurch eine reine Diagonalmatrix aus (2.16) entsteht, die trivial gelöst werden kann.

Eine zum LPS-Aufwindverfahren ähnliche Möglichkeit, den Aufwindpunkt zu bestimmen, ist das von Raw in [Raw85, SR87] vorgestellte Regular Upwinding (REG). Dabei wird die Strömungsrichtung soweit zurückverfolgt, bis eine Elementseite oder eine Kontrollvolumenfläche geschnitten wird. Dieser Schnittpunkt wird dann als Aufwindpunkt gewählt. Es können dabei Abhängigkeiten von anderen Integrationspunkten entstehen, wodurch aus (2.16) keine reine Diagonalmatrix mehr entsteht. Im Beispiel aus Abbildung 2.5(b) führt dies zu:

$$\mathbf{u}^{up} = \frac{b}{a+b} \mathbf{u}(ip_3) + \frac{a}{a+b} \mathbf{u}(ip_1).$$

Dieses Verfahren verhält sich sehr ähnlich zum LPS-Aufwindverfahren, da es je nach Strömungssituation zu den fast gleichen Approximationen führen kann. Allerdings ist die Implementierung in drei Raumdimensionen im Vergleich zum LPS-Verfahren sehr aufwendig, so daß auf die weitere Verfolgung dieser Methode verzichtet wird, zumal in einfachen Tests in zwei Raumdimensionen keine gravierenden Unterschiede ausgemacht werden konnten.

Um das Problem der negativen Koeffizienten zu umgehen, wurde von Schneider und Raw in [SR86] ein Verfahren vorgestellt, das keine negativen Koeffizienten liefert, allerdings einen gewissen Anteil an künstlicher Diffusion in das System einbringt, der aber wesentlich geringer ausfällt als z.B. beim vollen Aufwindverfahren. Dieses Schema wird mit Positive Upwinding, kurz POS, bezeichnet. Dabei werden die Massenflüsse über die Kontrollvolumenflächen zur Bestimmung des Aufwindpunktes berücksichtigt. Da man einen Aufwindpunkt sucht, gilt für den Massenfluß des betreffenden Integrationspunktes:

$$m_{ip} = \sum_{j=1}^d u_j(ip) n_j > 0,$$

d.h. die Masse, die über diesen Integrationspunkt ausfließt, kann nur über eine anliegende Teilkontrollvolumenfläche oder den zum Kontrollvolumen gehörenden Knoten in das Teilkontrollvolumen hineingeflossen sein. Zur Bestimmung des Aufwindpunktes wird daher der Gesamtfluß der in das Teilkontrollvolumen ein- bzw. ausströmenden Massen berücksichtigt:

$$m_{in} = \sum_{\substack{j=1 \\ m_{ip_j} < 0}}^{n_{SKVF}} -m_{ip_j} \quad \text{bzw.} \quad m_{out} = \sum_{\substack{j=1 \\ m_{ip_j} > 0}}^{n_{SKVF}} m_{ip_j}.$$

Dann ergibt sich als Approximation des Aufwindpunktes:

$$\mathbf{u}^{up} = \left(1 - \frac{m_{in}}{F}\right) \mathbf{U}_k + \sum_{\substack{j=1 \\ m_{ip_j} < 0}}^{n_{SKVF}} \alpha_j \mathbf{u}(ip_j)$$

mit $F = \max(m_{in}, m_{out})$, $\alpha_j = -\frac{m_j}{F}$ und $\frac{m_{in}}{F} = \sum_{j=1, m_{ip_j} < 0}^{n_{SKVF}} \alpha_j$. Dabei lassen sich drei Fälle unterscheiden:

▷ $m_{in} = 0$:

Es liegt an allen Teilkontrollvolumenflächen Ausfluß vor, d.h. die Information kann nur aus Richtung des Knotens kommen, deshalb wird als Aufwindpunkt der anliegende Knoten gewählt (im Beispiel \mathbf{U}_3). Dies entspricht der Approximation des vollen Aufwindverfahrens.

▷ $0 < \frac{m_{in}}{m_{out}} < 1$:

Hierbei wird zwischen dem Knoten und den anliegenden Integrationspunkten gewichtet, da sowohl ein Teil über die Kontrollvolumenflächen als auch über den Knoten einfließt (im Beispiel zwischen \mathbf{U}_3 und ip_3).

▷ $\frac{m_{in}}{m_{out}} \geq 1$:

Bei diesem Fall erhält man keine Abhängigkeit des Knotens, da der Fluß über die Seiten erfolgt. Der Aufwindpunkt hängt dann nur von den anliegenden Integrationspunkten ab (im Beispiel also von ip_3).

In Abbildung 2.5 sind zur Verdeutlichung die Verfahren graphisch dargestellt. Da das POS-Verfahren durch die Abhängigkeiten von den Massenflüssen etwas komplizierter ist, wird in diesem Fall zur Verdeutlichung auf die Referenzen in der Literatur verwiesen: [Raw85], [SR86] oder auch in den Arbeiten von Rentz-Reichert [RR96] und Metzner [Met03].

Die Konvektionslänge schließlich, entspricht dem Abstand des Aufwindpunkts zum Integrationspunkt $L_c := \|y_{ip} - y_{up}\|$.

2.5.2 Diffusion

Zur Approximation des Laplace-Operators wird ein 5-Punkt-Stern eingesetzt, wobei man von einem nicht-äquidistanten Ansatz ausgeht. Das wird am deutlichsten, wenn man sich eine Skizze der Situation in zwei Raumdimensionen (2d) in Abbildung 2.6 vor Augen hält.

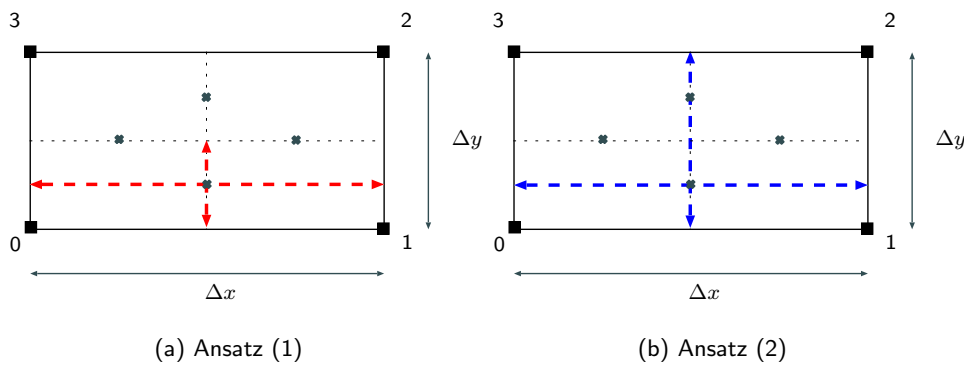


Abbildung 2.6: Zwei Ansätze für die Diffusionsapproximation

Im Ansatz (1) in Abbildung 2.6(a) wird der Laplace-Operator approximiert durch:

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2}(ip) &\approx \frac{\varphi^{x^+} - 2\varphi + \varphi^{x^-}}{\frac{1}{4}\Delta x^2} + \frac{\varphi^{y^+} - 2\varphi + \varphi^{y^-}}{\frac{1}{16}\Delta y^2} \\ &= \frac{\frac{3}{4}\Phi_1 + \frac{1}{4}\Phi_2 - 2\varphi + \frac{3}{4}\Phi_0 + \frac{1}{4}\Phi_3}{\frac{1}{4}\Delta x^2} + \frac{\frac{1}{4}(\Phi_0 + \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3) - 2\varphi + \frac{1}{2}(\Phi_0 + \Phi_1)}{\frac{1}{16}\Delta y^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{\Delta y^2} \right) \left(\frac{3}{8} (\Phi_0 + \Phi_1) + \frac{1}{8} (\Phi_2 + \Phi_3) - \varphi \right) \\
&= \underbrace{\left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{\Delta y^2} \right)}_{:= \frac{1}{L_d^2}} \left(\sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip) \Phi_k - \varphi \right).
\end{aligned}$$

Dagegen ergibt sich für den Ansatz (2) (siehe Abbildung 2.6(b)):

$$\begin{aligned}
\sum_i \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2}(ip) &\approx \frac{\varphi^{x^+} - 2\varphi + \varphi^{x^-}}{\frac{1}{4}\Delta x^2} + \frac{\frac{\varphi^{y^+} - \varphi}{\|y^+ - ip\|} - \frac{\varphi - \varphi^{y^-}}{\|ip - y^-\|}}{\frac{1}{2}\|y^+ - y^-\|} \\
&= \frac{\frac{3}{4}\Phi_1 + \frac{1}{4}\Phi_2 - 2\varphi + \frac{3}{4}\Phi_0 + \frac{1}{4}\Phi_3}{\frac{1}{4}\Delta x^2} + \frac{\frac{1}{2}(\Phi_2 + \Phi_3) - \varphi}{\frac{3}{8}\Delta y^2} - \frac{\varphi - \frac{1}{2}(\Phi_0 + \Phi_1)}{\frac{1}{8}\Delta y^2} \\
&= \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} \right) \left(\frac{3}{8} (\Phi_0 + \Phi_1) + \frac{1}{8} (\Phi_2 + \Phi_3) - \varphi \right) \\
&= \underbrace{\left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} \right)}_{:= \frac{1}{L_d^2}} \left(\sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip) \Phi_k - \varphi \right).
\end{aligned}$$

In der Dissertation von Raw [Raw85] wurde der Ansatz (2) verwendet, allerdings als Diffusionslänge:

$$L_d^2 = \left(\frac{1}{L_d^2} \right)^{-1} = \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} \right)^{-1} \approx \frac{1}{8}\Delta x^2 + \frac{3}{32}\Delta y^2 := L_{d_{Raw}}^2$$

gewählt. Diese Approximation wird bei Raw aus dem eindimensionalen Fall abgeleitet und resultiert daher nicht wie oben aus dem direkten Ansatz. Trotzdem läßt sich eine Analogie mittels einer „falschen“ Inversion herleiten. Allerdings spielt das für die Rechnung keine so große Rolle, da es dabei nur wichtig ist, daß der Einfluß der Stabilisierung mit der Gitterweite gegen Null geht. Viel entscheidender ist, eine korrekte Druckabhängigkeit für die Massenerhaltungsgleichung zu erhalten. Die ist von dieser Approximation bis auf einen Vorfaktor unabhängig. In Abschnitt 2.5.3 wird dies näher erläutert. Betrachtet man jedoch das Verhalten der Diffusionslängen bei gestreckten Elementen, stellt man einen deutlichen Unterschied fest. Sei $\sigma = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ das Seitenverhältnis und hält man Δx fest, so erhält man für $\sigma \rightarrow \infty$:

$$\frac{1}{L_{d_{Raw}}^2} = \frac{1}{\frac{1}{8}\Delta x^2 + \frac{3}{32}\Delta y^2} = \frac{32}{4\Delta x^2 + 3\Delta y^2} \xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \frac{8}{\Delta x^2}.$$

Für die Diffusionslänge aus Ansatz (2) erhält man dagegen:

$$\frac{1}{L_{d(2)}^2} = \frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} = \frac{32\sigma^2 + 24}{3\Delta x^2} \xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \infty.$$

Daraus folgt, der Ansatz nach Raw ist stabiler bei gestreckten Elementen, da man stets einen beschränkten Einfluß des Diffusionstermes erhält. Beim Ansatz (2) geht dieser Einfluß allerdings gegen Unendlich, und man erhält keine korrekte Kopplung mehr zwischen dem Druck

und den Geschwindigkeitskomponenten. Betrachtet man Gleichung (2.16) und läßt $\frac{1}{L_d^2}$ gegen Unendlich streben, dominiert der Diffusionsterm die Gleichung und der Einfluß der restlichen Terme verschwindet. Somit reduziert sich der komplette Stabilisierungsansatz zur Verwendung der reinen Ansatzfunktionen, und man verliert dadurch natürlich die Kopplung zwischen u und p . Um diesem Problem entgegenzuwirken, läßt sich eine geringe Modifikation des Ansatzes (2) einführen, die sich jedoch leichter anhand von Elementdaten wie Normalen und Volumina beschreiben läßt. Daher wird zunächst noch die Situation in drei Raumdimensionen (3d) besprochen, bevor die Verallgemeinerung mittels Elementdaten und die Modifikation dazu vorgestellt wird.

In 3d ergibt sich ein ganz ähnliches Problem. Betrachtet man wiederum den Ansatz (2) und den Ansatz nach Raw, erhält man die folgenden Ausdrücke:

$$\frac{1}{L_{d(2)}^2} = \frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} + \frac{32}{3\Delta z^2}$$

bzw.
$$\frac{1}{L_{dRaw}^2} = \frac{1}{\frac{1}{8}\Delta x^2 + \frac{3}{32}(\Delta y^2 + \Delta z^2)}.$$

Entsprechend ergibt sich auch in 3d für den Ansatz Raw eine Analogie mittels einer „falschen“ Inversion des Ansatzes (2):

$$\left(\frac{1}{L_{d(2)}^2}\right)^{-1} = \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} + \frac{32}{3\Delta z^2}\right)^{-1} \approx \frac{1}{8}\Delta x^2 + \frac{3}{32}(\Delta y^2 + \Delta z^2) =: L_{dRaw}^2.$$

Die Herleitung der entsprechenden Ausdrücke des Ansatzes (1) und (2) in 3d wird im Anhang A ausgeführt. Führt man die zwei Seitenverhältnisse $\sigma_1 = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ und $\sigma_2 = \frac{\Delta x}{\Delta z}$ ein, so kann man auch in 3d entsprechende Konvergenzaussagen machen:

$$\frac{1}{L_{dRaw}^2} = \frac{1}{\frac{1}{8}\Delta x^2 + \frac{3}{32}\Delta x^2\left(\frac{1}{\sigma_1^2} + \frac{1}{\sigma_2^2}\right)} \xrightarrow{\sigma_1, \sigma_2 \rightarrow \infty} \frac{8}{\Delta x^2}$$

bzw.
$$\frac{1}{L_{d(2)}^2} = \frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32\sigma_1^2}{3\Delta x^2} + \frac{32\sigma_2^2}{3\Delta x^2} \xrightarrow{\sigma_1, \sigma_2 \rightarrow \infty} \infty.$$

Der Ansatz (2) liefert somit für große Seitenverhältnisse keine Stabilisierung mehr. Dies kann allerdings durch eine Modifikation umgangen werden, die im Folgenden vorgestellt wird.

Zur Verallgemeinerung auf unstrukturierte Elemente werden die Diffusionslängen L_d^2 nun in Abhängigkeit von Elementdaten ausgedrückt, die auch schon für die Diskretisierung benötigt werden. Der Normalenvektor am Integrationspunkt ip_0 , skaliert mit der anliegenden Fläche, und das am Integrationspunkt anliegende Teilkontrollvolumen haben die Form:

$$\|\mathbf{n}_{ip_0}\| = \left\| \begin{pmatrix} \frac{\Delta y}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \right\| = \frac{\Delta y}{2} \quad \text{und} \quad |\text{SKV}_0| = \frac{\Delta x}{2} \frac{\Delta y}{2}.$$

Damit läßt sich die Diffusionslänge aus Ansatz (1) ausdrücken als:

$$\frac{1}{L_{d(1)}^2} = \frac{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}{|\text{SCV}_0|^2} + \frac{8}{\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}.$$

Entsprechend ergibt sich für den Ansatz (2):

$$(2.18) \quad \frac{1}{L_{d(2)}^2} = \frac{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}{|SCV_0|^2} + \frac{8}{3\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}$$

und für den Ansatz nach Raw:

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

Für alle anderen Integrationspunkte ergeben sich entsprechende Ausdrücke für die Diffusionslängen, die somit allgemeingültig eingesetzt werden können. In drei Raumdimensionen ergibt sich ebenfalls eine ähnliche Darstellung, die leicht hergeleitet werden kann:

$$\begin{aligned} \text{Ansatz (1):} \quad \frac{1}{L_{d(1)}^2} &= \frac{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}{|SCV_0|^2} + \frac{8d^2}{\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2} \\ \text{Ansatz (2):} \quad \frac{1}{L_{d(2)}^2} &= \frac{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2}{|SCV_0|^2} + \frac{8d^2}{3\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2} \\ \text{Raw:} \quad L_{d_{Raw}}^2 &= \frac{|SCV_0|^2}{2\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2} + \frac{3}{8}d^2 \end{aligned}$$

mit d der Diagonalen der zum Integrationspunkt gehörenden Teilkontrollvolumenfläche. Dies entspricht der Strecke vom Mittelpunkt der anliegenden Kante zum Schwerpunkt des Elements.

Um auf die Problematik der verschwindenden Stabilisierung durch den Ansatz (2) zurückzukommen, soll nun die Korrektur vorgestellt werden, die dafür sorgt, einen beschränkten Einfluß des Diffusionstermes und somit unter anderem einen gewissen Beitrag des Druckgradienten zu erhalten. Legt man die Darstellung in Gleichung (2.18) zugrunde, so kann durch Austausch von $\|\mathbf{n}_{ip_0}\|^2$ durch $\|\mathbf{n}_{\min}\|^2$ im ersten Term und durch $\|\mathbf{n}_{\text{avg}}\|^2$ im zweiten Term ein nach oben beschränkter Ausdruck gewonnen werden. Dabei ist $\|\mathbf{n}_{\min}\|^2 = \min_{\mathbf{n} \in \text{Element}} \|\mathbf{n}\|^2$ das Minimum aller Normen der zum Element gehörenden Normalen und das mittlere Maß aller Normalen $\|\mathbf{n}_{\text{avg}}\|^2$ ist durch $\frac{1}{n_{co}} \sum_{k=1}^{n_{co}} \|\mathbf{n}_k\|^2$ definiert. Dies ergibt folgenden Ausdruck:

$$(2.19) \quad \text{Ansatz (2)}_{\text{korr}} : \quad \frac{1}{L_{d(2)\text{korr}}^2} = \frac{2\|\mathbf{n}_{\min}\|^2}{|SCV|^2} + \frac{8}{3\|\mathbf{n}_{\text{avg}}\|^2}.$$

Für ein orthogonales Gitter ergibt sich für $\sigma \rightarrow \infty$:

$$\frac{1}{L_{d(2)\text{korr}}^2} = \frac{8}{\Delta x^2} + \frac{64}{3(\Delta x^2 + \Delta y^2)} = \frac{88 + 24\frac{1}{\sigma^2}}{3\Delta x^2(1 + \frac{1}{\sigma^2})} \xrightarrow{\sigma \rightarrow \infty} \frac{88}{3\Delta x^2}.$$

Dadurch wird der Beitrag des Diffusionsoperators nicht dominant, und der Stabilisierungsansatz liefert eine Abhängigkeit der Integrationspunktgeschwindigkeiten von den Druckwerten an den Gitterpunkten. Dies wird in Abschnitt 2.5.3 deutlicher werden, in dem genau beschrieben wird, welche Abhängigkeiten durch die Stabilisierung entstehen. In drei Raumdimensionen muß zusätzlich noch die Diagonale d durch $d_{\min} = \min_{d \in \text{Element}} d$ ersetzt werden, um einen beschränkten Ausdruck im Limit zu erhalten.

2.5.3 Resultat der Stabilisierung

Nun soll geklärt werden, inwiefern die Massenerhaltungs- bzw. Kontinuitätsgleichung durch die Stabilisierung modifiziert wird. Dazu schreibt man die Gleichung (2.17) wie folgt um:

$$u_i(ip) = \sum_{k=1}^{n_{co}} C_{U_i}(co_k) \cdot U_i^k + C_P \frac{\partial P}{\partial x_i}(ip) + C_f f_i + C_t u_i^o$$

mit einem Koeffizient C_P , der im wesentlichen die inverse Diagonale des zu lösenden Gleichungssystems enthält. Setzt man das Resultat in die Massenerhaltungsgleichung (2.15) ein, so erhält man qualitativ:

$$\sum_i u_i(ip) n_i(ip) = \sum_i \left(\sum_{k=1}^{n_{co}} C_{U_i}(co_k) \cdot U_i^k + C_f f_i + C_t u_i^o \right) n_i(ip) + C_P \underbrace{\sum_i \frac{\partial P}{\partial x_i}(ip) n_i(ip)}_{\text{diskreter Laplace}} .$$

D.h. man erhält als Eintrag in die Massenerhaltungsgleichung einen Term der Form

$$Ch^2 \Delta P,$$

wobei die Skalierung mit h^2 , einem Maß für die Gitterweite, durch den Diffusionsterm in der Stabilisierung entsteht. Eine Herleitung für diesen Faktor am Beispiel der Stokes-Gleichung soll nun zur Veranschaulichung dienen. Das verwendete Gitter sei äquidistant mit den Gitterabständen Δx in x-Richtung und Δy in y-Richtung. Somit läßt sich das Seitenverhältnis $\sigma = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ einführen, womit die Notation etwas kürzer wird.

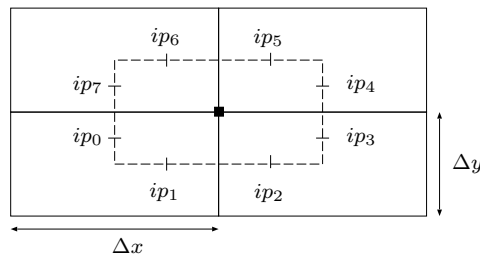


Abbildung 2.7: Knoten, sein Kontrollvolumen und die Bezeichnung der Integrationspunkte

Stokes

Der Ausgangspunkt ist die Finite Differenzen Form der Stokes-Gleichung (statt Gleichung (2.16)):

$$-\frac{\sum_k N_k U_i^k - u_i}{L_d^2} + \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k = 0 \Big|_{ip_l} .$$

Nach der Integrationspunktgeschwindigkeit u_i aufgelöst ergibt sich:

$$u_i = \sum_k N_k U_i^k - L_d^2 \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k \Big|_{ip_i}.$$

Setzt man nun diese Form in die Massenerhaltungsgleichung (2.15) ein, erhält man folgenden Differenzenstern für die Druckabhängigkeit an einem im Gebiet liegenden Gitterpunkt:

$$(2.20) \quad \begin{bmatrix} -\frac{1}{8} (L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 \sigma) & -\frac{1}{4} (-L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 3\sigma) & -\frac{1}{8} (L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 \sigma) \\ -\frac{1}{4} (L_{d_1}^2 \frac{3}{\sigma} - L_{d_2}^2 \sigma) & \frac{3}{2} (L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 \sigma) & -\frac{1}{4} (L_{d_1}^2 \frac{3}{\sigma} - L_{d_2}^2 \sigma) \\ -\frac{1}{8} (L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 \sigma) & -\frac{1}{4} (-L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 3\sigma) & -\frac{1}{8} (L_{d_1}^2 \frac{1}{\sigma} + L_{d_2}^2 \sigma) \end{bmatrix}_P$$

mit $L_{d_1}^2$ der Diffusionslänge, die von senkrechten Teilkontrollvolumenflächen stammt, und $L_{d_2}^2$ der Diffusionslänge von horizontalen Teilkontrollvolumenflächen. Für die Geschwindigkeitskomponenten erhält man die Sterne:

$$(2.21) \quad \frac{1}{2} \Delta y \begin{bmatrix} -\frac{1}{8} & 0 & \frac{1}{8} \\ -\frac{3}{4} & 0 & \frac{3}{4} \\ -\frac{1}{8} & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix}_U + \frac{1}{2} \Delta x \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & \frac{3}{4} & \frac{1}{8} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{8} & -\frac{3}{4} & -\frac{1}{8} \end{bmatrix}_V.$$

Diese entsprechen der einfachen Approximation der Divergenzbedingung:

$$\sum_{j=1}^d u_j(ip) n_j = \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^{n_{KP}} N_k(ip) U_j^k n_j.$$

Betrachtet man den Stern (2.20) und vergleicht ihn mit der Approximation des Laplace-Operators

$$\int_{\Omega_{KV}} -\Delta p \, dV = \int_{\partial\Omega_{KV}} -\nabla p \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_{SKVF} \sum_{k=1}^{n_{co}} \sum_{j=1}^d \frac{\partial N_k}{\partial x_j} P^k n_j,$$

die zu folgendem Stern führt:

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{8} (\frac{1}{\sigma} + \sigma) & -\frac{1}{4} (-\frac{1}{\sigma} + 3\sigma) & -\frac{1}{8} (\frac{1}{\sigma} + \sigma) \\ -\frac{1}{4} (\frac{3}{\sigma} - \sigma) & \frac{3}{2} (\frac{1}{\sigma} + \sigma) & -\frac{1}{4} (\frac{3}{\sigma} - \sigma) \\ -\frac{1}{8} (\frac{1}{\sigma} + \sigma) & -\frac{1}{4} (-\frac{1}{\sigma} + 3\sigma) & -\frac{1}{8} (\frac{1}{\sigma} + \sigma) \end{bmatrix},$$

stellt man fest, daß durch die Stabilisierung ein Term der Form

$$- \left(L_{d_1}^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + L_{d_2}^2 \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right)$$

in die Massenerhaltungsgleichung eingeführt wurde, also ein anisotroper Laplace, wie es schon am Anfang des Abschnitts erläutert wurde.

Für die Diffusionsapproximation aus Ansatz (1) erhält man dabei präziser

$$L_{d_1}^2 = \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{32\Delta x^2 + 8\Delta y^2} \quad \text{und} \quad L_{d_2}^2 = \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{8\Delta x^2 + 32\Delta y^2}$$

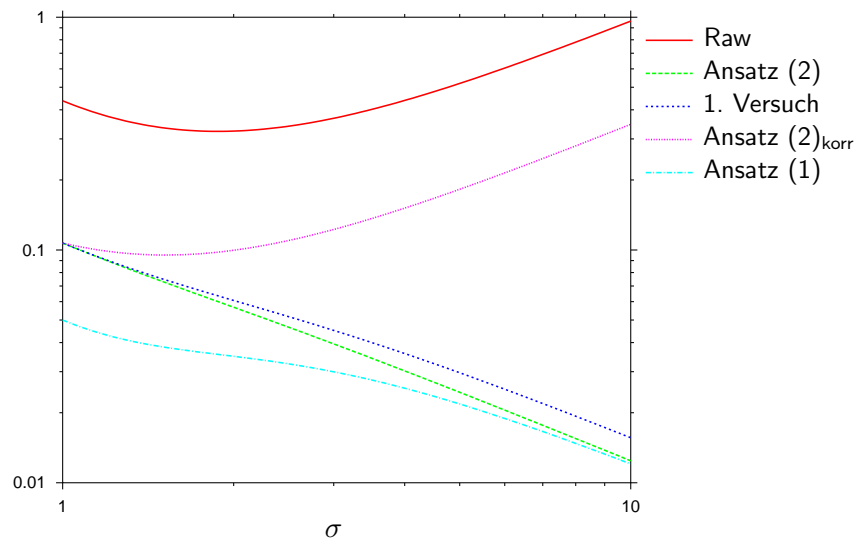
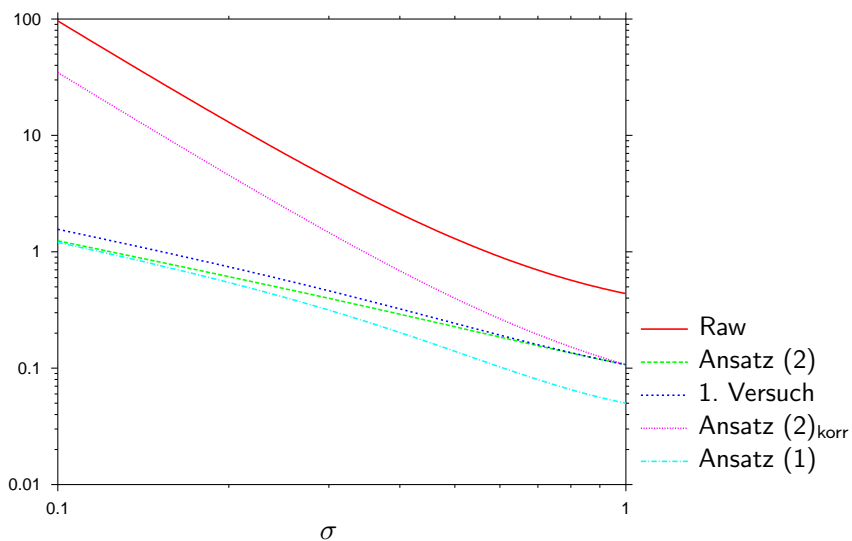
(a) $\sigma \geq 1$ (b) $\sigma < 1$

Abbildung 2.8: Stokes-System: Diagonaleinträge der Massenerhaltungsgleichung in 2d

mit $L_{d_1}^2$ und $L_{d_2}^2$ von der Ordnung $O(h^2)$ und h einem Maß für die Gitterweite abhängig von Δx und Δy . Legt man ein kartesisches Gitter zugrunde mit $h = \Delta x = \Delta y$, erhält man einen Beitrag der Form:

$$-\frac{1}{40}h^2\Delta p.$$

Setzt man dagegen die Approximation aus Ansatz (2) bzw. den Ansatz von Raw voraus, erhält

man für

$$\begin{aligned} \text{Ansatz (2): } L_{d_1}^2 &= \frac{3\Delta x^2 \Delta y^2}{32\Delta x^2 + 24\Delta y^2} & L_{d_2}^2 &= \frac{3\Delta x^2 \Delta y^2}{24\Delta x^2 + 32\Delta y^2} & \rightarrow & -\frac{3}{56}h^2 \Delta p \\ \text{bzw. Raw: } L_{d_1}^2 &= \frac{1}{8}\Delta x^2 + \frac{3}{32}\Delta y^2 & L_{d_2}^2 &= \frac{3}{32}\Delta x^2 + \frac{1}{8}\Delta y^2 & \rightarrow & -\frac{7}{32}h^2 \Delta p. \end{aligned}$$

Für anisotrope Elemente bekommt man durch die Ansätze von Raw, (1) und (2) bzw. der korrigierten Version (2.19) Diagonaleinträge in der Druckgleichung, die in Abbildung 2.8 über dem Seitenverhältnis $\sigma = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ dargestellt sind. Dabei sei Δx festgehalten und auf 1 normiert. Man erkennt sofort, daß der Ansatz von Raw einen um ein Vielfaches größeren Beitrag zur Diagonalen liefert und sowohl für $\sigma \rightarrow \infty$ als auch für $\sigma \rightarrow 0$ von Null weg beschränkt ist. Dagegen strebt der Ansatz (2) im ersten Fall gegen Null und liefert dadurch keine Stabilisierung mehr. Die korrigierte Version verhält sich ähnlich wie der Ansatz von Raw, allerdings um eine Größenordnung kleiner, wodurch die Korrektur in der Massenerhaltung und damit die Verletzung der Divergenzfreiheit geringer ausfällt. In der Abbildung ist zum Vergleich auch eingetragen (mit der Bezeichnung „1. Versuch“), wie sich der Ansatz (2) verhalten würde, wenn man nur die Korrektur im zweiten Term einführt, wie es am Ende des vorigen Abschnitts bei Gleichung (2.19) beschrieben wurde. Allerdings verbessert sich dadurch das Verhalten nur minimal und ist also in Bezug auf die Stabilisierung nicht ausreichend. Auf die Korrektur des Ansatzes (1) analog zur Korrektur von Ansatz (2) wurde verzichtet, da die beiden Verfahren bei steigendem bzw. fallendem Seitenverhältnis ein ähnliches Verhalten aufweisen. In den Simulationsergebnissen wird sich auch erweisen, daß die Version nach Ansatz (2) besser ist, auch wenn sich das in den Konstanten nicht unbedingt widerspiegelt (siehe Abschnitt 5.1.1).

Ganz entsprechende Resultate erhält man im dreidimensionalen Fall. Für ein kartesisches Gitter lauten die Beiträge in der Massenerhaltungsgleichung:

$$\begin{aligned} \text{Ansatz (1): } & -\frac{1}{72}h^2 \Delta p, \\ \text{Ansatz (2): } & -\frac{3}{88}h^2 \Delta p, \\ \text{bzw. Raw: } & -\frac{5}{16}h^2 \Delta p. \end{aligned}$$

Um den Verlust des Stabilisierungseffektes des Ansatzes (2) zu demonstrieren, wird in Abbildung 2.9 der Diagonalbeitrag der Massenerhaltungsgleichung:

$$\frac{3}{8}\Delta x \left[\frac{1}{\sigma_1 \sigma_2} L_{d_1}^2 + \frac{\sigma_1}{\sigma_2} L_{d_2}^2 + \frac{\sigma_2}{\sigma_1} L_{d_3}^2 \right]$$

dargestellt. $L_{d_1}^2$, $L_{d_2}^2$ und $L_{d_3}^2$ entsprechen den Diffusionslängen, die zu Teilkontrollvolumenflächen gehören, die orthogonal zur x-, y- bzw. z-Achse sind. Wiederum liefert der Ansatz nach Raw einen um ein Vielfaches höheren Diagonalterm gegenüber den Ansätzen nach (2) bzw. der korrigierten Version (2)_{korrr}. Auch das Verhalten des Ansatzes (2) für $\sigma_1, \sigma_2 \rightarrow \infty$ entspricht dem Verhalten des 2d-Falles. Die vorgestellte Modifikation resultiert in einem ganz ähnlichen Verhalten des Diagonalterms wie beim Raw-Ansatz und liefert dadurch ein gutartiges System.

Die Schlußfolgerung daraus ist also, daß die Größe der Störung in der Massenerhaltungsgleichung entscheidend davon abhängt, wie die Diffusion auf Integrationspunktebene behandelt wird.

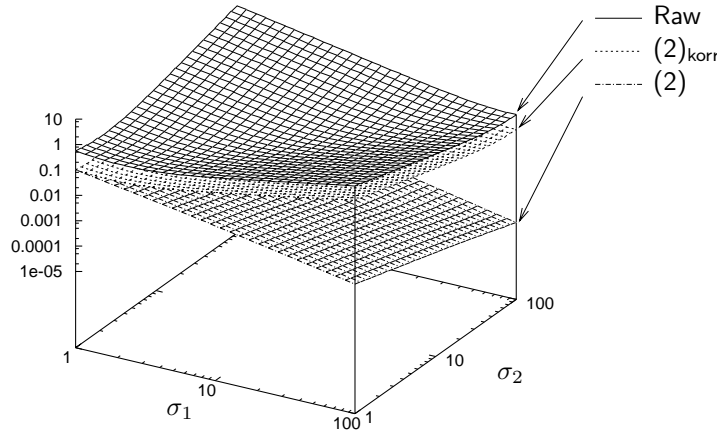


Abbildung 2.9: Stokes-System: Diagonaleinträge der Massenerhaltungsgleichung in 3d für $\sigma_{1,2} \geq 1$

Navier-Stokes

Betrachtet man nun den stationären Navier-Stokes-Fall mit einer uniformen Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und dem LPS-Aufwindverfahren zur Approximation des konvektiven Terms, erhält man folgende Gleichung für die Integrationspunktgeschwindigkeiten:

$$-\nu \frac{\sum_k N_k U_i^k - u_i}{L_d^2} + \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i - u_i^{up}}{L_c} + \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k = 0 \Big|_{ip_l}.$$

Da in diesem Fall das LPS-Verfahren angewandt wird, kann dieser Ansatz sofort nach u_i aufgelöst werden:

$$u_i = \left(\frac{\nu}{L_d^2} + \frac{1}{L_c} \right)^{-1} \left(\frac{\nu}{L_d^2} \sum_k N_k U_i^k + \frac{1}{L_c} u_i^{up} - \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k \right) \Big|_{ip_l}.$$

Damit ergibt sich folgender Stern für die Druckabhängigkeit:

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{8} (F_1 \frac{1}{\sigma} + F_2 \sigma) & -\frac{1}{4} (-F_1 \frac{1}{\sigma} + \frac{3}{2} (F_2 + F_3) \sigma) & -\frac{1}{8} (F_1 \frac{1}{\sigma} + F_3 \sigma) \\ -\frac{1}{4} (F_1 \frac{3}{\sigma} - F_2 \sigma) & \frac{3}{2} (F_1 \frac{1}{\sigma} + \frac{1}{2} (F_2 + F_3) \sigma) & -\frac{1}{4} (F_1 \frac{3}{\sigma} - F_3 \sigma) \\ -\frac{1}{8} (F_1 \frac{1}{\sigma} + F_2 \sigma) & -\frac{1}{4} (-F_1 \frac{1}{\sigma} + \frac{3}{2} (F_2 + F_3) \sigma) & -\frac{1}{8} (F_1 \frac{1}{\sigma} + F_3 \sigma) \end{bmatrix}_P$$

mit $F_1 = \left(\frac{\nu}{L_{d1}^2} + \frac{1}{L_{c1}} \right)^{-1}$, $F_2 = \left(\frac{\nu}{L_{d2}^2} + \frac{1}{L_{c2}} \right)^{-1}$, $F_3 = \left(\frac{\nu}{L_{d3}^2} + \frac{1}{L_{c3}} \right)^{-1}$ und $L_{c1} = \frac{1}{2} \Delta x$, $L_{c2} = \frac{3}{4} \Delta x$, $L_{c3} = \frac{1}{4} \Delta x$ und L_{di}^2 wie bereits oben beschrieben. Falls keine Konvektion vorliegt, erhält der Stern wiederum die Form aus Gleichung (2.20). D.h. es liegt ebenso wie zuvor eine Art Laplace-Operator für den Druck als Modifikation der Kontinuitätsgleichung vor. Für die

Geschwindigkeitskomponenten ergeben sich folgende Sterne, aufgespalten in den diffusiven Anteil U_d bzw. V_d und den konvektiven Beitrag U_c bzw. V_c :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}\Delta y \begin{bmatrix} -\frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d1}^2}F_1 & 0 & \frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d1}^2}F_1 \\ -\frac{3}{4}\frac{\nu}{L_{d1}^2}F_1 & 0 & \frac{3}{4}\frac{\nu}{L_{d1}^2}F_1 \\ -\frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d1}^2}F_1 & 0 & \frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d1}^2}F_1 \end{bmatrix}_{U_d} + \frac{1}{2}\Delta y \begin{bmatrix} -\frac{1}{4}\frac{1}{L_{c1}}F_1 & \frac{1}{4}\frac{1}{L_{c1}}F_1 & 0 \\ -\frac{3}{2}\frac{1}{L_{c1}}F_1 & \frac{3}{2}\frac{1}{L_{c1}}F_1 & 0 \\ -\frac{1}{4}\frac{1}{L_{c1}}F_1 & \frac{1}{4}\frac{1}{L_{c1}}F_1 & 0 \end{bmatrix}_{U_c}, \\ & \frac{1}{2}\Delta x \begin{bmatrix} \frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d2}^2}F_2 & \frac{3}{8}\frac{\nu}{L_{d2}^2}(F_2 + F_3) & \frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d2}^2}F_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d2}^2}F_2 & -\frac{3}{8}\frac{\nu}{L_{d2}^2}(F_2 + F_3) & -\frac{1}{8}\frac{\nu}{L_{d2}^2}F_3 \end{bmatrix}_{V_d} + \frac{1}{2}\Delta x \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\frac{1}{L_{c2}}F_2 & \frac{1}{2}\frac{1}{L_{c3}}F_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}\frac{1}{L_{c2}}F_2 & -\frac{1}{2}\frac{1}{L_{c3}}F_3 & 0 \end{bmatrix}_{V_c}. \end{aligned}$$

Daraus erkennt man, daß sich für die Geschwindigkeiten eine Mischung zwischen zentralen Differenzen (analog zu den Sternen (2.21)) und Aufwindifferenzen ergibt. Die zentralen Differenzen entstehen durch die Approximation des diffusiven Terms in der bestimmenden Gleichung für die Integrationspunktgeschwindigkeiten. Entsprechend erhält man durch den Aufwindansatz für den konvektiven Term auch einen Aufwindifferenz-Charakter des resultierenden Sterns. Bei verschwindender Konvektion erhält man einen reinen zentralen Differenzenansatz und umgekehrt bei verschwindender Diffusion ein reines Aufwindverfahren. Dabei reduziert sich allerdings die quadratische Abhängigkeit von der Gitterweite des Druckbeitrags zu qualitativ:

$$O(h)\Delta p.$$

2.5.4 Modifikation der Stabilisierung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde eine Art der Stabilisierung beschrieben, die auf Raw [Raw85] zurückgeht. Im weiteren Verlauf wird sie mit FIELDS (engl. Finite Element Differential Scheme) bezeichnet. Später entstand eine Modifikation, die von Karimian [KS95] eingeführt wurde. Diese ist für schwach kompressible Ansätze geeignet, bei denen die vorher beschriebene Stabilisierung zu Druckoszillationen geführt hatte. Die Basis war eine Finite Differenzen Darstellung der Impulsgleichung. Man kann die Gleichung auch als eine Fehlergleichung für den Impuls am Integrationspunkt betrachten. Dementsprechend wurde der Fehler der Massenerhaltung am Integrationspunkt nicht berücksichtigt. Hier setzte Karimian an und forderte, daß am Integrationspunkt nicht nur der Impulsfehler, sondern auch der Divergenzfehler berücksichtigt wird. Um dies zu erreichen, kombinierte er die beiden Gleichungen derart, daß

$$\underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial t} - \nu \Delta u_i + \sum_{j=1}^d u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - f_i}_{:= \dot{\epsilon}} = u_i \underbrace{\text{div}(\mathbf{u})}_{:= \ddot{\epsilon}}$$

an jedem Integrationspunkt erfüllt sein muß. Dabei bezeichne $\dot{\epsilon}$ den Impulsfehler und $\ddot{\epsilon}$ den Divergenzfehler. In Kurzform lautet die Gleichung also:

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

Dabei wird als Vereinfachung der Skalierungsfaktor des Divergenzfehlers aus der letzten Iterierten approximiert, d.h. $u_i \approx \tilde{u}_i$. Zur Approximation des Divergenzfehlers an jedem Integrationspunkt bestehen mehrere Möglichkeiten:

$$u_i \tilde{\varepsilon} \approx \tilde{u}_i \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_j^k.$$

Oder unter Ausnutzung, daß sich $u_i \operatorname{div}(\mathbf{u})$ auch schreiben läßt als:

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

erhält man die zweite Möglichkeit:

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

mit L_{dn} der Länge vom Aufwindpunkt y_{up} zum Abwindpunkt y_{dn} . Letztere Variante wird zur Unterscheidung im Folgenden mit FLOW bezeichnet.

Nach Anwendung der Finiten Differenzen lautet der Ansatz:

$$(2.22) \quad \frac{u_i - u_i^o}{\Delta t} - \nu \frac{\sum_k N_k U_i^k - u_i}{L_d^2} + \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i - u_i^{up}}{L_c} + \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k - \tilde{u}_i \sum_k \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_j^k = f_i$$

bzw.

$$(2.23) \quad \frac{u_i - u_i^o}{\Delta t} - \nu \frac{\sum_k N_k U_i^k - u_i}{L_d^2} + \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i - u_i^{up}}{L_c} + \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k - \|\tilde{\mathbf{u}}\| \frac{u_i^{dn} - u_i^{up}}{L_{dn}} + \sum_{j=1, j \neq i}^d \sum_{k=1}^{n_{co}} \left(\tilde{u}_j \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_i^k - \tilde{u}_i \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_j^k \right) = f_i.$$

Im Gegensatz zur Approximation aus (2.16) erhält man in diesen beiden Fällen eine Abhängigkeit der Geschwindigkeitskomponenten untereinander. Man kann also die Gleichungen umformen zu:

$$u_i(ip) = \sum_{k=1}^{n_{co}} \left(\sum_{j=1}^d C_{U_j}(co_k) \cdot U_j^k + C_P^i(co_k) \cdot P^k \right) + C_f f_i + C_t u_i^o.$$

Die Koeffizienten C_{U_j} , C_P^i , C_f und C_t sind analog wie in Gleichung (2.17) definiert. Durch den zusätzlichen Term $\operatorname{div}(\mathbf{u})$ im Ansatz für die Integrationspunktvariablen, erreicht man eine Abhängigkeit der u_i von allen Knotengeschwindigkeiten U_j , im Gegensatz zur vorherigen Abhängigkeit von U_i allein, vergleiche Gleichung (2.17). Betrachtet man für diesen Fall den

entstehenden Differenzenstern für den stationären Navier-Stokes-Fall mit der direkten Approximation des Divergenzfehlers, bekommt man zusätzliche Einträge der Form:

$$\begin{aligned}
& F_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{8\sigma} \tilde{u}_7 & -\frac{1}{8\sigma} (\tilde{u}_7 + \tilde{u}_4) & \frac{1}{8\sigma} \tilde{u}_4 \\ \frac{3}{8\sigma} (\tilde{u}_0 + \tilde{u}_7) & -\frac{3}{8\sigma} (\tilde{u}_0 + \tilde{u}_3 + \tilde{u}_7 + \tilde{u}_4) & \frac{3}{8\sigma} (\tilde{u}_3 + \tilde{u}_4) \\ \frac{1}{8\sigma} \tilde{u}_0 & -\frac{1}{8\sigma} (\tilde{u}_0 + \tilde{u}_3) & \frac{1}{8\sigma} \tilde{u}_3 \end{bmatrix}_U \\
& + F_2 \begin{bmatrix} -\frac{1}{4} \tilde{v}_6 & \frac{1}{4} \tilde{v}_6 & 0 \\ \frac{1}{4} (\tilde{v}_1 - \tilde{v}_6) & -\frac{1}{4} (\tilde{v}_1 - \tilde{v}_6) & 0 \\ \frac{1}{4} \tilde{v}_1 & -\frac{1}{4} \tilde{v}_1 & 0 \end{bmatrix}_U + F_3 \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{4} \tilde{v}_5 & -\frac{1}{4} \tilde{v}_5 \\ 0 & \frac{1}{4} (\tilde{v}_5 - \tilde{v}_2) & -\frac{1}{4} F_3 (\tilde{v}_5 - \tilde{v}_2) \\ 0 & -\frac{1}{4} \tilde{v}_2 & \frac{1}{4} \tilde{v}_2 \end{bmatrix}_U
\end{aligned}$$

für die u -Komponente der Geschwindigkeit und entsprechend für die v -Komponente:

$$\begin{aligned}
& F_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \tilde{u}_7 & \frac{1}{4} (\tilde{u}_7 - \tilde{u}_4) & -\frac{1}{4} \tilde{u}_4 \\ -\frac{1}{4} (\tilde{u}_0 + \tilde{u}_7) & -\frac{1}{4} (\tilde{u}_0 - \tilde{u}_3 + \tilde{u}_7 - \tilde{u}_4) & \frac{1}{4} (\tilde{u}_3 + \tilde{u}_4) \\ \frac{1}{4} \tilde{u}_0 & \frac{1}{4} (\tilde{u}_0 - \tilde{u}_3) & -\frac{1}{4} \tilde{u}_3 \end{bmatrix}_V \\
& + F_3 \begin{bmatrix} 0 & \frac{3}{8} \sigma \tilde{v}_5 & \frac{1}{8} \sigma \tilde{v}_5 \\ 0 & -\frac{3}{8} \sigma (\tilde{v}_2 + \tilde{v}_5) & -\frac{1}{8} \sigma (\tilde{v}_2 + \tilde{v}_5) \\ 0 & \frac{3}{8} \sigma \tilde{v}_2 & \frac{1}{8} \sigma \tilde{v}_2 \end{bmatrix}_V + F_2 \begin{bmatrix} \frac{1}{8} \sigma \tilde{v}_6 & \frac{3}{8} \sigma \tilde{v}_6 & 0 \\ -\frac{1}{8} \sigma (\tilde{v}_1 + \tilde{v}_6) & -\frac{3}{8} \sigma (\tilde{v}_1 + \tilde{v}_6) & 0 \\ \frac{1}{8} \sigma \tilde{v}_1 & \frac{3}{8} \sigma \tilde{v}_1 & 0 \end{bmatrix}_V.
\end{aligned}$$

Anhand numerischer Tests kann festgestellt werden, daß die FLOW-Version zum einen einen geringeren Massenerhaltungsfehler liefert und zum anderen v.a. bei stark wirbelbehafteten Strömungen, wie z.B. bei der Nischenströmung (siehe 5.1.2) oder dem Mixing-Layer-Problem (siehe 5.2.1), eine deutlich bessere nichtlineare Konvergenz aufweist. Auch wenn Modellterme hinzukommen, wie beim gemischten Modell aus Abschnitt 1.3.3, sind die Eigenschaften der Diskretisierung wesentlich stabiler als bei FIELDS. Dies äußert sich z.B. dadurch, daß beim Wechsel des Turbulenzmodelles die zeitliche Entwicklung bei der Variante mit FIELDS starke Unterschiede aufweist, wohingegen bei der Verwendung von FLOW die Entwicklung in der Zeit äquivalent ist. Ebenso kann bei FIELDS ein Fehlverhalten bezüglich des Energieverlaufs und der Entwicklung des Massenerhaltungsfehlers auftreten, was bei FLOW nicht der Fall ist (vergleiche z.B. Abbildungen 5.31 und 5.32).

2.5.5 Verhalten der Stabilisierungen im Grenzfall

Schließlich sollen noch die Grenzfälle der Stabilisierung bei $h \rightarrow 0$ und $\Delta t \rightarrow 0$ betrachtet werden. Hierzu wird Gleichung (2.16) umgeformt zu:

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\nu}{L_d^2} + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} \right) u_i = \frac{1}{\Delta t} u_i^o + \frac{\nu}{L_d^2} \sum_k N_k U_i^k + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} u_i^{up} - \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k + f_i$$

bzw.

$$\begin{aligned}
 u_i &= \frac{1}{\frac{1}{\Delta t} + \frac{\nu}{L_d^2} + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \left(\frac{1}{\Delta t} u_i^o + \frac{\nu}{L_d^2} \sum_k N_k U_i^k + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} u_i^{up} - \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k + f_i \right) \\
 &= \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \left(\frac{1}{\Delta t} u_i^o + \frac{\nu}{L_d^2} \sum_k N_k U_i^k + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} u_i^{up} - \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k + f_i \right).
 \end{aligned}$$

Dabei verhalten sich L_d^2 wie $O(h^2)$, L_c wie $O(h)$ und $\frac{\partial N_k}{\partial x_j}$ wie $O(\frac{1}{h})$. Daraus ergeben sich für den Fall $h \rightarrow 0$ folgende Limes.

$$\begin{aligned}
 \text{Zeitterm:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \frac{1}{\Delta t} u_i^o && \rightarrow 0 \\
 \text{Diffusion:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \frac{\nu}{L_d^2} \sum_k N_k U_i^k && \rightarrow 1 \\
 \text{Konvektion:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} u_i^{up} && \rightarrow 0 \\
 \text{Druckgradient:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k && \rightarrow 0 \\
 \text{Quell-, Modellterm:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} f_i && \rightarrow 0
 \end{aligned}$$

Das Resultat ist dadurch für $h \rightarrow 0$:

$$u_i = \sum_k N_k U_i^k,$$

d.h. im Grenzfall für unendlich feine Darstellung verschwindet die Störung der Massenerhaltungsgleichung, wie es im Kontinuierlichen der Fall ist. Das Verhalten der Stabilisierung für diesen Fall ist daher korrekt.

Für den Grenzfall unendlich feiner zeitlicher Auflösung $\Delta t \rightarrow 0$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \text{Zeitterm:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \frac{1}{\Delta t} u_i^o && \rightarrow 1 \\
 \text{Diffusion:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \frac{\nu}{L_d^2} \sum_k N_k U_i^k && \rightarrow 0 \\
 \text{Konvektion:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} u_i^{up} && \rightarrow 0 \\
 \text{Druckgradient:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k && \rightarrow 0 \\
 \text{Quell-, Modellterm:} & \quad \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \frac{\nu}{L_d^2} + \Delta t \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c}} f_i && \rightarrow 0
 \end{aligned}$$

und damit folgende Repräsentation der Integrationspunktgeschwindigkeit:

$$u_i = u_i^o = \sum_k N_k U_i^{k^o}.$$

Auch in diesem Grenzfall verhält sich der Stabilisierungsansatz korrekt, da bei unendlich kleiner Schrittweite die Strömung quasi keine Veränderung vornimmt und dadurch die Approximation der Integrationspunktgeschwindigkeit mittels der alten Geschwindigkeiten zum vorherigen Zeitpunkt ausreichend ist.

Ganz entsprechende Resultate ergeben sich auch für die zwei Modifikationen der FIELDS-Stabilisierung aus dem vorangegangenen Abschnitt. Die zusätzlichen Terme lassen sich analog zum Limit des Druckgradienten bzw. des Konvektionsterms einordnen und liefern daher für die Grenzwerte $h, \Delta t \rightarrow 0$ keinen Beitrag.

2.6 Spezielle Behandlung der Konvektion

Im konvektiven Term der diskretisierten Impulsgleichung blieb die Integrationspunktgeschwindigkeit ebenso unbestimmt wie in der Massenerhaltungsgleichung. Um diesen Term durch Knotenwerte auszudrücken, kann man verschiedene Methoden anwenden. Bevor diese beschrieben werden, wird zur Rekapitulation der Eintrag des konvektiven Terms in die Steifigkeitsmatrix bei voller Newton-Linearisierung (vergleiche Gleichung (2.14)) wiederholt:

$$\sum_{j=1}^d \tilde{u}_j n_j (u_i - \tilde{u}_i) + \sum_{j=1}^d \tilde{u}_i n_j (u_j - \tilde{u}_j).$$

Grundsätzlich wird die alte bzw. letzte Näherung der Integrationspunktgeschwindigkeit \tilde{u}_i mittels der Ansatzfunktionen dargestellt. Für die Integrationspunktgeschwindigkeit u_i werden nun verschiedene Methoden beschrieben, die sie auf Knotenwerte zurückführt.

Zentrale Differenzen

Für die u_i kann man unter anderem die Ansatzfunktionen einsetzen, um sie durch Knotenwerte auszudrücken:

$$u_i(ip) = \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip) U_i^k.$$

Das führt zu zentralen Differenzen, die für stark konvektionsdominante Fälle wegen der zu starken Gewichtung der Abwindknoten ungeeignet sind. Dies würde zu einer unphysikalischen Lösung führen.

Reines Aufwindverfahren

Statt zentraler Differenzen läßt sich auch eine Aufwindmethode wie in Abschnitt 2.5.1 beschrieben anwenden, die in folgender Form geschrieben werden kann:

$$(2.24) \quad u_i(ip) = u_i^{up}$$

mit geeignet aus Knotenwerten interpoliertem u_i^{up} . Diese Strategie ist für stark konvektionsdominante Fälle geeignet, jedoch ist die Qualität der Lösung enorm von der durch das Verfahren eingebrachten künstlichen Diffusion abhängig.

PAC-Aufwindverfahren

Eine dritte Methode ist, eine Darstellung mittels physikalischer Abhängigkeiten zu erzielen. Man bezeichnet dieses Verfahren dann als PAC-Aufwindverfahren (engl. Physical Advection Correction). Hierzu werden die durch die Gleichung (2.16) bestimmten Integrationspunktgeschwindigkeit $u_i(ip)$ verwendet. Diese Gleichung läßt sich auch interpretieren in der Form:

$$(2.25) \quad u_i(ip) = \tilde{u}_i^{up} + \delta u_i := \widetilde{u}_i^{up},$$

wodurch die Integrationspunktgeschwindigkeit mit einer verallgemeinerten Aufwindgeschwindigkeit \widetilde{u}_i^{up} in Beziehung gesetzt wird. Der Korrekturterm δu_i ist dabei von folgender Form:

$$\delta u_i = \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\nu}{L_d^2} + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} \right)^{-1} \left(\frac{u_i^o}{\Delta t} + \frac{\nu}{L_d^2} \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k U_i^k - \sum_{k=1}^{n_{co}} \frac{\partial N_k}{\partial x_i} P^k + f_i \right),$$

und

$$\tilde{u}_i^{up} = \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\nu}{L_d^2} + \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} \right)^{-1} \frac{\|\tilde{\mathbf{u}}\|}{L_c} u_i^{up}$$

entspricht einer skalierten Variante der Aufwindgeschwindigkeit aus (2.24). Dieser Ansatz ist eine Verallgemeinerung der schiefen Aufwindmethoden, die Raithby [Rai76] eingeführt hat:

$$u_i(ip) = u_i^{up} + \Delta u_i,$$

wobei Δu_i die Veränderung von u_i zwischen dem Integrationspunkt und dem Aufwindpunkt darstellt. In Gleichung (2.25) wurde allerdings nicht streng nach Konvektion und allen anderen Termen getrennt, bevor die Auflösung nach dem Integrationspunkt durchgeführt wurde. Trotzdem stellt dies ebenso eine Aufwindmethode dar, wie die von Raithby vorgestellte. Desweiteren erhöht sich die Ordnung der Approximation gegenüber einer reinen Aufwindmethode wie in Gleichung (2.24). Anschaulich erläutert wird das anhand eines Testproblems in Abschnitt 5.1.2. Dort erzielt das hier vorgestellte PAC-Aufwindverfahren eine deutlich sichtbar höhere Ordnung als das reine Aufwindverfahren.

Die Strategie dieser Methode ist sofort erkennbar. Man möchte einen möglichst durch die Gleichung lokal auf Elementebene gegebenen Einfluß zur Bestimmung der konvektierten Geschwindigkeit $u_i(ip)$ erhalten. Dies ist durch den Ansatz für die Stabilisierung bereits gegeben und läßt sich in diesem Zusammenhang als eine Methode unter Ausnutzung der physikalischen Eigenschaften interpretieren.

Peclet-Blending

Schließlich ist es oft auch ratsam, keine reinen zentralen Differenzen bzw. Aufwindmethoden zu verwenden, sondern zwischen beiden Extremen zu wichten. Dies ist insbesondere deswegen

ratsam, da innerhalb des Strömungsgebietes sowohl die Konvektion als auch die Diffusion dominieren kann. Im ersten Fall ist eine stärkere Wichtung hin zu Aufwindmethoden ratsam, wohingegen im zweiten Fall die zentralen Differenzen geeigneter sind. Man setzt also eine Konvexkombination zwischen beiden an, ganz ähnlich wie bei Raithby und Torrance [RT74]:

$$(2.26) \quad u_i(ip) = \omega u_i^{up} + (1 - \omega) \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip) U_i^k$$

mit u_i^{up} aus Gleichung (2.24) oder als die verallgemeinerte Aufwindgeschwindigkeit \widetilde{u}_i^{up} aus (2.25). Die Wichtung wird dabei rein lokal auf jedem Element und abhängig vom lokalen Verhältnis der Konvektion zur Diffusion bestimmt mit Hilfe der Peclet-Zahl:

$$\omega = \frac{Pe^2}{5 + Pe^2} \quad \text{mit} \quad Pe = \frac{u_n L}{\nu}$$

Zur Bestimmung der Peclet-Zahl gehen die normale Geschwindigkeit am Integrationspunkt als Referenzgeschwindigkeit und die Länge der am nächsten liegenden Kante als Referenzlänge ein. Die Bestimmung von ω erfolgt dabei wie in der Arbeit von Rentz-Reichert [RR96] beschrieben.

2.7 Randbedingungen

Die zur vollständigen Beschreibung des Randwertproblems notwendigen Randbedingungen werden in diesem Abschnitt vorgestellt. Hierfür benötigt man die Darstellung des Randkontrollvolumens und seiner Integrationspunkte, die durch nachfolgende Skizze verdeutlicht werden.

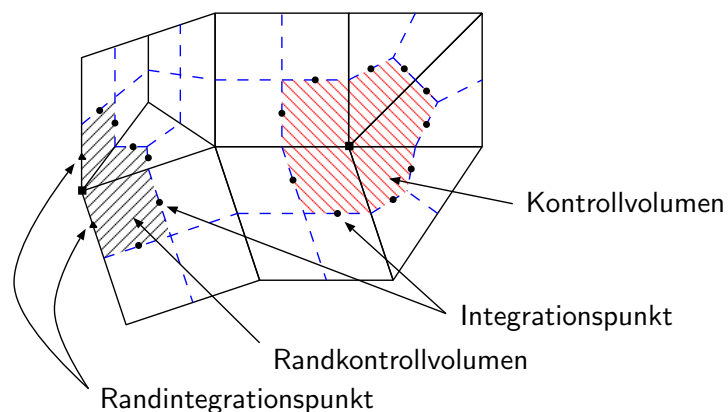


Abbildung 2.10: Randkontrollvolumen und dessen Integrationspunkte

Das Randkontrollvolumen besteht also aus einem „halben“ inneren Kontrollvolumen und besitzt zusätzliche Integrationspunkte am Rand, die Randintegrationspunkte. In der Behandlung des Randkontrollvolumens besteht kein Unterschied zu inneren Kontrollvolumen bis auf die Auswertungen an den Randintegrationspunkten (*bip*) selbstverständlich. Diese Auswertungen werden im Zuge der diversen Randbedingungen beschrieben, insofern sie dort benötigt werden.

Einflußrandbedingung

Einflußränder charakterisieren sich durch ein vorgegebenes Geschwindigkeitsprofil und somit auch durch einen vorgegebenen Massenfluß. Der Druckwert bleibt frei an diesen Rändern und stellt sich in Abhängigkeit von der Strömung und den Randbedingungen ein. Es wird also an diesem Rand die Geschwindigkeit \mathbf{u}_{in} vorgegeben. Dies entspricht einer Dirichlet-Randbedingung, wodurch am Einflußrand die Impulsgleichung am betreffenden Gitterpunkt ersetzt wird durch die entsprechenden Gleichungen für die Geschwindigkeitskomponenten mit den vorgegebenen Werten:

$$\mathbf{u}(co_k) = \mathbf{u}_{in}(co_k) \quad \forall co_k \in \text{Einflußrand.}$$

Die Kontinuitätsgleichung wird am Rand diskretisiert, indem der bekannte Massenfluß

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

eingesetzt wird. Dabei entfällt die sonst im Innern angewandte Stabilisierung, d.h. man bestimmt in diesem Falle keine Abhängigkeit der Randintegrationspunktgeschwindigkeiten von den Knotengeschwindigkeiten und Druckwerten. Die Folge ist eine Art Neumann-Randbedingung:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0,$$

da am Rand kein Beitrag für den Laplace-Operator hinzugefügt wird, der durch die Stabilisierung entsteht. Das steht im Widerspruch zu einem Druckgradienten ungleich Null, der am Einflußrand vorliegen muß. Allerdings ist dieser Effekt auf feineren Gittern immer weniger spürbar durch die verschwindende Stabilisierung und stellt beim Lösen des Gleichungssystems auch kein Problem dar. Daher wurde in dieser Arbeit auf eine Modifikation am Einflußrand verzichtet.

Ausflußrandbedingung

An Ausflußrändern soll die Strömung das Gebiet möglichst ungestört verlassen können. Unter anderem kann daher im inkompressiblen Fall der Druckwert Null vorgegeben werden. Dieser soll einen unveränderten oder unbeeinflussten Verlauf der Strömung nach dem Ausflußrand charakterisieren. Das setzt natürlich eine gleichmäßige Strömung voraus, die nicht immer vorliegt. Für den Ausflußrand gibt es also zwei Alternativen. Die eine Alternative erlaubt der Geschwindigkeit ein freies Ausfließen aus dem Gebiet mit gleichzeitiger Vorgabe der Dirichlet-Bedingung:

$$p(co_k) = 0 \quad \forall co_k \in \text{Ausflußrand}$$

an den Druck. Die parallele Ausströmung wird dadurch realisiert oder erzwungen, indem die Flüsse über die Rand-Teilkontrollvolumenflächen durch Projektion der Flüsse über entsprechende innere Teilkontrollvolumenflächen auf den Rand bestimmt werden. Jedoch ist diese Randbedingung für turbulente Strömungen nicht unbedingt geeignet, da sie einen konstanten Druckwert am gesamten Ausflußrand verlangt. Durch das Turbulenzmodell wird aber ein nicht konstanter Druck erzeugt. Daher wird die zweite Alternative als Ausflußrandbedingung im turbulenten Fall verwendet, die einen verschwindenden Mittelwert für den Druck fordert:

$$\int_{\text{Ausflußrand}} p \, dS = 0.$$

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

$$\int_{\partial_{KV}} pn_i dS = \sum_{SKVF} pn_i = \sum_{ip} p(ip)n_i + \sum_{\substack{bip \\ bip \notin \text{Ausflußrand}}} p(bip)n_i.$$

Alle anderen Flüsse in der Impulsgleichung werden analog zu den Approximationen an inneren Integrationspunkten am Randintegrationspunkt bip ausgewertet. Für den konvektiven Fluß werden zentrale Differenzen eingesetzt, da diese am Rand etwa einem Aufwindverfahren ähneln. Die Stabilisierung und damit auch das PAC-Aufwindverfahren läßt sich an diesem Rand ebensowenig wie am Einflußrand einsetzen, da keine geeignete Randintegrationspunktgeschwindigkeit vorliegt bzw. ein Mapping von inneren Integrationspunkten einen parallelen Ausfluß voraussetzen würde. Außerdem wird für den normalen diffusiven Fluß σ_n verlangt:

$$\sigma_n = 0 \quad \text{mit} \quad \sigma_n = \sum_{i,j=1}^d \nu \underbrace{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)}_{:=\sigma_{ij}} n_j n_i.$$

Das bedeutet für den tangentialen diffusiven Fluß:

$$\sum_{j=1}^d \sigma_{ij}^t n_j = \sum_{j=1}^d \left(\sigma_{ij} n_j - \sum_{l=1}^d \sigma_{jl} n_l n_j n_i \right),$$

woraus dann die Bedingung $\sigma_n = 0$ folgt. Diskret lautet die Bedingung:

$$\sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^{n_{co}} \left(\nu \left(\frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_i^k + \frac{\partial N_i}{\partial x_j} U_j^k \right) n_j - \sum_{l=1}^d \nu \left(\frac{\partial N_k}{\partial x_l} U_j^k + \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_l^k \right) n_l n_j n_i \right) \Bigg|_{bib}.$$

Symmetrierandbedingung

Symmetrieränder werden immer dann eingesetzt, wenn die Strömung in etwa eine Symmetrieachse aufweist und man das Rechengebiet somit verkleinern kann. Das bedeutet dann, daß der Fluß normal zum Rand identisch Null sein muß und die tangentialen viskosen Kräfte verschwinden, d.h.

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \wedge \quad \sigma_t = 0 \quad \text{mit} \quad \sigma_t = \sum_{i,j=1}^d \sigma_{ij} n_j t_i.$$

Am Symmetrierand muß also nur der Druckfluß und der normale viskose Fluß assembliert werden, da der konvektive Fluß verschwindet:

$$-\sigma_{jl} n_l n_i + p n_i.$$

Die diskrete Form dieser Randbedingung lautet:

$$\sum_{l=1}^d \sum_{k=1}^{n_{co}} \nu \left(\frac{\partial N_k}{\partial x_l} U_j^k + \frac{\partial N_k}{\partial x_j} U_l^k \right) n_l n_i + N_k P^k n_i \Bigg|_{bib}.$$

Der Massenfluß ist ebenfalls durch die Randbedingung zu Null vorgegeben und ist dadurch schon auf natürliche Art und Weise assembliert.

Wandrandbedingung

Da eine reibungsbehaftete Strömung vorliegt, muß die Geschwindigkeit am Rand der Wandgeschwindigkeit entsprechen, wobei diese im Normalfall Null ist:

$$\mathbf{u}(co_k) = \mathbf{u}_{\text{Wand}}(co_k) \quad \forall co_k \in \text{Wandrand.}$$

Diese Randbedingung entspricht wiederum einer Dirichlet-Bedingung an die Geschwindigkeit und wird analog zur Einflußrandbedingung behandelt. In diesem Falle ist die indirekte Neumann-Bedingung an den Druck sogar korrekt und verursacht dadurch keine Schwierigkeiten.

Periodische Randbedingung

Die periodischen Ränder stellen für einen unstrukturierten Ansatz, der dem hier verwendeten Softwarepaket *UG* zugrunde liegt, eine Herausforderung dar, da die zueinander gehörenden Punkte erst gefunden werden müssen. Es liegt keine Information vor, welche Lage jeder Gitterknoten relativ zu seinen Nachbarn besitzt. Bei einem strukturierten Programm ließe sich das noch durch Speichern eines Index oder Ähnlichem realisieren, aber bei einem völlig unstrukturierten Programm muß vor der Rechnung Vorarbeit geleistet werden, auch wenn das tatsächlich verwendete Gitter durchaus strukturiert ist. Wenn diese Arbeit erledigt ist, ist die Realisierung der periodischen Randbedingung denkbar einfach. Da alle Beiträge bereits aus dem Innern geliefert werden, muß an diesem Rand kein zusätzlicher Term approximiert werden. Außerdem stellt ein periodischer Rand keinen Rand im klassischen Sinne dar, sondern entspricht einem Teil eines unendlichen und sich immer wiederholenden Gebietes.

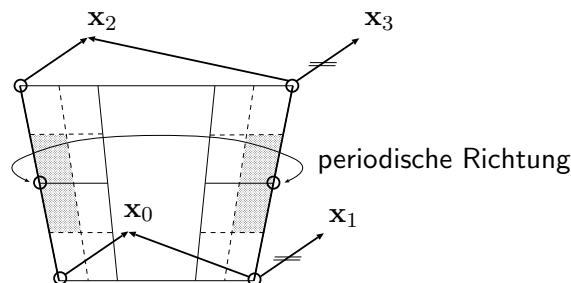


Abbildung 2.11: Periodische Identifizierung

Bevor das Konzept der periodischen Ränder beschrieben wird, soll kurz auf das Parallelisierungskonzept im Programmpaket *UG* eingegangen werden. Dieses beruht darauf, auf zwei oder mehr Prozessoren verteilte Objekte, die logisch identisch sind und insbesondere dieselbe Position im Rechengebiet besitzen, durch geeignete Routinen zu identifizieren/gleichzusetzen. Dabei werden auch Prioritäten verteilt, um später Daten konsistent zu machen oder Daten zu verteilen und dergleichen. Solche verteilten Objekte gelten nach der Identifikation als ein logisches Objekt. Dieses Konzept der Identifizierung von verteilten Objekten kann auf die periodischen Ränder übertragen werden. Auch hier liegen „verteilte“ Objekte vor, allerdings sind diese nicht unbedingt auf mehrere Prozessoren verteilt, sondern räumlich getrennt voneinander. Um sie trotzdem als ein Objekt zu erfassen, werden Identifizierungsroutinen benötigt, die

die räumlich getrennten Objekte als logisch identisch klassifizieren. Insbesondere wird dabei den periodischen Punkten ein gemeinsamer Datenplatz zugewiesen. Das Besondere an periodischen Gitterpunkten ist, daß der zugehörige Differenzenstern identisch zu entsprechenden inneren Punkten ist. Normalerweise ist der Differenzenstern an Randpunkten kleiner als im Innern, doch nicht am periodischen Rand. Es liegt dort statt den Randkontrollvolumen an anderen Rändern des Gebietes ein vollständiges Kontrollvolumen vor. In Abbildung 2.11 ist dies durch die schraffierten Bereiche angedeutet. Sie stellen jeweils ein Teilstück des periodischen Kontrollvolumens dar und werden „zusammengeklebt“ zu einem periodischen Randkontrollvolumen. Dadurch erhält der periodische Randpunkt Abhängigkeiten von inneren Punkten, die ursprünglich nur der gegenüberliegende Randpunkt besaß.

Periodische Identifizierung:

Man startet auf dem größten Gitter der Gitterhierarchie. Dort werden alle an einem periodischen Rand liegenden Punkte gesammelt, sortiert und anschließend als periodisch identifiziert. Insbesondere erhalten sie denselben Speicherplatz für die Unbekannten. In Abbildung 2.11 ist schematisch dargestellt, wie die zugehörigen Knoten einen gemeinsamen Datenspeicherplatz x erhalten. Die Zuordnung der zugehörigen Knoten geschieht über eine affine Abbildung, die die beiden Ränder aufeinander abbildet. Mit Hilfe dieser Abbildung kann entschieden werden, welche Punkte periodisch identifiziert werden müssen. Sobald das grobe Gitter identifiziert ist, können die feineren Gitter hierarchisch anhand der Information des groben Gitters ebenfalls periodisch identifiziert werden. Dies wird in Abbildung 2.12 verdeutlicht. Dabei bezeichnen Kreise grobe und Dreiecke feine Gitterknoten, die am periodischen Rand liegen.

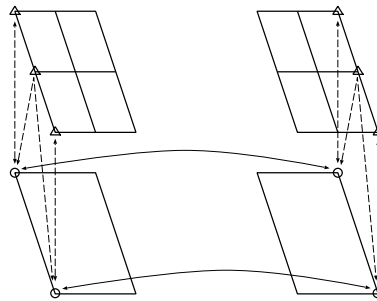


Abbildung 2.12: Hierarchische Identifizierung der periodischen Knoten

Im Programmpaket *UG* startet die Gitterhierarchie beim groben Gitter, die weiteren Ebenen entstehen durch sukzessive Verfeinerung. Dabei bekommen die neu entstandenen Elemente die Information, aus welchem groben Element sie hervorgegangen sind. Ebenso erhalten die neu entstandenen Knoten eine „Vaterrelation“. Jeder Knoten auf dem feinen Gitter besitzt entweder die gleiche geometrische Position wie ein grober Gitterknoten (sein Vaterknoten), oder er entstand durch Verfeinerung einer Kante (seiner Vaterkante) oder Seite (seiner Vaterseite). Dadurch kann man jedem feinen Gitterknoten einen bis maximal vier Vaterknoten auf dem groben Gitter zuordnen: sein Vaterknoten, oder die zwei an der Vaterkante anliegenden Knoten bzw. die zur Vaterseite gehörenden Knoten. Mit Hilfe dieser geometrischen Information kann man zu den algebraischen Daten der „Väter“ gehen und entscheiden, ob diese periodischer

Natur sind oder nicht. Nur für die mittels der affinen Abbildung als periodisch erkannten Gitterpunkte ist dieser Weg erforderlich. Die Kriterien zur periodischen Identifizierung auf dem feinen Gitter sind:

- ▶ Die Anzahl der Vaterknoten stimmt überein.
- ▶ Die affine Abbildung bildet die beiden Punkte aufeinander ab.
- ▶ Die algebraischen Daten der Väter stimmen überein, d.h. sie haben dieselben globalen Nummern.

Um die parallele Situation zu beschreiben, muß ganz allgemein die Datenverteilung auf mehrere Prozessoren im Programmpaket *UG* beschrieben werden. Diese ist elementbasiert, d.h. die Elemente werden den einzelnen Prozessoren zugewiesen. Diese Verteilung auf die Prozessoren ist eindeutig, allerdings wird für die in *UG* verwendeten iterativen Löser und für den Gitteradaptionsprozeß eine gewisse Überlappung am Prozessorrand benötigt. Die Nachbarn der am Prozessorrand liegenden Elemente werden daher als Kopien ebenfalls abgespeichert (horizontale Überlappung). Für das Mehrgitter wird desweiteren auch das Väterelement jedes Elementes benötigt, um den Gittertransfer ohne Kommunikation durchführen zu können (vertikale Überlappung). Durch die Lastverteilung der Elemente erhalten auch die zum Element gehörenden Knoten und algebraischen Daten eine Verteilung auf die einzelnen Prozessoren. Durch die mehrfache Speicherung der unterschiedlichen Daten ist die Zuteilung nicht eindeutig, und für die logisch identischen Objekte muß aus diesem Grund eine Hierarchie eingeführt werden. Hierfür werden den einzelnen Objekten Prioritäten zugewiesen, die den unterschiedlichen Charakter der Objekte auf den jeweiligen Prozessoren repräsentieren. Die verschiedenen Prioritäten sind:

- MasterType: Master, Border,
- GhostType: HGhost, VGhost, VHGhost.

In Bezug auf die exakte Definition der Prioritäten und die parallele Philosophie im Programmpaket *UG* sei auf die Arbeit von Lang [Lan01] verwiesen. Für das Verständnis der Situation bei periodischen Rändern ist es ausreichend, die unterschiedlichen Prioritäten nur kurz zu beschreiben. Jedes Element, das nicht als Kopie auf einem Prozessor vorliegt, erhält die Priorität Master, die horizontalen Kopien HGhost und die vertikalen entsprechend VGhost bzw. VHGhost, falls sie sowohl horizontale als auch vertikale Kopien sind. Davon abgeleitet werden die Prioritäten der zum Element gehörenden Objekte, insbesondere der Knoten und der algebraischen Daten. Jedes Objekt erhält die höchste Priorität, die den Elementen zugewiesen wurde, zu dem das Objekt gehört. Die einzige Einschränkung dieser Strategie der Prioritätenzuweisung erfolgt bei den Objekten der Master-Elemente. Bei einem Master-Element gehören die am Prozessorrand liegenden Daten oder Objekte zu mehreren Prozessoren und dadurch auch zu mehreren Master-Elementen. Da aber nur einer der logisch identischen, aber parallel verteilten Objekte auf einem Prozessor Master sein kann, erhalten alle anderen logisch Identischen die Priorität Border, um eine Unterscheidung einzuführen. In Bezug auf die periodischen Ränder sind zusätzliche Identifizierungsroutinen erforderlich, die diese speziellen periodisch identifizierten algebraischen Daten auch parallel identifizieren. Dadurch wird ein künstlicher Prozessorrand eingeführt, der sich allerdings nur auf die algebraischen Daten erstreckt. Die rein geometrische Lastverteilung erfolgt wie oben beschrieben ohne Modifikation im periodischen Fall. Diese erwähnten algebraischen Daten werden zusätzlich als ein parallel verteiltes Objekt definiert. In Abbildung 2.13 ist eine einfache Situation auf zwei Prozessoren skizziert, um den Sachverhalt zu verdeutlichen. Dabei sind sowohl die verteilten Objekte Element mit

Master-Priorität M und Ghost-Priorität G, als auch die periodischen algebraischen Datensätze mit entsprechenden Prioritäten Master (M) und Border (B) eingezeichnet. Die Zugehörigkeit der verteilten periodischen Daten ist durch gleiche Symbole angedeutet. Der periodische Rand stellt somit einen weiteren Prozessrand dar, ohne allerdings die zugehörigen Elemente zu verteilen. Daher bezieht sich der zusätzliche Prozessrand ausschließlich auf die periodisch verteilten algebraischen Objekte, wobei die Geometrie und somit Elemente und Knoten davon unbeeinträchtigt bleiben.

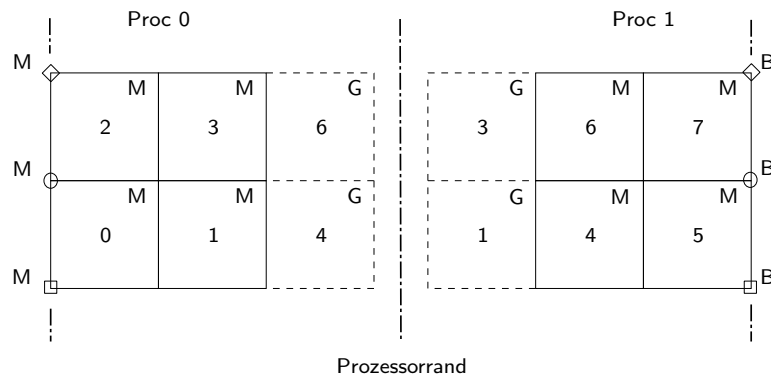


Abbildung 2.13: Verteilte Objekte im periodischen Fall

2.8 Zusammenfassung

Aufgrund der Länge dieses Kapitels sollen hier ganz kurz die wichtigsten Punkte rekapituliert werden. Auch in Bezug auf die numerischen Resultate und deren Diskussion, bietet sich eine kurze Auflistung der wichtigsten Begriffe an.

- **Zeitdiskretisierung:**

Es wurden diverse Zeitschrittverfahren vorgestellt, um mehrere Möglichkeiten zur Diskretisierung des Zeitgradienten aufzuzeigen. In den numerischen Simulationen wird jedoch nur auf das DIRK(2)-Verfahren aus Formel (2.5) Bezug genommen. Es wird nur dieses Verfahren betrachtet, da es sich als robust erwiesen hat und ein Verfahren zweiter Ordnung darstellt.

- **Ortsdiskretisierung und Stabilisierung:**

Als Diskretisierungsmethode wird das Finite Volumen Verfahren verwendet, mit nicht gestaffelter Anordnung der Unbekannten. Daraus folgt, daß das Gleichungssystem stabilisiert werden muß. Zwei Stabilisierungsverfahren wurden vorgestellt:

FIELDS aus Gleichung (2.16) und FLOW aus Gleichung (2.23).

Für die Bestimmung dieser Stabilisierungsansätze wurden Aufwindifferenzen und Diffusionsapproximationsansätze benötigt.

- **Aufwindifferenzen:**

Bei den numerischen Resultaten werden die beiden in Abschnitt 2.5.1 vorgestellten Aufwindifferenzen POS und LPS betrachtet. Aus zweierlei Gründen beschränken sich

die Untersuchungen auf diese beiden Verfahren. Zum einen haben sie per Konstruktion einen deutlich unterschiedlichen Charakter, und zum anderen sind die restlichen vorgestellten Aufwindverfahren sehr diffusiv. Die Approximation ist dadurch wesentlich schlechter, und auf einen Vergleich mit diesen Methoden wird daher verzichtet.

– **Diffusion:**

Die in Abschnitt 2.5.2 vorgestellten Ansätze zur Approximation des Diffusionsterms (1), (2), (2)_{korr} und Raw, bestimmen unter anderem die Größe des durch die Stabilisierung eingeführten Störterms in der Kontinuitätsgleichung. Sie sind daher für den Divergenzfehler von großer Bedeutung, wie es sich in Abschnitt 2.5.3 gezeigt hat.

• **Konvektion:**

Die Behandlung des Konvektionsterms in der Impulsgleichung wurde ausführlich vorgestellt. Zu den Aufwindmethoden gehören dabei das reine Aufwindverfahren aus Gleichung (2.24) und das PAC-Verfahren aus Gleichung (2.25). Die zentralen Differenzen werden dabei mit durch das vorgestellte Peclet-Blending bzw. Verschieben hin zu zentralen Differenzen abgedeckt. Dies ist eine sehr vorteilhafte Strategie, um lokal angepaßte Methoden für die Konvektion verwenden zu können.

3 Diskretisierung des Turbulenzmodells

Zur Diskretisierung der Turbulenzmodelle aus Abschnitt 1.3 ist es erforderlich, die Realisierung des Filter-Operators, der gemittelten Daten und die Berechnung der benötigten Tensoren zu beschreiben. Auch der Transport relevanter Daten auf grobe Gitter und Routinen, die zur Auswertung der Resultate benötigt werden, werden in den nun folgenden Abschnitten vorgestellt.

3.1 Diskrete Filteroperatoren

Die Realisierung der diskreten Filteroperatoren, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, bedarf einer näheren Untersuchung. Kontinuierlich sind sie wie folgt definiert (vergleiche die Definition aus (1.3)):

$$\bar{f}(x, t) = \int_{\Omega} G_{\Delta}(x, y) f(y, t) dV = \frac{1}{|\Omega_{\Delta}(x)|} \int_{\Omega_{\Delta}(x)} f(y, t) dV.$$

Sie sind vom Typ eines Box-Filters und daher sehr einfach auch auf unstrukturierten Gittern realisierbar. Es verbleibt also nur noch, den Trägerbereich zu definieren, um die diskrete Form des Filteroperators beschreiben zu können.

Bedenkt man, daß die zugrunde liegende Diskretisierung eine Finite Volumen Methode ist, und wählt man das zum Punkt x gehörende Kontrollvolumen $\Omega_{KV}(x)$ als Trägerbereich $\Omega_{\Delta}(x)$, kann man einen Box-Filter der Form

$$\bar{f}(x, t) = \frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \int_{\Omega_{KV}(x)} f(y, t) dV$$

definieren. Dadurch werden die Subskalen, also alle nicht mehr darstellbaren Strukturen, durch diesen Filter mit Filterweite $\Delta = |\Omega_{KV}|$ entfernt. Andererseits entspricht dies bis auf die Skalierung genau dem Ansatz des Finite Volumen Verfahrens, das die Gleichungen nur im schwachen Sinn erfüllt, siehe Gleichung (2.12). Das Finite Volumen Verfahren kann man auch interpretieren in der Form, daß die Gleichungen im Raum gemittelt gelöst werden, wie es für die Grobstruktursimulation notwendig ist. Somit wirkt das Diskretisierungsverfahren selbst als Filter und wird im Folgenden mit Gitterfilter bezeichnet.

Zur Verdeutlichung des Filtercharakters der Diskretisierung werden die Repräsentanten der relevanten Terme näher betrachtet: Zeitableitung, Ortsableitung und Quellterm. Diese drei decken alle in der Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichung auftauchenden Terme ab, so daß die Notation etwas verkürzt werden kann. Die Beiträge durch das Finite Volumen Verfahren (FV-Beiträge) werden jeweils gesondert bezeichnet. Wenn man annimmt, daß sich der

Lösungsvektor $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix}$ auf den Kontrollvolumina nicht zu stark verändert, kann man die Integration und Differentiation vertauschen, d.h. für die Zeitableitung ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \int_{\Omega_{KV}(x)} \frac{\partial f(y,t)}{\partial t} dV &= \frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{KV}(x)} f(y,t) dV}_{\text{FV-Beitrag}} \\ &= \frac{\partial \bar{f}}{\partial t}(x,t) \end{aligned}$$

und entsprechend für die Ortsableitungen

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \int_{\Omega_{KV}(x)} \frac{\partial f(y,t)}{\partial x_i} dV &= \frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{\Omega_{KV}(x)} f(y,t) dV \\ &= \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i}(x,t) \\ \text{bzw. ohne Vertauschung:} &= \frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \underbrace{\int_{\partial\Omega_{KV}(x)} f(y,t) n_i dS}_{\text{FV-Beitrag}}. \end{aligned}$$

Analog erhält man natürlich für den Kraft- oder Quellterm:

$$\frac{1}{|\Omega_{KV}(x)|} \underbrace{\int_{\Omega_{KV}(x)} f(y,t) dV}_{\text{FV-Beitrag}} = \bar{f}(x,t).$$

Daraus kann man sofort schließen, daß die Finite Volumen Methode, die in dieser Arbeit als Diskretisierung verwendet wird, selbst als Filter wirkt. Man interpretiert also die schwache Lösung als im Ort gemittelte Lösung, wodurch die Filterung der Daten zur Entfernung der Subskalen entfällt.

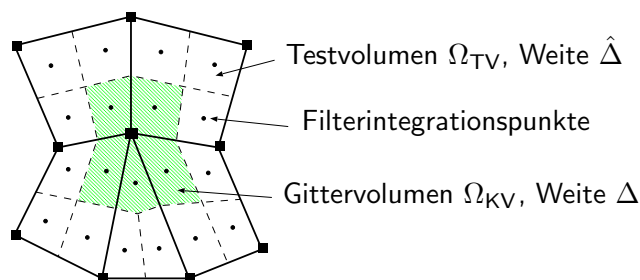


Abbildung 3.1: Trägerbereiche und Approximationspunkte der Mittelungsoperatoren: Gitter- und Testfilter; vergleiche auch Abbildung 1.1

Allerdings benötigt man für die dynamischen Modelle einen Filter mit einer größeren Filterweite $\hat{\Delta}$, wie es in Abschnitt 1.3.2 bei der Beschreibung des dynamischen Modells von Germano bereits erläutert wurde. Dieser Filter wird im weiteren Verlauf als Testfilter bezeichnet.

Für das dynamische Modell aus (1.6) und das gemischte Modell aus (1.11) werden zweifach gemittelte Größen benötigt. Die grobe Mittelung mit dem Testfilter G_{Δ} erfolgt durch Summation aller Beiträge, die mittels den Ansatzfunktionen an den Filterintegrationspunkten, wie in Abbildung 3.1 angedeutet, entstehen:

$$(3.1) \quad \hat{f} \approx \frac{1}{|\Omega_{TV}|} \sum_{j=1}^{n_{pts}^T} |\text{SKV}_j| \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(y_j) f(co_k).$$

Dabei bezeichne $|\Omega_{TV}|$ die Norm des Testvolumens (In Abbildung 3.1 entspricht das der gesamten Fläche der fünf Gitterelemente.). Die Anzahl der Filterintegrationspunkte y_j im Testvolumen wird mit n_{pts}^T bezeichnet, co_k sind wie gewohnt die n_{co} Knoten der zugehörigen Elemente (in der Abbildung durch schwarze Quadrate markiert), und $|\text{SKV}_j|$ ist das zum Filterintegrationspunkt y_j gehörende Volumen.

Für das gemischte Modell aus (1.11) werden dagegen mit dem Gitterfilter G_{Δ} zweifach gemittelte Daten für den Skalenähnlichkeitsterm \mathcal{L}_{ij}^m gebraucht. Um in diesem Fall überhaupt eine Aussage zu bekommen, d.h. einen echten Mittelungseffekt zu erhalten, wird über alle Integrationspunkte des Gittervolumens (dies entspricht der schraffierten Fläche) summiert, um das Volumenintegral zu approximieren:

$$(3.2) \quad \bar{f} \approx \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \sum_{j=1}^{n_{pts}^G} |\text{SKV}_j| \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(y_j) f(co_k).$$

$|\Omega_{KV}|$ bezeichnet die Norm des Gittervolumens, das mit dem Kontrollvolumen der Diskretisierung übereinstimmt und n_{pts}^G ist die Anzahl der Filterintegrationspunkte y_j des Gittervolumens.

3.2 Berechnung der Spannungstensoren

In Kapitel 1 wurden die Turbulenzmodelle ausführlich beschrieben. Für alle dort vorgestellten Modelle benötigt man zur Bestimmung des Modellparameters C gemittelte Spannungstensoren S_{ij} und deren Norm. In Übereinstimmung mit der Diskretisierung des Gleichungssystems werden diese mittels eines Finite Volumen Ansatzes berechnet:

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

Analog zur Diskretisierung wird die Integration über den Rand des Kontrollvolumens weiter aufgeteilt und liefert:

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

Somit kann auch die Norm des Spannungstensors $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$ leicht ausgerechnet werden. Für die dynamischen Modelle benötigt man auch einen mit G_{Δ} gemittelten Spannungstensor, der analog zu Formel (3.1) mit $f = \bar{S}_{ij}$ bestimmt wird.

3.3 Mittelung des Modellparameters

Die Bestimmung des Modellparameters C bei den dynamischen Modellen wurde in den Abschnitten 1.3.2 und 1.3.3 beschrieben. Jedoch kann der Parameter nach der Bestimmung stark im Ort und in der Zeit oszillieren. Um numerische Probleme zu vermeiden, wird er gemittelt, bevor er endgültig ins Modell eingesetzt wird. Dies stellt keine Einschränkung des dynamischen und lokalen Charakters des Parameters dar, da er trotzdem noch in Raum und Zeit variiert, allerdings etwas gedämpft. Zu seiner Bestimmung wurde ein Minimierungsansatz verwendet, daher dürfte die anschließende Mittelung des Parameters zur numerischen Stabilisierung keine Verschlechterung des Resultats zur Folge haben.

Mittelung im Raum

Um die Oszillationen im Raum zu dämpfen, wird der Parameter über dem Testvolumen gemittelt. Dies entspricht der Anwendung des Filteroperators G_{Δ} analog zu Formel (3.1):

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

Dadurch werden die starken Oszillationen gedämpft, aber trotzdem bleiben natürlich noch räumliche Variationen erhalten, die erst nach mehrmaliger Anwendung dieses Mittelungsoperators immer schwächer würden.

Mittelung in der Zeit

Der Modellparameter kann nicht nur im Raum, sondern auch in der Zeit sehr stark variieren. Entsprechend kann auch für diesen Fall eine Mittelung oder Dämpfung eingebracht werden. Dies erfolgt durch einen Tiefpassfilter, analog zu dem von Breuer [BR94] verwendeten, der alle hohen Frequenzen entfernt und nur die tiefen Frequenzen durchläßt:

$$C(x, t_{n+1}) = (1 - \varepsilon) C(x, t_n) + \varepsilon C(x, t_{n+1}) \quad \text{und } \varepsilon \in (0, 1).$$

Dadurch wird unter anderem verhindert, daß vor allem am Anfang der Simulation große zeitliche Veränderungen des Parameters dem Zeitschrittverfahren und seinen internen Lösern Schwierigkeiten bereiten. Typischerweise wird dabei $\varepsilon = 10^{-3}$ gewählt.

Beschränkung der turbulenten Viskosität

Ein weiteres Problem kann entstehen, falls die turbulente Viskosität (die negativ sein kann) die kinematische Viskosität ν auslöscht. Um dies zu verhindern, wird ν_t von $-\nu$ weg beschränkt:

$$\nu + \nu_t \geq \xi \nu \quad \text{mit } \xi \in (0, 1].$$

Das hat dann für den Modellparameter C zur Folge:

$$\begin{aligned} \nu_t &= C \Delta^2 |\bar{S}| \geq (\xi - 1) \nu \\ \Rightarrow C &\geq (\xi - 1) \frac{\nu}{\Delta^2 |\bar{S}|}. \end{aligned}$$

Die Division mit der Norm des Spannungstensors ist problemlos möglich, da nur im Falle einer von Null verschiedenen turbulenten Viskosität eine Beschränkung in obiger Form erfolgt, d.h. für den betrachteten Fall gilt $|\bar{S}| \neq 0$.

3.4 Transport der turbulenten Daten auf grobe Gitter

Innerhalb dieser Arbeit wird eine Gitterhierarchie, statt eines einzelnen Rechengitters verwendet. Insbesondere wird ein Mehrgitterverfahren zur Lösung des resultierenden Gleichungssystems eingesetzt, das später in Abschnitt 4.3.4 vorgestellt wird. Im Hinblick darauf muß natürlich beachtet werden, welche Veränderungen oder Anpassungen des Turbulenzmodells erforderlich sind. Bei der Modellbildung ist es v.a. wichtig, bezüglich der räumlichen Auflösung fein genug zu sein, um das Modell einsetzen zu können. Schließlich ist die Modellannahme, große Strukturen aufzulösen, also darstellen zu können, und nur die kleinen, nicht mehr darstellbaren Strukturen zu modellieren. Dies wäre aber auf gröberen Gittern definitiv nicht mehr der Fall. Aus diesem Grunde müssen in geeigneter Weise die Teile des Modells, die auf groben Gittern nicht adäquat bestimmt werden können (wie der Modellparameter C), vom feinsten Gitter zu den gröberen Gittern transportiert werden. Dieser Transport kann als Teil der Turbulenzmodellierung aufgefaßt werden und erfolgt unabhängig vom Lösungsalgorithmus, um die einzelnen Komponenten Diskretisierung, Turbulenzmodellierung und Lösung soweit wie möglich getrennt behandeln zu können.

Berücksichtigt man also, daß innerhalb des Mehrgitterverfahrens ein Grobgitteroperator aufgestellt werden muß, so hat das Auswirkungen auf die turbulente Viskosität ν_t aus Gleichung (1.13), die unter anderem auch den Modellparameter C enthält. Selbstverständlich leistet ν_t einen direkten Beitrag zum Grobgitteroperator und muß daher auf die gröberen Gitter transportiert werden. Als einfachste Möglichkeit wird zum Transport eine einfache Injektion eingesetzt, da kompliziertere Methoden unter Umständen eine zu starke Mittelung von ν_t zur Folge hätten. Bei der Injektion ist zumindest an gleichen Punkten im Raum auch dieselbe Viskosität gegeben, was bei anderen Transportroutinen nicht mehr der Fall wäre. Dadurch kann eine gewisse Konsistenz der einzelnen Ebenen sichergestellt werden. Es stellt sich auch die Frage, in welcher Weise die Viskosität transportiert werden sollte, sofern man nicht die Injektion anwendet. Je mehr Gitterebenen zum Einsatz kommen, desto weiter wird der Bereich, über den die turbulente Viskosität letztendlich gemittelt würde, egal welche Strategie dabei verwendet wird. Nur bei der Injektion kann man diesen Effekt verhindern, wodurch insgesamt das Turbulenzmodell auch auf dem groben Gitter im Ort variiert, so wie es auf der feinsten Ebene der Fall ist.

Außer der turbulenten Viskosität, kann der Skalenähnlichkeitsterm \mathcal{L}_{ij}^m in das Gleichungssystem eingehen. Wie bereits am Ende des Abschnitts 1.3.4 erwähnt, liefert dieser Term nur einen Beitrag zur rechten Seite und damit zum Defekt. Dieser muß nicht gesondert transportiert werden, da der Transport des Defekts bereits durch den Lösungsalgorithmus abgedeckt wird.

3.5 Auswertungsroutinen

3.5.1 Mittelung in periodische Richtungen

Bei turbulenten Simulationen besitzt die Strömung sehr häufig eine periodische Richtung. Zumindest nimmt man meistens eine Richtung als annähernd periodisch an. Dies geschieht hauptsächlich zur Reduktion des Rechenaufwandes. Wenn nun eine periodische Richtung vorgegeben ist, wird ein Integralmittel in diese Richtung gebildet, um die Daten von unterschiedlichen Gittern bzw. Verfahren vergleichen zu können. In zwei Raumdimensionen entspricht das Integralmittel einer Mittelung entlang einer Geraden, in drei Raumdimensionen ist es typischerweise eine Mittelung über eine Ebene. Daher wird auch im weiteren Verlauf statt von einem Integralmittel von einer Ebenenmittelung gesprochen, da man eine Hyperfläche (in 2d eine Gerade, in 3d eine Ebene) auch als Ebene bezeichnen kann. Zur Integration über eine solche Ebene E wird wiederum von der Mittelpunktsregel Gebrauch gemacht, um die Beiträge kleiner Flächenteilstücke e mit $E = \bigcup e$ zu approximieren:

$$(3.3) \quad \begin{aligned} \langle f \rangle &= \frac{1}{|E|} \int_E f(y) \, dS \\ &= \frac{1}{|E|} \sum_e \int_e f(y) \, dS \approx \frac{1}{|E|} \sum_e |e| f(MP(e)), \end{aligned}$$

wobei $MP(e)$ den Mittelpunkt von e bezeichne, und $|\cdot|$ sei das Maß der Fläche bzw. des Flächenteilstücks. Bei einem unstrukturierten Ansatz, wie in dem hier verwendeten Programmpaket *UG*, ist es schwierig festzustellen, welche Punkte zu welcher Ebene einen Beitrag liefern, da keine direkte Information über die Lage relativ zu den Nachbarn vorhanden ist. Diese Information je Punkt läßt sich mit einem Aufwand von $O(C(n_{KP})n_{KP})$ generieren, mit n_{KP} der Anzahl der Gitterpunkte. Die Konstante $C(n_{KP})$ kann jedoch sehr hoch sein. Um dieses Auswertungsverfahren trotzdem relativ einfach anwenden zu können, wurde zunächst eine kleine Einschränkung gemacht, indem die Datenpunkte entsprechend sortiert sein müssen. Wenn zu einer Ebene gehörende Punkte hintereinander liegen, läßt sich die Ebenenmittelung relativ einfach realisieren, v.a. mit einem wesentlich geringeren Aufwand als $O(C(n_{KP})n_{KP})$. Zunächst ist es dafür erforderlich, für jede Ebene einen Referenzpunkt x_{ref} zu suchen, mit dessen Hilfe die Zugehörigkeit zur jeweiligen Ebene bestimmt werden kann. Dabei wird die Hessesche Normalform für Ebenen zugrunde gelegt. In Algorithmus 3.1 ist die Vorgehensweise beschrieben. Man läßt eine geringe Abweichung der Normalen der Ebenenteilstücke bezüglich der gewünschten Normalenrichtung zu, indem eine geringe Toleranz, typischerweise $tol \approx 10^{-3}$, vorgegeben wird. Man fordert also nur:

$$|(y_k - x_{ref}) \cdot \mathbf{n}| \leq tol$$

für alle y_k der Ebene zum Referenzpunkt x_{ref} mit der Normalenrichtung \mathbf{n} , die von vorneherein durch die Problembeschreibung festgelegt ist. Nachdem die Liste der Referenzpunkte und das an jedem Gitterpunkt anliegende Teilstück der Ebene bestimmt sind, kann die Berechnung der Ebenenmittel durch einen einmaligen Durchlauf über alle Gitterpunkte abgearbeitet werden, d.h. der Aufwand ist dann $O(n_{KP})$. Der Ablauf dieser Routine ist in Algorithmus 3.2 dokumentiert.

Algorithmus 3.1 Vorbereitung der Ebenenmittelung

Require: tol (Toleranz für Ebenenzugehörigkeit)

Ensure: Punkte ebenenweise sortiert

$k = 1, N = 0$ (Zähler Gitterpunkte, Referenzpunkte)

$pos = y_k$

$pointlist[0] = pos$ (erster Referenzpunkt)

$N = N + 1$

while ($k \leq n_{KP}$) **do**

$k = k + 1$

if ($(y_k - pos) \cdot \mathbf{n} > tol$) **then**

$pos = y_k$ (neuer Referenzpunkt)

$pointlist[N] = pos$

$N = N + 1$

end if

end while

(Bestimmung der Flächenteilstücke)

for ($El = 0, \dots, n_{El}$) **do**

for ($Seite = 0, \dots, n_{Seiten}$) **do**

if ($n_S \cdot \mathbf{n} > 1 - tol$) **then**

for all ($y_k \in Seite$) **do**

$A(y_k) += \frac{1}{n_{KP}(Seite)} |Seite|$

end for

end if

end for

end for

Algorithmus 3.2 Ebenenmittelung

Require: $pointlist$ und tol (Liste der Referenzpunkte und Toleranz)

$k_{start} = 0$ (Startvektornummer)

for all ($x_{ref} \in pointlist$) **do**

$mean = area = 0$ (Mittelwert und Fläche der Ebene)

for all (y_k mit $k > k_{start}$) **do**

if ($|(x_{ref} - y_k, \mathbf{n})| < tol$) **then**

$mean += A(y_k) \cdot W(y_k)$ (Fläche · der zu mittelnde Wert)

$area += A(y_k)$

else

$k_{start} = k$ (Startvektor für nächste Ebene)

end if

end for

if ($area > 0$) **then**

$mean / = area$

end if

 PostProc (\Leftarrow Auswertungsroutinen, die die Ebenenmittelung benötigen)

end for

3.5.2 Wirbelstärkendirke

Für das „Mixing Layer“ Problem, das in Abschnitt 5.2.1 beschrieben wird, ist es üblich, zu Vergleichszwecken die Wirbelstärkendirke δ zu berechnen, siehe z.B. bei John [Joh02] oder Lesieur et al. [LSLRC88]. Sie wird hier definiert durch:

$$(3.4) \quad \delta := \frac{2U_\infty}{\max_y |\langle \omega_z \rangle(y, t)|},$$

wobei es sich bei $\langle \cdot \rangle$ um eine Ebenenmittelung wie im vorigen Abschnitt beschrieben handelt, und ω_z ist die z-Komponente der Wirbelstärke:

$$\omega = \nabla \times \mathbf{u}.$$

Dadurch läßt sich sowohl in zwei als auch drei Raumdimensionen die Wirbelstärkendirke bestimmen, die ein Maß für die Größe der vorhandenen Wirbel darstellt. In zwei Raumdimensionen ist also die Wirbelstärkendirke aussagekräftig. Für drei Raumdimensionen wird sie allerdings nur für die Initialisierung des Problems verwendet bzw. sie wird dazu benutzt, die Gleichungen dimensionslos zu schreiben, siehe Abschnitt 5.2.2. Da die Wirbelstärke durch Differentiation bestimmt wird, unterliegt sie natürlich auch einer starken Abhängigkeit von Fluktuationen im Vergleich zur Impulsdicke, die im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt wird.

Berechnet wird die Wirbelstärkendirke δ über die schwachen Gradienten des Strömungsfeldes:

$$\begin{aligned} \omega_z &\approx \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \int_{\Omega_{KV}} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2} dV \\ &= \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \int_{\partial\Omega_{KV}} u_2 n_1 - u_1 n_2 dS \\ &\approx \frac{1}{|\Omega_{KV}|} \sum_{j=1}^{n_{SKVF}} \sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip_j) (U_2^k n_1 + U_1^k n_2) \end{aligned}$$

und über die Ebenenmittelung nach Formel (3.3)

$$\langle \omega_z \rangle = \frac{1}{|E|} \sum_e |e| \omega_z(MP(e)) \approx \frac{1}{|E|} \sum_e |e| \sum_{k=1}^{n_{KP}} N_k(MP(e)) \omega_z(co_k).$$

Eingesetzt in Formel (3.4) liefert schließlich das Resultat.

3.5.3 Impulsdicke

Für dreidimensionale Strömungen vom Scherströmungscharakter wie das Mixing Layer Problem aus Abschnitt 5.2.2 ist es üblich, statt der Wirbelstärkendirke die Impulsdicke zu betrachten. Die Impulsdicke dieser Scherschicht wird aus folgender Beziehung abgeleitet (siehe z.B. [Lei90]):

$$(U_\infty - (-U_\infty))\mu(t) = \int_{y_0}^{y_1} (U_\infty - \langle u \rangle(t, y)) (\langle u \rangle(t, y) - U_\infty) dy.$$

Daraus resultiert der auch von Vreman et al. [VGK97] und Moser und Rogers [MR93] verwendete Ausdruck:

$$(3.5) \quad \mu(t) = \frac{1}{4} \int_{y_0}^{y_1} \left(1 - \left(\frac{\langle u \rangle(t, y)}{U_\infty} \right)^2 \right) dy.$$

Dabei sei y orthogonal zu den periodischen Richtungen, und y_0, y_1 charakterisieren den unteren bzw. oberen Rand des Gebietes an dem gilt: $u = \pm U_\infty$. Wiederum bezeichnet $\langle \cdot \rangle$ eine Ebenenmittelung in periodischer Richtung.

Die Impulsdicke quantifiziert die Aufweitung des mittleren Geschwindigkeitsprofils. Als integrale Größe unterliegt sie dabei weniger starken Störungen durch Fluktuationen, wie es bei der Wirbelstärke der Fall ist.

Die Berechnung der Impulsdicke erfolgt über die Ebenenmittelung des Geschwindigkeitsfeldes mit anschließender Approximation des Integrals. Dabei wird die Liste der Referenzpunkte abgelaufen, um mit Hilfe der Trapezregel das Integral zu bestimmen. Diese Routine wird eng mit der Ebenenmittelung verwoben, d.h. sobald ein Ebenenmittelwert bestimmt ist, kann schon ein Teil der Integration durchgeführt werden. Dies geschieht in Algorithmus 3.2 in der PostProc-Anweisung.

3.5.4 Totale kinetische Energie

Die totale kinetische Energie gemittelt über das zugrunde liegende Gebiet

$$(3.6) \quad E_{kin} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \bar{u}_i \bar{u}_i dV$$

wird auch zum Vergleich der Ergebnisse herangezogen. In der Regel ist bei turbulenten Prozessen ein Abklingverhalten der totalen kinetischen Energie zu beobachten, da Energie von großen zu kleinen Strukturen fließt und dadurch dissipiert wird. Man kann also diese Größe bestimmen, um z.B. auch ein Fehlverhalten des Turbulenzmodelles beobachten zu können bzw. auch unterschiedliche Modelle miteinander zu vergleichen. Berechnet wird diese Größe wie folgt:

$$E_{kin} \approx \frac{1}{|\Omega|} \sum_{k=1}^{n_{KP}} |KV| \sum_{i=1}^d U_i^k U_i^k.$$

3.5.5 Subskalendissipation

Eine weitere interessante Größe ist die Subskalendissipation gemittelt über das Gebiet

$$(3.7) \quad \bar{\varepsilon}_{SGS} := \int_{\Omega} \varepsilon_{SGS} dV = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^d \tau_{ij} \bar{S}_{ij} dV.$$

Sie repräsentiert den Energiefluß von den aufgelösten Skalen zu den Subskalen. Für das Smagorinsky-Modell ist diese Größe negativ und entzieht dadurch den aufgelösten Skalen Energie. Bei den dynamischen Modellen kann ε_{SGS} auch positiv werden und wird dann als

„backscatter“ bezeichnet, da Energie von den kleinen zu den großen Skalen fließt. Dies kann unter Umständen zu numerischen Schwierigkeiten führen. Aus diesem Grund erfolgt auch die Beschränkung der turbulenten Viskosität, wie es bereits zuvor bei der Mittelung des Modellparameters beschrieben wurde.

Die Berechnung erfolgt analog zur Energie:

$$\int_{\Omega} \varepsilon_{SGS} dV \approx \sum_{k=1}^{n_{KP}} |KV| \sum_{i,j=1}^d \tau_{ij}(co_k) \bar{S}_{ij}(co_k)$$

mit den an den Knoten vorliegenden Spannungstensoren \bar{S}_{ij} und den je nach Modell unterschiedlichen Modelltermen τ_{ij} .

4 Das Lösungsverfahren

In Kapitel 2 wurde sowohl die Zeitdiskretisierung als auch die Linearisierung des Systems bereits geschildert. Allerdings wurde es in dem dortigen Rahmen nur in Bezug auf die diskrete Darstellung beschrieben. In diesem Kapitel soll nun auf die Lösung des diskreten Systems eingegangen werden. Dafür wird zunächst die Zeititeration erläutert, die das nichtlineare Lösungsverfahren aufruft, das wiederum ein lineares Iterationsverfahren zur Lösung der linearen Teilprobleme verwendet. Aufgrund dieser Abhängigkeiten wird zuerst die Zeitschrittiteration, anschließend der nichtlineare Löser betrachtet und zum Schluß die linearen Iterationsverfahren vorgestellt.

4.1 Zeititeration

In Abschnitt 2.1 sind bereits die verschiedenen Arten der Zeitdiskretisierung vorgestellt worden. Diese beziehen sich allerdings immer nur auf einen Zeitschritt. Die Integration in der Zeit wird durch einen äußeren Algorithmus gesteuert, der unabhängig von den verschiedenen Diskretisierungen ist. Insgesamt ist das Lösungsverfahren für n_{max} Zeitschritte in Algorithmus 4.1 zusammengefaßt.

Algorithmus 4.1 Das Lösungsverfahren

Require: wähle ein Zeitschrittverfahren (siehe Abschnitt 2.1)
Require: $t_0, \Delta t_{min}, \Delta t_{max}$ (Anfangszeitpunkt, Schranken für Zeitschrittweite)
wähle Startzeitschrittweite Δt mit $\Delta t \in [\Delta t_{min}, \Delta t_{max}]$
for ($n = 0, \dots, n_{max} - 1$) **do**
 while ($\Delta t > 0$) **do** (neuer Zeitpunkt)
 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$
 Startwert für Zeitpunkt t_{n+1} ist $\mathbf{x}(t_n)$
 löse $\frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} + K(\mathbf{x}, t) - \mathbf{b} = 0 \Big|_{t_{n+1}}$ (Aufruf Nichtlinearer Löser)
 if (nichtlineares Verfahren divergent) **then**
 $\Delta t = 0.5\Delta t$ (halbiere Zeitschritt)
 if ($\Delta t < \Delta t_{min}$) **then**
 $\Delta t = \Delta t_{min}$
 end if
 else
 break
 end if
 end while
 wähle neue Zeitschrittweite Δt abhängig vom Lösungsverhalten
end for

Die Zeitschrittweitensteuerung hängt dabei vom Verhalten des nichtlinearen Löser ab. Wenn dieser weniger Schritte als erwartet benötigt, kann der Zeitschritt vergrößert werden. Falls allerdings mehr Schritte erforderlich sind, kann der nächste Zeitschritt entsprechend kleiner gewählt werden, um unnötige Zeitschritthalbierungen möglichst zu vermeiden. Das Kriterium zur Wahl des Zeitschritts lautet:

$$\Delta t^{neu} = \sqrt{\frac{n_{nl}}{n_{it}}} \Delta t,$$

abhängig von der Zahl der erwarteten Schritte n_{nl} und der Anzahl der tatsächlich durchgeführten Iterationsschritte n_{it} . Je weniger nichtlineare Schritte durchgeführt werden, desto größer wird mittels dieses Kriteriums der nächste Zeitschritt. Bei vielen nichtlinearen Iterationen dagegen kann der nächste Zeitschritt auch relativ klein gewählt werden. Wie gut oder schlecht diese Strategie funktioniert, hängt unter anderem von der Wahl der erwarteten Iterationsschritte n_{nl} ab. Diese können z.B. auch sehr groß gewählt werden, wenn man einen möglichst schnellen Übergang von kleinen zu großen Zeitschritten erzielen will. Das ist aber nur angebracht, wenn man die Entwicklung der Strömung genau kennt und nur am Anfang der Simulation Probleme durch zu große Zeitschrittweiten entstehen würden. Eine zu optimistische Wahl von n_{nl} dagegen kann zu sehr kleinen Zeitschritten führen und resultiert dadurch in langen Simulationszeiten. Zusätzlich wird die Zeitschrittweitensteuerung noch von den vorgegebenen Schranken für Δt beeinflusst, die zu kleine bzw. zu große Schrittweiten verhindern. Insgesamt ist natürlich für jedes Anwendungsproblem eventuell eine andere Kombination von n_{nl} und $\Delta t_{min/max}$ erforderlich. Ratsam ist auch, bei der Wahl des Zeitschritts die CFL-Zahl zu berücksichtigen. Es ist bei einem impliziten Ansatz wünschenswert, eine CFL-Zahl größer als 1 zu erhalten. Für kleinere CFL-Zahlen lassen sich explizite Ansätze anwenden, die dann im Normalfall deutlich schneller sind, da dafür – wenn überhaupt – nur eine reduzierte Matrix gelöst werden muß. Auch beim Speicherbedarf sind explizite Methoden deutlich sparsamer, daher sollte man dem Aufwand entsprechend tendenziell größere Zeitschrittweiten benützen.

Bei turbulenten Simulationen allerdings muß man berücksichtigen, daß durch die Zeitdiskretisierung eine zusätzliche Mittelung in der Zeit hinzukommt. Daher sollte man in diesem Fall auch keine zu großen CFL-Zahlen verwenden. Typischerweise werden dabei Werte zwischen 1 und maximal 8 verwendet, siehe Seite 116 bzw. 122. In 2d können eher große CFL-Zahlen erlaubt werden, aber die 3d-Probleme erfordern CFL-Zahlen näher bei 1, um die zeitliche Entwicklung der Strömung möglichst exakt nachzuvollziehen.

Beim Aufruf des nichtlinearen Löser geht die Art des Zeitschrittverfahrens ein, da der Defekt und die Massen- bzw. Steifigkeitsmatrix entsprechend skaliert werden müssen. Der nichtlineare Löser erhält dabei eine Matrix und die zugehörige rechte Seite, die Skalierungen werden jedoch vom äußeren Zeitschrittverfahren geliefert. Diese werden durch Faktoren s_m vor der Massenmatrix, die durch die Diskretisierung von $\frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t}$ entsteht, bzw. s_a vor der Steifigkeitsmatrix, die aus der diskreten Darstellung von $K(\mathbf{x}, t)$ resultiert, umgesetzt. Zusammengefaßt kann dies ausgedrückt werden durch

$$s_m \mathcal{T}^{n+1} + s_a \mathcal{K}^{n+1} - s_a \mathbf{b} = \mathcal{R},$$

wobei mit \mathcal{T}^{n+1} und \mathcal{K}^{n+1} die Massenmatrix bzw. Steifigkeitsmatrix jeweils zum Zeitpunkt t_{n+1} bezeichnet wird. Bei jedem Verfahren entsteht auch ein zusätzlicher Beitrag zur rechten Seite, der mit \mathcal{R} ausgedrückt wird. Die erwähnten Vorfaktoren s_m und s_a variieren je nach

	s_m	s_a	\mathcal{R}	
implizites Euler	1	Δt	\mathcal{T}^n	
Crank-Nicolson	1	$\frac{1}{2}\Delta t$	$\mathcal{T}^n - s_a(\mathcal{K}^n - \mathbf{b})$	
BDF(2)	1	$\frac{2}{3}\Delta t$	$\frac{4}{3}\mathcal{T}^n - \frac{1}{3}\mathcal{T}^{n-1}$	
DIRK(2)	1	$\alpha\Delta t$	\mathcal{T}^n	1. Teilschritt
	1	$\alpha\Delta t$	$\mathcal{T}^{n+\alpha} - (1 - 2\alpha)\Delta t(\mathcal{K}^{n+\alpha} - \mathbf{b})$	2. Teilschritt

Tabelle 4.1: Skalierungen der unterschiedlichen Zeitschrittverfahren

Verfahren. Für die in Abschnitt 2.1 beschriebenen Verfahren sind sie in Tabelle 4.1 aufgelistet. Analog zu den Bezeichnungen in Abschnitt 2.1 wird dabei das Kürzel n benützt, um die Auswertung zum alten Zeitpunkt $t_n = t_{n+1} - \Delta t$ auszudrücken. Entsprechend steht die Bezeichnung $n + \alpha$ für einen Zeitpunkt zwischen dem alten Zeitpunkt t_n und dem neuen Wert t_{n+1} .

4.2 Nichtlineare Iteration

In Abschnitt 2.2 wurde die Linearisierung des nichtlinearen Operators beschrieben. Hier soll dies noch einmal in allgemeinerer Form und für das System als Ganzes geschehen, d.h. es wird das Gesamtsystem linearisiert, auch wenn nur Teile davon nichtlinear sind. Doch das vereinfacht die Notation und das Verständnis.

Ausgangspunkt für die nichtlineare Iteration ist das Newton-Verfahren, wie z.B. im Buch von Deuffhard und Hohmann [DH91] beschrieben. Hier soll kurz das Vorgehen erläutert werden. Man entwickelt das System um eine Näherung $\tilde{\mathbf{x}}$ und bricht nach dem Term erster Ordnung ab:

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{x}}) + \frac{\partial \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{x}})}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) + O((\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}})^2)$$

für einen nichtlinearen Operator \mathcal{N} , der in diesem Falle definiert ist als (vergleiche Formel (2.1)):

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}) = \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial t} + K(\mathbf{x}, t) - \mathbf{b}$$

bzw. dessen schwache Formulierung aus Abschnitt 2.2. Dabei sind natürlich auch lineare Terme enthalten, die aber in der allgemeinen Darstellung keine Probleme bereiten.

Die Entwicklung des Operators kann auch mittels der Jacobi-Matrix \mathcal{J} mit

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{N}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$$

geschrieben werden. Damit lautet das Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems $\mathcal{N}(\mathbf{x}) = 0$:

$$\mathcal{J}(\tilde{\mathbf{x}}) \cdot \mathbf{c} = -\mathbf{d}$$

mit der Korrektur $\mathbf{c} = \mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}$ und dem Defekt $\mathbf{d} = \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{x}})$. Das nun rein lineare Gleichungssystem kann mit einem im nächsten Abschnitt vorgestellten linearen Iterationsverfahren gelöst werden.

Anschließend erfolgt die Aktualisierung der Lösung mittels der neu berechneten Korrektur \mathbf{c} :

$$\mathbf{x}^{neu} = \tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{c}.$$

Dabei besteht die Möglichkeit, eventuelle Konvergenzprobleme der nichtlinearen Iteration zu umgehen, indem nicht die volle Korrektur verwendet wird, sondern nur ein gedämpfter Teil:

$$\mathbf{x}^{neu} = \tilde{\mathbf{x}} + \lambda \mathbf{c}$$

mit $\lambda \in (0, 1]$ bzw. $\lambda \in (\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ und $0 < \lambda_{min} < \lambda_{max} \leq 1$. Der Dämpfungsparameter λ kann fest vorgegeben oder aber optimal durch eine Liniensuche bestimmt werden. Das Kriterium zur Wahl des Dämpfungsparameters ist die Fehlerreduktion r des mit der neuen Lösung berechneten Defektes \mathbf{d}^{neu} :

$$\mathbf{d}^{neu} = \mathcal{N}(\mathbf{x}^{neu}) = \frac{\partial T(\mathbf{x}^{neu})}{\partial t} + K(\mathbf{x}^{neu}) - \mathbf{b}$$

gegenüber dem alten Defekt \mathbf{d} :

$$r = \frac{\|\mathbf{d}^{neu}\|}{\|\mathbf{d}\|} < tol \quad \text{mit} \quad tol < 1$$

und $\|\cdot\|$ der Euklidischen Norm über den kompletten Unbekanntenvektor bzw. in diesem Falle den Defektvektor. Die Liniensuche wird mit der besten Korrektur $\lambda = \lambda_{max}$ gestartet. Der neue Defekt \mathbf{d}^{neu} wird berechnet und das Konvergenzverhalten überprüft. Falls die gewünschte Reduktion nicht erreicht wird, kann der Dämpfungsparameter sukzessive halbiert werden, bis entweder der minimale Dämpfungsparameter λ_{min} oder die gewünschte Reduktion erreicht wird. Dieses Verfahren ist eine sehr einfache Strategie, Probleme beim Lösen zu umgehen. Die Toleranz wird dabei zunächst vorgegeben, allerdings im Laufe der Iteration so gewählt, daß eine quadratische Konvergenz angenommen wird, d.h. die neue Toleranz für den nächsten Schritt ist:

$$tol^{neu} = \min\{tol, \frac{\|\mathbf{d}^{neu}\|^2}{\|\mathbf{d}\|^2}\}.$$

4.3 Lineare Iterationsverfahren

Zur Lösung des linearen Teilproblems, das innerhalb des nichtlinearen Verfahrens gelöst werden muß, können direkte Methoden aufgrund der Problemgröße in der Regel nicht angewandt werden. Daher kommen iterative Verfahren zum Zuge. Leider sind klassische Methoden wie Gauß-Seidel oder Jacobi viel zu langsam, um effektiv eingesetzt werden zu können. Sie kommen allenfalls als Glätter in Frage, wobei das äußere Verfahren effizient sein muß, d.h. möglichst von der Ordnung $O(n)$, mit n der Anzahl der Unbekannten.

Das zu lösende Problem ist von der Form:

$$(4.1) \quad \mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$$

mit einem Unbekanntenvektor $\mathbf{y} = (u_k, v_k, w_k, p_k)_{k=1, \dots, n_{KP}}^T$, der an jedem Gitterpunkt k die unbekanntes Geschwindigkeits- und Druckwerte enthält.

Unabhängig von der Tatsache, daß die zu lösende Matrix aus der Diskretisierung eines Systems partieller Differentialgleichungen entstand, soll zunächst ganz allgemein auf lineare Iterationsverfahren eingegangen werden. Hierfür ist natürlich Voraussetzung, daß die Matrix A regulär ist. Eine sehr umfassende Einführung in die Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme findet sich in dem Buch von Hackbusch [Hac93]. In Anlehnung an dessen Darstellung, erfolgen kurze Auszüge über wichtige Verfahren, die dem Verständnis dienen bzw. in dieser Arbeit verwendet werden.

4.3.1 Klassische Iterationsverfahren

Die klassischen Iterationsverfahren, wie z.B. Jacobi und Gauß-Seidel, leitet man mittels einer additiven Zerlegung der Matrix A her:

$$A = M - R.$$

Dabei sei M regulär und leicht invertierbar und R wird als Restmatrix bezeichnet. Daraus läßt sich dann leicht ein Iterationsverfahren konstruieren. Wegen

$$A\mathbf{y} = (M - R)\mathbf{y} = \mathbf{b}$$

folgt

$$M\mathbf{y} = R\mathbf{y} + \mathbf{b} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{y} = M^{-1}R\mathbf{y} + M^{-1}\mathbf{b}.$$

Daraus läßt sich sofort das Iterationsverfahren in der ersten Normalform ableiten:

$$\mathbf{y}^{i+1} = M^{-1}R\mathbf{y}^i + M^{-1}\mathbf{b}.$$

Diese kann ganz leicht unter Ausnutzung der Beziehung $R = M - A$ umgeformt werden in folgende Darstellung, die als zweite Normalform bezeichnet wird:

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - M^{-1}(A\mathbf{y}^i - \mathbf{b}) = \mathbf{y}^i - M^{-1}\mathbf{d}^i$$

mit dem Defekt $\mathbf{d}^i = A\mathbf{y}^i - \mathbf{b}$. In dieser Version kann man leicht erkennen, daß M^{-1} eine Näherung für A^{-1} darstellt. Aus diesem Grund bezeichnet man M^{-1} als angenäherte Inverse für die Matrix A . Zusätzlich kann daraus auch ein gedämpftes Verfahren abgeleitet werden mit einem skalaren Dämpfungsparameter λ :

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - \lambda M^{-1}\mathbf{d}^i.$$

Die gedämpfte Form der Iteration wird eingesetzt, um eventuell eine Konvergenz zu erreichen, falls das ungedämpfte Verfahren keinen Erfolg aufweist.

Nachdem nun die Form der Iteration festgelegt ist, bleibt noch die Wahl der Matrix M zu beschreiben. Dafür benötigt man eine weitere Aufspaltung der Ausgangsmatrix A in eine strikte untere Dreiecksmatrix L , eine Diagonalmatrix D und eine strikte obere Dreiecksmatrix U :

$$A = D - L - U.$$

Für das Jacobi-Verfahren wird M wie folgt gewählt:

$$M = D,$$

wodurch sich die (gedämpfte) Iterationsvorschrift ergibt zu:

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - \lambda D^{-1} \mathbf{d}^i.$$

Die Konvergenz dieses Verfahrens ist sehr langsam, dafür ist es sehr einfach zu verstehen und zu implementieren.

Im Falle der Gauß-Seidel-Iteration lautet die Wahl:

$$M = D - L.$$

Das führt zu folgender Vorschrift:

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - \lambda (D - L)^{-1} \mathbf{d}^i.$$

Die Konvergenz ist etwas schneller als beim Jacobi-Verfahren, da auch neue Werte berücksichtigt werden, sobald sie vorhanden sind. Allerdings ist die Konvergenz trotzdem noch relativ langsam. Hinzu kommt außerdem die Abhängigkeit von der Anordnung der Unbekannten, die beim Jacobi-Verfahren nicht entscheidend ist.

Aus dem Gauß-Seidel-Verfahren wird durch Extrapolation das SOR-Verfahren (engl. Successive Overrelaxation) konstruiert, vergleiche z.B. Barrett et al. [BBC⁺94]. Aufgrund des leichteren Verständnisses wird zunächst die Darstellung in komponentenweiser Notation gewählt:

$$y_j^{i+1} = \omega y_j^{i+1} \Big|_{\text{GS}} + (1 - \omega) y_j^i$$

mit dem Überrelaxationsparameter $\omega \in (0, 2)$ und der Gauß-Seidel-Iterierten $y_j^{i+1} \Big|_{\text{GS}}$. Insgesamt lautet damit das Verfahren analog zu den bisherigen Darstellungen:

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - \lambda \omega (D - \omega L)^{-1} \mathbf{d}^i.$$

Das entspricht der Wahl von M als

$$M = \frac{1}{\omega} D - L.$$

Die Konvergenz kann gegenüber dem Gauß-Seidel-Verfahren deutlich schneller sein, allerdings erfordert das die Wahl eines optimalen Relaxationsparameters, der in der Regel nur für einfache Fälle exakt bestimmt werden kann. Für die Wahl von $\omega = 1$ erhält man wiederum das Gauß-Seidel-Verfahren selbst. Für eine Überrelaxation bewirkt das Verfahren eine Schwächung der Diagonalen in M , wodurch im Allgemeinen eine Konvergenzbeschleunigung erreicht wird.

Die vorgestellten Verfahren liefern nur für stark diagonaldominante bzw. zumindest symmetrische Matrizen A eine gute Konvergenz oder hängen stark von der Wahl eines optimalen Parameters ab. Die Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichungen resultiert im allgemeinen Fall allerdings weder in einer stark diagonaldominanten noch in einer symmetrischen Matrix. Auch die Wahl eines optimalen Parameters ist in der Regel nicht möglich, daher wird das Augenmerk auf andere Verfahren gelegt, um als lineare Lösungsverfahren eingesetzt zu werden.

4.3.2 Unvollständige Dreieckszerlegungen

Im Gegensatz zu den bisher beschriebenen klassischen Iterationen, beruht die Idee der unvollständigen Dreieckszerlegung, auch ILU-Iteration genannt, auf einer multiplikativen Zerlegung der Matrix A , die durch eine Gauß-Elimination entsteht:

$$A = LU$$

mit einer unteren Dreiecksmatrix L und der zugehörigen oberen Dreiecksmatrix U . Dabei entstehen allerdings viele Nichtnull-Einträge in den Matrizen L und U , die in der Ausgangsmatrix A nicht enthalten waren. Dieses Phänomen des Auffüllens während der Elimination ist bei schwach besetzten Matrizen unerwünscht. Um das zu verhindern, wird keine exakte Zerlegung durchgeführt, sondern eine unvollständige, wodurch eine Restmatrix R eingeführt wird:

$$(4.2) \quad A = LU - R.$$

Das Kriterium für die unvollständige Zerlegung ist das Besetzungsmuster der Matrix A . Es werden nur solche Einträge in den beiden Zerlegungsmatrizen L und U zugelassen, die auch schon in A vorhanden sind, d.h. mit $L = (l_{ij})_{i,j=1}^n$, $U = (u_{ij})_{i,j=1}^n$ und $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ gilt:

$$\begin{aligned} l_{ij} &= 0 \text{ für } i < j & \wedge \quad a_{ij} \neq 0 &\Rightarrow l_{ij} \neq 0 \text{ (gegebenenfalls),} \\ u_{ij} &= 0 \text{ für } i > j & \wedge \quad a_{ij} \neq 0 &\Rightarrow u_{ij} \neq 0 \text{ (gegebenenfalls).} \end{aligned}$$

Entsprechend der Darstellung der klassischen Iterationsverfahren aus dem vorangegangenen Abschnitt wird für die ILU-Iteration die Matrix M gewählt als:

$$M = LU$$

mit der Definition von L und U aus (4.2). Das Iterationsverfahren lautet damit:

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - \lambda U^{-1} L^{-1} \mathbf{d}^i$$

bzw. es kann auch wie folgt formuliert werden mit der Diagonalmatrix $D = \text{diag}(U)$, der strikten oberen Dreiecksmatrix $U' = U - D$ und der strikten unteren Dreiecksmatrix $L' = (L - I)D$:

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - \lambda (D + U')^{-1} D (L' + D)^{-1} \mathbf{d}^i.$$

Eine Modifikation dieser ILU-Iteration kann erreicht werden, wenn die Restmatrix $R = (r_{ij})_{i,j=1}^n$ nicht völlig ignoriert wird, sondern die Beträge der bei der Zerlegung vernachlässigten Einträge skaliert mit einem Faktor β zur Diagonalen von U addiert werden. Das ergibt folgende Zerlegung der Matrix A :

$$A = M_\beta - R_\beta,$$

wobei M_β und R_β definiert sind durch (vergleiche [Wit89]):

$$M_\beta = (L' + D_\beta) D_\beta^{-1} (D_\beta + U') \quad \text{mit} \quad D_\beta = D + \text{diag}(\beta \sum_{j,j \neq i} |r_{ij}|),$$

$$R_\beta = M_\beta - M + R = L' (D_\beta^{-1} - D^{-1}) U' + D_\beta - D + R.$$

Diese Variante wird auch mit ILU_β bezeichnet und wurde unter anderem von Wittum [Wit89] eingeführt. Für $\beta = 0$ erhält man das normale ILU-Verfahren, auch als ILU_0 bezeichnet. Für die Wahl von $\beta = -1$ erhält man eine Verbesserung der Kondition, andererseits erreicht man für $\beta > 0$ eine Art Dämpfung, die förderlich für die Iteration sein kann.

4.3.3 Blockung

Das zu lösende Gleichungssystem aus (4.1) besteht aus Variablen unterschiedlicher Bedeutung, nämlich aus den Geschwindigkeitskomponenten und den Druckwerten. Diese gehören zu Gleichungen unterschiedlichen Typs und verhalten sich dementsprechend nicht äquivalent. Man muß also noch spezifizieren, wie diese Gleichungen angeordnet werden sollen, bevor sie gelöst werden, um ein praktikables Verfahren zu erhalten. Grundsätzlich ergeben sich zwei verschiedene Möglichkeiten der Anordnung:

- punktweise:
Die Unbekannten werden in n_{KP} Blöcke der Größe $d + 1$ angeordnet. Dies entspricht der Anordnung, wie sie bereits im Unbekanntenvektor \mathbf{y} am Anfang des Abschnitts angedeutet wurde:

$$(u_1, v_1, w_1, p_1, \dots, u_{n_{KP}}, v_{n_{KP}}, w_{n_{KP}}, p_{n_{KP}})^T.$$

Die dazugehörige Matrix besteht damit aus n_{KP} $((d + 1) \times (d + 1))$ -Blöcken, den Punktblöcken.

- gleichungsweise:
Die Unbekannten werden gleichungsweise sortiert, d.h. es entstehen $d + 1$ Blöcke der Größe n_{KP} . Der Lösungsvektor hat dann die Form:

$$(u_1, \dots, u_{n_{KP}}, v_1, \dots, v_{n_{KP}}, w_1, \dots, w_{n_{KP}}, p_1, \dots, p_{n_{KP}})^T,$$

und die Matrix besteht in diesem Fall aus $d + 1$ $(n_{KP} \times n_{KP})$ -Blöcken.

Die gleichungsweise Anordnung führt zu sehr großen Blöcken, die im Zuge der Iteration nur annäherungsweise invertiert werden können. Die punktweise Blockung dagegen resultiert in sehr kleinen Blöcken, die leicht und sogar exakt invertiert werden können. Dadurch lassen sich Verfahren aus dem skalaren Fall, wie sie in den vorangegangenen Unterabschnitten beschrieben wurden, ohne großen Aufwand auf Blockverfahren für Systeme erweitern. Die Zerlegung der Matrix A in die Matrizen L , D , U und R bezieht sich dann auf die Blockversion der skalaren Fälle. Man spricht dann von (strikten) unteren/oberen Blockdreiecksmatrizen und Blockdiagonalmatrizen bzw. von Block-Restmatrizen. Ansonsten kann die Iteration analog zum skalaren Pendant erfolgen, wobei auch die meisten Konvergenzaussagen übertragen werden können.

Aufgrund des geringeren Aufwands und der besseren Kopplung der unterschiedlichen Unbekannten untereinander, wird in dieser Arbeit die Punktblock-Anordnung gewählt. Die gleichungsweise Anordnung und verwandte Verfahren dazu wurden von Rentz-Reichert [RR96] behandelt und können dort nachgelesen werden. Im Folgenden wird darauf verzichtet, speziell auf die Punktblock-Strategie hinzuweisen, wenn die eingesetzten Verfahren genannt werden, da nur diese Anordnung in der Arbeit zum Einsatz kommt.

4.3.4 Das Mehrgitterverfahren

Analysen des Konvergenzverhaltens (siehe z.B. [Hac85], [Wes92]) der bisher beschriebenen Iterationsverfahren zeigen, daß die hochfrequenten Fehleranteile sehr schnell abklingen bzw. geglättet werden, die langwelligen jedoch so gut wie nicht reduziert werden können. Bei immer feiner werdenden Darstellungen, d.h. bei immer feiner werdenden Gittern, verschlimmert sich dieses Verhalten und resultiert in immer langsamerer Konvergenz. Andererseits bezieht sich die

Bezeichnung „hochfrequent“ bzw. „glatt“ auf die Darstellbarkeit des jeweiligen Gitters. Auf einem gröberen Gitter kann somit ein hochfrequenter Fehleranteil bezüglich des feineren Gitters nicht mehr dargestellt werden. Allerdings ist der zuvor langwellige Anteil auf dem groben Gitter darstellbar, wird aber nun zu einem Hochfrequenten bezüglich der gröberen Auflösung. Dort läßt sich dieser Fehleranteil mit den beschriebenen Verfahren schnell glätten, wohingegen der Langwellige weiterhin langsam reduziert wird. Verfolgt man die eben angesprochene Strategie weiter, erhält man eine ganze Hierarchie von Gittern, wobei die jeweiligen Fehleranteile auf dem dazu passenden Gitter behandelt werden. Die Idee dabei ist nun, wenige Iterationsschritte mit einem der beschriebenen Iterationsverfahren auszuführen, um dann den nun geglätteten Anteil auf ein gröberes Gitter zu transferieren. Dort kann er einfacher gelöst bzw. geglättet werden. Anschließend wird die Korrektur auf das feine Gitter übertragen, um die Gesamtlösung zu aktualisieren. Diese Strategie entspricht dem Zweigitterverfahren, das in der Regel aber nicht angewandt wird. Stattdessen wendet man dieses Verfahren rekursiv weiter an, bis man auf einem sehr groben Gitter angekommen ist, so daß das System exakt gelöst werden kann. Die Korrektur wird danach auf die nächsthöhere Ebene transportiert und kann dort nochmals geglättet werden. Das wird solange fortgesetzt, bis man wieder auf der höchsten Ebene angekommen ist. Dieses Verfahren bezeichnet man als Mehrgitterverfahren. Zusammengefaßt ist es in Algorithmus 4.2 dargestellt. Eine kurze Motivation für Mehrgitterverfahren kann auch in [Wit95] nachgelesen werden. Ausführlichere Darstellungen sind in den Büchern von Hackbusch [Hac85] und Wesseling [Wes92] enthalten.

Die einzelnen Komponenten, die für ein Mehrgitterverfahren benötigt werden, sind: Glättungsoperatoren zur Vor- und Nachglättung, Gittertransferoperatoren zur Restriktion und Prolongation und die Grobgitterkorrektur.

Algorithmus 4.2 Mehrgitterverfahren $MGV(l, \mathbf{y}_l, \mathbf{b}_l)$

```

if ( $l = 0$ ) then
     $\mathbf{y}_0 = A_0^{-1} \mathbf{b}_0$  (exakte Lösung)
else
     $\mathbf{y}_l = S^{\nu_1}(\mathbf{y}_l, \mathbf{b}_l)$  (Vorglättung)
     $\mathbf{d}_l = \mathbf{b}_l - A_l \mathbf{y}_l$  (neuer Defekt)
     $\mathbf{d}_{l-1} = R_l^{l-1} \mathbf{d}_l$  (Restriktion)
     $\mathbf{c}_{l-1} = 0$ 
    for ( $i = 1, \dots, \gamma$ ) do
         $MGV(l-1, \mathbf{c}_{l-1}, \mathbf{d}_{l-1})$  (Grogitterlösung)
    end for
     $\mathbf{y}_l = \mathbf{y}_l + P_{l-1}^l \mathbf{c}_{l-1}$  (Prolongation)
     $\mathbf{y}_l = S^{\nu_1}(\mathbf{y}_l, \mathbf{b}_l)$  (Nachglättung)
end if

```

Gitterhierarchie

Zur Anwendung eines Mehrgitterverfahrens wird eine Gitterhierarchie benötigt. Ein Gitter der Ebene l mit $l = 1, \dots, l_{\max}$ wird mit \mathcal{T}_l bezeichnet. Es definiert eine zulässige Triangulierung des zugrunde liegenden Rechengebietes Ω . Dabei wird vorausgesetzt, daß die Gitter geschachtelt sind in folgendem Sinne: Die feineren Gitter sind aus den gröberen Gittern entstanden und

aufgrund dessen ineinander verschachtelt. Ausnahme sind reine Randelemente, die durch die Randanpassung diese Schachtelung verletzen. Zur Verdeutlichung dient Abbildung 4.1.

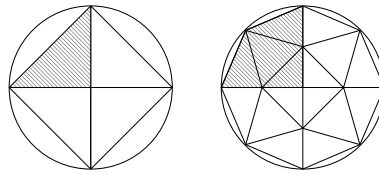


Abbildung 4.1: Randanpassung bei Verfeinerung

Im linken Teil des Bildes ist das grobe Gitter angedeutet. Ein Element ist hervorgehoben, dessen Verfeinerung im rechten Teil ebenfalls markiert ist. Daraus erkennt man sofort, daß die Vereinigung der Feingitterelemente größer als das grobe Element ist. Allerdings wird die Geometrie durch diese Strategie und damit das Rechenggebiet als solches wesentlich besser aufgelöst als durch das grobe Gitter selbst. Da das Rechenggebiet und dessen Rand eine entscheidende Rolle während der Rechnung spielen, ist es natürlich wünschenswert, diese Information nicht zu vernachlässigen. Der Fehler durch die Verletzung dieser Schachtelung wird bei Verfeinerung auch immer kleiner, so daß der Effekt immer weniger zum Tragen kommt. Insbesondere tritt das Problem natürlich nur bei gekrümmten Rändern auf. Viel problematischer als das oben skizzierte konvexe Gebiet sind die konkaven Ränder, da dabei die Elemente teilweise (oder sogar größtenteils) außerhalb des Gebietes liegen können und dadurch die Massenerhaltung verletzen. Doch auch hier gilt, sofern das grobe Gitter (das nicht zu grob sein darf) die Geometrie einigermaßen abbilden kann, ist die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens nicht gefährdet.

Glättungsoperatoren

Bevor der Defekt mittels der Restriktion auf das gröbere Gitter übertragen wird, erfolgt zunächst eine Glättung, um die hochfrequenten Fehleranteile zu dämpfen. Entsprechend wird nach der Prolongation die Korrektur geglättet, um wiederum die hochfrequenten Anteile zu behandeln. Zu diesem Zweck werden lineare Iterationsverfahren, wie sie bereits zuvor beschrieben wurden, eingesetzt. Speziell für die Navier-Stokes Gleichungen, die zu einem unsymmetrischen und indefiniten System führen, kann man oft nur die ILU-Iteration verwenden, da die anderen Verfahren zumeist divergent sind. Schon in den Arbeiten von Rentz-Reichert [RR96], Hurdeman [Huu99] und Metzner [Met03], die ähnliche Diskretisierungsverfahren einsetzten, wurde das ILU_β -Verfahren als wesentlich robuster gegenüber anderen Glättungsverfahren erachtet. Prinzipiell kann zur Vor- und Nachglättung jeweils ein anderer Operator bzw. ein anderes Iterationsverfahren eingesetzt werden, jedoch wird in dieser Arbeit stets dasselbe Verfahren verwendet. Die Zahl der Glättungsschritte zur Vor- und Nachglättung ν_1 und ν_2 kann natürlich auch variieren. In den betrachteten Fällen werden sie jedoch auch gleich gewählt.

Restriktion und Prolongation

Durch die Konstruktion der Gitter \mathcal{T}_l durch sukzessive Verfeinerung und die Verwendung konformer Ansatzräume bestehend aus stückweise linearen Ansatzfunktionen, kann im Folgenden

davon ausgegangen werden, daß für die zugehörigen Ansatzräume gilt (vergleiche Kapitel 2, Seite 20 und die Bezeichnungen dort):

$$W_{l-1} \subset W_l.$$

Diese Beziehung gilt für alle Elemente der Gitter \mathcal{T}_l bis auf Randelemente bei gekrümmten Rändern, wie es bereits bei der Diskussion der Gitterhierarchie angedeutet wurde.

Jeder Vektor $\mathbf{v}_l \in W_l$ kann demnach dargestellt werden als Linearkombination der Basisfunktionen des Ansatzraumes (vergleiche die Darstellung in [RR96]):

$$\mathbf{v}_l = \sum_{k=1}^{n_{\text{KP}_l}} c_k N_k := I_l \mathbf{c}_l$$

mittels eines Koeffizientenvektors $\mathbf{c}_l \in \mathbb{R}^{n_{\text{KP}_l}} = C_l$, d.h. $\mathbf{c}_l = (c_0, \dots, c_{n_{\text{KP}_l}})^T$. Desweiteren kann auch jeder Vektor $\mathbf{v}_{l-1} \in W_{l-1}$ dargestellt werden durch die Ansatzfunktionen des feineren Raumes:

$$\mathbf{v}_{l-1} = I_l \mathbf{c}_l.$$

Dadurch läßt sich eine kanonische Abbildung vom groben Raum C_{l-1} auf den feinen Raum C_l definieren, die Prolongation:

$$P_{l-1}^l : C_{l-1} \rightarrow C_l \quad \text{mit} \quad P_{l-1}^l = I_l^{-1} I_{l-1}.$$

Die Restriktion R_l^{l-1} von Gitterebene l nach $l-1$ wird als Adjungierte der Prolongation gewählt:

$$R_l^{l-1} = (P_{l-1}^l)^*.$$

Insgesamt ergeben sich für ein kartesisches Gitter in zwei Raumdimensionen folgende Operatoren in Sterndarstellung:

$$P_{l-1}^l = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad R_l^{l-1} = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Grobgitterkorrektur

Die Grobgitterkorrektur auf Ebene $l=0$ wird im Normalfall durch einen exakten Löser gebildet. Das System ist in der Regel so grob, daß man eine LU-Zerlegung durchführen kann, ohne große Zeitverluste hinnehmen zu müssen. Sofern das System regulär ist, verursacht dieses Verfahren keine Schwierigkeiten. Im Falle der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen ist allerdings der Druck unter Umständen nur bis auf eine Konstante eindeutig bestimmt, wodurch das System singulär wird. Dieses Problem wird in Abschnitt 4.3.5 noch näher erläutert.

Wahl des Grobgitteroperators

Auf jeder Gitterebene l liegt ein diskretes Problem der Form

$$A_l \mathbf{y}_l = \mathbf{b}_l \quad \text{für} \quad l = 1, \dots, l_{\max}$$

vor. Aufgrund der Gitterhierarchie und der Hierarchie der Ansatzräume können die Operatoren, die aus dem Diskretisierungsschema entstehen, auf jeder Gitterebene separat bestimmt werden. Insbesondere erhält man dadurch die Möglichkeit, auf allen Gitterebenen Aufwind-Techniken einzusetzen, die beim Galerkin-Ansatz:

$$A_{l-1} = R_l^{l-1} A_l P_{l-1}^l$$

durch die Anwendung der kanonischen Transferoperatoren zunehmend zu zentralen Ansätzen mutieren würden. Dieses Phänomen kann leicht erklärt werden. Die Restriktion verteilt die Information durch volle Gewichtung auf alle groben Nachbarpunkte. Umgekehrt erzeugt die Prolongation ebenfalls eine Art Mittelung der groben Daten bezüglich der feinen Gitterpunkte. Bei einem konvektionsdominanten Problem ist man allerdings nicht daran interessiert, durch diese Mittelungen eine Aufwinddiskretisierung zu verfälschen. Dies würde durch die zentralen Ansätze jedoch passieren, wodurch ein Galerkin-Ansatz mit Hilfe der kanonischen Transferoperatoren ausgeschlossen wird. Mit trickreicheren Transferroutinen, die die Strömungsrichtungen berücksichtigen, könnte man den Galerkin-Ansatz ins Auge fassen, siehe z.B. de Zeeuw [Zee90], oder Wesseling [Wes92] und die dort beschriebenen Matrix-abhängigen Transferroutinen. Allerdings ist die Konvergenz des Verfahrens mit dem einfacheren direkten Ansatz, bei dem die Grobgittermatrizen direkt assembliert werden, schon ausreichend. Daher wurde auf die Wahl spezieller Operatoren und den Galerkin-Ansatz verzichtet.

Zyklusarten

In Algorithmus 4.2 wurde der Parameter γ eingeführt, der die Art des Mehrgitterzyklus beschreibt. Der einfachste Zyklus ist der V-Zyklus mit $\gamma = 1$, der nur eine Grobgitterkorrektur durchführt. Der W-Zyklus mit $\gamma = 2$ führt im Gegensatz dazu mehrere Grobgitterkorrekturen durch, wodurch natürlich auch das Grobgitterproblem mehrmals exakt gelöst werden muß. Dadurch ergibt sich pro Iteration ein erhöhter Aufwand gegenüber dem einfacheren V-Zyklus, der nicht unbedingt durch weniger Iterationen wieder gut gemacht werden kann. Bei fünf Mehrgitterebenen muß z.B. beim W-Zyklus acht mal exakt gelöst werden, im Gegensatz zum V-Zyklus mit nur einem Grobgitterproblem.

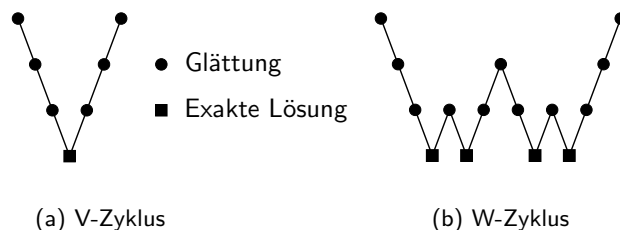


Abbildung 4.2: Mehrgitterzyklen

Desweiteren kann zur Verbesserung der Startlösung eine geschachtelte Iteration mit den verschiedenen Zyklen kombiniert werden, die dafür sorgt, daß das äußere nichtlineare Iterationsverfahren einen besseren Startwert für die nichtlineare Iteration erhält, siehe z.B. in Wesseling

[Wes92], Hackbusch [Hac93]. Für die Verbesserung der linearen Iteration hat dies keine Auswirkungen außer der schnelleren Konvergenz durch die geringere Problemgröße auf den gröberen Gittern.

4.3.5 Druckprojektion

Ein inhärentes Problem der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen ist der nur bis auf eine Konstante bestimmte Druckwert. Falls eine Druckrandbedingung vorliegt, sieht die Situation anders aus, da dabei die Konstante durch die Randwerte fixiert wird. In allen anderen Fällen muß jedoch eine zusätzliche Bedingung an das Gleichungssystem (4.1) gestellt werden, um es eindeutig lösbar zu machen. Es wird also zur Regularisierung des Systems eine Druckprojektion eingeführt, die einfach fordert, daß der Druck im Mittel gleich Null ist:

$$(4.3) \quad \frac{1}{n_{\text{KP}}} \sum_{k=1}^{n_{\text{KP}}} p_k = 0.$$

Man modifiziert dafür den Druck durch

$$p_k^{\text{mod}} = p_k - \frac{1}{n_{\text{KP}}} \sum_{l=1}^{n_{\text{KP}}} p_l.$$

Diese Druckkorrektur ist beim Lösen des Grobgitterproblems erforderlich und kann auch nach dem Glätten durchgeführt werden. Falls nach dem Glätten eine Druckprojektion stattfand, muß auch der Defekt innerhalb des Mehrgitterzyklus korrigiert werden, da durch die Druckmodifikation natürlich auch der restringierte Defekt entsprechend angepaßt werden muß. Verzichtet man dagegen auf eine Modifikation nach dem Glätten, erhalten die Druckwerte auf verschiedenen Ebenen unterschiedliche Konstanten. Da aber nur der Gradient des Drucks in das Gleichungssystem eingeht, spielt das für die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens keine Rolle. Bezüglich des Grobgitterproblems ergibt sich jedoch ein Problem, falls dort ein exakter Löser verwendet wird. Die LU -Zerlegung existiert nicht für eine singuläre Matrix A . Jedoch tritt während der Zerlegung erst im letzten Block eine singuläre Blockdiagonalmatrix auf. Diese kann durch das Ersetzen des entstandenen Null-Eintrags auf der Diagonalen durch eine 1 reguliert werden. Somit wird willkürlich der Druckwert festgelegt, allerdings erfüllt er dadurch natürlich nicht mehr die Mittelwertbedingung (4.3) und kann nach dem Lösen, wie oben beschrieben, modifiziert werden.

4.3.6 Krylov-Raum-Verfahren

Bei der Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichungen entstehen sehr komplexe Matrizen, die weder positiv definit noch symmetrisch sind. Infolgedessen können reine Mehrgitterverfahren nicht so leicht angewandt werden, da es abhängig vom resultierenden Gleichungssystem immer schwieriger wird, ein geeignetes Glättungsverfahren zu generieren. Um die Konvergenz zu verbessern, können die Krylov-Unterraum-Methoden zur Beschleunigung eingesetzt werden, wobei die Komplexität des Gesamtverfahrens nicht verschlechtert wird. Diese Krylov-Raum-Verfahren beruhen darauf, die nächste Iterierte \mathbf{y}_m aus einem Raum $\mathbf{y}_0 + K_m$ zu bestimmen, mit dem Krylov-Raum $K_m = \text{span}\{\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0\}$. Dies erfolgt unter der Bedingung, daß die

nächste Iterierte optimal ist. Einen Überblick über die verschiedenen Krylov-Raum-Verfahren ist in Meister und Witzel [MW99] zu finden, und in Barrett et al. [BBC⁺94] wird diesbezüglich mehr auf die Art der Implementierung eingegangen. Das einfachste und älteste Krylov-Raum-Verfahren stammt von Hestenes und Stiefel [HS52]. Sehr anschaulich erläutert wird es im Buch von Deuffhard und Hohmann [DH91]. Eine ausführlichere Darstellung ist im Buch von Hackbusch [Hac93] zu finden. Hier soll nur ganz kurz auf die Prinzipien eingegangen werden. Gesucht ist eine nächste Iterierte \mathbf{y}^m des Problems (4.1). Wenn man nun die Matrix A als symmetrisch und positiv definit annimmt, kann man dem Problem (4.1) folgendes Funktional zuordnen:

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

mit der Ableitung $F'(\mathbf{x}) = \text{grad}F(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b} = -\mathbf{r}$. Dieses Funktional nimmt einen Minimalwert an, falls $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ erfüllt ist. Die Minimierung des Funktionals ist also mit der Lösung des gegebenen Gleichungssystems äquivalent. Die Minimierung erfolgt dabei in Richtung des steilsten Abstiegs unter der Nebenbedingung, daß diese Suchrichtung A -orthogonal zu den vorangegangenen Richtungen ist, um optimal bezüglich aller Suchrichtungen zu bleiben. Die neue Iterierte wird also gesucht im Raum $\mathbf{y}_0 + K_m$ mit $K_m = \text{span}\{\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_{m-1}\}$ dem Raum der m Suchrichtungen. Die neue Iterierte läßt sich bestimmen durch:

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{y}_{m-1} + \lambda_{opt} \mathbf{p}_{m-1} \quad \text{mit } \lambda_{opt} = \frac{(\mathbf{r}_{m-1}, \mathbf{p}_{m-1})}{(A\mathbf{p}_{m-1}, \mathbf{p}_{m-1})}.$$

Der optimale Parameter λ_{opt} wird dabei bestimmt durch die Minimierung von

$$F(\mathbf{y}_{m-1} + \lambda \mathbf{p}_{m-1}) = F(\mathbf{y}_{m-1}) - \lambda (\mathbf{r}_{m-1}, \mathbf{p}_{m-1}) + \frac{1}{2} \lambda^2 (A\mathbf{p}_{m-1}, \mathbf{p}_{m-1})$$

bezüglich λ . Für das neue Residuum ergibt sich somit:

$$\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_{m-1} - \lambda_{opt} A\mathbf{p}_{m-1}.$$

Da A symmetrisch positiv definit ist, gilt

$$(\mathbf{p}, A\mathbf{p}) > 0 \quad \forall \mathbf{p} \neq 0,$$

und damit bricht die Konstruktion genau dann ab, falls $\mathbf{p}_m = 0$ bzw. damit auch $\mathbf{r}_m = 0$ und die Lösung des Gleichungssystems erreicht ist. Aufgrund der Optimalitätsforderung bezüglich aller Suchrichtungen, wird die neue Richtung \mathbf{p}^m durch das Residuum $\mathbf{r}_m = \mathbf{b} - A\mathbf{y}_m$ bestimmt unter der Bedingung, daß es A -orthogonal zu den vorangegangenen Suchrichtungen ist. Als erste Suchrichtung \mathbf{p}_0 wählt man analog zum Verfahren des steilsten Abstiegs \mathbf{r}_0 . Die weiteren Suchrichtungen werden mittels eines Projektionsansatzes bestimmt:

$$\mathbf{p}_m = \mathbf{r}_m - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{(A\mathbf{r}_m, \mathbf{p}_j)}{(A\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_j)} \mathbf{p}_j = \mathbf{r}_m - \frac{(A\mathbf{r}_m, \mathbf{p}_{m-1})}{(A\mathbf{p}_{m-1}, \mathbf{p}_{m-1})} \mathbf{p}_{m-1}.$$

Einfacher formuliert kann man auch folgende Formel verwenden (siehe [Hac93],[SB90]):

$$\mathbf{p}_m = \mathbf{r}_m + \frac{(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_m)}{(\mathbf{r}_{m-1}, \mathbf{r}_{m-1})} \mathbf{p}_{m-1},$$

da für die Residuen gilt $\mathbf{r}_m \perp \mathbf{p}_l$ für alle $l < m$. Spätestens nach n Schritten erreicht dieses Verfahren die exakte Lösung, wenn man eine $(n \times n)$ -Matrix vorliegen hat. Die Residuen können laut Konstruktion auch als ein Polynom $P_m(A)$ vom Grad m aufgefaßt werden:

$$\mathbf{r}_m = P_m(A)\mathbf{r}_0,$$

so daß der Raum K_m auch geschrieben werden kann als

$$K_m = \text{span}\{\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0\}.$$

Zur Beschleunigung der Konvergenz des Verfahrens, kann eine Vorkonditionierung eingebaut werden. Zusammengefaßt ist der Algorithmus inklusive Vorkonditionierung in Algorithmus 4.3 wiedergegeben. In dieser Form ist er dem Buch von Barrett et al. [BBC⁺94] entnommen.

Algorithmus 4.3 Das vorkonditionierte CG-Verfahren

Berechne $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{y}_0$ mit der Startlösung \mathbf{y}_0

for $i = 1, 2, \dots$ **do**

 Löse $M\mathbf{z}_{i-1} = \mathbf{r}_{i-1}$

(Vorkonditionierung)

$\varrho_{i-1} = \mathbf{r}_{i-1}^T \mathbf{z}_{i-1}$

if $i = 1$ **then**

$\mathbf{p}_1 = \mathbf{z}_0$

else

$\beta_{i-1} = \varrho_{i-1} / \varrho_{i-2}$

$\mathbf{p}_i = \mathbf{z}_{i-1} + \beta_{i-1}\mathbf{p}_{i-1}$

end if

$\mathbf{q}_i = A\mathbf{p}_i$

$\alpha_i = \varrho_{i-1} / \mathbf{p}_i^T \mathbf{q}_i$

$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i-1} + \alpha_i \mathbf{p}_i$

$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} - \alpha_i \mathbf{q}_i$

if $\|\mathbf{r}_i\| < \text{tol}$ **then**

 stop

end if

end for

Der Nachteil des CG-Verfahrens ist, daß es nicht auf unsymmetrische Matrizen angewandt werden kann, da die Suchrichtungen nicht mehr mit kurzen Rekursionen orthogonalisiert werden können. Das GMRES-Verfahren (engl. Generalized Minimal Residual) erhält die Orthogonalität, allerdings hat das Verfahren einen erhöhten Speicherbedarf. Das BiCG-Verfahren (engl. BiConjugate Gradient) dagegen bildet statt nur einer Sequenz von orthogonalen Vektoren zwei Sequenzen, allerdings ohne dabei zu minimieren. Es werden zwei Serien von Residuen gebildet, wobei die transponierte Matrix A^T hinzugezogen wird:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i-1} - \alpha_i A\mathbf{p}_{i-1}, \quad \tilde{\mathbf{r}}_i = \tilde{\mathbf{r}}_{i-1} - \alpha_i A^T \tilde{\mathbf{p}}_{i-1} \quad \text{mit } \alpha_i = \frac{\tilde{\mathbf{r}}_{i-1}^T \mathbf{r}_{i-1}}{\tilde{\mathbf{p}}_{i-1}^T A\mathbf{p}_{i-1}}.$$

Die zugehörigen Suchrichtungen sind dabei

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{r}_{i-1} + \beta_{i-1}\mathbf{p}_{i-1}, \quad \tilde{\mathbf{p}}_i = \tilde{\mathbf{r}}_{i-1} + \beta_{i-1}\tilde{\mathbf{p}}_{i-1} \quad \text{mit } \beta_i = \frac{\tilde{\mathbf{r}}_i^T \mathbf{r}_i}{\tilde{\mathbf{r}}_{i-1}^T \mathbf{r}_{i-1}}.$$

und die zugrunde gelegte Orthogonalitätsforderung ist

$$\tilde{\mathbf{r}}_i^T \mathbf{r}_j = \tilde{\mathbf{p}}_i^T A \mathbf{p}_j \quad \forall i \neq j.$$

Das Verfahren kann auf unsymmetrische Matrizen angewandt werden, doch werden dafür Multiplikationen mit der transponierten Matrix erfordert. Desweiteren kann das Verfahren durch die fehlende Minimierungseigenschaft zum einen vorzeitig abbrechen und zum anderen einen sehr unregelmäßigen Konvergenzverlauf aufweisen. Das CGS-Verfahren (engl. Conjugate Gradient Squared) dagegen vermeidet die Multiplikation mit der transponierten Matrix. Hierfür wird ausgenutzt, daß sich die Residuen mittels Polynomen ausdrücken lassen. Das bedeutet also, für einen BiCG-Schritt kann man die Auswertung von $(\mathbf{r}_i, \tilde{\mathbf{r}}_i) = (P_i(A)\mathbf{r}_0, P_i(A^T)\tilde{\mathbf{r}}_0)$ umformen zu $(P_i(A)^2\mathbf{r}_0, \tilde{\mathbf{r}}_0)$, wodurch der Ausdruck „squared“ zu erklären ist. Idealerweise ist die Konvergenz etwa doppelt so schnell wie beim BiCG-Verfahren, allerdings kann das Verfahren einen noch stärker irregulären Konvergenzverlauf haben als bei der BiCG-Methode.

Das Bi-CGSTAB-Verfahren (engl. BiConjugate Gradient Stabilized) von Van der Vorst [Vor92] versucht diesen Konvergenzverlauf zu glätten. Zunächst wird dabei folgender Ausdruck für die Residuen erwünscht

$$\mathbf{r}_i = Q_i(A)P_i(A)\mathbf{r}_0,$$

im Gegensatz zum vorherigen $\mathbf{r}_i = P_i(A)^2\mathbf{r}_0$ des CGS-Verfahrens. $Q_i(A)$ ist wiederum ein Polynom vom Grad i von folgender Form:

$$Q_i(A) = (I - \omega_1 A)(I - \omega_2 A) \cdots (I - \omega_i A),$$

und die ω_k werden über einen Minimierungsalgorithmus bezüglich der 2-Norm bestimmt. Es wird also zusätzlich zur Bi-Orthogonalität der Residuen \mathbf{r} und $\tilde{\mathbf{r}}$ auch eine Minimierung durchgeführt, wodurch ein glatterer Konvergenzverlauf zu erwarten ist. Dieses Verfahren hat sich schon in vielen Applikationen bewährt, und die vorkonditionierte Variante ist in Algorithmus 4.4 aus [BBC⁺94] entnommen.

Algorithmus 4.4 Vorkonditioniertes Bi-CGSTAB-Verfahren

Bestimme $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - A\mathbf{y}^0$ für Startlösung \mathbf{y}^0

Wähle $\tilde{\mathbf{r}}$ (z.B. $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}^0$)

for $i = 1, 2, \dots$ **do**

$$\varrho_{i-1} = \tilde{\mathbf{r}}^T \mathbf{r}^{i-1}$$

if $\varrho_{i-1} = 0$ **then**

stop (Verfahren fehlgeschlagen)

end if

if $i = 1$ **then**

$$\mathbf{p}^i = \mathbf{r}^{i-1}$$

else

$$\beta_{i-1} = (\varrho_{i-1}/\varrho_{i-2})(\alpha_{i-1}/\omega_{i-1})$$

$$\mathbf{p}^i = \mathbf{r}^{i-1} + \beta_{i-1}(\mathbf{p}^{i-1} - \omega_{i-1}\mathbf{v}^{i-1})$$

end if

Löse $M\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^i$

(Vorkonditionierung)

$$\mathbf{v}^i = A\hat{\mathbf{p}}$$

$$\alpha_i = \varrho_{i-1}/\tilde{\mathbf{r}}^T \mathbf{v}^i$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{r}^{i-1} - \alpha_i \mathbf{v}^i$$

if $\|\mathbf{s}\| < tol$ **then**

$$\mathbf{y}^i = \mathbf{y}^{i-1} + \alpha_i \hat{\mathbf{p}}$$

stop

end if

Löse $M\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{s}$

(Vorkonditionierung)

$$\mathbf{t} = A\hat{\mathbf{s}}$$

$$\omega_i = (\mathbf{t}^T \mathbf{s})/(\mathbf{t}^T \mathbf{t})$$

$$\mathbf{y}^i = \mathbf{y}^{i-1} + \alpha_i \hat{\mathbf{p}} + \omega_i \hat{\mathbf{s}}$$

$$\mathbf{r}^i = \mathbf{s} - \omega_i \mathbf{t}$$

if $\|\mathbf{r}^i\| < tol$ **then**

stop

end if

if $\omega_i = 0$ **then**

stop

end if

end for

5 Numerische Resultate

Zur Auswertung der Konvergenzeigenschaften der Verfahren werden mittlere Konvergenzraten betrachtet. Zunächst ist dabei die mittlere lineare Konvergenzrate über k Schritte von Interesse. Diese ist wie folgt definiert:

$$\kappa_k(x_i) = \left(\frac{r_0(x_i)}{r_k(x_i)} \right)^{\frac{1}{k}},$$

wobei mit r_0 das Anfangsresiduum und mit r_k das letzte Residuum bezeichnet sei. Diese Definition wird auf jede Unbekannte x_i ($x_i = u, v, w$ oder p) separat angewendet. Um aber für das System eine Konvergenzrate zu ermitteln, wird aus den einzelnen Raten ein Mittel gebildet. Die mittlere lineare Konvergenzrate des Unbekanntenvektors ist damit definiert durch:

$$\kappa_k^m = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^{d+1} \kappa_k(x_i).$$

Um nun Aussagen über die Konvergenzeigenschaften des linearen Verfahrens innerhalb eines äußeren nichtlinearen Schemas treffen zu können, wird eine weitere mittlere Konvergenzrate definiert, die ein Mittel der gemittelten Raten darstellt. Es können dabei in den n_{nl} nichtlinearen Schritten jeweils unterschiedlich viele lineare Schritte benötigt werden, um die geforderte Reduktion zu erreichen. Daher wird die Zahl der linearen Schritte im j -ten nichtlinearen Schritt mit $k(j)$ bezeichnet. Das Mittel der mittleren linearen Konvergenzraten ist damit definiert durch:

$$\kappa^*(x_i) = \frac{1}{n_{nl}} \sum_{j=1}^{n_{nl}} \kappa_{k(j)}(x_i).$$

Und entsprechend wird das Mittel κ^* der mittleren Konvergenzraten $\kappa_{k(j)}^m$ definiert:

$$\kappa^* = \frac{1}{n_{nl}} \sum_{j=1}^{n_{nl}} \kappa_{k(j)}^m.$$

Die mittlere nichtlineare Konvergenzrate ist analog zur mittleren linearen Konvergenzrate definiert:

$$\psi_k(x_i) = \left(\frac{d_0(x_i)}{d_k(x_i)} \right)^{\frac{1}{k}} \quad \text{und entsprechend} \quad \psi_k^m = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^{d+1} \psi_k(x_i)$$

mit dem nichtlinearen Anfangsdefekt d_0 und dem letzten Defekt d_k am Ende der nichtlinearen Iteration.

In instationären Berechnungen werden die Konvergenzraten $\kappa_j^*(x_i)$ (der Rate im j -ten Zeitschritt) gemittelt über die n_{ZS} Zeitschritte betrachtet:

$$\kappa^t(x_i) = \frac{1}{n_{ZS}} \sum_{j=1}^{n_{ZS}} \kappa_j^*(x_i) \quad \text{bzw.} \quad \kappa_m^t = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^{d+1} \kappa^t(x_i).$$

Bei den nichtlinearen Konvergenzraten wird dabei in jedem Zeitschritt über die Zahl der Zwischenschritte gemittelt, d.h. es ergibt sich für das DIRK(2)-Verfahren:

$$\psi^t(x_i) = \frac{1}{n_{ZS}} \sum_{j=1}^{n_{ZS}} \frac{1}{2} (\psi_{k_1}(x_i) + \psi_{k_2}(x_i)) \quad \text{bzw.} \quad \psi_m^t = \frac{1}{d+1} \sum_{i=1}^{d+1} \psi^t(x_i).$$

Zur Beurteilung der Massenerhaltung wird an jedem Gitterpunkt lokal die momentane Massenerhaltung im Finite Volumen Sinn bestimmt:

$$\text{div}(\mathbf{u})_{co_k} := \int_{\partial KV_{co_k}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS.$$

Davon wird die L_2 -Norm gebildet, um eine allgemeine Aussage zu erhalten:

$$\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2 = \sqrt{\sum_k \int_{KV_k} |\text{div}(\mathbf{u})_{co_k}|^2 \, dV}.$$

Falls eine exakte Lösung zu einem Modellproblem vorliegt, wird der Fehler wie folgt berechnet:

$$E = \sqrt{\sum_{j=1}^{d+1} e_j^2} \quad \text{mit} \quad e_j := \|x_j - x_j^{exakt}\|_2.$$

5.1 Laminare Testfälle

In diesem Abschnitt wird die Diskretisierung hinsichtlich des Konvergenzverhaltens des Mehrgitterverfahrens und im Hinblick auf den eingebrachten Diskretisierungsfehler untersucht. Speziell der Diskretisierungsfehler wird unter anderem auch durch den Fehler in der Massenerhaltung bestimmt. Dieser kann am besten durch die Untersuchung der linearen Stokes-Gleichung untersucht werden, da dabei ausschließlich Stabilisierungseffekte eine Rolle spielen. Im Falle der Stokes-Gleichung erhält man, wie in Abschnitt 2.5 bereits beschrieben, einen Beitrag der Form

$$- \left(L_{d_1}^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + L_{d_2}^2 \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right)$$

in der Massenerhaltungsgleichung in zwei Raumdimensionen. Dies stellt eine Störung des ursprünglichen Systems dar, die aber quadratisch mit der Maschenweite verschwindet.

Desweiteren werden nichtlineare Testfälle untersucht, sowohl im Hinblick auf Diskretisierungs- und Massenerhaltungsfehler, als auch unter Berücksichtigung des Konvergenzverhaltens. Auch der instationäre Fall wird betrachtet, um später für die turbulenten Fälle eine Basis zu haben.

5.1.1 Kanalströmung

Für die Kanalströmung, eine Strömung zwischen parallelen Wänden bei $y = \pm a$, liegt eine exakte Lösung vor, so daß sich die Diskretisierung mittels dieser Strömung beurteilen und überprüfen läßt. Diese Strömung wird auch als Poiseuille-Strömung bezeichnet und besitzt unter den folgenden Annahmen

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial y} \neq 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = c = \text{const}$$

die exakte Lösung:

$$u(x, y) = \frac{1}{2} \frac{c}{\nu} (y^2 - a^2), \quad v(x, y) = 0, \quad p(x, y) = cx + p_0$$

mit einem konstanten Druckwert p_0 , der durch die Randbedingung vorgegeben werden kann. In diesem Fall wird der Druckwert durch die Ausflußrandbedingung fixiert, die dort $p = 0$ fordert. Für die Geschwindigkeit wird dabei paralleler Ausfluß zu den Wänden angenommen. Die Einflußrandbedingung schreibt das exakte Profil für die Geschwindigkeitskomponenten vor, und an den Wänden sei eine Hafttrandbedingung gegeben. Die Parameter für diese Strömung lauten: $a=1$, $\nu = 1$, $u_{\max} = -\frac{1}{2} \frac{c}{\nu} a^2 = 1.5$. Daraus resultiert eine Reynoldszahl von $Re=1$ bezogen auf die mittlere Einlaßgeschwindigkeit als Referenzgeschwindigkeit und der Halbhöhe a des Gebietes als Referenzlänge. Desweiteren ist die Länge des Gebietes 10, d.h. daraus resultiert ein konstanter Druckwert $p_0 = 30$. Eine Skizze verdeutlicht das Rechengebiet und die Randbedingungen:

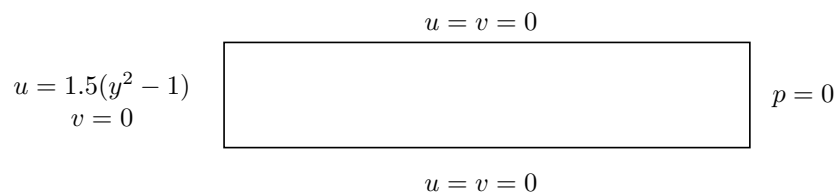


Abbildung 5.1: Problembeschreibung der Kanalströmung

Anhand dieser Strömung läßt sich für den Stokes-Fall untersuchen, wie groß der Einfluß der jeweiligen Diffusionsapproximation innerhalb der Stabilisierung ist. Ebenso kann der Divergenzfehler gemessen werden, der Aussagen darüber macht, wie groß die Störung in der Massenerhaltungsgleichung ist. Einflüsse durch die Konvektion entfallen, daher sind die untersuchten Fälle beschränkt auf die Untersuchung der unterschiedlichen im Abschnitt 2.5 vorgestellten Ansätze von Raw, Ansatz (1), Ansatz (2) und die korrigierte Version $(2)_{\text{korr}}$.

Als lineares Lösungsverfahren wird das in Abschnitt 4.3.4 beschriebene Mehrgitterverfahren eingesetzt. Als Glätter dient die unvollständige Dreieckszerlegung ILU, ohne Dämpfung und ohne Beta-Modifikation. Sowohl der V- als auch der W-Zyklus werden eingesetzt, und die Zahl der Glättungsschritte variiert von eins bis drei je Vor- und Nachglättung. Das grobe Gitter hat die feinste Maschenweite $h = \frac{1}{2}$ und wird fünfmal uniform verfeinert. Das Seitenverhältnis wird ebenfalls von $\sigma = 1$ bis $\sigma = 4$ variiert, um die Problematik der Beiträge zur Stabilisierung der verschiedenen Diskretisierungsverfahren zu demonstrieren. Die Seitenverhältnisse werden

durch Vergrößerung des Gitters in x -Richtung erzielt. Die Sortierung der Gitterpunkte erfolgt rein lexikographisch. Dabei werden die Punkte in Reihen von unten nach oben und die Reihen von links nach rechts sortiert. Dies entspricht einer Sortierung in Strömungsrichtung.

Die ersten drei Testfälle befassen sich mit der Stokes-Gleichung, um den Fehler, der durch die Stabilisierung erzeugt wird, zu untersuchen. Anschließend wird im Falle der Navier-Stokes Gleichungen der Einfluß durch die unterschiedlichen Stabilisierungsansätze FIELDS und FLOW betrachtet.

Kartesisches Gitter, $\sigma=1$

Das kartesische Gitter stellt den Idealfall dar, für den die unterschiedlichen Approximationen des Diffusionsoperators zur Bestimmung der Stabilisierung einen Laplace-Operator in die Massenerhaltungsgleichung eintragen. Der Unterschied besteht dann lediglich in der Größe der Störung bzw. in der Größe der Konstante in

$$Ch^2\Delta p.$$

Allerdings verhalten sich die Verfahren nicht unbedingt ähnlich, da die Stabilisierungsstärke natürlich ebenso variiert. In Tabelle 5.1 sind die Konvergenzraten der u -Komponente $\kappa_{10}(u)$ und die Konvergenzraten des Unbekanntenvektors κ_{10}^m für unterschiedliche Zyklen eingetragen. Beim hier vorliegenden kartesischen Gitter haben die Verfahren allerdings ein sehr ähnliches Verhalten. Nur der Ansatz (1) fällt dabei etwas aus der Reihe im Vergleich zu den anderen beiden Versionen, woraus man den Schluß ziehen kann, daß dabei keine optimale Stabilisierung erzielt wird. Durch Erhöhung der Glättungsschritte von eins bis drei je Vor- und Nachglättung, erfolgt zunächst eine deutliche Verschlechterung der Konvergenz, die dann wiederum abfällt. Auch der W-Zyklus weist keine Robustheit auf für den Ansatz (1). Dies wird bei der Erhöhung des Seitenverhältnisses noch deutlicher werden. Die Verfahren nach Raw und mit dem Ansatz (2) zeichnen sich jedoch durch ein deutlich robusteres Verhalten aus. Bei Erhöhung der Zahl der Glättungsschritte verringert sich die Konvergenzrate entsprechend auf etwa die Hälfte bzw. ein Drittel mit Ausnahme der größten Gitter. Der W-Zyklus ist für beide Varianten sehr robust mit gitterunabhängiger Konvergenz. Beim W-Zyklus sind die Konvergenzraten des Ansatzes (2) sogar deutlich geringer als die Raten des Verfahrens nach Raw. Dafür ist die sehr viel geringere Konstante bei der Störung der Massenerhaltung verantwortlich. Da beim kartesischen Fall der Ansatz nach Raw und der Ansatz (2) bis auf die Konstante in derselben Form der Störung der Massenerhaltungsgleichung resultieren, kann nur der geringere Faktor die Konvergenzverbesserung erzielen. Dieses Phänomen ist v.a. beim W-Zyklus spürbar, da dort um ein Vielfaches häufiger als beim V-Zyklus das Grobgitterproblem gelöst werden muß.

Ein weiteres Kriterium zur Beurteilung der Verfahren ist die Approximation der exakten Lösung. Berechnet man den Fehler an jedem Gitterpunkt und bestimmt anschließend die L_2 -Norm, erhält man die in Tabelle 5.2 dokumentierten Werte. Wie sich bereits aus den in Abschnitt 2.5.3 bestimmten Diskretisierungssternen angedeutet hat, ist der Fehler für den Ansatz (2) kleiner als der Fehler, der bei dem Verfahren nach Raw entsteht. Dies spiegelt sich in den Resultaten wieder. Im ersten Falle ist die Konstante vor dem Stabilisierungsterm geringer und resultiert in einem kleineren Divergenzfehler und dadurch auch in einem geringeren Fehler zur Lösung. Der Ansatz (1) erweist sich dagegen als widersprüchlich zur im Abschnitt 2.5.3 berechneten kleinsten Konstanten vor dem Stabilisierungsterm. Der Grund dafür ist offensichtlich

ein zu geringer Stabilisierungseffekt, der sich sowohl durch schlechtere Lösungseigenschaften, als auch durch einen schlechteren Fehler auszeichnet. Die Kopplung zwischen den Geschwindigkeitskomponenten ist zu gering, wodurch die Lösung nicht optimal bestimmt werden kann. Da selbst für ein kartesisches Gitter diese Variante ein schlechteres Verhalten aufweist, ist nicht zu erwarten, daß sich das Verhalten auf anisotropen Gittern oder gar unstrukturierten Gittern bessern wird. Dies wird beim nächsten Fall mit $\sigma = 2$ bereits deutlich werden.

Gitterebene			1	2	3	4	5
V(1,1)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.063285	0.132205	0.205737	0.278242	0.349523
		(1)	0.064109	0.055377	0.090052	0.184283	0.412470
		(2)	0.068596	0.069011	0.123528	0.202386	0.312818
	κ_{10}^m	Raw	0.048829	0.175365	0.284776	0.402954	0.530219
		(1)	0.045587	0.066700	0.111174	0.238578	0.553813
		(2)	0.049613	0.090725	0.168055	0.287097	0.462432
V(2,2)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.057763	0.049958	0.078563	0.115095	0.148776
		(1)	0.067920	0.082579	0.143758	0.360010	0.647526
		(2)	0.053130	0.053822	0.070232	0.086755	0.140249
	κ_{10}^m	Raw	0.044206	0.067514	0.108724	0.166254	0.225251
		(1)	0.050121	0.099285	0.179171	0.461196	0.860959
		(2)	0.038017	0.070238	0.095214	0.122882	0.209413
V(3,3)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.042245	0.021114	0.048902	0.077549	0.096210
		(1)	0.055938	0.068874	0.085572	0.149015	0.313217
		(2)	0.030647	0.030672	0.039586	0.072047	0.087093
	κ_{10}^m	Raw	0.032331	0.027652	0.066505	0.110339	0.146254
		(1)	0.040399	0.082813	0.105662	0.198434	0.425362
		(2)	0.022214	0.041305	0.053598	0.102636	0.130306
W(1,1)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.063285	0.111799	0.093022	0.093096	0.086226
		(1)	0.064109	0.085326	0.076313	0.107570	0.117354
		(2)	0.068596	0.062523	0.058771	0.053683	0.064105
	κ_{10}^m	Raw	0.048829	0.148664	0.129143	0.134834	0.130157
		(1)	0.045587	0.101803	0.095656	0.137497	0.155618
		(2)	0.049613	0.081284	0.080075	0.077020	0.093866

Tabelle 5.1: Mittlere Konvergenzraten $\kappa_{10}(u)$ und κ_{10}^m für kartesisches Gitter

Gitterebene		1	2	3	4	5
$\ \text{div}(\mathbf{u})\ _2$	Raw	0.00240432	0.000219896	1.97396e-05	1.75814e-06	1.56213e-07
	(1)	0.00151363	0.000136021	1.21216e-05	1.07575e-06	9.52405e-08
	(2)	0.00085879	7.74391e-05	6.91208e-06	6.13905e-07	5.43790e-08
E	Raw	1.80553	0.461718	0.116553	0.0293914	0.00744383
	(1)	1.06952	0.270761	0.070228	0.0188056	0.00537335
	(2)	0.60655	0.152359	0.038666	0.0099527	0.00263496

Tabelle 5.2: Divergenzfehler und Fehler der Lösung für kartesisches Gitter

Gitter mit Seitenverhältnis $\sigma=2$

In Abschnitt 2.5.2 wurde darauf hingewiesen, daß die Diffusionsapproximationen der Stabilisierung unterschiedliche Eigenschaften bezüglich Anisotropien des Gitters besitzen. Die Verfahren nach Raw und $(2)_{\text{korr}}$ bleiben beschränkt, wenn man das Seitenverhältnis der Elemente gegen Unendlich streben läßt. Das Verfahren nach Ansatz (2) (und entsprechend auch nach Ansatz (1)) ist jedoch unbeschränkt. Daher wird nun das Seitenverhältnis der Elemente etwas erhöht, um diesen Effekt zu demonstrieren.

Gitterebene			1	2	3	4	5
V(1,1)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.129665	0.193594	0.299201	0.396965	0.487269
		(1)	0.204537	0.215033	0.533576	div.	div.
		(2)	0.165639	0.151507	0.210965	0.379271	0.533322
		$(2)_{\text{korr}}$	0.137454	0.132901	0.189927	0.263007	0.349085
	κ_{10}^m	Raw	0.103902	0.241204	0.388131	0.540044	0.697651
		(1)	0.145128	0.268165	0.699186	div.	div.
		(2)	0.118790	0.210259	0.310769	0.570047	0.830656
		$(2)_{\text{korr}}$	0.100760	0.173558	0.259634	0.376195	0.523466
V(2,2)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.105690	0.082267	0.120176	0.168015	0.209633
		(1)	0.088094	0.194339	div.	div.	div.
		(2)	0.060850	0.081468	0.162172	0.551536	div.
		$(2)_{\text{korr}}$	0.049698	0.068256	0.088023	0.110295	0.151648
	κ_{10}^m	Raw	0.084821	0.103178	0.154099	0.225587	0.295705
		(1)	0.063272	0.253651	div.	div.	div.
		(2)	0.046328	0.119372	0.235939	0.818388	div.
		$(2)_{\text{korr}}$	0.038112	0.091867	0.120739	0.157480	0.227777
V(3,3)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.086220	0.072738	0.067514	0.102077	0.134097
		(1)	0.081774	0.367197	div.	div.	div.
		(2)	0.043737	0.054776	0.172480	div.	div.
		$(2)_{\text{korr}}$	0.021739	0.047696	0.066620	0.089154	0.113218
	κ_{10}^m	Raw	0.069363	0.090751	0.086234	0.134636	0.187201
		(1)	0.057805	0.441569	div.	div.	div.
		(2)	0.031357	0.077287	0.250388	div.	div.
		$(2)_{\text{korr}}$	0.016227	0.063872	0.091994	0.127919	0.168887
W(1,1)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.129665	0.163394	0.153376	0.144343	0.133422
		(1)	0.204537	0.197756	0.301438	0.403677	div.
		(2)	0.165639	0.118942	0.133390	0.141033	0.147418
		$(2)_{\text{korr}}$	0.137454	0.103932	0.099413	0.090380	0.085070
	κ_{10}^m	Raw	0.103902	0.203066	0.197750	0.192818	0.185742
		(1)	0.145128	0.229393	0.390472	0.534533	div.
		(2)	0.118790	0.163457	0.197731	0.216354	0.239689
		$(2)_{\text{korr}}$	0.100760	0.135900	0.137663	0.130111	0.127781

Tabelle 5.3: Mittlere Konvergenzraten $\kappa_{10}(u)$ und κ_{10}^m für Gitter mit $\sigma = 2$

Die Konvergenzeigenschaften des korrigierten Verfahrens sind deutlich besser gegenüber der unkorrigierten Version, allerdings muß man im Gegenzug einen größeren Fehler der Lösung, als auch einen größeren Fehler in der Massenerhaltung in Kauf nehmen. Dafür bleibt aber das Verfahren stabil, wohingegen für den Ansatz (2) auch Divergenz des linearen Löser resultiert. Das Verfahren nach Ansatz (1) weist diesbezüglich eine noch gravierendere Verschlechterung auf. Darin ist deutlich die Tendenz der Stabilisierung erkennbar, bei anisotropen Elementen zu verschwinden. Das ist ein unerwünschtes Ergebnis und kann aber für die Version (2)_{korr} umgangen werden.

Betrachtet man den Fehler in der Massenerhaltung, so stellt man fest, daß auch in der Variante (2)_{korr} der Fehler deutlich geringer ausfällt, als dies beim Ansatz nach Raw der Fall ist. Dasselbe gilt auch für den Fehler der Lösung, der bei Raw um ein Vielfaches größer ist als beim Ansatz (2)_{korr}. Auch hier bestätigt sich wiederum die schon theoretisch bestimmte kleinere Konstante vor der Störung in der Massenerhaltung im Vergleich zur Konstante bei Raw (vergleiche Abschnitte 2.5.2 und 2.5.3).

Gitterebene		1	2	3	4	5
$\ \text{div}(\mathbf{u})\ _2$	Raw	0.0132922	0.00125770	0.000113965	1.01891e-05	9.05667e-07
	(1)	0.0020905	0.00018555	1.64404e-05	1.45587e-06	–
	(2)	0.0004643	4.16656e-05	3.71114e-06	3.29289e-07	2.91612e-08
	(2) _{korr}	0.0019916	0.00018052	1.61463e-05	1.43555e-06	1.27256e-07
E	Raw	6.74779	1.811270	0.462930	0.1169820	0.0295798
	(1)	1.04904	0.274445	0.074976	0.0216881	–
	(2)	0.22507	0.057108	0.014689	0.0038696	0.0010586
	(2) _{korr}	0.97029	0.246908	0.062668	0.0160388	0.0041804

Tabelle 5.4: Divergenzfehler und Fehler der Lösung für Gitter mit $\sigma = 2$

Bezüglich der Konvergenzraten erhält man auch schon für dieses sehr moderate Seitenverhältnis von zwei eine dramatische Verschlechterung der Eigenschaften des Mehrgitterverfahrens für die beiden Ansätze (1) und (2). Beim Ansatz (1) war das Konvergenzverhalten schon beim kartesischen Gitter deutlich schlechter als bei den anderen Ansätzen. Für diesen Fall ist das Verfahren jedoch schon ab Gitterebene 3 divergent, falls mehr als je ein Vor- und Nachglättungsschritt durchgeführt wird. Für den Ansatz nach Raw und (2)_{korr} ergibt sich wiederum ein ähnliches Verhalten zum kartesischen Fall, mit natürlich etwas schlechteren Konvergenzraten. Aber bei Erhöhung der Glättungsschritte reduziert sich wiederum die Konvergenzrate, wie es zu erwarten war und wiederum erweist sich der W-Zyklus als sehr robust mit gitterunabhängiger Konvergenz.

Gitter mit Seitenverhältnis $\sigma=4$

Da die Eigenschaften des Ansatzes (1) schon bei einem Seitenverhältnis von zwei nicht optimal waren, wird für diesen und die folgenden Fälle auf die Auflistung der entsprechenden Werte verzichtet. Die Verfahren nach Raw, nach Ansatz (2) und nach der Version (2)_{korr} werden weiterhin einander gegenübergestellt.

Gitterebene		1	2	3	4	5
$\ \text{div}(\mathbf{u})\ _2$	Raw	0.0625307	0.00680875	0.000638435	5.76395e-05	5.14441e-06
	(2)	0.0024513	0.00014461	–	–	–
	(2) _{korr}	0.0195004	0.00183176	0.000164923	1.4699e-05	1.30458e-06
E	Raw	21.4702	6.76111	1.81313	0.4634	0.117165
	(2)	0.22728	0.052959	–	–	–
	(2) _{korr}	6.50919	1.7418	0.446364	0.113669	0.0292003

Tabelle 5.5: Divergenzfehler und Fehler der Lösung für Gitter mit $\sigma = 4$

Gitterebene		1	2	3	4	5	
V(1,1)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.273893	0.324147	0.387201	0.540335	0.716782
		(2)	0.579066	0.896615	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.175814	0.280696	0.269034	0.348163	0.432209
	κ_{10}^m	Raw	0.234652	0.391053	0.472792	0.690762	0.961665
		(2)	0.433872	1.201296	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.134176	0.349800	0.339749	0.461486	0.602829
V(2,2)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.238836	0.266454	0.209143	0.243217	0.311806
		(2)	0.211976	0.689487	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.068292	0.156606	0.237790	0.266925	0.258622
	κ_{10}^m	Raw	0.203879	0.320597	0.259431	0.306406	0.412792
		(2)	0.164046	1.043687	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.053941	0.196530	0.306640	0.347999	0.353566
V(3,3)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.206830	0.219603	0.154543	0.157386	0.211638
		(2)	0.218326	0.893018	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.050902	0.064002	0.139648	0.164179	0.208841
	κ_{10}^m	Raw	0.176558	0.263876	0.189758	0.195104	0.275471
		(2)	0.156824	1.279658	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.040104	0.078756	0.176852	0.214443	0.283698
W(1,1)	$\kappa_{10}(u)$	Raw	0.273893	0.215530	0.259659	0.243251	0.222433
		(2)	0.579066	0.569927	1.062705	div.	div.
		(2) _{korr}	0.175814	0.264858	0.226878	0.231296	0.236345
	κ_{10}^m	Raw	0.234652	0.259982	0.311518	0.301212	0.286747
		(2)	0.433872	0.748405	div.	div.	div.
		(2) _{korr}	0.134176	0.329253	0.288672	0.304355	0.325652

Tabelle 5.6: Mittlere Konvergenzraten $\kappa_{10}(u)$ und κ_{10}^m für Gitter mit $\sigma = 4$

Auch in diesem Fall zeichnet sich die Version mit Ansatz (2) durch einen kleineren Fehler gegenüber dem Verfahren nach Raw aus. Auch das Verfahren nach (2)_{korr} besitzt einen deutlich geringeren Fehleranteil als das Raw-Verfahren, sowohl bei der Massenerhaltung, als auch beim Fehler der resultierenden Lösung. Das unkorrigierte Verfahren allerdings, divergiert schon ab Gitterebene 3. Dieses Verhalten zeigt deutlich die zu geringe Stabilisierung durch die verschwindenden Diagonaleinträge, wie es auch in Abbildung 2.8 verdeutlicht wurde.

Die Konvergenzeigenschaften des Ansatzes $(2)_{\text{korr}}$ ändern sich allerdings geringfügig für diesen Fall. Die Konvergenzraten sind ungefähr auf gleichem Niveau wie die Raten des Ansatzes nach Raw. Daher soll nicht weiter auf die Unterschiede der beiden Ansätze eingegangen werden. Stattdessen wird die Untersuchung anhand eines Gitters mit maximalem Seitenverhältnis von ca. 8.6 weitergeführt. An dieser Stelle soll aber darauf hingewiesen werden, daß bei dem Verfahren nach $(2)_{\text{korr}}$ für jede Teilkontrollvolumenfläche dieselbe Diffusionslänge angesetzt wird. Dies führt zur Approximation eines Laplace-Operators als Störung in der Massenerhaltung. Im Gegensatz dazu wird beim Verfahren nach Raw weiterhin ein anisotroper Laplace-Operator zur Stabilisierung eingebaut. Es liegen also unterschiedliche Störungen vor, die sich aufgrund dessen auch unterschiedlich verhalten und sich nicht nur durch eine Konstante unterscheiden.

Gitter mit maximalem Seitenverhältnis $\sigma=8.6$

Bei diesem Fall soll nun im Gegensatz zu den vorangegangenen Fällen der Einfluß der β -Modifikation des ILU-Glätters betrachtet werden. Durch das größere Seitenverhältnis wird die Konvergenzrate des Mehrgitterverfahrens von Ebene zu Ebene schlechter. Im gleichen Maße reduziert sich dabei die Stärke der Stabilisierung. Daher ist die Hoffnung, durch die Stärkung der Diagonalen in der Massenerhaltungsgleichung die Konvergenzeigenschaft des Mehrgitterverfahrens zu verbessern.

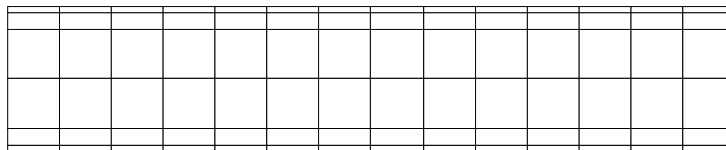


Abbildung 5.2: Grobes Gitter mit maximalem Seitenverhältnis $\sigma = 8.6$

In Abbildung 5.2 ist das hierbei verwendete grobe Gitter dargestellt, das wiederum fünfmal uniform verfeinert wird, um die weiteren Gitterebenen zu generieren. Bei dieser Wahl des Grobgitters wird die Randschicht der Strömung besser aufgelöst. Speziell im Hinblick auf realistischere Probleme als das einfache Poiseuille-Problem, ist man natürlich daran interessiert, die an Wänden auftretenden Randschichten möglichst gut zu approximieren. Bei dem vorliegenden Modellproblem ist dies nicht unbedingt erforderlich, da sich das Strömungsprofil auch auf gröberen Gittern gut darstellen läßt, aber man kann daran den durch die Diskretisierung entstandenen Fehler in der Lösung untersuchen und natürlich das Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens betrachten.

Das grobe Gitter wurde in y -Richtung derart aufgebaut, daß die Gitterweite von der Mitte des Kanals aus zu den Wänden hin mit dem Faktor 0.35 abnimmt. Dabei besteht das grobe Gitter aus 105 Gitterpunkten bzw. 84 Elementen. Die weiteren Ebenen entstehen durch uniforme Verfeinerung, d.h. das feinste Gitter besitzt 86 016 Elemente bzw. 86 657 Gitterpunkte. Das maximale Seitenverhältnis ist 8.58601 und das minimal vorkommende 1.05179.

In den Abbildungen B.2-B.5 im Anhang sind die Konvergenzraten für verschiedene Einstellungen für β und unterschiedliche Zyklen abgebildet. Exemplarisch wird hier der Fall mit $V(2,2)$ -Zyklus in Abbildung 5.3 herausgegriffen. Die beiden Varianten weisen ein sehr unterschiedliches Verhalten auf, bedingt durch den unterschiedlichen Charakter der Stabilisierung.

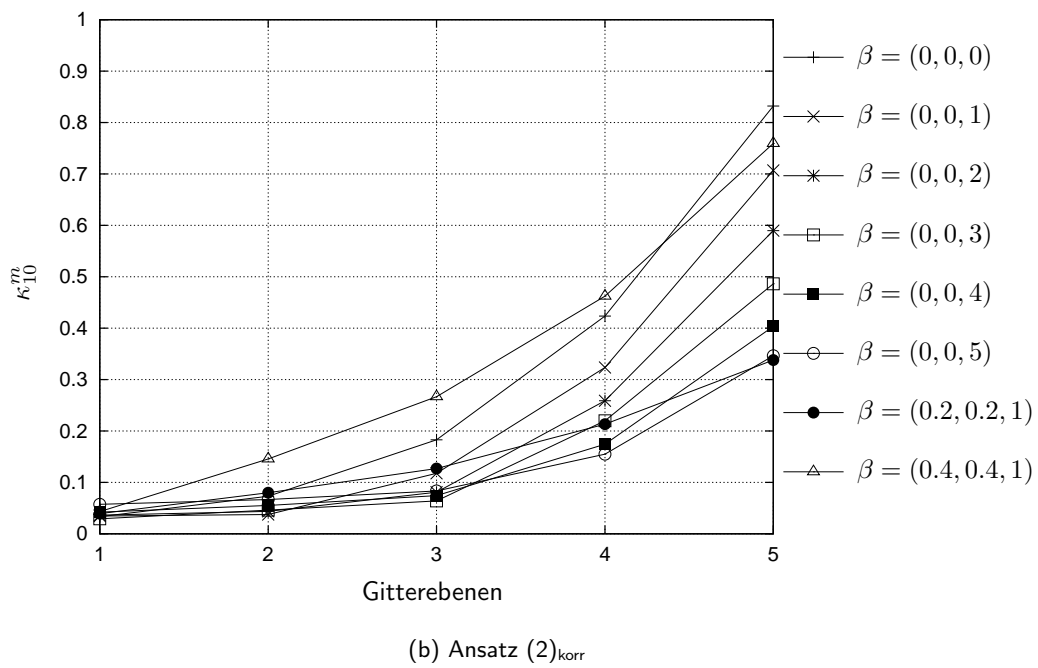
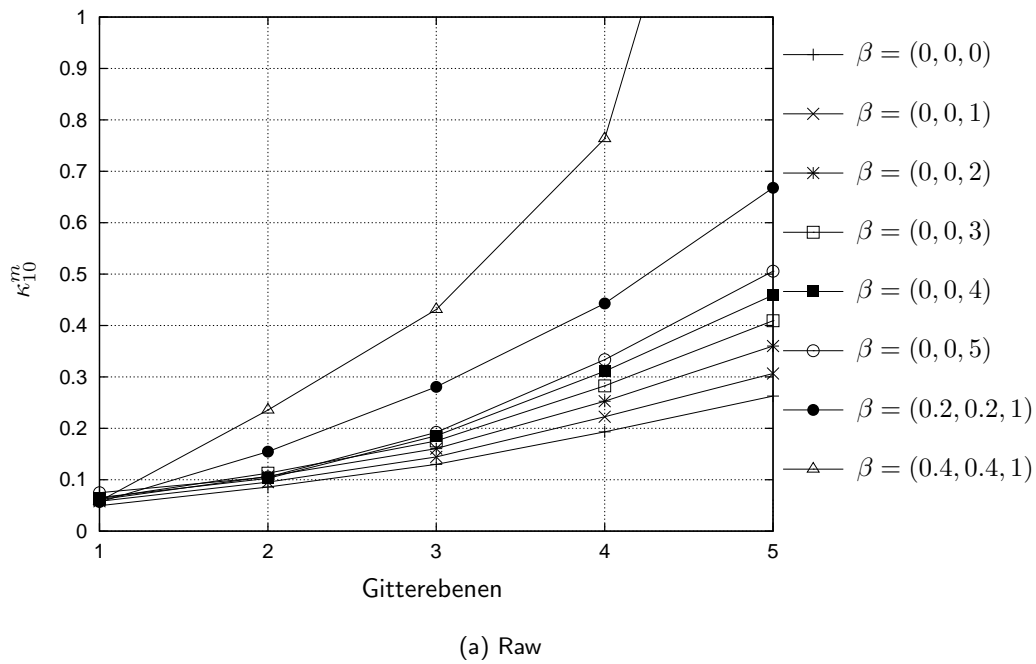


Abbildung 5.3: Konvergenzraten κ_{10}^m für Raw und den Ansatz (2)_{korr} beim V(2,2)-Zyklus

Beim Verfahren nach Raw werden auf senkrechten und horizontalen Teilkontrollvolumenflächen unterschiedliche Diffusionslängen eingesetzt, wohingegen bei $(2)_{\text{korr}}$ für beide dieselbe Diffusionslänge verwendet wird. Dies führt zu einem reinen Laplace-Operator als Stabilisierungsterm, im Gegensatz zum anisotropen Laplace-Operator, der bei Raw resultiert. Jedoch verhalten sich diese beiden Arten der Stabilisierung völlig unterschiedlich.

Wiederum wird sehr deutlich, daß das Verfahren $(2)_{\text{korr}}$ in der Regel ein schlechteres Konvergenzverhalten als das Verfahren nach Raw aufweist. Dies resultiert aus der viel kleineren Stabilisierungskonstanten im Vergleich zur Konstanten bei Raw. Ein weiteres Merkmal für diesen Fall ist, daß die β -Modifikation beim V-Zyklus keine Verbesserung der Konvergenzeigenschaft beim Verfahren mit Raw liefert (siehe Abbildungen B.2-B.4). Beim W-Zyklus dagegen kann durch die Änderung von β eine Verringerung der Konvergenzraten erzielt werden. Allerdings ist die Verbesserung nicht unbedingt überragend (vergleiche Abbildung B.5) und im Vergleich mit den Raten des V-Zyklus nicht empfehlenswert, zumal der W-Zyklus einen höheren Aufwand besitzt. Es ist daher ratsam, die Zahl der Glättungsschritte zu erhöhen und den V-Zyklus beizubehalten, statt zum W-Zyklus zu wechseln.

Beim Verfahren nach $(2)_{\text{korr}}$ erzielt man durch eine geeignete Wahl von β dagegen bessere Konvergenzraten beim V-Zyklus. Dabei wird sehr deutlich, daß die geringere Stabilisierung eine Stärkung der Diagonalen der Druckgleichung (der Massenerhaltungsgleichung) erfordert. Wählt man eine Kombination zwischen Stärkung der Geschwindigkeitsgleichungen und der Druckgleichung (im Beispiel: $\beta=(0.2,0.2,1)$ und $\beta=(0.4,0.4,1)$), erreicht man keine Verbesserung gegenüber der unmodifizierten Glättung beim V(1,1)-Zyklus. In diesem Falle divergiert das Verfahren sogar (siehe Abbildung B.2). Beim V(2,2)-Zyklus kann eine geringfügige Verbesserung erzielt werden, ebenso beim V(3,3)-Zyklus. Allerdings ist eine geeignete Wahl der Parameter nicht einfach und auch stark problemabhängig. Daher ist es zumindest für die Stokes-Gleichung empfehlenswert, nur die Druckgleichung zu stärken, da in diesem Falle auch beim W-Zyklus eine bessere Konvergenzrate erzielt werden kann.

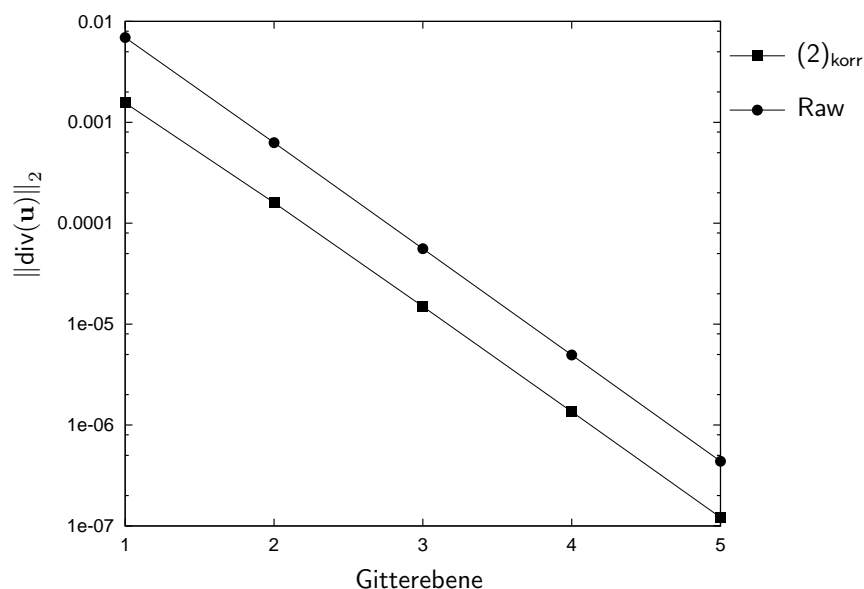


Abbildung 5.4: Fehler der Massenerhaltung beim Stokes-Fall

Betrachtet man den Fehler in der Massenerhaltung und in der Lösung (siehe Abbildungen 5.4,5.5), wird der geringere Fehleranteil des Verfahrens $(2)_{\text{korr}}$ deutlich. Damit läßt sich auch die schlechtere Lösbarkeit erklären, da die Stabilisierung wesentlich geringer ausfällt und damit auch der Fehler, der unter anderem auch durch die Störung der Massenerhaltung entsteht. Legt man also Wert auf einen möglichst geringen Fehler, der in die Gleichungen durch die Stabilisierung eingetragen wird, dann ist es durchaus ratsam, die Variante $(2)_{\text{korr}}$ einzusetzen, auch wenn dies mit einer schlechteren Lösbarkeit des resultierenden Systems verbunden ist.

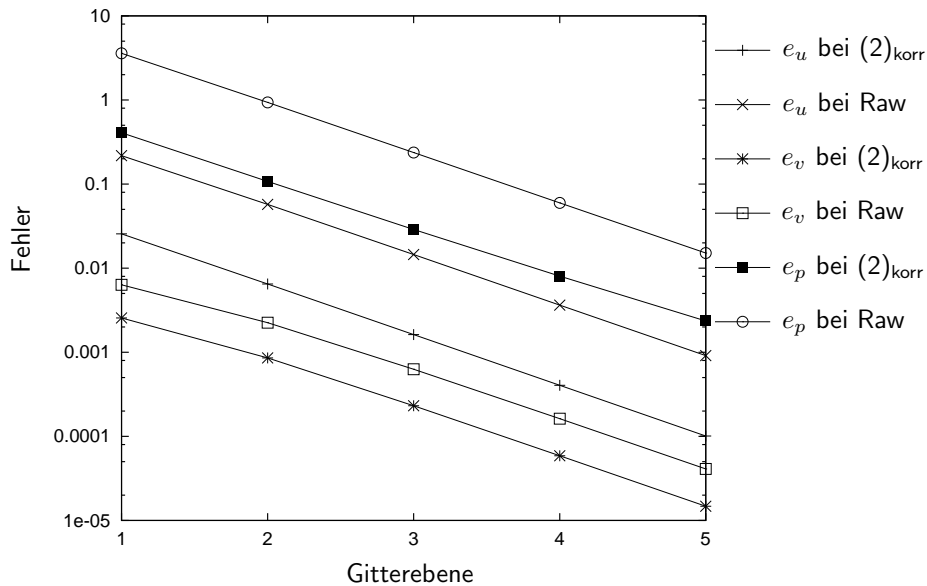


Abbildung 5.5: Fehler der Lösung beim Stokes-Fall

Kanalströmung bei $Re=100$

Für den nichtlinearen Fall bei $Re=100$ wird wiederum das anisotrope Gitter mit maximalem Seitenverhältnis 8.6 zugrunde gelegt, um die Randschicht gut aufzulösen. Nun sollen auch die verschiedenen Möglichkeiten der Approximation des konvektiven Terms untersucht werden. Ein Kriterium hierfür ist natürlich das Konvergenzverhalten der Diskretisierung, noch wichtiger und entscheidender allerdings ist der Diskretisierungsfehler. V.a. im Hinblick auf komplexere Strömungsverhältnisse ist es von entscheidender Bedeutung, wie groß der Fehler in der Lösung ist. Daher wird hierfür mehr Gewicht auf die Fehlerreduktion als auf die Löseigenschaften gelegt. Desweiteren lassen sich an diesem Beispiel auch die diversen Möglichkeiten, die Stabilisierung zu bestimmen, untersuchen und auch unterschiedliche Aufwindstrategien testen.

Als linearer Löser wird für dieses Beispiel das mit Mehrgitter vorkonditionierte Bi-CGSTAB-Verfahren eingesetzt. Schon beim Stokes-Fall auf demselben Gitter war die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens nicht konstant. Um Lösungsschwierigkeiten zu umgehen, die durch den Einfluß des konvektiven Terms und der verschiedenen Stabilisierungsvarianten entstehen, wurde für diesen Fall darauf verzichtet, ein reines Mehrgitterverfahren zu verwenden. Insbesondere soll bei diesem Testfall die Konzentration auf der nichtlinearen Konvergenz liegen.

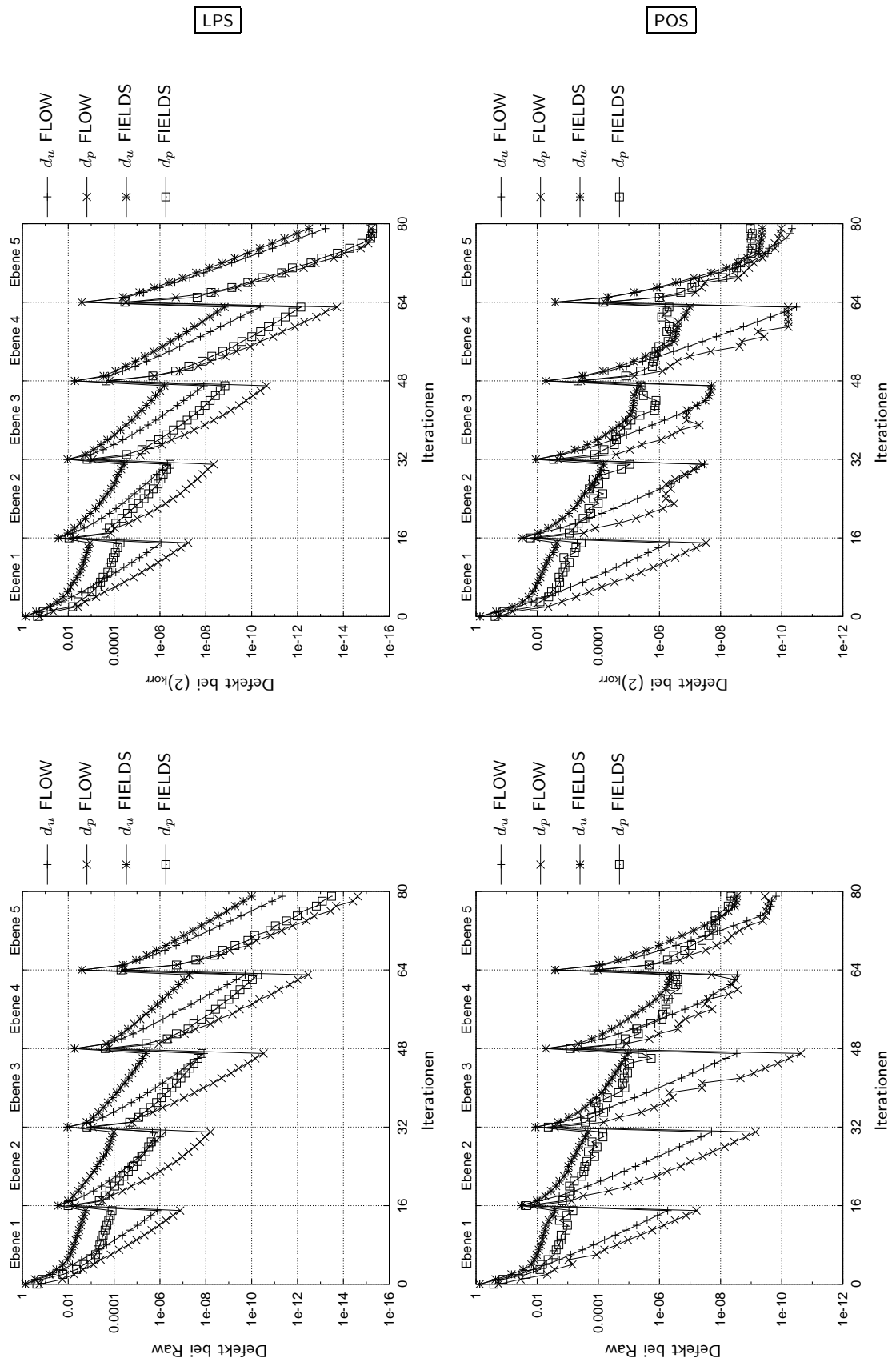


Abbildung 5.6: Nichtlineare Reduktion bei geschachtelter Iteration und PAC: Variante nach Raw unten, (2)_{kor} oben; LPS links, POS rechts

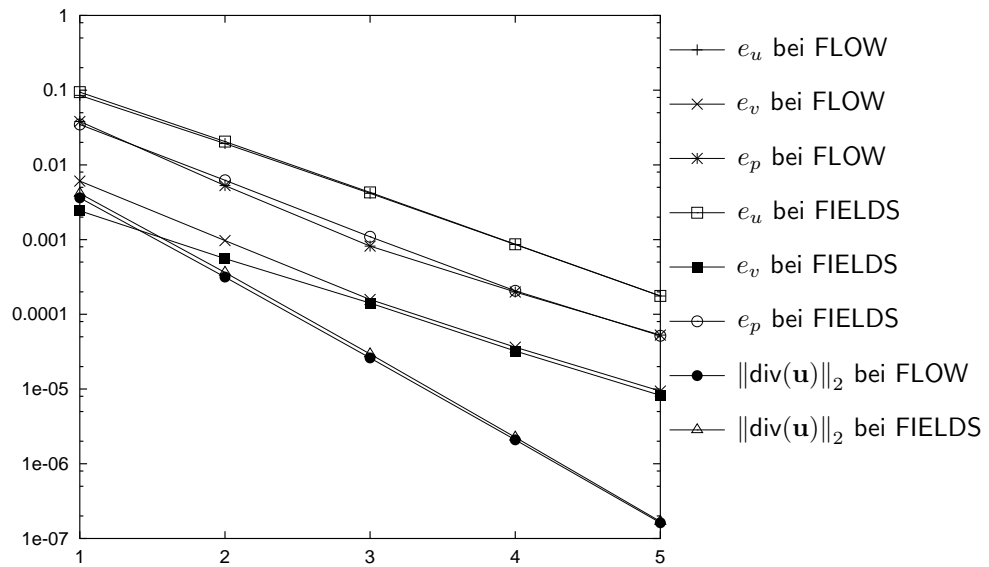
Zunächst betrachtet man die nichtlineare Reduktion des Defektes der einzelnen Lösungskomponenten. Das zugrunde liegende System wird gekoppelt gelöst, jedoch erfahren die einzelnen Gleichungen für die Geschwindigkeiten u und v als auch für den Druck verschiedene Defekt-reduktionen. In der Abbildung 5.6 sind die nichtlinearen Defekte je Iterationsschritt und je Ebene für die FIELDS- und FLOW-Versionen aufgetragen, die in Abschnitt 2.5 vorgestellt wurden, sowie die Varianten nach Raw und $(2)_{\text{korr}}$ aus Abschnitt 2.5.2. Außerdem werden zwei verschiedene Aufwindstrategien getestet und einander gegenübergestellt, das LPS- und das POS-Aufwindverfahren, die beide in Abschnitt 2.5.1 vorgestellt wurden. Die Einstellung für die Approximation des konvektiven Terms in der Impulsgleichung sind inklusive lokalem Verschieben hin zu zentralen Differenzen, wie in Gleichung (2.26) beschrieben, und unter Verwendung des Ansatzes nach Gleichung (2.25), das als PAC-Aufwindmethode bezeichnet wird.

Für beide Möglichkeiten die Diffusionslänge für die Stabilisierung zu bestimmen, ist das nicht-lineare Konvergenzverhalten der FLOW-Variante besser als bei FIELDS. Der Defekt wird sowohl für die u -Komponente als auch für die p -Komponente weit stärker reduziert als das bei FIELDS der Fall ist. Offensichtlich ist auch das Verhalten beim LPS-Aufwindverfahren deutlich konstanter als beim POS-Verfahren. Bei letzterem erfährt die Druckkomponente einen etwas eigenartigen Konvergenzverlauf, der v.a. auch wesentlich weniger Reduktion liefert. Da das System gekoppelt gelöst wird, überträgt sich das nach ein paar Iterationen auf die Reduktion der u -Komponente. Insgesamt ist es bei diesem Aufwindverfahren nicht möglich, den nichtlinearen Defekt genauso weit wie beim LPS-Verfahren zu reduzieren. Die Ursache für diesen Konvergenzverlauf ist das Aufwindverfahren POS selbst. Dieses enthält eine Schranke, die bei geringfügiger Abweichung zu einer völlig anderen Aufwindrichtung führen kann. Beim LPS-Verfahren ist das nicht der Fall, wodurch der glattere Konvergenzverlauf resultiert.

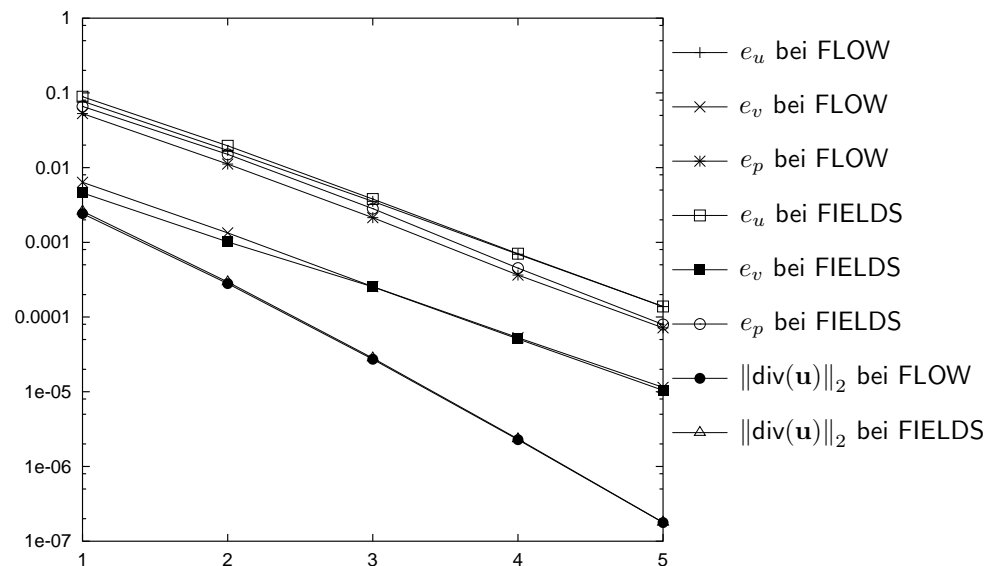
Im Anhang sind in den Abbildungen B.6–B.9 die Fehler der Lösung und der Massenerhaltung der unterschiedlichen Versionen über den Gitterebenen aufgetragen. Exemplarisch soll an dieser Stelle die PAC-Version mit der Variante $(2)_{\text{korr}}$, siehe Abbildung 5.7, herausgegriffen werden. Es werden sowohl eine reine Aufwindmethode nach Gleichung (2.24), als auch das PAC-Aufwindverfahren nach Gleichung (2.25) betrachtet, jeweils in Kombination mit lokalem Verschieben zu zentralen Differenzen, dem POS- und LPS-Aufwindverfahren und den beiden Ansätzen für die Diffusion Raw und $(2)_{\text{korr}}$.

Wenn man den Fehler der Lösung betrachtet, erkennt man nur relativ kleine Unterschiede zwischen den Diskretisierungsvarianten. Die Lösungen, und dadurch deren Fehler zur exakten Lösung, liegen alle sehr nahe beieinander, jedoch weisen sie trotzdem Unterschiede im Verhalten auf. Die Varianten, die die Diffusionsapproximation nach Raw bei der Stabilisierung verwenden, zeigen eine nichtkonstante Fehlerreduktion auf höheren Gitterebenen. Wenn man die Abbildungen B.6–B.9 bzw. 5.7 betrachtet, zeigen die Graphiken für die Variante $(2)_{\text{korr}}$ eine konstante Fehlerreduktion, wohingegen die Graphiken der Raw-Versionen B.6 und B.8 jeweils eine Verringerung der Konvergenz aufweisen. Ab Gitterebene 4 reduziert sich die Ordnung der Fehlerreduktion gegenüber der Version $(2)_{\text{korr}}$, unabhängig von der Behandlung des konvektiven Terms in der Impulsgleichung bzw. des gewählten Aufwindverfahrens. Einen Unterschied der beiden getesteten Aufwindstrategien, dem POS- und LPS-Verfahren, läßt sich auch aus den Graphiken entnehmen. Bei POS ist der Fehler in der Druckkomponente e_p größer als bei LPS. Das verdeutlicht nochmals das eigenartige Konvergenzverhalten des Druckdefektes. Dies gilt für alle getesteten Kombinationen der Behandlung der Konvektion und der eingesetzten Stabilisierung. Der Unterschied bei den Stabilisierungen FIELDS und FLOW ist für

diesen Problemfall marginal. Das liegt zum einen daran, daß $\frac{\partial v}{\partial y}$ nahezu Null ist, wodurch sich auch für die modifizierte Stabilisierung aus Abschnitt 2.5.4 keine große Einflußmöglichkeit durch Hinzunahme von $\text{div}(\mathbf{u})$ ergibt, zumal auch $\frac{\partial u}{\partial x}$ nahezu Null ist. Allerdings ist das nicht-lineare Konvergenzverhalten von FLOW deutlich besser, wie bereits am Anfang des Abschnitts erwähnt.



(a) LPS



(b) POS

Abbildung 5.7: Fehler bei PAC-Version und Variante $(2)_{\text{korr}}$ über den Gitterebenen

5.1.2 Driven Cavity – angetriebene Nischenströmung

Die angetriebene Nischenströmung (engl. Driven Cavity) ist ein beliebtes Modellproblem, um eine Diskretisierung zu testen. Allerdings sind zwei Singularitäten in den beiden oberen Ecken enthalten. Doch für nicht allzu hohe Reynoldszahlen kann man das Problem gut lösen und auch dazu nutzen, die Diskretisierungs- und Lösungsverfahren zu testen. Die Definition des Problems inklusive der Randbedingungen ist in Abbildung 5.8 schematisch dargestellt.

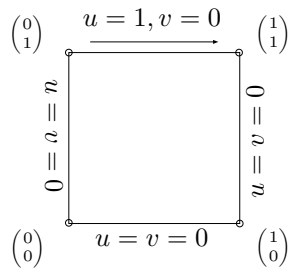


Abbildung 5.8: Die Problembeschreibung der Driven Cavity

Als Testfall dient das Problem bei $Re=3200$ bezogen auf die Geschwindigkeit des oberen Randes und die Seitenlänge des Gebietes, die in diesem Fall zu 1 gewählt wird. Auch bei diesem Problem soll nun das unterschiedliche Verhalten der Diskretisierungen untersucht werden. Das besondere Augenmerk wird dabei auf den Unterschied zwischen einem Aufwindverfahren mittels physikalischer Effekte, dem PAC-Aufwindverfahren (siehe Abschnitt 2.6), und mittels den simplen Aufwindstrategien aus Abschnitt 2.5.1 gelegt, die durch Gleichung (2.24) in die Impulsgleichung eingehen. Hinzu kommt noch abhängig von der lokalen Peclet-Zahl das Verschieben hin zu zentralen Differenzen. Doch in weiten Teilen des Gebietes, in denen die Konvektion dominiert, kommt hauptsächlich das Aufwindverfahren zum Einsatz. Daher ist dieses Problem bestens geeignet, um die unterschiedlichen Eigenschaften der Behandlung des konvektiven Terms zu untersuchen. Da in diesem Fall im Gegensatz zum Kanal eine wirbelbehaftete Strömung vorliegt, werden größere Unterschiede der einzelnen Verfahren erwartet.

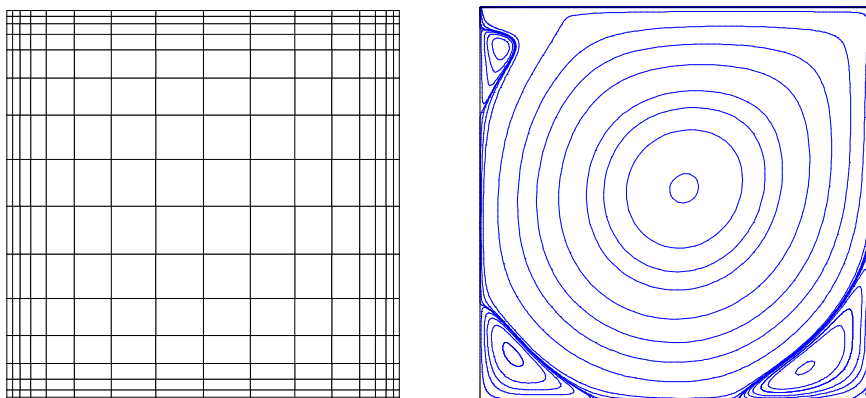


Abbildung 5.9: Driven Cavity: grobes Gitter und Stromlinien der Lösung

Das grobe Gitter auf Ebene 0 besteht aus 289 Gitterpunkten. Die weiteren Ebenen entstehen durch uniforme Verfeinerung. Die Ergebnisse werden mit den von Ghia et al. [GGS82] veröffentlichten Strömungsdaten verglichen. Es handelt sich um Werte der u -Komponente entlang einer senkrechten Linie durch den Mittelpunkt des Gebietes (mit y bezeichnet), bzw. um die Werte der v -Komponente entlang einer horizontalen Linie (mit x bezeichnet).

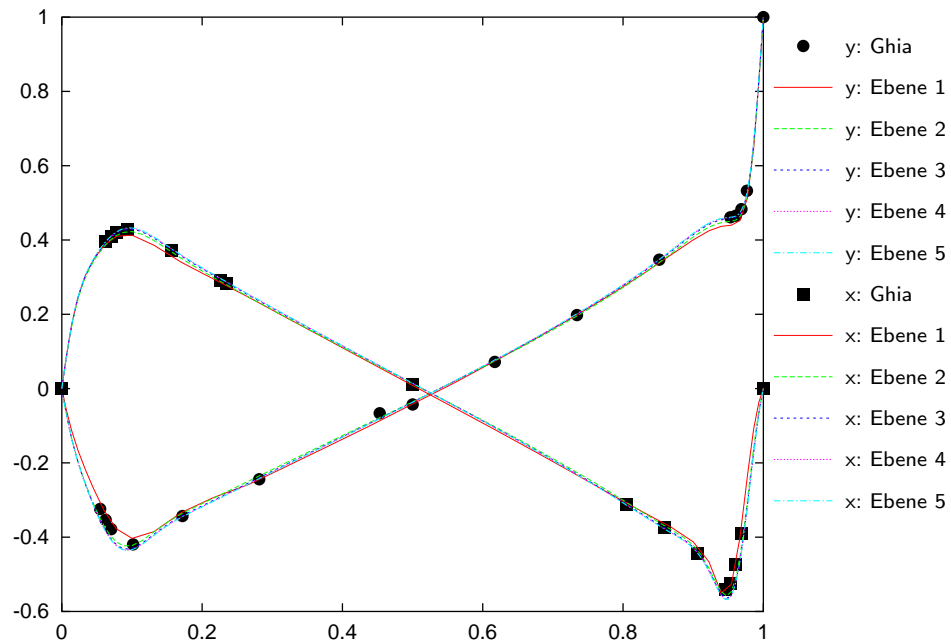


Abbildung 5.10: Vergleich mit Daten von Ghia et al. bei der FLOW-Version mit PAC, $(2)_{\text{korrr}}$ und LPS; x-Linien: v entlang $y = \frac{1}{2}$; y-Linien: u entlang $x = \frac{1}{2}$

Für die FLOW-Version mit PAC-Aufwindverfahren und der Variante $(2)_{\text{korrr}}$ sind die berechneten Werte in perfekter Übereinstimmung mit den Referenzdaten, wie aus Abbildung 5.10 ersichtlich ist. Desweiteren ist auch kaum ein Unterschied zwischen den Lösungen der Gitterebenen 3-5 erkennbar. Die Auflösung ist also schon ausreichend auf Ebene 3. Dies entspricht der Gitterfeinheit der Ghia-Daten, allerdings für ein kartesisches Gitter. Da man auf den weiteren Ebenen keinen Unterschied mehr erkennen kann, erübrigt sich eine weitere Verfeinerung des Gebietes. Wenn man dagegen die einfachere Alternative wählt, um die Konvektion zu diskretisieren, erhält man abweichende Lösungen und insbesondere deutliche Unterschiede der einzelnen Gitterebenen (siehe Abbildung 5.11). Die Approximation ist dabei um Größenordnungen schlechter als bei der PAC-Variante. Auch auf Gitterebene 5 erhält man noch einen klaren Unterschied zu den Vergleichswerten von Ghia et al. Daher ist diese Strategie nicht empfehlenswert. Der Schluß den man daraus ziehen kann ist, daß man durch die PAC-Version eine höhere Ordnung für die Approximation erzielen kann. Das reine Aufwindverfahren ist dagegen sehr diffusiv, das macht sich durch die Abschwächung der Lösung deutlich.

Nun konzentriert man sich darauf, den Unterschied zwischen den beiden betrachteten Diffusionsansätzen nach Raw und $(2)_{\text{korrr}}$ und den beiden Aufwindmethoden LPS und POS zu betrachten. Durch den Wechsel des Diffusionsansatzes kann beim Vergleich mit den Daten

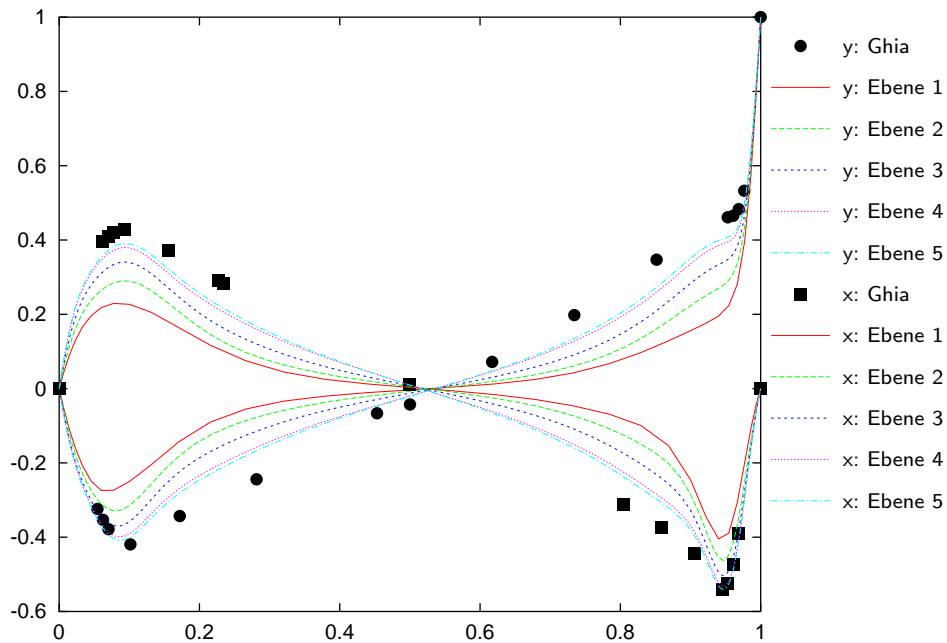


Abbildung 5.11: Vergleich mit Daten von Ghia et al. bei der FLOW-Version mit reinem Aufwindverf., $(2)_{\text{korr}}$ und LPS; x-Linien: v entlang $y = \frac{1}{2}$; y-Linien: u entlang $x = \frac{1}{2}$

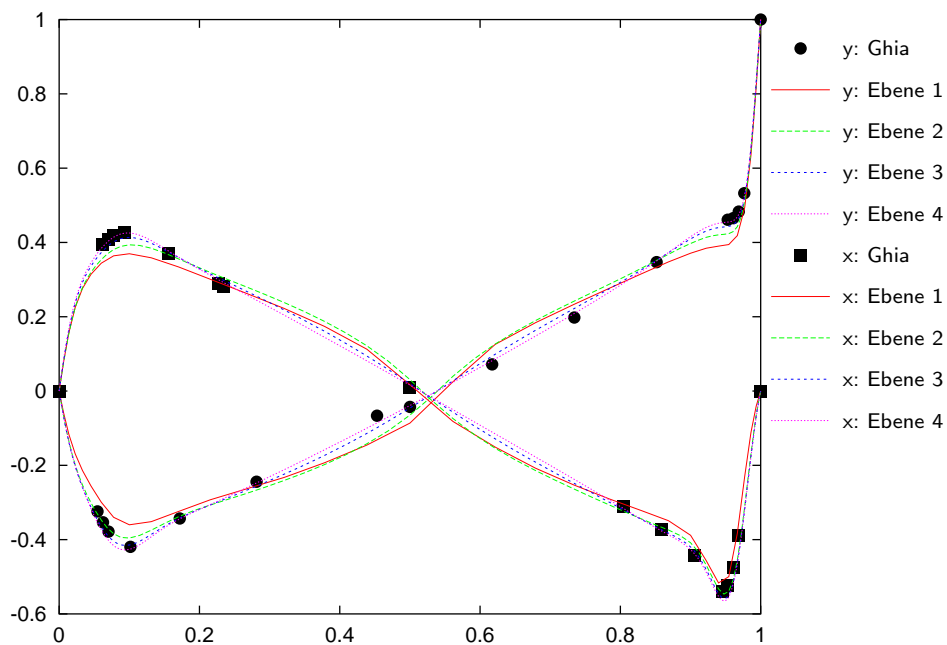


Abbildung 5.12: Vergleich mit Daten von Ghia et al. bei der FLOW-Version mit PAC, $(2)_{\text{korr}}$ und POS; x-Linien: v entlang $y = \frac{1}{2}$; y-Linien: u entlang $x = \frac{1}{2}$

von Ghia kein bedeutender Unterschied ausgemacht werden. Außer auf Ebene 1, die sehr grob ist, liegen die Kurven so nahe beieinander, daß keine Abweichung feststellbar ist. Daher wird auf eine Dokumentation dieses Vergleiches verzichtet. Jedoch ist ein wesentlicher Unterschied erkennbar beim Wechsel vom LPS- zum POS-Aufwindverfahren. Dies kann am besten graphisch anhand Abbildung 5.12 beurteilt werden. Darin ist deutlich der größere diffusive Charakter des POS-Aufwindverfahrens zu erkennen. Erst ab Gitterebene 4 sind die Werte mit denen der Referenzlösung vergleichbar. Im Gegensatz dazu war dies beim LPS-Verfahren schon ab Ebene 3 erfüllt. Das ist ein Indiz für den deutlich diffusiveren Charakter des POS-Aufwindverfahrens, das mehr Verfeinerungsstufen benötigt, um dieselbe Approximation zu erreichen, selbst wenn man wie hier das PAC-Verfahren einsetzt.

		Gitterebene	1	2	3	4
Raw	POS	MG	0.602562	0.757682	0.693777	0.620291
		Bi-CGSTAB	0.597876	0.828692	0.672485	0.627545
	LPS	MG	0.516907	0.607968	0.573768	0.528379
		Bi-CGSTAB	0.513401	0.610105	0.574003	0.535245
$(2)_{\text{korr}}$	POS	MG	0.571756	0.670985	0.650638	0.615633
		Bi-CGSTAB	0.565722	0.665199	0.694321	0.598261
	LPS	MG	0.537921	0.606207	0.539974	0.528284
		Bi-CGSTAB	0.532158	0.605262	0.539620	0.576913

Tabelle 5.7: Mittlere nichtlineare Konvergenzraten ψ_{15}^m bei der FLOW-Version mit PAC-Aufwind

Auffallend bei diesem Problem ist auch, daß die FIELDS-Varianten schlechter gelöst werden können. Natürlich sorgen die beiden enthaltenen Singularitäten dafür, daß die Lösung nicht einfach ist. Auch die für eine stationäre Berechnung relativ hohe Reynoldszahl macht es dem iterativen Löser nicht einfacher. All dies zusammen resultiert in einer schlechten nichtlinearen Konvergenz, wie in Tabelle 5.7 dokumentiert. Es ist auch nur eine Quasi-Newton-Approximation anwendbar, da bei einem vollen Newton-Verfahren die Matrix-Eigenschaften so stark gestört werden, daß das Lösen des Gleichungssystems unmöglich ist. Die Nebendiagonaleinträge werden dabei so stark, daß die Diagonaldominanz verloren geht. Durch den einfacheren Fixpunktansatz kann natürlich auch keine besonders gute nichtlineare Konvergenz erwartet werden.

Doch zeichnen sich die FLOW-Versionen durch relativ robustes Verhalten bezüglich des linearen Löser aus, wohingegen die FIELDS-Versionen schlecht bzw. gar nicht konvergieren, sofern man das PAC-Aufwindverfahren verwendet. Nur für den Fall, daß kein PAC-Aufwind verwendet wird, konvergiert das Mehrgitterverfahren in diesem Fall, allerdings ist die Lösung nicht zufriedenstellend, wie es oben bereits angemerkt wurde. Daher sind die Aussagen diesbezüglich nicht relevant. Im Folgenden werden also nur die Konvergenzraten des Verfahrens mit der Kombination FLOW, PAC, Verfahren nach Raw bzw. $(2)_{\text{korr}}$ und LPS bzw. POS-Aufwindmethoden verglichen. Die Einstellungen für das lineare Mehrgitterverfahren sind: V(2,2)-Zyklus, ILU_0 , $\lambda = 0.7$, bzw. beschleunigt mit Bi-CGSTAB.

In Tabelle 5.8 sind die gemittelten Konvergenzraten eingetragen. Die Konvergenzraten des Mehrgitterverfahrens für die FLOW-Varianten sind schon ausreichend gut, daß auf die Verbes-

serung der Bi-CGSTAB-Beschleunigung verzichtet werden kann. Diese bedeutet einen Mehraufwand, der sich im vorliegenden Fall nicht lohnt. Die nichtlineare Konvergenz ist für die angetriebene Nischenströmung weitaus entscheidender und schwerer zu verbessern. Untersuchungen bezüglich der Modifikation des β -Parameters beim ILU-Glätter haben keine Verbesserung gebracht. Das leicht gedämpfte Verfahren ist schon zufriedenstellend.

		Gitterebene	1	2	3	4
Raw	POS	MG	0.085595	0.091494	0.136954	0.183195
		Bi-CGSTAB	0.099435	0.045878	0.097552	0.061062
	LPS	MG	0.086420	0.090590	0.136742	0.154879
		Bi-CGSTAB	0.093069	0.081388	0.032944	0.039123
$(2)_{\text{korr}}$	POS	MG	0.087045	0.065585	0.149896	0.225173
		Bi-CGSTAB	0.094492	0.053909	0.083759	0.100924
	LPS	MG	0.097826	0.094368	0.102790	0.116907
		Bi-CGSTAB	0.103474	0.088362	0.021776	0.022563

Tabelle 5.8: Mittlere lineare Konvergenzraten κ^* über 15 nichtlineare Schritte bei der FLOW-Version mit PAC-Aufwind

		Gitterebene	1	2	3	4
Raw	POS		5.73515e-05	8.18035e-06	7.0311e-07	9.62171e-08
	LPS		4.31159e-05	3.91027e-06	5.02157e-07	8.48433e-08
$(2)_{\text{korr}}$	POS		5.43548e-05	5.10849e-06	6.57831e-07	1.33205e-07
	LPS		3.53489e-05	3.12022e-06	5.58418e-07	1.27753e-07

Tabelle 5.9: Fehler der Massenerhaltung bei der FLOW-Version mit PAC-Aufwind

Beim Vergleich der Fehler der Massenerhaltung der unterschiedlichen Verfahren erhält man für die an sich kleinere Störung der Massenerhaltungsgleichung bei der $(2)_{\text{korr}}$ -Variante einen größeren Fehler. Qualitativ kann dies wie folgt erläutert werden. Durch die Stabilisierungen erhält man folgenden Beitrag in der Massenerhaltungsgleichung:

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) - Ch^2 \Delta p = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \Delta p = \frac{1}{Ch^2} \operatorname{div}(\mathbf{u}),$$

d.h. durch die geringere Stabilisierung entsteht eine größere Krümmung im Druck. Dadurch wird ebenso der resultierende Druckgradient in den Eckensingularitäten stärker und läßt sich durch den bilinearen Ansatz immer schlechter darstellen. Im gleichen Zug reduziert sich die Kopplung zwischen den $u_i(ip)$ und den Druckwerten, wodurch sich auch der Fehler in der Massenerhaltungsgleichung erhöht. Bei der $(2)_{\text{korr}}$ -Variante ist dieses Verhalten stärker ausgeprägt als bei der Variante nach Raw wegen der kleineren Konstante dieses Ansatzes. Die Abschwächung der Fehlerreduktion von Ebene zu Ebene ist aber bei beiden Versionen gegeben.

5.1.3 Benchmark-Problem Zylinder

Ein sehr interessantes Problem ist die Umströmung eines Zylinders, wie es von Schäfer und Turek in [ST96] veröffentlicht wurde. Es handelt sich hierbei um mehrere Fälle in zwei und drei Raumdimensionen, sowohl stationärer als auch instationärer Natur. Hier soll nun der stationäre zweidimensionale Fall untersucht werden. Der Vollständigkeit halber wird kurz das Problem beschrieben. Es handelt sich um eine Strömung in einem Kanal der Höhe $H=0.41\text{m}$ und der Länge $L=2.2\text{m}$. Leicht außerhalb der Mitte des Kanals ist ein Zylinder mit Durchmesser $D=0.1\text{m}$ angeordnet. Der Mittelpunkt des Zylinders befindet sich 0.2m vom Einflußrand entfernt auf der Höhe 0.2m . Somit ergibt sich ein Auftriebseffekt, der bei mittig angebrachtem Zylinder nicht entstehen würde. Die dem Problem zugeordnete Reynoldszahl ist definiert durch $\text{Re} = \frac{\bar{U}D}{\nu}$ mit der mittleren Einlaßgeschwindigkeit $\bar{U} = \frac{2}{3}u(0, \frac{H}{2})$. Das Profil der Geschwindigkeit am Einflußrand wird wie folgt vorgegeben:

$$u(0, y) = \frac{4U_m}{H^2}y(H - y), v = 0$$

mit $U_m = 0.3 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Daraus resultiert als Reynoldszahl $\text{Re}=20$ bei einer angenommenen Viskosität von $\nu = 10^{-3} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. Es werden Daten über den Auftriebs- und Widerstandsbeiwert c_a und c_w , die Druckdifferenz am Zylinder $\Delta p = p(0.15, 0.2) - p(0.25, 0.2)$ und die Länge der Rezirkulationszone L_a in [ST96] bereitgestellt. Anhand dieser Daten kann also die Diskretisierung eingeordnet bzw. getestet werden. Die beiden Beiwerte c_a und c_w werden anhand nachfolgender Formeln berechnet:

$$F_a = - \int_S \nu \frac{\partial u_t}{\partial n} n_x + p n_y dS \quad c_a = \frac{2F_a}{\bar{U}^2 D}$$

$$F_w = \int_S \nu \frac{\partial u_t}{\partial n} n_y - p n_x dS \quad c_w = \frac{2F_w}{\bar{U}^2 D}$$

mit S der Oberfläche des Zylinders, $\mathbf{n} = (n_x, n_y)^T$ dem äußeren Normalenvektor des Zylinders und u_t der tangentialen Geschwindigkeit. Die Randbedingungen sind Einfluß am linken Rand mit vorgegebenem Geschwindigkeitsprofil, Ausfluß am rechten Rand mit Vorgabe an den Druck und Haftrand- bzw. Wandrandbedingung sonst.

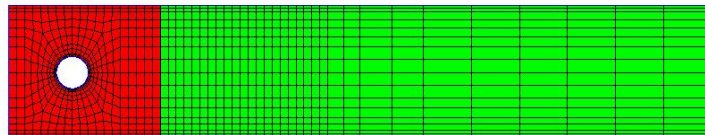


Abbildung 5.13: Gitter der Ebene 1 des Zylinderproblems verteilt auf zwei Prozessoren

In Abbildung 5.13 ist das Gitter auf Ebene 1 dargestellt. Das grobe Gitter der Ebene 0 besteht dabei aus 289 Gitterpunkten und wird fünfmal uniform verfeinert. Da das feinste Gitter 253 952 Elemente besitzt – das entspricht 765 792 Unbekannten – wird es parallel auf zwei Prozessoren

verteilt. Der Prozessorand ist verschwindend gering und liegt auch außerhalb der Zone um den Zylinder, daher ist der Einfluß der parallelen Rechnung auf die Konvergenzeigenschaft als gering einzustufen. Die Aussagen sind also mit einem rein sequentiell gerechneten Problem vergleichbar. Als Mehrgitterzyklus wird der V-Zyklus mit jeweils zwei Vor- und Nachglättungsschritten gewählt. Die nichtlineare Approximation des konvektiven Terms erfolgt über ein Quasi-Newton-Verfahren (vergleiche Abschnitt 2.2). Der lineare Löser besteht aus einem reinen Mehrgitterverfahren mit ILU_β als Glätter. Für dieses Problem werden unterschiedliche Einstellungen des Dämpfungsparameters λ untersucht, auch in Kombination mit β . Bezüglich der Diskretisierung werden sowohl die Methode FLOW, als auch FIELDS in Verbindung mit der Variante nach Raw und der Variante $(2)_{\text{korrr}}$ und zwei Aufwindstrategien (LPS und POS) in Betracht gezogen. Da es sich schon bei der angetriebenen Nischenströmung gezeigt hat, daß die Aufwindstrategie mittels physikalischer Phänomene sehr hilfreich sein kann, wird an dieser Stelle auf das reine Aufwindverfahren verzichtet. Desweiteren wird wiederum das Peclet-Zahl-abhängige Verschieben zu zentralen Differenzen aus Formel (2.26) eingesetzt. Zur Veranschaulichung der Lösung sind in Abbildung 5.14 die u - und p -Komponente des Lösungsvektors dargestellt.

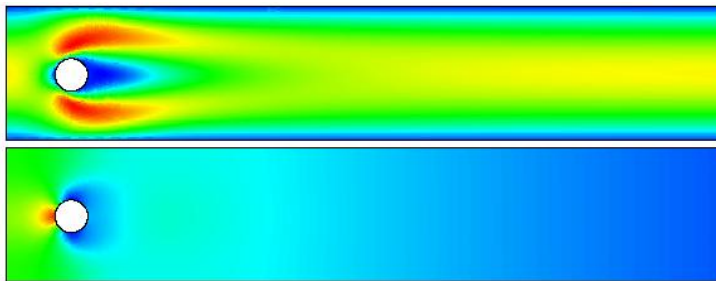


Abbildung 5.14: Lösung des stationären Zylinderproblems, Komponente u (oben) und p ; rot bedeutet große Werte, blau kleine Werte

Wenn man den Fehler in der Massenerhaltung betrachtet, stellt man ähnliche Phänomene wie beim Kanal fest. Die Variante von Raw liefert größere Fehler und ist auch bezüglich der gewählten Aufwindstrategien empfindlicher. In Abbildung 5.15 ist das Verhalten des Divergenzfehlers bei unterschiedlichen Diskretisierungsmethoden über den Gitterebenen aufgetragen. Es zeigt sich wiederum, daß die Varianten $(2)_{\text{korrr}}$ einen geringeren Fehleranteil in die Massenerhaltung eintragen. Dies ist unabhängig von der gewählten Stabilisierungsversion FIELDS oder FLOW und auch unabhängig vom Aufwindverfahren LPS oder POS. Ein weiterer Aspekt ist der etwas geringere Divergenzfehler bei den FLOW-Verfahren gegenüber ihren entsprechenden FIELDS-Methoden. Jedoch wird der Abstand natürlich von Gitterebene zu Gitterebene geringer, da die beiden Varianten im Limit identisch sind. Auffallend ist auch, daß die FLOW-Varianten bei unterschiedlichen Aufwindmethoden denselben Fehler in der Massenerhaltung liefern. In der bereits erwähnten Abbildung sind die Linien kaum zu unterscheiden, da sie nahezu aufeinander liegen. Im Gegensatz dazu entsteht allerdings bei den FIELDS-Varianten ein viel größerer Fehler, falls das POS-Aufwindverfahren angewandt wird. Dieses Phänomen wird bei der Diskussion der Strömungswerte nochmals aufgegriffen.

Um die Lösungen mit den Ergebnissen des Benchmark-Problems aus [ST96] zu vergleichen, werden die berechneten Kennzahlen c_a , c_w , $\Delta p = p(0.15, 0.2) - p(0.25, 0.2)$ und L_a in tabellarischer Form wiedergegeben.

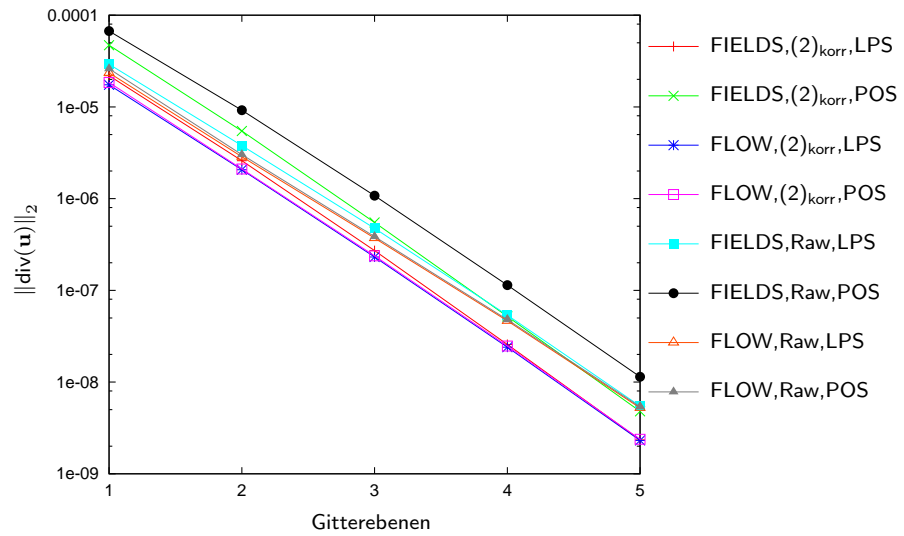


Abbildung 5.15: Divergenzfehler beim stationären Zylinderproblem

Verschiedene Einstellungen der Diskretisierung								
	FIELDS, Raw, POS				FLOW, Raw, POS			
	c_a	c_w	Δp	L_a	c_a	c_w	Δp	L_a
1	-0.006046	5.68059	0.116089	0.10333	0.0094578	5.79793	0.11731	0.087246
2	0.0061385	5.58294	0.115182	0.0906141	0.0095402	5.60694	0.116015	0.0855147
3	0.0088995	5.57301	0.116294	0.084505	0.0101323	5.57703	0.116644	0.0846533
4	0.0101451	5.57429	0.116954	0.0839683	0.0104523	5.57537	0.117078	0.0844507
5	0.0104767	5.57644	0.117262	0.0844187	0.01057	5.57704	0.117297	0.0845162
	FIELDS, Raw, LPS				FLOW, Raw, LPS			
	c_a	c_w	Δp	L_a	c_a	c_w	Δp	L_a
1	0.0043567	5.69467	0.116764	0.0886649	0.0049432	5.70437	0.116498	0.0875226
2	0.0083382	5.58791	0.116108	0.0844679	0.0084492	5.58924	0.116089	0.0843997
3	0.0099279	5.57287	0.116679	0.0844216	0.0099374	5.57302	0.116679	0.0844254
4	0.0104195	5.5741	0.117079	0.0845284	0.0104202	5.57412	0.117079	0.0845296
5	0.0105643	5.57665	0.117295	0.0845643	0.0105644	5.57665	0.117295	0.0845644
	FIELDS, (2) _{korr} , POS				FLOW, (2) _{korr} , POS			
	c_a	c_w	Δp	L_a	c_a	c_w	Δp	L_a
1	0.0042179	5.6105	0.117215	0.100012	0.0119883	5.68271	0.117841	0.0876373
2	0.0082717	5.56901	0.116822	0.0870416	0.0102995	5.58098	0.117174	0.0858957
3	0.0100914	5.56961	0.117231	0.084474	0.0104346	5.57283	0.117375	0.0848714
4	0.0104788	5.57434	0.117395	0.084343	0.010559	5.57508	0.117435	0.0845836
5	0.0105743	5.57695	0.117447	0.0845243	0.0106007	5.57716	0.117457	0.0845693
	FIELDS, (2) _{korr} , LPS				FLOW, (2) _{korr} , LPS			
	c_a	c_w	Δp	L_a	c_a	c_w	Δp	L_a
1	0.0084572	5.61618	0.117811	0.0883903	0.0085525	5.62453	0.117781	0.0878867
2	0.0097004	5.57074	0.117299	0.0852535	0.0097394	5.57125	0.117291	0.08519
3	0.0103611	5.57078	0.117393	0.0847228	0.0103628	5.57081	0.117392	0.0847183
4	0.0105476	5.57455	0.117434	0.0846082	0.0105477	5.57455	0.117434	0.0846079
5	0.0105988	5.57702	0.117455	0.0845849	0.0105988	5.57702	0.117455	0.0845849

Referenzwerte	c_a	c_w	Δp	L_a
min	0.0104	5.5700	0.1172	0.0842
max	0.0110	5.5900	0.1176	0.0852

Tabelle 5.10: Kennzahlen inklusive Referenzzahlen beim Zylinderproblem für die Ebenen 1-5

			Gitterebene	1	2	3	4	5
FIELDS	Raw	POS	MG	0.124605	0.049042	0.087377	0.117324	0.178610
			Bi-CGSTAB	0.020272	0.027265	0.009842	0.016164	0.035722
		LPS	MG	0.124967	0.161988	0.327967	0.247334	0.349225
			Bi-CGSTAB	0.025305	0.048357	0.135171	0.116171	0.169209
	(2) _{korr}	POS	MG	0.165513	0.083415	0.122665	0.113318	0.185234
			Bi-CGSTAB	0.037523	0.014755	0.021024	0.017874	0.045238
		LPS	MG	0.289462	0.329998	0.587412	0.351480	div.
			Bi-CGSTAB	0.094177	0.124644	0.312441	0.141045	0.200320
FLOW	Raw	POS	MG	0.141644	0.107382	0.168546	0.169003	0.204748
			Bi-CGSTAB	0.042044	0.026125	0.058388	0.035895	0.069096
		LPS	MG	0.140527	0.114079	0.251994	0.332795	0.425156
			Bi-CGSTAB	0.038747	0.023397	0.115755	0.173758	0.229832
	(2) _{korr}	POS	MG	0.190314	0.136701	0.205454	0.159692	0.206320
			Bi-CGSTAB	0.080685	0.043047	0.109002	0.063701	0.078800
		LPS	MG	0.186683	0.151810	0.215383	0.353894	0.521892
			Bi-CGSTAB	0.066476	0.049775	0.081902	0.158071	0.242549

Tabelle 5.11: Lineare mittlere Konvergenzraten κ^* über 15 nichtlineare Schritte beim Zylinderproblem

Alle Ergebnisse sind vergleichbar mit den in [ST96] veröffentlichten Werten, außer denen der sehr groben Gitter 1 und 2. Diese sind jedoch noch zu grob, um sie als repräsentativ anzusehen. Man kann also davon ausgehen, daß alle Varianten zu korrekten Ergebnissen führen. Leider ist für dieses Problem keine exakte Lösung bekannt, aber durch den Vergleich mit anderen Gruppen, wie er hier stattfindet, kann man die Ergebnisse zumindest einordnen.

Zum Vergleich der verschiedenen Einstellungen der Diskretisierung wird die Druckdifferenz Δp betrachtet. Dieser Wert entspricht einem punkweisen Vergleich, wohingegen der Auftriebs- und Widerstandsbeiwert integrale Größen sind und selbst Rundungsfehler enthalten können. Betrachtet man nun also die zwei Stabilisierungsvarianten FIELDS und FLOW, kann man erkennen, daß sich die Druckdifferenz kaum unterscheidet, solange man LPS als Aufwindverfahren einsetzt. Dagegen ergeben sich deutliche Unterschiede, wenn das POS-Aufwindverfahren verwendet wird. Dieses Phänomen war auch schon im Vergleich der Divergenzfehler aufgefallen. Durch den größeren Fehler in der Massenerhaltung, wird auch die Drucklösung beeinflusst und resultiert in größeren Abweichungen der erhaltenen Lösungen der zwei Stabilisierungsvarianten. Man kann also daraus schließen, daß die FLOW-Variante durch den zusätzlichen Term $-u_i \text{div}(\mathbf{u})$ am Integrationspunkt, diesem Phänomen entgegenwirkt. Dies läßt sich auch aus Tabelle 5.10 entnehmen. Die Druckdifferenz variiert bei der FLOW-Variante kaum beim Wechsel des Aufwindverfahrens. Jedoch ist die Differenz der Lösungen bei der FIELDS-Variante in diesem Fall etwa um eine Größenordnung stärker ausgeprägt. Dies ist analog zu den relativ geringen Unterschieden zwischen FIELDS und FLOW beim Massenerhaltungsfehler, sofern das LPS-Verfahren eingesetzt wird, bzw. zu den relativ großen Unterschieden beim POS-Verfahren.

Betrachtet man die mittleren linearen Konvergenzraten in Tabelle 5.11, die zu einem $V(2,2)$ -Zyklus mit ILU_0 als Glätter und Dämpfungsparameter $\lambda = 0.7$ bzw. zum mit Bi-CGSTAB beschleunigten Verfahren gehören, so erweisen sich bessere Konvergenzeigenschaften des Diskretisierungsverfahrens, falls das POS-Verfahren verwendet wird. Allerdings liefert dieses Auf-

		Gitterebene		1	2	3	4	5
FIELDS	Raw	POS	MG	0.496180	0.731496	0.749030	0.723666	0.654368
			Bi-CGSTAB	0.492932	0.744993	0.747225	0.731864	0.649260
	(2) _{korr}	LPS	MG	0.387886	0.513605	0.426346	0.321650	0.217698
			Bi-CGSTAB	0.387941	0.513610	0.426321	0.321563	0.217667
	(2) _{korr}	POS	MG	0.469714	0.710564	0.705534	0.672514	0.591612
			Bi-CGSTAB	0.466883	0.700887	0.681420	0.665922	0.586745
(2) _{korr}	LPS	MG	0.353407	0.446543	0.336339	0.227240	-	
		Bi-CGSTAB	0.354989	0.446459	0.336329	0.227365	0.191174	
FLOW	Raw	POS	MG	0.357403	0.377986	0.406477	0.492462	0.484868
			Bi-CGSTAB	0.355145	0.378634	0.406474	0.488730	0.484472
	(2) _{korr}	LPS	MG	0.268988	0.360929	0.297550	0.254902	0.206711
			Bi-CGSTAB	0.269221	0.361380	0.297971	0.254734	0.205635
	(2) _{korr}	POS	MG	0.244091	0.312435	0.264821	0.378235	0.437072
			Bi-CGSTAB	0.244089	0.312885	0.265052	0.473261	0.436726
(2) _{korr}	LPS	MG	0.240757	0.310366	0.262293	0.207109	0.194549	
		Bi-CGSTAB	0.240753	0.310238	0.261883	0.207061	0.193239	

Tabelle 5.12: Mittlere nichtlineare Konvergenzraten ψ_{15} des Zylinderproblems

windverfahren eine schlechtere nichtlineare Konvergenz, wie aus Tabelle 5.12 deutlich wird. Dieses Verhalten ist unabhängig von der gewählten Stabilisierungsversion FIELDS oder FLOW und auch unabhängig von den Varianten nach Raw bzw. (2)_{korr}. Auch in Bezug auf die Masenerhaltung schneidet das POS-Aufwindverfahren teilweise schlechter ab, daher ist es nicht empfehlenswert, wenn man hoch nichtlineare Prozesse betrachten möchte. Das LPS-Verfahren dagegen, resultiert in Problemen beim Lösen mittels eines reinen Mehrgitterverfahrens. In Kombination mit dem Krylov-Unterraum-Verfahren Bi-CGSTAB, sind gute lineare Konvergenzraten erreichbar. Allerdings bedeutet dies auch, daß je Iterationsschritt zweimal mit Mehrgitter vorkonditioniert wurde. Wenn man dies bei der Berechnung der Konvergenzrate berücksichtigt, erhält man ähnliche Werte wie beim reinen Mehrgitterverfahren. Der Schluß daraus ist also, daß sich trotz allem das Bi-CGSTAB-Verfahren nicht lohnt, bis auf ein oder zwei Fälle, bei denen das Mehrgitterverfahren viel zu viele Schritte benötigen würde, um dieselbe Reduktion zu erreichen (siehe z.B. bei FIELDS-(2)_{korr}-LPS). Man muß dabei natürlich auch noch den größeren Aufwand des Krylov-Raum-Lösers bedenken, der mit einem erhöhten Zeitbedarf verbunden ist, um die in der Tabelle eingetragenen Konvergenzraten zu erhalten. Es bietet sich also am ehesten eine Strategie an, die primär das Mehrgitterverfahren benützt und nur in Ausnahmesituationen das Bi-CGSTAB-Verfahren als Beschleuniger dazuschaltet.

Für dieses Zylinderproblem werden auch Testrechnungen mit anderen Einstellungen für das Mehrgitterverfahren gemacht: $\beta = (0.2, 0.2, 1)$, $\beta = (0.4, 0.4, 1)$ jeweils mit $\lambda = 0.7$, oder auch unterschiedliche Einstellungen des Dämpfungsparameters $\lambda = (1, 1, 0.5)$, $\lambda = (1, 1, 0.7)$ mit $\beta = 0$ und $\beta = (0, 0, 0.5)$. Allerdings liefert das nur mit $\lambda = 0.7$ gedämpfte Mehrgitterverfahren die besten Resultate, daher wird auf eine Auflistung der Ergebnisse der anderen Einstellungen verzichtet.

Bezüglich der nichtlinearen Konvergenz ergeben sich durch Wechsel des linearen Lösungsverfahrens nur marginale Unterschiede, die auf kleine Rundungsfehler zurückzuführen sind. Wie bereits bei den vorangegangenen Testfällen ist auch hier die nichtlineare Reduktion der LPS-Verfahren deutlich schneller gegenüber den POS-Verfahren. Auch beim direkten Vergleich der

Varianten nach $(2)_{\text{korr}}$ und nach Raw sind in diesem Fall die Konvergenzraten der $(2)_{\text{korr}}$ -Verfahren besser als die bei Raw. Schließlich läßt sich auch wieder die schnellere nichtlineare Reduktion der FLOW-Stabilisierungen gegenüber ihren FIELDS-Varianten feststellen.

5.1.4 Zylinderproblem in drei Raumdimensionen

Wie bereits in Abschnitt 5.1.3 erwähnt, wurde auch in drei Raumdimensionen das Zylinderproblem als Benchmark in [ST96] zur Verfügung gestellt. Als Vergleich wird hierfür der Fall der Umströmung eines Zylinders mit quadratischem Profil herangezogen. Die Problemstellung ist ähnlich zum stationären Fall in zwei Raumdimensionen. Die Dimensionen des Gebietes sind etwas größer durch die dreidimensionalen Effekte, die auftreten können. Das Gebiet ist insgesamt 2.5m lang und jeweils $H=0.41\text{m}$ hoch und breit. Der Abstand des Zylinders vom Einflußrand beträgt $l=0.45\text{m}$ und seine Achse ist $h_u=0.2\text{m}$ vom Boden und $h_o=0.16\text{m}$ vom oberen Rand entfernt. Die Seitenlänge des Zylinders beträgt $D=0.1\text{m}$. Der Ausflußrand ist schließlich $A=1.95\text{m}$ vom Zylinder entfernt. Das Gebiet zeichnet sich also durch einen verlängerten Einfluß- und Ausflußbereich gegenüber dem zweidimensionalen Problem aus. Die Randbedingungen werden analog zum zweidimensionalen Problem gesetzt.

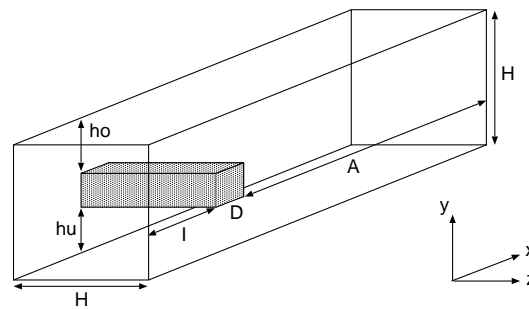


Abbildung 5.16: Problembeschreibung des 3d-Zylinderproblems

Das Strömungsprofil am Einflußrand hat die Form

$$u(0, y, z) = \frac{16U_m}{H^4} yz(H-y)(H-z), v = w = 0$$

mit $U_m = 0.45 \frac{\text{m}}{\text{s}}$. Die mittlere Einflußgeschwindigkeit beträgt damit $\bar{U} = \frac{4}{9}u(0, \frac{H}{2}, \frac{H}{2})$, woraus eine Reynoldszahl von $\text{Re}=20$ resultiert.

Als Vergleichswerte dienen wiederum die Auftriebs- und Widerstandsbeiwerte c_a und c_w , sowie die Druckdifferenz $\Delta p = p(0.45, 0.2, 0.205) - p(0.55, 0.2, 0.205)$. Die Auftriebs- und Widerstandskräfte werden analog zum zweidimensionalen Fall berechnet mit dem Normalenvektor $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0)^T$ und dem Tangentialvektor $\mathbf{t} = (n_y, -n_x, 0)^T$. Daraus werden die Beiwerte nach folgender Vorschrift bestimmt:

$$c_a = \frac{2F_a}{\bar{U}^2 DH} \quad \text{und} \quad c_w = \frac{2F_w}{\bar{U}^2 DH}.$$

Das grobe Gitter auf Ebene 0 besteht aus 168 Hexaeder-Elementen und wird viermal uniform verfeinert. Das Gleichungssystem des feinsten Gitters auf Ebene 4 besteht somit aus 2 872 576

Unbekannten. Die Simulation erfolgt auf 16 Prozessoren mit der rekursiven Koordinatenbisektion (engl. Recursive Coordinate Bisection (RCB)) als Lastverteilung. In Abbildung 5.17 ist die Lastverteilung auf Ebene 1 dargestellt, und in Abbildung 5.18 wird die Lösung in einem Schnitt durch die Mitte des Gebietes verdeutlicht.

Das Ergebnis einer Simulation hängt unter anderem natürlich vom gewählten Gitter ab und ob man es speziell auf die gewünschten Werte adaptiert hat. In dieser Arbeit liegt der Schwerpunkt allerdings nicht auf adaptiver Gitterverfeinerung. Daher wurde auch für diesen Fall darauf verzichtet, auch wenn es für dieses Problem mit Sicherheit angebracht wäre, in der Nähe des Zylinders adaptiv zu verfeinern.

Das Lösungsverfahren ist ein reines lineares Mehrgitterverfahren mit ILU_0 als Glättungsverfahren mit einem Dämpfungsparameter $\lambda = 0.7$. Als Linearisierung wird das Quasi-Newton-Verfahren eingesetzt. Die lineare Reduktion je nichtlinearem Schritt ist 0.01, und es werden jeweils 15 nichtlineare Schritte ausgeführt.

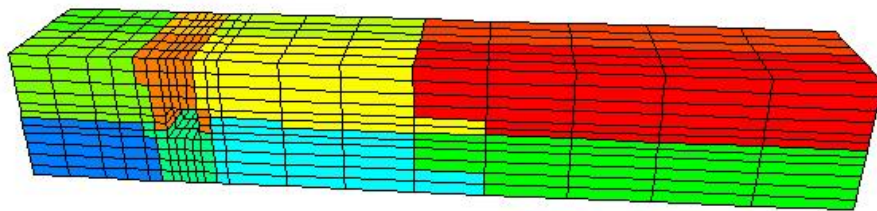
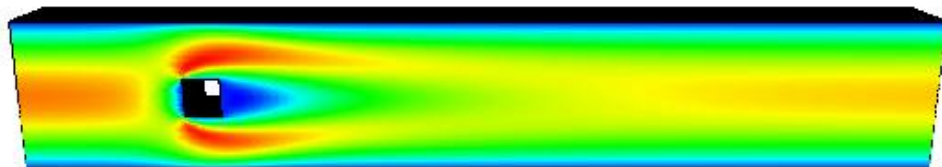


Abbildung 5.17: 3d-Zylinder: Lastverteilung auf 16 Prozessoren



(a) u -Komponente



(b) ω_z

Abbildung 5.18: Lösung des 3d-Zylinderproblems: Schnittebene in der Mitte des Gebietes

FIELDS, Raw, POS				FLOW, Raw, POS			
Ebene	c_a	c_w	Δp	Ebene	c_a	c_w	Δp
1	0.0002127	7.564	0.17135	1	0.0232069	5.90981	0.126727
2	0.0200406	7.7931	0.169946	2	0.0252707	7.52981	0.170585
3	0.0458592	7.57253	0.167308	3	0.0568862	7.57547	0.170503
4	0.0779279	7.55614	0.168964	4	0.0839937	7.58047	0.171163

FIELDS, Raw, LPS				FLOW, Raw, LPS			
Ebene	c_a	c_w	Δp	Ebene	c_a	c_w	Δp
1	0.0182509	8.51974	0.182415	1	0.0348638	7.15225	0.146103
2	0.035794	7.80301	0.176551	2	0.0518532	7.58223	0.172764
3	0.0622718	7.53872	0.170917	3	0.0966481	7.48992	0.170376
4	0.0777192	7.57197	0.171088	4	0.102563	7.5551	0.170913

FIELDS, (2) _{korr} , POS				FLOW, (2) _{korr} , POS			
Ebene	c_a	c_w	Δp	Ebene	c_a	c_w	Δp
1	0.0239461	8.4843	0.186569	1	0.0362567	7.88381	0.177855
2	0.044769	7.60389	0.177637	2	0.0640885	7.56287	0.182144
3	0.0697659	7.57961	0.173959	3	0.0765784	7.59762	0.175889
4	0.080946	7.68035	0.173948	4	0.0781304	7.68736	0.17456

FIELDS, (2) _{korr} , LPS				FLOW, (2) _{korr} , LPS			
Ebene	c_a	c_w	Δp	Ebene	c_a	c_w	Δp
1	0.0304874	8.74677	0.194027	1	0.0387058	8.11984	0.179526
2	0.0666232	7.57602	0.181476	2	0.0803861	7.53497	0.181226
3	0.070259	7.60508	0.175795	3	0.0815206	7.59321	0.175727
4	0.0758045	7.69352	0.174548	4	0.0791879	7.68964	0.174526

Referenzwerte	c_a	c_w	Δp
min	0.06	7.5	0.172
max	0.08	7.7	0.180

Tabelle 5.13: Vergleichswerte des 3d-Zylinderproblems

Die Kennzahlen zu vergleichen ist für diesen Fall deutlich schwieriger, da auch in der Veröffentlichung der Benchmark-Resultate in [ST96] die Werte weit streuen und eine Einordnung dadurch kompliziert ist. Vor allem für die instationären Testfälle in 3d wurden zu wenige Beiträge eingereicht, die auch zu weit auseinander lagen, um fundierte Aussagen machen zu können. Daher wird in dieser Arbeit der stationäre Fall herausgegriffen, um einigermaßen ausgewogene Daten zum Vergleich zu haben. Die Gitterebene 1 ist relativ grob für ein dreidimensionales Problem, daher werden die Resultate nicht weiter bewertet. Im Folgenden konzentriert sich die Diskussion auf die Ebenen 2,3 und 4, die aus 50 752, 374 400 bzw. 2 872 576 Unbekannten bestehen. Betrachtet man wiederum die Druckdifferenz, erhält man ebenso wie in zwei Raumdimensionen das Phänomen, daß sich die Druckwerte der FIELDS- und FLOW-Versionen nicht allzu sehr voneinander unterscheiden, sofern man das LPS-Aufwindverfahren benützt. Beim Wechsel zum POS-Aufwindverfahren jedoch fallen die Unterschiede größer aus. Hier bestätigen sich die Ergebnisse aus dem zweidimensionalen Fall. Die integralen Größen der Auftriebs- und Widerstandsbeiwerte hängen stark von der Implementierung ab und können dadurch weiter

streuen als die Druckdifferenz. Allerdings liegen die Werte für den Auftriebsbeiwert innerhalb der Schranken aus [ST96]. Diese Schranken sind nicht als strikt anzusehen, daher kann man davon ausgehen, daß alle getesteten Versionen mit kleineren Abweichungen nach unten bzw. oben zu korrekten Ergebnissen führen.

FLOW, $(2)_{\text{korr}}$, LPS				
Ebene	c_a	c_w	Δp	$\kappa^* - \text{MG}$
1	0.0386908	8.11984	0.196047	0.496849
2	0.0804566	7.5335	0.181153	0.534006
3	0.0817458	7.59133	0.175718	0.412582
4	0.079778	7.68741	0.174518	0.301933
5	0.0785015	7.73184	0.17419	0.370359

Tabelle 5.14: 3d-Zylinder: Kennzahlen und Konvergenzraten des Mehrgitterverfahrens auf 128 Prozessoren

Zum Vergleich erfolgt eine weitere Simulation, die bis zur Ebene 5 verfeinert wird. Das Problem besteht in diesem Fall aus 22 497 792 Unbekannten und 5 624 448 Elementen. Da es allerdings zu groß ist, um auf 16 Prozessoren verteilt zu werden, erfolgt die Berechnung auf 128 Prozessoren. Die Ergebnisse fallen natürlich geringfügig anders aus, weil ein höherer Parallelisierungseffekt beim Glätten zu spüren ist. Jedoch sind die Resultate ungefähr im gleichen Rahmen wie bei den bisher vorgestellten Simulationen auf 16 Prozessoren (siehe Tabelle 5.14). Die Tendenz der Resultate bleibt also erhalten.

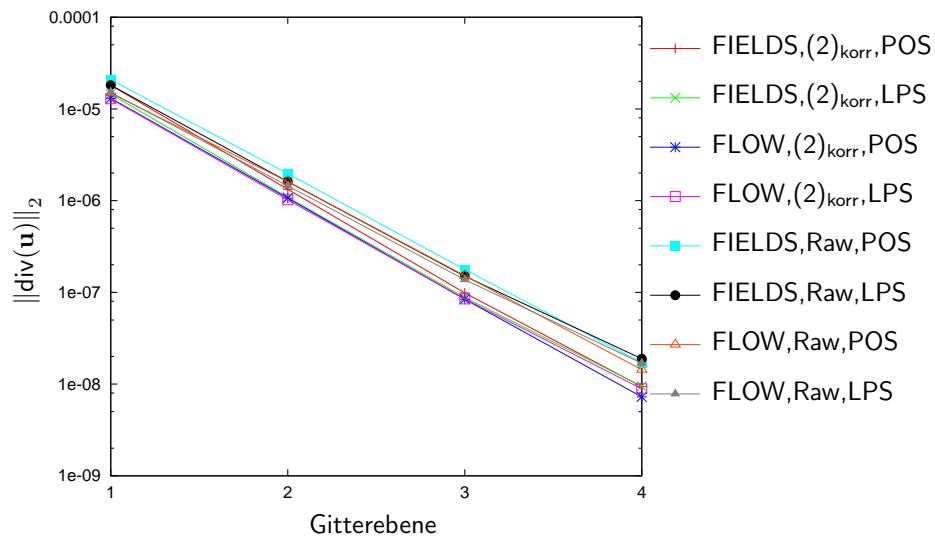


Abbildung 5.19: 3d-Zylinder: Fehler der Massenerhaltung

Aus Abbildung 5.19 wird klar, daß im dreidimensionalen Fall die Fehler der Massenerhaltung deutlich näher beieinander liegen. Trotzdem läßt sich daraus sehr gut ablesen, daß die $(2)_{\text{korr}}$ -Varianten einen geringeren Fehleranteil einbringen, wie es zu erwarten war. Ebenso erreichen die FLOW-Versionen gegenüber ihren entsprechenden FIELDS-Methoden einen kleinen Vorteil

durch einen geringeren Fehler. Allerdings ist das nicht so deutlich erkennbar wie im zweidimensionalen Fall. Trotzdem kann das Ergebnis hiermit bestätigt werden.

Bezüglich der Konvergenzraten der linearen Löser ergeben sich die Werte, die in Tabelle 5.15 eingetragen sind. Dabei werden ein reines Mehrgitterverfahren mit V(2,2)-Zyklus und das mit Bi-CGSTAB beschleunigte Verfahren mit V(1,1)-Zyklus einander gegenübergestellt.

Der Vergleich der linearen Konvergenzraten führt wiederum zu dem Ergebnis, daß sich das mit Bi-CGSTAB beschleunigte Verfahren nicht lohnt. Es hat einen deutlich höheren Aufwand und erzielt im Gegenzug aber keine besseren Konvergenzraten im Vergleich zum Mehrgitterverfahren. Die Konvergenzraten sind sogar in derselben Größenordnung, wodurch sich das beschleunigte Verfahren von selbst als adäquate Methode ausschließt.

			Gitterebene	1	2	3	4
FIELDS	Raw	POS	MG	0.426795	0.291915	0.392594	0.513337
			Bi-CGSTAB	0.318671	0.285258	0.385918	0.436443
		LPS	MG	0.471728	0.402796	0.498710	0.563822
			Bi-CGSTAB	0.363937	0.344291	0.433410	0.511641
	(2) _{korr}	POS	MG	0.440847	0.390398	0.399116	0.340757
			Bi-CGSTAB	0.347444	0.359808	0.383404	0.346197
		LPS	MG	0.504978	0.461698	0.494387	0.345816
			Bi-CGSTAB	0.400423	0.381984	0.450906	0.286177
FLOW	Raw	POS	MG	0.413656	0.232515	0.196236	0.355073
			Bi-CGSTAB	0.309453	0.200915	0.197032	0.332644
		LPS	MG	0.444051	0.277445	0.290317	0.518919
			Bi-CGSTAB	0.294869	0.212984	0.248601	0.466732 ¹
	(2) _{korr}	POS	MG	0.422708	0.259015	0.206307	0.199393
			Bi-CGSTAB	0.318268	0.216403	0.221903	0.186356
		LPS	MG	0.415957	0.340895	0.239126	0.159250
			Bi-CGSTAB	0.308051	0.294231	0.226360	0.143952

Tabelle 5.15: 3d-Zylinder: Lineare mittlere Konvergenzraten κ^* über 15 nichtlineare Schritte

Nun konzentriert man sich auf das unbeschleunigte Mehrgitterverfahren und vergleicht die beiden Stabilisierungsmethoden FIELDS und FLOW. Dabei kann man feststellen, daß das FLOW-Verfahren stets schneller konvergiert als das entsprechende FIELDS-Verfahren, im Gegensatz zum zweidimensionalen Fall, bei dem es tendenziell umgekehrt war. Dies liegt mit großer Wahrscheinlichkeit an der eckigen Form des Zylinders in drei Raumdimensionen, wodurch die starke Kopplung der Geschwindigkeitskomponenten untereinander wesentlich wird und damit der lineare Löser das Problem besser lösen kann. Beim 2d-Problem sind keine so wohldefinierten „Abrißkanten“ enthalten. An den Kanten des Zylinders in drei Raumdimensionen liegen jedoch starke Gradienten vor, die das FLOW-Verfahren besser abbilden kann und damit auch der lineare Löser. Analog zum zweidimensionalen Problem erreicht man wiederum meist bessere Konvergenzraten, sofern das POS-Aufwindverfahren zum Einsatz kommt. Jedoch sind die Unterschiede in drei Raumdimensionen nicht so groß. Interessanterweise verbessern sich beim

¹14 Iterationen, keine ausreichende Konvergenz im letzten Iterationsschritt

$(2)_{\text{korr}}$ -Verfahren die Konvergenzraten auf feineren Gittern, beim Raw-Verfahren ist jedoch das Gegenteil der Fall. Leider bestätigt die Vergleichsrechnung bis Gitterebene 5 diesen Sachverhalt nicht, wie aus Tabelle 5.14 klar wird. Speziell bei diesem Fall könnte der Parallelisierungseffekt beim Glätter für die geringfügige Erhöhung der Konvergenzrate bei Ebene 5 verantwortlich sein, so daß durch eine Erhöhung der Zahl der Glättungsschritte dieses Phänomen abgefangen werden könnte.

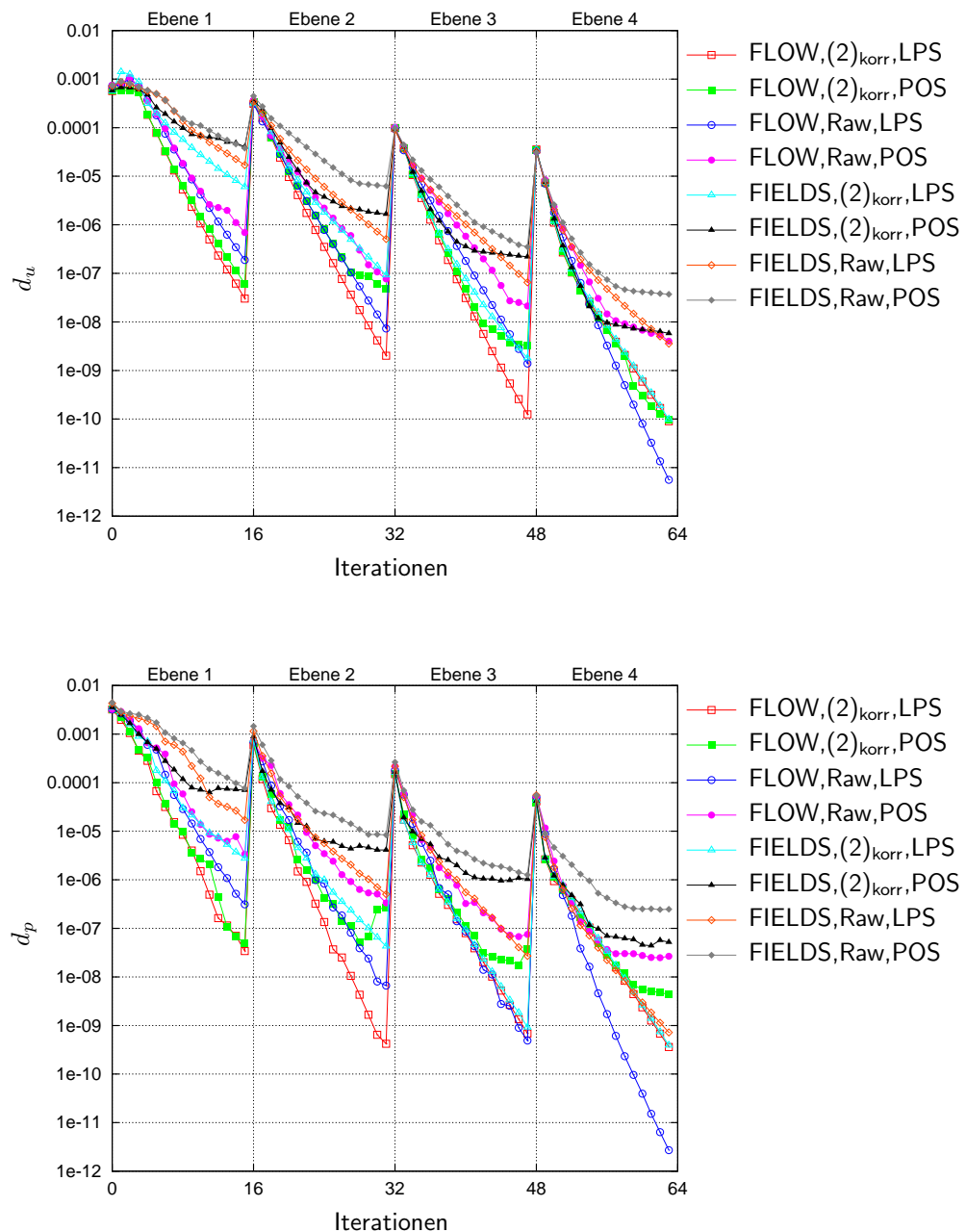


Abbildung 5.20: 3d-Zylinder: Entwicklung des nichtlinearen Defektes bei geschachtelter Iteration für die u - und p -Komponente der Lösung

Das nichtlineare Konvergenzverhalten ist in Abbildung 5.20 für die Defekte der u - und p -Komponente aufgetragen. Bemerkbar macht sich wiederum das schlechtere nichtlineare Konvergenzverhalten, wenn das POS-Aufwindverfahren eingesetzt wird. Wie bereits bei der Kanalströmung ist auch in diesem Fall die nichtlineare Konvergenz der FLOW-Varianten schneller als die entsprechenden FIELDS-Methoden. Desweiteren kann wiederum festgestellt werden, daß der nichtlineare Defekt bei den Varianten mit POS-Verfahren, vor allem bei der Druckkomponente, nicht unter ein gewisses Niveau reduziert werden kann. Im Gegensatz dazu kann beim LPS-Verfahren der Defekt weiter reduziert werden, ohne daß eine deutliche Abschwächung der Konvergenz festzustellen ist.

5.1.5 Chorin's abklingende Wirbel

Von Chorin wurde 1968 [Cho68] ein einfaches Testproblem im Einheitsquadrat mit einer exakten Lösung folgender Form präsentiert:

$$\begin{aligned} u &= -\cos(n\pi x)\sin(n\pi y)e^{-\frac{2n^2\pi^2 t}{\tau}} \\ v &= \sin(n\pi x)\cos(n\pi y)e^{-\frac{2n^2\pi^2 t}{\tau}} \\ p &= -\frac{1}{4}(\cos(2n\pi x) + \cos(2n\pi y))e^{-\frac{4n^2\pi^2 t}{\tau}}, \end{aligned}$$

wobei $\tau = \nu^{-1}$ die Relaxationszeit bezeichne, und n die Anzahl der Wirbel, die in der Strömung vorkommen. Als Werte werden hierfür eingesetzt: $\tau = 1000$ und $n = 4$. Auch in der Habilitationsschrift von John [Joh02] wurde dieses Problem mit denselben Parametern betrachtet. Bei John wurden Dirichletwerte als Randbedingung vorgegeben. Da das Problem allerdings periodisch ist, werden in diesem Fall periodische Randbedingungen verwendet, um auch diese damit testen zu können. Zur Veranschaulichung des Charakters der Strömung sei auf Abbildung 5.21 verwiesen.

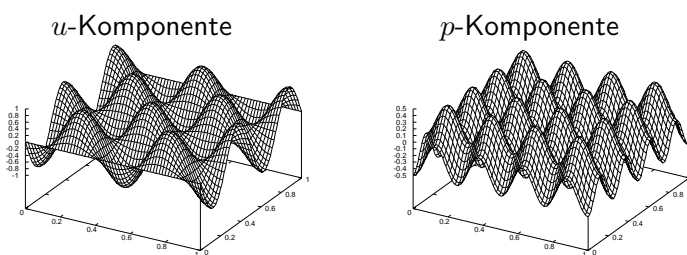


Abbildung 5.21: Exakte Lösung des Chorin-Problems bei $t=0$

Als Lösungsverfahren wird hierfür ein reines Mehrgitterverfahren eingesetzt, mit einem $V(2,2)$ -Zyklus, ILU_0 als Glätter und Dämpfungsparameter $\lambda = 1.0$. Die geforderte lineare Reduktion je nichtlinearem Schritt ist mindestens 10^{-1} und die nichtlineare Reduktion wird auf 10^{-6} gesetzt. Als Linearisierungsmethode wird das volle Newton-Verfahren wie in Abschnitt 2.2 beschrieben eingesetzt. Das Zeitschrittverfahren ist das in den Kapiteln 2 und 4 vorgestellte diagonal implizite Runge-Kutta-Verfahren DIRK(2). Es werden Gitter mit einer Gitterweite von $h = \frac{1}{16}$ (bei Ebene 3) bis $h = \frac{1}{128}$ (bei Ebene 6) betrachtet. Gleichzeitig wird auch der

Zeitschritt mit der Gitterweite halbiert, um die resultierende CFL-Zahl auf ungefähr gleichem Niveau zu halten. Die Zeitschrittweiten werden pro Gitter wie folgt gewählt: $\Delta t = h$, $\Delta t = 2h$ und $\Delta t = 4h$, wodurch sich auch der Einfluß der Zeitschrittweite beurteilen läßt. Daraus resultieren CFL-Zahlen von 1, 2 bzw. 4 am Anfang der Simulation. Naturgemäß verringern sich diese im Laufe der Simulation aufgrund der immer schwächer werdenden Lösung und der konstant gewählten Zeitschritt- und Gitterweite.

In den Abbildungen C.1 bis C.4 im Anhang ist der Fehler der u -Komponente (der mit dem Fehler der v -Komponente aus Symmetriegründen übereinstimmt) und der p -Komponente über der Zeit aufgetragen. Darin werden jeweils die verschiedenen Diskretisierungsmöglichkeiten FIELDS und FLOW, als auch die beiden Ansätze nach Raw und (2) mit verschiedenen Zeitschrittweiten und dem LPS-Aufwindverfahren dargestellt. Exemplarisch wird hier der Fall FLOW auf Ebene 6 in Abbildung 5.22 herausgegriffen.

Die kleinste betrachtete Gitterweite ist für dieses Problem relativ grob, da für die stehenden Wirbel nur 4 Gitterpunkte zur Darstellung in jede Richtung vorhanden sind. Dadurch ist der Fehler der Lösung relativ groß und wird bei Gitterverfeinerung geringer, wie es zu erwarten ist. Allerdings beeinflußt auch die Wahl des Zeitschritts die Größe des Fehlers, v.a. da die Zeitschrittweite nicht nur in die Impulsgleichung bei der Diskretisierung des Zeitterms eingeht, sondern auch durch die Stabilisierung in die Massenerhaltung einfließt. Desweiteren beeinflußt die Zeitschrittweite auch die Behandlung der Konvektion durch die eingesetzte PAC-Aufwindmethode (vergleiche Abschnitt 2.6). Daraus resultieren sehr unterschiedliche Verhaltensweisen der getesteten Diskretisierungsvarianten bei Zeitschritthalbierung.

Die Eigenschaft der Strömung, am Anfang einen starken Zeitgradienten zu enthalten, der aber sehr schnell kleiner wird, kann auch im Verhalten des Fehlers der u -Komponente abgelesen werden. Solange die zeitlichen Ableitungen der Lösung relativ groß sind, erhält man durch Halbierung des Zeitschritts auch einen kleineren Fehler der resultierenden Lösung. Allerdings ändert sich das Verhalten deutlich, sobald der Zeitgradient ab ca. $t=2$ geringer ist (siehe Abbildungen C.3, C.4). Daraus läßt sich schließen, daß man zu späteren Zeitpunkten größere Zeitschrittweiten wählen sollte, um dem immer schwächer werdenden Zeitgradienten zu folgen, der sich dann auch leichter abbilden läßt. Das Verhalten der Druckkomponente sieht dagegen anders aus. Von vorneherein enthält die bestimmende Gleichung, die Massenerhaltungsgleichung, keine von der Zeit abhängigen Terme. Durch die Stabilisierung werden jedoch auch Variationen in der Zeit eingeführt, da die zur Bestimmung der Stabilisierung verwendete Gleichung (2.16) bzw. (2.23) natürlich auch einen Zeitterm enthält. Jedoch ist der Fehler der Druckkomponente am geringsten, falls ein möglichst großer Zeitschritt gewählt wird. Vernachlässigt man für die Stabilisierung diesen Zeitterm, erhält man sogar einen größeren Fehler in der Lösung, da man dadurch die zeitliche Veränderung der Abhängigkeit von Druck und Geschwindigkeit vernachlässigt, um die Stabilisierung zu bestimmen. Als Ausweg bleibt nur, eine möglichst ausgewogene Wahl der Zeitschrittweite vorzunehmen, in dem Sinn, daß kein zu kleiner Zeitschritt gewählt wird, aber auch kein zu großer, sofern eine starke zeitliche Änderung in der Strömung vorliegt. Besonders zu Beginn der Simulation sind sehr starke Veränderungen in der Strömung vorhanden, die mit einem zu groß gewählten Zeitschritt nur schlecht abgebildet werden können. Zu späteren Zeitpunkten flachen diese Veränderungen ab und man könnte größere Zeitschrittweiten erlauben. Das macht aber den Vergleich von unterschiedlichen Werten für Δt schwieriger.

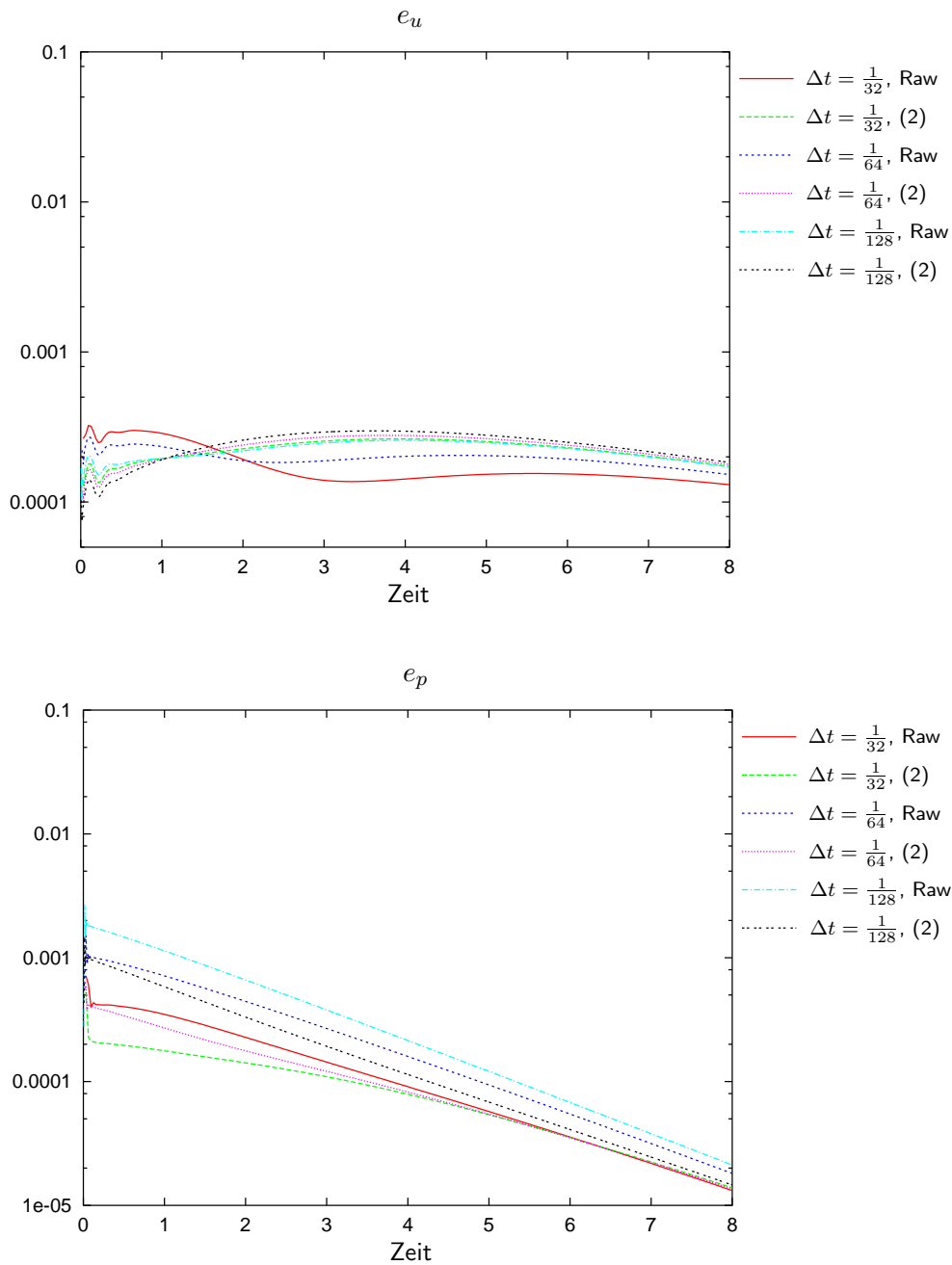


Abbildung 5.22: Chorin-Problem: Fehler der Lösung auf Ebene 6 ($h = \frac{1}{128}$) bei FLOW

Auf den beiden groben Gittern ist das Verhalten der Fehler schon allein deswegen etwas anders (siehe Abbildungen C.1, C.2), da dort die Darstellung der stehenden Wirbel deutlich schlechter ist. Trotzdem ist am Verlauf der Fehlerkurven die Tendenz der Resultate der feineren Gitterebenen erkennbar.

Betrachtet man die Graphiken in den Abbildungen C.5 und C.6 im Anhang, in denen der Fehler der Massenerhaltung über der Zeit aufgetragen ist, erhält man ein sehr gutes Verhalten aller Testfälle. Ganz entsprechend zu den Ergebnissen der stationären Untersuchungen ist der Fehler geringer, sofern man die Diffusion für die Stabilisierung mittels des Ansatzes (2) modelliert. Ebenso verringert sich der Fehler bei Halbierung des Zeitschrittes, wie es zu erwarten ist. Vergleicht man die Varianten FIELDS und FLOW miteinander, dann enthalten die FLOW-Versionen stets einen etwas geringeren Massenerhaltungsfehler gegenüber den entsprechenden FIELDS-Varianten. Für die Fälle, in denen die Version (2) eingesetzt wird, ist der Unterschied sehr gering. Dies kann dadurch erklärt werden, daß die Approximation der Diffusion einen starken Einfluß auf die Güte der Massenerhaltung hat, viel stärker als dies durch den Wechsel von FIELDS zu FLOW der Fall ist, zumal schon durch die Problembeschreibung keine örtliche Veränderung der Wirbel vorliegt, so daß der Beitrag von $u_i \text{div}(\mathbf{u})$ gering ist. Aufgrund der relativ kleinen Unterschiede bei diesem Vergleich wird auf eine graphische Darstellung verzichtet.

In Bezug auf die hier eingesetzte periodische Randbedingung kann keine störende Beeinflussung auf die Strömung festgestellt werden. Die Strömung weist einen regelmäßigen und periodischen Charakter auf, ebenso wie der darin enthaltene Fehler. Die Eigenschaft der periodischen Ränder, das Gebiet durch regelmäßig wiederkehrende Strukturen unendlich groß zu machen, kann also sehr gut abgebildet werden.

Schließlich soll auch das Verhalten der iterativen Löser diskutiert werden. Die ermittelten linearen und nichtlinearen Konvergenzraten sind in den Tabellen 5.16 und 5.17 eingetragen. Die linearen Raten bleiben bei Zeitschritthalbierung mehr oder weniger konstant. Allerdings verschlechtern sie sich bei Gitterverfeinerung geringfügig. Dies läßt sich auf die schwächer werdende Stabilisierung zurückführen. Beim direkten Vergleich der beiden Diffusionsansätze Raw und (2), liefert das Verfahren (2) etwas schlechtere Konvergenzraten, da es zu der schwächeren Stabilisierung gehört und dadurch das System ebenfalls etwas schlechter gelöst werden kann. Wie auch schon bei der Massenerhaltung erwähnt, sind die Unterschiede beim Wechsel von FIELDS zu FLOW relativ gering. Dies spiegelt sich auch in den Konvergenzraten wieder.

Gitterebene			3	4	5	6
$\Delta t = h$	FIELDS	Raw (2)	0.000212 0.000311	0.002516 0.005029	0.011780 0.027331	0.040665 0.070858
	FLOW	Raw (2)	0.000224 0.000344	0.002669 0.005206	0.012184 0.027856	0.041284 0.071813
$\Delta t = 2h$	FIELDS	Raw (2)	0.000151 0.000222	0.002475 0.004605	0.014595 0.030843	0.047698 0.083314
	FLOW	Raw (2)	0.000137 0.000244	0.002614 0.004782	0.015283 0.031402	0.047684 0.084148
$\Delta t = 4h$	FIELDS	Raw (2)	0.000233 0.000337	0.002699 0.003825	0.016851 0.024851	0.056209 0.085433
	FLOW	Raw (2)	0.000199 0.000323	0.002835 0.003752	0.017524 0.023789	0.057349 0.084316

Tabelle 5.16: Chorin-Problem: Lineare Konvergenzraten κ_m^t , gemittelt über die Zahl der Zeitschritte

Im Gegensatz zu den linearen Konvergenzraten werden die nichtlinearen Raten von Ebene zu Ebene besser, da die nichtlinearen Effekte auf den feineren Gitterebenen natürlich besser dargestellt werden können. Auch ist in diesem Fall die schwächere Stabilisierung, die beim Verfahren (2) entsteht, in Bezug auf die nichtlineare Konvergenz besser, da der Störterm in der Massenerhaltungsgleichung geringer ist. Auch beim Wechsel der Stabilisierungsvariante von FIELDS zu FLOW wird die Konvergenz etwas schneller, wie es schon mehrmals bei den vorangegangenen Problemfällen aufgetreten ist. Ein Grund dafür ist die durch FLOW künstlich eingeführte Nichtlinearität in die Massenerhaltungsgleichung. Diese führt insgesamt zu einer besseren Kopplung der einzelnen Komponenten untereinander und dadurch zu einer etwas schnelleren nichtlinearen Konvergenz. Bei Zeitschrittverdopplung verschlechtern sich allerdings die Konvergenzraten zum Teil deutlich. Das stellt jedoch kein großes Manko dar, da man dadurch so manchen nichtlinearen Effekt, der während des Zeitschritts auftritt, einfach überspringt. Dies kann selbstverständlich nicht zu einer besseren nichtlinearen Konvergenz führen. Insgesamt verschlechtert sich die Konvergenzrate um etwa die Hälfte, wenn der Zeitschritt verdoppelt wird, doch das ist ein völlig normales Verhalten eines nichtlinearen Prozesses.

		Gitterebene	3	4	5	6
$\Delta t = h$	FIELDS	Raw (2)	0.055563 0.053023	0.054371 0.049222	0.029058 0.023045	0.012760 0.008273
	FLOW	Raw (2)	0.051271 0.049460	0.053090 0.048089	0.028712 0.022925	0.012388 0.008095
$\Delta t = 2h$	FIELDS	Raw (2)	0.090691 0.084666	0.089186 0.076651	0.048041 0.035113	0.019436 0.013049
	FLOW	Raw (2)	0.080273 0.076469	0.084763 0.073334	0.046126 0.034288	0.017644 0.012414
$\Delta t = 4h$	FIELDS	Raw (2)	0.139535 0.125964	0.134553 0.109065	0.075575 0.052773	0.030004 0.021954
	FLOW	Raw (2)	0.117594 0.109892	0.122005 0.100882	0.068465 0.049171	0.027120 0.019017

Tabelle 5.17: Chorin-Problem: Nichtlineare Konvergenzraten ψ_m^t gemittelt über die Zahl der Zeitschritte

5.2 Turbulente Testfälle

In diesem Abschnitt werden die unterschiedlichen Diskretisierungsmethoden auf turbulente Testfälle angewendet. Hierbei spielen die Effekte der Turbulenzmodelle zusätzlich eine Rolle und werden im Folgenden untersucht. Das Verhalten der beiden Stabilisierungsmethoden FIELDS und FLOW bei einer turbulenten Simulation steht dabei im Mittelpunkt der Untersuchungen. Als Einstieg wird dazu ein Fall in zwei Raumdimensionen besprochen und anschließend ein entsprechendes Problem in drei Raumdimensionen betrachtet.

5.2.1 Mixing Layer in zwei Raumdimensionen

Beim Mixing Layer Problem handelt es sich um eine Scherströmung mit anregenden Geschwindigkeiten in entgegengesetzte Richtung. Es ist ein beliebtes Testproblem, um Turbulenzmodelle miteinander zu vergleichen. Unter anderem wurde es in den Arbeiten von Boersma et al. [BKNW97], John [Joh02], Lesieur et al. [LSLRC88] und auch in [NW03] untersucht.

Die Scherströmung ist in $\Omega = (0, 1) \times (-0.5, 0.5)$ definiert mit periodischer Randbedingung in x -Richtung und Symmetrierandbedingungen bei $y = 0$ und $y = 1$. Die in Abschnitt 2.7 vorgestellte Symmetrierandbedingung entspricht einer Gleitrandbedingung, wie sie bei reibungslosen Strömungen oft angewandt wird. Als Startlösung wird folgendes Geschwindigkeitsprofil vorgegeben:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} U_\infty \tanh\left(\frac{2y}{\delta}\right) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Zur Anregung der Turbulenz wird diese mit einer divergenzfreien Störung \mathbf{u}' überlagert:

$$\mathbf{u}' = 0.001 \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \\ -\frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \Psi = e^{-\left(\frac{2y}{\delta}\right)^2} (\cos(16\pi x) + \cos(40\pi x)).$$

Daraus ergibt sich eine initiale Wirbelstärke der ungestörten Startlösung von (vergleiche Formel (3.4))

$$\delta_{t=0} = \frac{2U_\infty}{\max_y |\langle \omega_z \rangle(y, t)|} = \frac{2U_\infty}{\max_y (U_\infty \frac{2}{\delta} (1 - \tanh^2(\frac{2y}{\delta})))} = \frac{2U_\infty}{U_\infty \frac{2}{\delta}} = \delta.$$

Dabei werden als Referenzgrößen $U_\infty = 1$, $\delta = \frac{1}{28}$ und $Re = \frac{U_\infty \delta}{\nu} = 10000$ gewählt, d.h. die Simulationen finden bei einer Viskosität von $\nu = \frac{1}{280000}$ statt, analog zu den Daten, die von John in [Joh02] verwendet wurden.

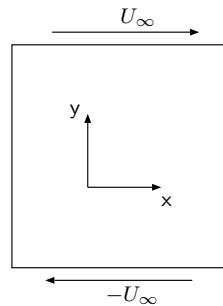


Abbildung 5.23: Problembeschreibung des 2d Mixing Layer Problems

Als Turbulenzmodell kommt sowohl das dynamische Modell nach Germano/Lilly aus Abschnitt 1.3.2 als auch das gemischte Modell von Zang et al. aus Abschnitt 1.3.3 zum Einsatz. Bei der Bestimmung des Modellparameters wird die Mittelung im Raum verwendet, wie in Abschnitt 3.3 beschrieben. Die beiden Diskretisierungsvarianten FIELDS und FLOW, jeweils mit den Ansätzen nach Raw und (2), und dem LPS- und POS-Verfahren, werden einander gegenübergestellt. Als nichtlineare Approximation wird in diesem Fall das volle Newton-Verfahren eingesetzt, um möglichst alle nichtlinearen Effekte zu berücksichtigen. Das Aufwindverfahren

besteht wiederum aus der PAC-Version inklusive Peclet-Blending wie in Gleichung (2.26) beschrieben.

Das grobe Gitter besteht aus 25 Punkten, die äquidistant verteilt sind, d.h. man erhält als grobe Gitterweite $h = \frac{1}{4}$. Dieses Gitter wird fünfmal uniform verfeinert, so daß das feinste Gitter die Gitterweite $h = \frac{1}{128}$ besitzt. Der lineare Löser ist ein reines Mehrgitterverfahren mit V(2,2)-Zyklus und ILU_0 als Glättungsoperator mit $\lambda = 0.7$. Dabei wird die mindestens geforderte lineare Reduktion auf 10^{-1} und die nichtlineare auf 10^{-5} gesetzt.

Als Zeitschrittverfahren wird das DIRK(2)-Verfahren mit einem konstanten Zeitschritt von $\Delta t = \frac{\delta}{U_\infty}$ verwendet. Dieser relativ große Zeitschritt wurde gewählt, um eine CFL-Zahl zu erhalten, die deutlich von der eins entfernt ist. In den verschiedenen Simulationen führt dieser konstante Zeitschritt zu CFL-Zahlen in folgendem Bereich: $4 < CFL < 8$. Dies rechtfertigt den Einsatz eines impliziten Ansatzes, der die CFL-Beschränkungen eines expliziten Verfahrens nicht besitzt. Daher wird für diese Simulationen bewußt ein großer Zeitschritt gewählt.

Da hier eine starke Wirbelströmung vorliegt, werden durch den Wechsel des Aufwindverfahrens sehr große Änderungen in den resultierenden Lösungen erreicht. Anhand der Entwicklung der totalen kinetischen Energie über der Zeit, erhält man wiederum den deutlich sichtbaren diffusiven Charakter des POS-Aufwindverfahrens (siehe Abbildung 5.24 unten im Vergleich zu oben). Da der Energieverlust bei dieser Aufwindstrategie enorm ist, wird der Einfluß des Turbulenzmodelles überlagert, so daß nicht mehr sicher zwischen dem Resultat des Turbulenzmodelles und der Diskretisierung unterschieden werden kann. Daher wird die Simulation nicht bis zum Ende durchgeführt. Auffallend dabei ist auch, daß die FIELDS-Versionen diesbezüglich noch schlechter reagieren als die FLOW-Varianten, die zumindest qualitativ einen ähnlichen Verlauf der Energiekurven aufweisen, wie es beim LPS-Aufwindverfahren der Fall ist. Allerdings erfolgt bei den FLOW-Versionen in diesem Fall ein Energieanstieg gegen Ende der Simulation, der unphysikalisch ist und zum Abbruch führt. Das bedeutet, daß auch die FLOW-Versionen in Kombination mit dem POS-Aufwindverfahren ein falsches Verhalten besitzen, auch wenn der Effekt schwächer ausgeprägt ist, als bei den FIELDS-Methoden.

Desweiteren ist der Energieverlust bei den Raw-Varianten stärker als bei den Varianten mit (2). Daraus folgt, daß allein durch den größeren Störterm durch die Stabilisierung ein geringfügig anderes Resultat erzielt wird. Das macht die Entscheidung, welche Diskretisierungsvariante besser geeignet ist, nicht unbedingt einfach, da keine exakte Lösung vorhanden ist. Darüberhinaus handelt es sich bei einer LES-Simulation um einen hochgradig nichtlinearen Prozeß, bei dem die Fehler am Anfang der Simulation das Resultat gegen Ende beeinflussen, da insbesondere der Modellterm aus den vorangegangenen Schritten bestimmt wird. Dadurch wird die Einordnung der Resultate erschwert. Allerdings kann man davon ausgehen, daß die stark diffusiven Resultate der POS-Versionen nicht korrekt sind.

Im Anhang ist in den Abbildungen D.1 und D.2 die Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ (vergleiche Formel (3.7)) dargestellt, woraus ein paar Dinge deutlich werden. Man kann den mehr oder weniger rein diffusiven Einfluß des dynamischen Modells durch den zumeist negativen Wert von $\bar{\epsilon}_{SGS}$ ablesen, wie es auch von einem Wirbelviskositätsmodell erwartet wird. Dagegen weißt das gemischte Modell wesentlich weniger Diffusivität auf und kann auch den Energiefluß von kleinen zu großen Strukturen, „backscatter“ genannt, wesentlich besser modellieren. Dies äußert sich durch den streckenweise deutlich positiven Charakter von $\bar{\epsilon}_{SGS}$. Auch aus diesen Graphiken in Abbildung D.2 im Vergleich zur Abbildung D.1 kann das stärkere diffuse Verhalten der POS-

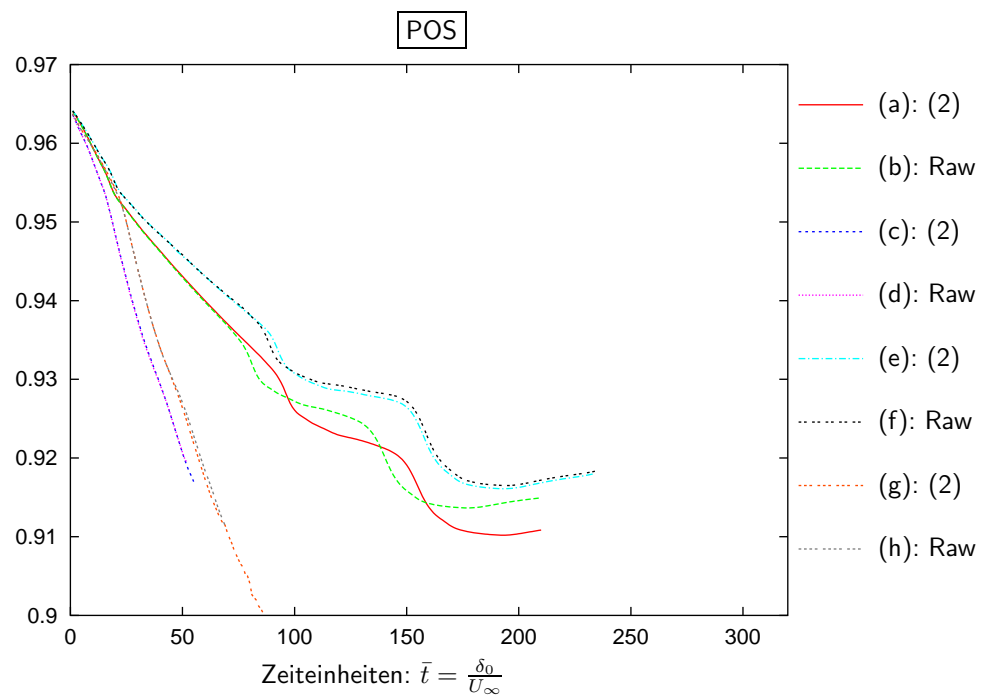
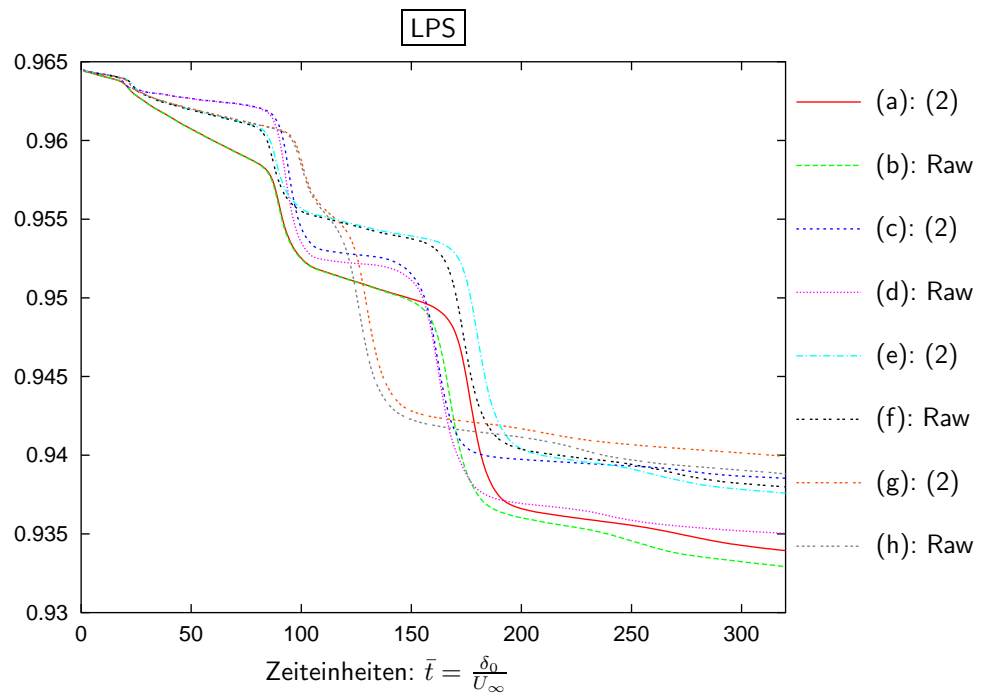


Abbildung 5.24: Totale kinetische Energie bei verschiedenen Turbulenzmodellen und Diskretisierungen: (a)-(d) Gemischtes Modell; (e)-(h) Dynamisches Modell; (a),(b),(e),(f) FLOW; (c),(d),(g),(h) FIELDS

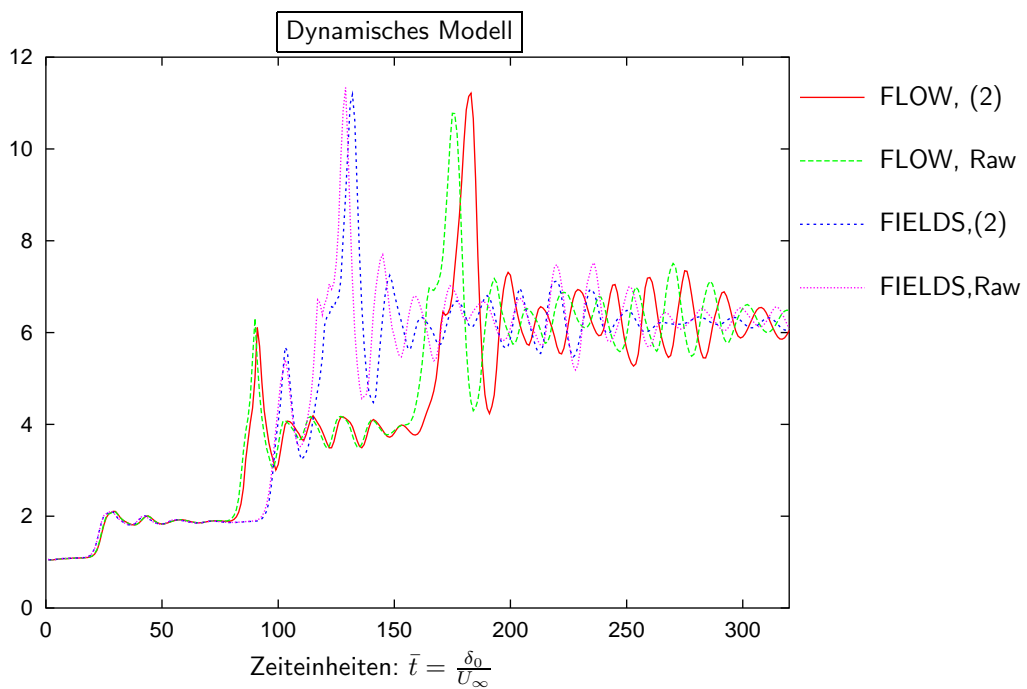
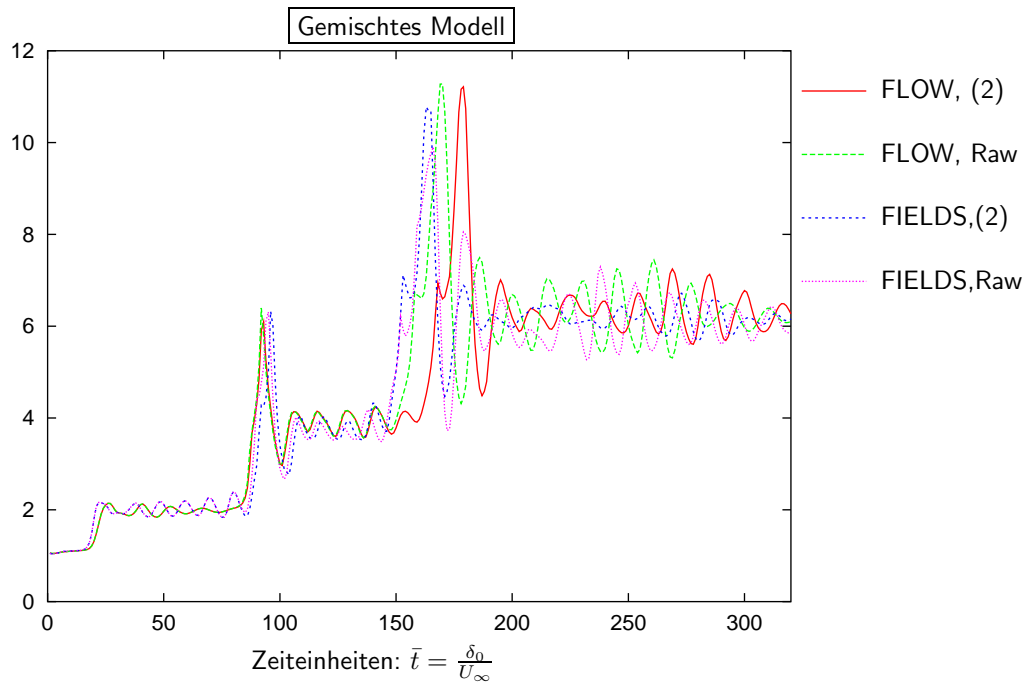


Abbildung 5.25: Wirbelstärkendicke δ relativ zu $\delta_0 = \frac{1}{28}$ bei der Version mit LPS

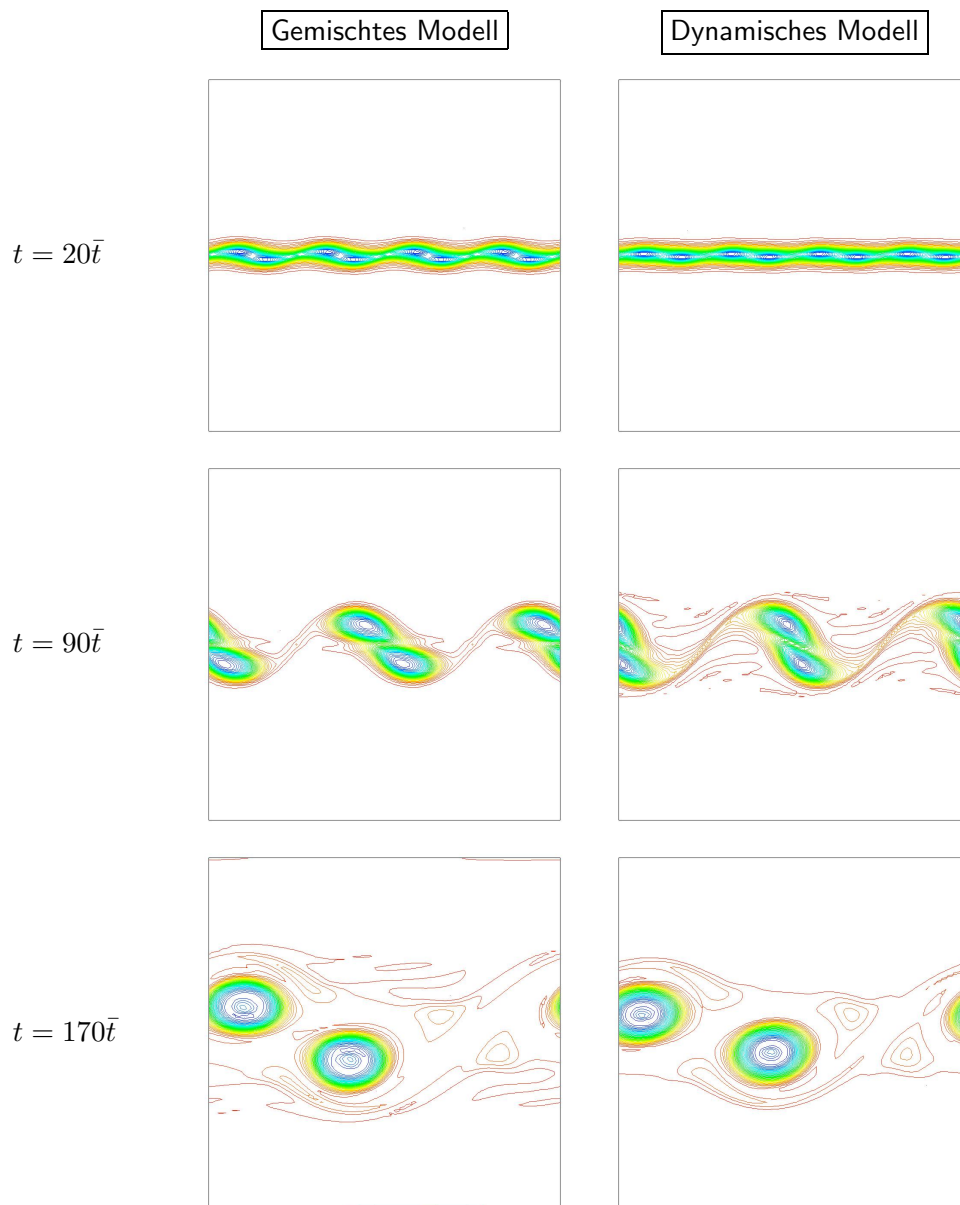
Version entnommen werden. Da bereits festgestellt wurde, daß das POS-Aufwindverfahren viel zu diffusiv ist, konzentriert sich die weitere Diskussion auf die Verfahren mit LPS-Aufwind.

Auffallend ist, daß die FLOW-Versionen sich relativ ähnlich verhalten, egal welches Turbulenzmodell verwendet wird, d.h. die Entwicklung der Fundamentalwirbel, das erste Paaren und das zweite Paaren zweier Wirbel zu einem Großen, erfolgt zu ungefähr denselben Zeitpunkten. Dies kann nicht nur aus dem Verlauf der totalen kinetischen Energie in Abbildung 5.24 abgelesen werden, sondern auch aus der Entwicklung der Wirbelstärke ω_z , die in Abbildung 5.26 bzw. auch in den Abbildungen D.3 und D.4 im Anhang zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt ist. Allerdings ergeben sich deutliche Diskrepanzen bei den FIELDS-Verfahren. Dies deutet darauf hin, daß diese für turbulente Simulationen ungeeignet sind. Insbesondere spiegelt sich das auch in einem völlig anderen Energieniveau je nach Turbulenzmodell während der Entstehung der Fundamentalwirbel wieder. Beim dynamischen Modell liegen die verschiedenen Diskretisierungsvarianten auf demselben Niveau, nur beim gemischten Modell fallen die FIELDS-Verfahren aus dem Rahmen durch eine um ein Vielfaches größere totale kinetische Energie. Das hängt mit dem Skalenähnlichkeitsterm zusammen, der einen Beitrag zur rechten Seite liefert und dadurch auch die Massenerhaltungsgleichung stört. Die FIELDS-Methoden können offensichtlich diesen Quellterm nicht korrekt verarbeiten. Durch den zusätzlichen Term $u_i \text{div}(\mathbf{u})$, der bei den FLOW-Verfahren eingesetzt wird, kann das Verhalten der Strömung also besser abgebildet werden. Auch im Vergleich zu den Resultaten von John [Joh02], bei dem nach 200 Zeiteinheiten $\bar{t} = \frac{\delta_0}{U_\infty}$ die Energiereduktion im Vergleich zum Anfangsniveau etwa 3% beträgt, sind die Resultate der FLOW-Varianten eher vergleichbar, bei denen die Reduktion ebenfalls etwa in dem Bereich liegt.

Hinzu kommt bei den FIELDS-Methoden der höhere Massenerhaltungsfehler, wie aus Abbildung D.5 im Anhang deutlich wird. Auch daraus wird klar, daß die FIELDS-Stabilisierung für das gemischte Modell ungeeignet ist. Es resultiert in einem viel größeren Massenerhaltungsfehler gegenüber dem FLOW-Verfahren, wodurch die Energiebilanz verfälscht wird. Beim dynamischen Modell sind die Unterschiede weniger ausgeprägt, da es ein reines Wirbelviskositätsmodell ist, das durch beide Stabilisierungsvarianten gut behandelt werden kann. Es ergeben sich lediglich bei der zeitlichen Entwicklung Unterschiede. Trotzdem wird weiterhin dem FLOW-Verfahren der Vorzug gegeben, da es weniger empfindlich auf das jeweilige Modell reagiert.

Betrachtet man die Wirbelstärkedicke relativ zu δ_0 in Abbildung 5.25, kann man die unterschiedlichen zeitlichen Entwicklungen der Strömung gut erkennen. Gemeinsam ist den Verfahren, nach der Bildung der Fundamentalwirbel etwa doppelte Stärke erreicht zu haben. Desweiteren ist die Stärke nach der ersten Paarung etwa bei 4. Nach der zweiten Paarung ist dann schon der Einfluß der oberen und unteren Ränder spürbar, wodurch statt einer Stärke von 8 nur etwa 6 erreicht wird. Dies entspricht den Ergebnissen von John. Deutlich erkennbar ist die zeitliche Diskrepanz der Strömungsentwicklung bei den FIELDS-Methoden. Die FLOW-Versionen dagegen, haben einen sehr ähnlichen zeitlichen Verlauf mit nur marginalen Zeitunterschieden und eignen sich dadurch wesentlich besser für turbulente Simulationen.

Zum Vergleich der Lösungseigenschaften werden ebenfalls nur die Fälle mit LPS-Verfahren in Betracht gezogen, da die POS-Verfahren viel zu diffusiv und dadurch wenig aussagekräftig sind. Ganz entsprechend zu den stationären Ergebnissen ist die nichtlineare Konvergenz bei den FLOW-Verfahren deutlich schneller als bei den FIELDS-Methoden. In diesem Fall ergibt sich sogar doppelt so schnelle Konvergenz der FLOW-Verfahren. Dies ist ein weiteres Indiz

Abbildung 5.26: Wirbelstärke ω_z beim FLOW-(2)-LPS-Verfahren

dafür, daß die FIELDS-Verfahren die hoch nichtlinearen Prozesse bei turbulenten Strömungen schlechter abbilden können und somit auch ein höheres Energieniveau behalten, da sie die Energiedissipation der Turbulenzmodelle nicht korrekt nachvollziehen. Die linearen Konvergenzraten sind für alle aufgelisteten Fälle sehr zufriedenstellend. Hierbei sind die Unterschiede zwischen den Stabilisierungsvarianten nicht so ausgeprägt, auch wenn die FLOW-Varianten geringfügig besser konvergieren. Das Konvergenzverhalten stellt für diesen Testfall überhaupt kein Problem dar. Die Schwierigkeiten liegen dabei vielmehr beim korrekten Verhalten der Stabilisierung bzw. Diskretisierung. Dies zeigt sich deutlich durch das falsche Verhalten durch zu starken Energieverlust bzw. durch Energiegewinn, was beides unphysikalisch ist. Das Verhalten

Modell	Stabilisierung		Lin. Konv		Nichtlin. Konv.	
			$\kappa^t(u)$	$\kappa^t(p)$	$\psi^t(u)$	$\psi^t(p)$
Gemischt	FIELDS	Raw	0.018862	0.055175	0.512351	0.521532
		(2)	0.019113	0.054372	0.511071	0.513979
	FLOW	Raw	0.016566	0.045848	0.283442	0.269224
		(2)	0.016471	0.045079	0.280470	0.266567
Dynamisch	FIELDS	Raw	0.019643	0.098656	0.496130	0.428898
		(2)	0.019792	0.100009	0.499238	0.426275
	FLOW	Raw	0.017458	0.053130	0.277070	0.235629
		(2)	0.016929	0.052587	0.277128	0.236590

Tabelle 5.18: Lineare und nichtlineare Konvergenzraten über 320 Zeitschritte gemittelt

hängt stark von der Art des Aufwindverfahrens ab. Das LPS-Verfahren ist für diesen Zweck gut geeignet, wie sich durch die Simulationsergebnisse gezeigt hat, auch wenn sich dadurch geringfügig schlechtere Matrixeigenschaften ergeben. Doch sind die Resultate der Simulation entscheidender als die Lösungseigenschaften für diese Art von Problemfall.

5.2.2 Mixing Layer in drei Raumdimensionen

In drei Raumdimensionen läßt sich ebenfalls das Mixing Layer Problem definieren. Es wurde bereits in verschiedenen Arbeiten betrachtet, wie z.B. von Vreman et al. [VGK97] zum Vergleich der Eigenschaften unterschiedlicher Subskalenmodelle, oder auch von Moser und Rogers [MR93], um die entstehenden Strukturen zu untersuchen und von John [Joh02], um die entwickelten Turbulenzmodelle zu vergleichen. In dieser Arbeit sollen anhand dieses Testproblems die beiden Diskretisierungsvarianten FIELDS und FLOW in Kombination mit dem dynamischen und gemischten Turbulenzmodell getestet werden.

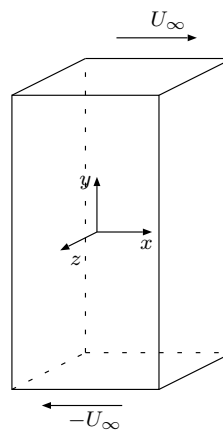


Abbildung 5.27: Mixing Layer 3d: Problemstellung

Analog zum zweidimensionalen Problem ist die Problemstellung wie folgt. Die Scherströmung ist definiert in $\Omega = (0, 2) \times (0, 2) \times (0, 4)$ mit periodischen Randbedingungen in x - und z -

Richtung und einer Symmetrierandbedingung bei $y = 0$ und $y = 4$, analog zum 2d-Problem. Als Startlösung wird folgendes Profil vorgegeben:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} U_\infty \tanh\left(\frac{2y-2}{\delta}\right) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit $\delta = \delta_0 = \frac{1}{14}$ und $U_\infty = 1$. Dies entspricht den auf das größere Gebiet skalierten Werten aus dem zweidimensionalen Gebiet. Da schon beim 2d-Problem das POS-Aufwindverfahren als viel zu diffusiv erkannt wurde, beschränken sich die Simulationen für das 3d-Problem auf das LPS-Verfahren in Kombination mit PAC-Aufwind und Peclet-Zahl-abhängigem Verschieben zu zentralen Differenzen. Weiterhin beschränken sich die Untersuchungen auf das Verfahren $(2)_{\text{korrr}}$, da auch beim 2d-Problem kaum ein Unterschied der Verfahren aufgefallen ist. Der Grund dafür ist, daß die Diffusion in diesem Fall nicht dominant ist und daher durch Wechsel von $(2)_{\text{korrr}}$ nach Raw keine große Veränderung auftritt. Trotzdem wird aus Sicherheitsgründen das $(2)_{\text{korrr}}$ -Verfahren eingesetzt, um die Massenerhaltung möglichst wenig zu verletzen.

Das eingesetzte Zeitschrittverfahren ist wiederum DIRK(2) mit folgenden Einschränkungen an den Zeitschritt: $\Delta t \in \left[\frac{1}{16}\bar{t}, \frac{1}{2}\bar{t}\right]$ mit $\bar{t} = \frac{\delta_0}{U_\infty}$ der zugeordneten Zeiteinheit. Daraus resultieren CFL-Zahlen zwischen 1 und maximal 2.4 je nach Startlösung. Das Lösungsverfahren wiederum besteht aus einer äußeren Newton-Iteration mit Mehrgitterverfahren als linearem Löser. Es wird ein V(2,2)-Zyklus verwendet und ILU₀ mit $\lambda = 0.7$ als Glätter eingesetzt. Als lineare Reduktion wird dabei mindestens 10^{-1} gefordert und die nichtlineare Reduktion wird auf 10^{-5} gesetzt. Das grobe Gitter auf Ebene 0 besteht aus $5 \times 9 \times 5$ Punkten, wobei die Abstände der Punkte in x - und z -Richtung äquidistant sind, in y -Richtung allerdings von der Mitte des Gebiets in Richtung der Ränder mit dem Faktor 1.5 vergrößert werden. Nach viermaliger uniformer Verfeinerung resultiert daraus auf dem feinsten Gitter der Ebene 4 als kleinste Elementkante 0.01538 und als größte 0.05192. Aufgrund der Problemgröße von 2 113 536 Unbekannten erfolgen die Rechnungen parallel auf 32 Prozessoren, wobei RCB als Lastverteilungsroutine dient.

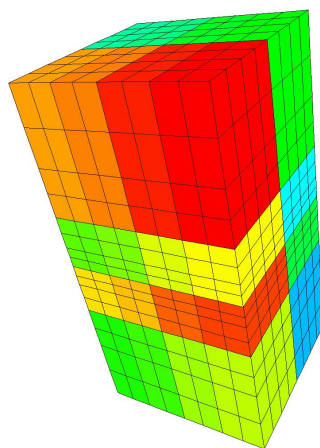


Abbildung 5.28: Gitter der Ebene 1, Lastverteilung auf 32 Prozessoren

Im Unterschied zum zweidimensionalen Problem hängt die Entwicklung der Strömung stark von der aufgeprägten Störung ab. Daher werden verschiedene Variationen getestet, die z.B. zu einem rein zweidimensionalen Strömungsbild führen bzw. auch darin resultieren, daß nach der Bildung der Fundamentalwirbel keine Paarung zweier Wirbel wie im 2d-Fall stattfindet, sondern starke 3d-Strukturen entwickelt werden und die Strömung sofort in den turbulenten Fall übergeht.

Startlösung 1 bei Re=500

Zur ersten Kategorie gehört folgende Störung, bei der zunächst eine zweidimensionale Modulation \mathbf{u}'_{2d} aufgeprägt wird:

$$\mathbf{u}'_{2d} = 0.0005 \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi_{2d}}{\partial y} \\ -\frac{\partial \Psi_{2d}}{\partial x} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \Psi_{2d} = e^{-\left(\frac{2y-2}{\delta}\right)^2} \sum_{k=0}^3 \cos(2^k \pi x).$$

Anschließend wird eine dreidimensionale Störung \mathbf{u}'_{3d} überlagert:

$$\mathbf{u}'_{3d} = 0.0002 \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial^2 \Psi_{3d}}{\partial y \partial z} \\ -\frac{\partial^2 \Psi_{3d}}{\partial x \partial z} \\ -\frac{\partial^2 \Psi_{3d}}{\partial x \partial y} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \Psi_{3d} = e^{-\left(\frac{2y-2}{\delta}\right)^2} \sum_{k=0}^3 \cos(2^k \pi x) \cos(2^k \pi z).$$

Insgesamt ist die Störung per Konstruktion divergenzfrei, so daß dadurch keine Massenquellen in das System eingetragen werden. Diese Startlösung führt zu einem zweidimensionalen Charakter der Strömung. Als Reynoldszahl wird dabei Re=500 gewählt, bezogen auf die Wirbelstärkendicke δ und die Referenzgeschwindigkeit U_∞ . Ein Vergleich mit Re=714 ergab sehr ähnliche Resultate. Die Abhängigkeit von der Reynoldszahl ist also bei dieser Startlösung gering, v.a. da die Störung relativ schwach gewählt wird.

In Abbildung 5.30 bzw. D.6 im Anhang ist die z -Komponente der Wirbelstärke zu verschiedenen Zeitpunkten abgebildet. Dabei verändert sich die Lösung nicht, wenn man den Schnitt durch das Gebiet in z -Richtung verschiebt, d.h. die Strömung ist unabhängig von der dritten Raumrichtung und damit zweidimensional. Daraus resultiert auch das in Abbildung 5.31 dargestellte Verhalten der totalen kinetischen Energie, die sich analog zum 2d-Problem entwickelt (vergleiche Abbildung 5.24). Es sind zwei Stabilisierungsmethoden, FIELDS und FLOW, und zwei Turbulenzmodelle, das dynamische und das gemischte Modell, eingetragen. Leicht erkennbar ist das Fehlverhalten der Simulation, sofern das gemischte Modell mit der FIELDS-Methode kombiniert wird. Auch beim dynamischen Modell kann in Kombination mit FIELDS die Simulation nicht zu Ende geführt werden, da der Löser ab einem gewissen Zeitpunkt divergiert. Daraus kann man also schließen, daß diese Stabilisierungsvariante für turbulente Simulationen ungeeignet ist.

Bei FLOW weisen beide Turbulenzmodelle eine recht ähnliche Entwicklung auf. Insbesondere ist weder ein Fehlverhalten der resultierenden Lösung feststellbar, noch bricht die Simulation vorzeitig aufgrund von Lösungsschwierigkeiten ab. Die totale kinetische Energie des gemischten Modells ist geringer im Vergleich zum dynamischen Modell. Das entspricht auch den Resultaten

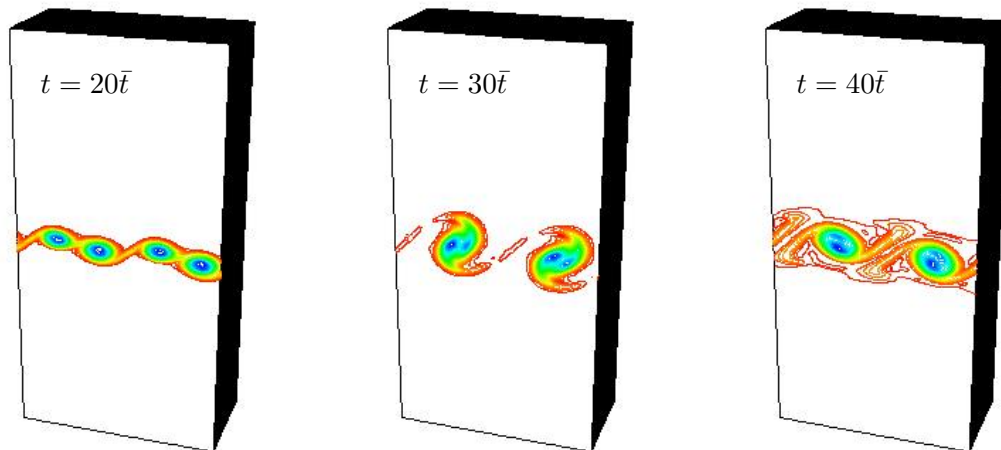


Abbildung 5.30: 2d-Charakter: ω_z in Ebene $z = 1$ beim gemischten Modell mit FLOW

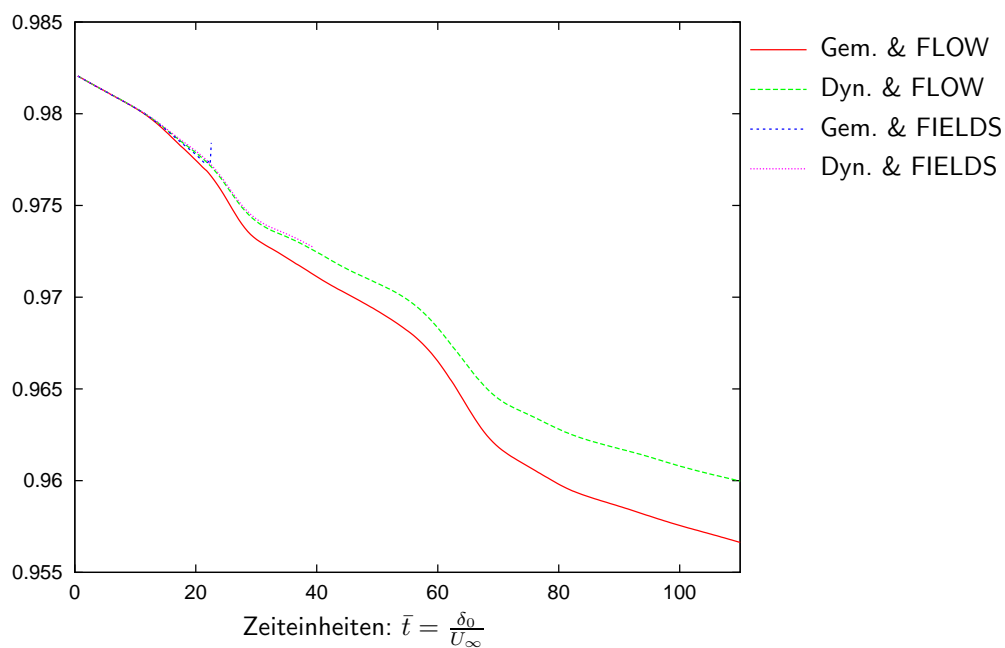


Abbildung 5.31: 2d-Charakter: Totale kinetische Energie beim gemischten und dynamischen Modell in Kombination mit FIELDS und FLOW

von Vreman et al. [VGK97]. Auch dort weist das gemischte Modell einen stärkeren Abfall der totalen kinetischen Energie gegenüber dem dynamischen Modell auf.

Betrachtet man die Entwicklung der Impulsdicke μ in Abbildung 5.29, kann man darin die Entstehung der Fundamentalwirbel erkennen, das dem ersten Plateau in der Graphik entspricht. Beim Start der ersten Paarung erfolgt ein Anstieg der Impulsdicke mit anschließendem Ab-

sinken nach der Paarung. Der erneute Anstieg erfolgt schließlich bei der zweiten Paarung mit anschließender Plateaubildung, da kein weiterer Vereinigungsprozeß mehr möglich ist. Dieser Verlauf entspricht etwa dem Verhalten der Wirbelstärkendicke beim 2d-Problem bis auf unterschiedliche Zeitskalen. Die FIELDS-Simulationen enden dabei allerdings schon bei $t \approx 20\bar{t}$ bzw. bei $t \approx 40\bar{t}$ aufgrund des Fehlverhaltens bzw. der Divergenz des Löser. Beim 2d-Problem lieferten beide Turbulenzmodelle etwa die gleiche Wirbelstärkendicke, hier resultieren sie in etwa gleicher Impulsdicke, wodurch das ähnliche Verhalten erklärt werden kann.

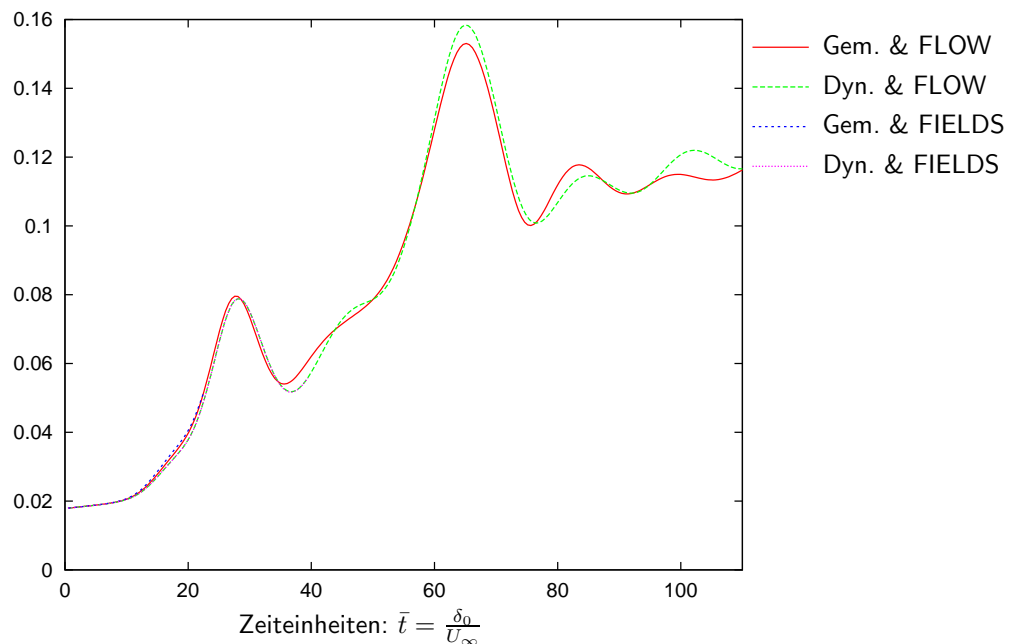


Abbildung 5.29: 2d-Charakter: Entwicklung der Impulsdicke μ beim gemischten und dynamischen Modell in Kombination mit FIELDS und FLOW

Bezüglich des Massenerhaltungsfehlers besteht nur eine Vergleichsmöglichkeit der beiden Turbulenzmodelle bei der FLOW-Variante, da die beiden anderen Fälle viel zu früh abgebrochen sind. Trotzdem sind in Abbildung 5.32 für alle vier Kombinationen die Entwicklung des Massenerhaltungsfehlers über den Zeiteinheiten aufgetragen. Auch hier ist das Fehlverhalten beim gemischten Modell in Verbindung mit FIELDS erkennbar, entsprechend zum Verhalten der Energie. Der Anstieg des Massenerhaltungsfehlers ist ein Anzeichen dafür, daß FIELDS in Verbindung mit dem gemischten Modell keine ausreichende Stabilisierung liefert. Die Kombination von dynamischem Modell und FIELDS hat ein sehr ähnliches Verhalten wie bei FLOW, allerdings bricht die Simulation frühzeitig ab. Die beiden FLOW-Kombinationen sind diesbezüglich robust, wobei das gemischte gegenüber dem dynamischen Modell einen größeren Fehler aufweist. Dies läßt sich durch den zusätzlichen Modellterm beim gemischten Modell erklären, der auch in die Massenerhaltungsgleichung eingeht und dadurch diese stört. Doch im Prinzip verhalten sich die Fehler bei beiden Modellen recht ähnlich und bewegen sich in einem akzeptablen Bereich. Da die Stabilisierung unter anderem auch vom Zeitschritt abhängt, ergibt sich bei Zeitschritthalbierung auch eine Reduktion des Massenerhaltungsfehlers. Dadurch ist der zeitliche Verlauf des Fehlers nicht glatt, sondern weist einen teilweise „zackigen“ Verlauf auf.

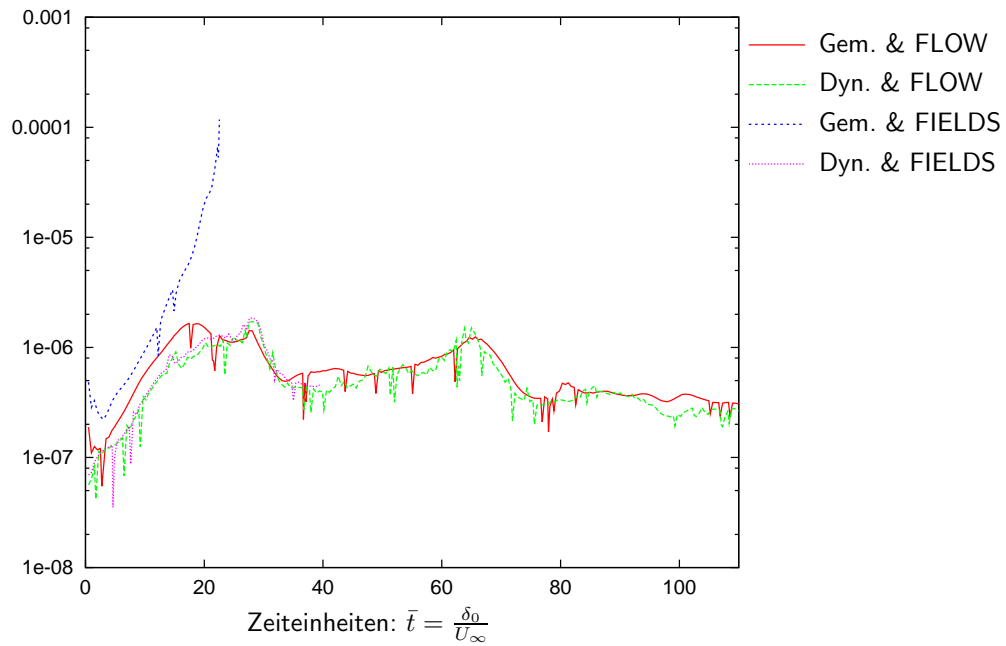


Abbildung 5.32: 2d-Charakter: Massenerhaltungsfehler $\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2$ beim gemischten und dynamischen Modell

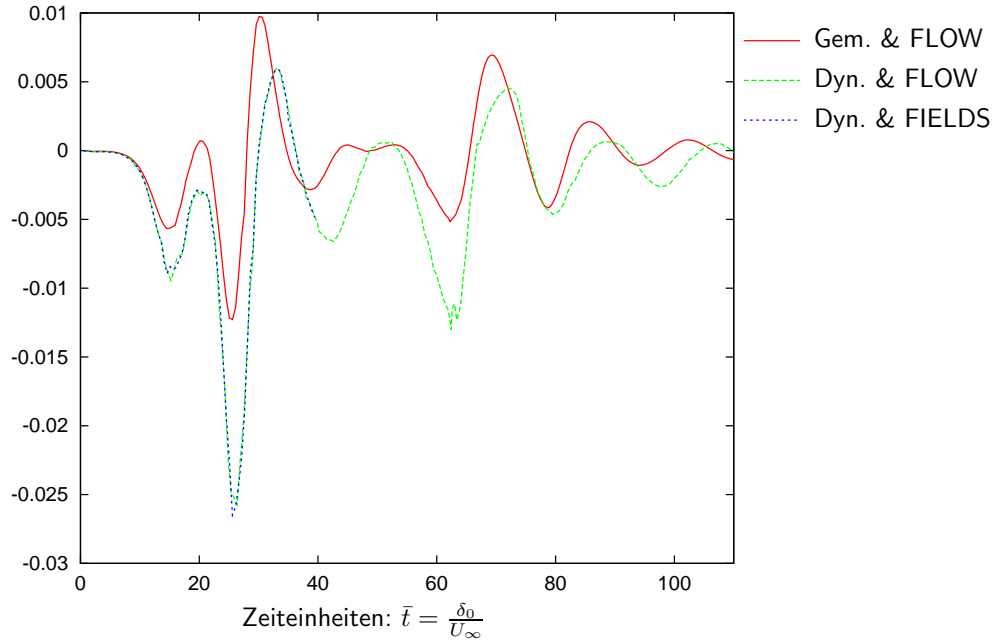


Abbildung 5.33: 2d-Charakter: Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ beim gemischten und dynamischen Modell

In Abbildung 5.33 ist die Entwicklung der Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ dargestellt. Da für das gemischte Modell bei der FIELDS-Methode ein Fehlverhalten feststellbar ist, wird auf die Darstellung der Subskalendissipation in diesem Fall verzichtet. Die Diskussion beschränkt sich also auf FLOW beim dynamischen und gemischten Modell bzw. auf FIELDS beim dynamischen Modell. Durch die Graphik wird deutlich, daß das gemischte Modell wesentlich besser das Phänomen des „backscatters“ darstellen kann. Dies macht sich durch die größeren positiven Werte von $\bar{\epsilon}_{SGS}$ deutlich. Bei der speziellen Entwicklung dieser Strömung mit zwei Paarungsprozessen muß Energie von kleinen zu großen Strukturen fließen. Diesen Prozeß verfolgt das gemischte Modell wesentlich besser, auch wenn das dynamische Modell durchaus ein vergleichbares Verhalten zeigt mit naturgemäß größerer Dissipation. Diese Dissipation, der Energiefluß von großen zu kleinen Strukturen, ist beim gemischten Modell deutlich geringer, da der Skalenähnlichkeitsterm diese sogenannte Subskalendissipation nicht besonders gut darstellen kann und der Anteil des Wirbelviskositätsmodelles, das diese Dissipation leisten kann, relativ gering ist im Vergleich zum dynamischen Modell. Beim Vergleich der Entwicklung von $\bar{\epsilon}_{SGS}$ bei den beiden Stabilisierungsmethoden FIELDS und FLOW kann kein großer Unterschied ausgemacht werden, außer daß die Simulation bei FIELDS frühzeitig abbricht. Bis auf die Schwierigkeiten beim Lösen resultieren die beiden Methoden in sehr ähnlichen Werten wie es auch schon bei der Massenerhaltung der Fall war.

Modell	Stabilisierung	Lin. Konv		Nichtlin. Konv.	
		$\kappa^t(u)$	$\kappa^t(p)$	$\psi^t(u)$	$\psi^t(p)$
Gemischt	FIELDS ²	0.037229	0.050160	0.243842	0.263019
	FLOW	0.034460	0.057098	0.165111	0.189170
Dynamisch	FIELDS ³	0.032495	0.080685	0.155020	0.131084
	FLOW	0.030020	0.075093	0.150837	0.132699

Tabelle 5.19: Konvergenzraten bei $Re=500$ gemittelt über $110\bar{t}$

Aus Tabelle 5.19 sind die gemittelten Konvergenzraten des linearen und nichtlinearen Löser ersichtlich. Dabei ist zu beachten, daß die FIELDS-Methoden aufgrund von Lösungsschwierigkeiten sehr früh abgebrochen sind. Auch durch Zeitschritthalbierung konnte keine ausreichende Konvergenz erzielt werden, wobei das vorgeschriebene Zeitschrittintervall eingehalten werden mußte. Diese Schwierigkeiten treten bei den FLOW-Versionen nicht auf. Das bestätigt wie auch schon beim zweidimensionalen Problem aus Abschnitt 5.2.1 die These, daß die Stabilisierungsvariante FIELDS für turbulente Simulationen ungeeignet ist. Bei FLOW ist die Kopplung zwischen den Geschwindigkeitskomponenten untereinander und mit dem Druck deutlich ausgeprägter. Dadurch lassen sich die komplizierten Prozesse bei Problemen dieser Art besser nachvollziehen, wobei das System weiterhin stabil bleibt. Die ermittelten Konvergenzraten sind mit den Raten des 2d-Problems des vorigen Abschnitts vergleichbar, wobei die nichtlineare Reduktion sogar stärker ist. Solange die Diskretisierung kein Fehlverhalten in irgendeiner Form produziert, stellt das Lösen des resultierenden Gleichungssystems kein Problem dar. Nur wenn ein unphysikalischer Effekt auftritt, bricht der Lösungsalgorithmus ab. Dies stellt jedoch kein Manko dar, da das Ergebnis dann sowieso fragwürdig ist.

²Bei dieser Kombination wurde nur über $t \approx 22\bar{t}$ gemittelt.

³Hier erfolgt die Mittelung etwa über $t \approx 39\bar{t}$.

Startlösung 2 bei Re=714

Eine weitere Möglichkeit der Störung der Anfangslösung zur Anregung der Turbulenz setzt sich wie folgt zusammen (in Anlehnung an die von John [Joh02] verwendete Störung):

$$\mathbf{u}' = 0.01 \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \\ -\frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ -\frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \Psi = e^{-\left(\frac{2y-2}{\delta}\right)^2} (\cos(4\pi x) + \cos(2\pi z)).$$

Diese divergenzfreie Störung führt schon gleich zu Anfang der Simulation zu einer positiven z -Komponente der Wirbelstärke. Bei der ersten Startlösung war ω_z im gesamten Gebiet negativ und wanderte nur sehr langsam in den positiven Bereich, wobei der negative Anteil dominierte. In diesem Fall ist jedoch sowohl der negative Anteil deutlich höher, als auch der positive mit relativ starken Werten und Variationen in z -Richtung vorhanden. Das Resultat ist daher vom ersten Fall zu unterscheiden. Zur Verdeutlichung ist ω_z zum Zeitpunkt $t = 50\bar{t}$ in Abbildung 5.35 bei Re=714 für beide Turbulenzmodelle in Kombination mit FLOW dargestellt. Der zeitliche Verlauf von ω_z kann aus den Abbildungen D.7 bis D.10 im Anhang entnommen werden. Die Entwicklung der Fundamentalwirbel ist bei $t = 15\bar{t}$ abgeschlossen. Allerdings ist bereits zu diesem Zeitpunkt eine starke Variation in z -Richtung erkennbar, wodurch der Paarungsprozeß im Gegensatz zum vorherigen Beispiel unterdrückt wird. Die Strömung wird dabei von der Veränderung in z -Richtung dominiert. Es erfolgt eine Aufweitung der Impulsdicke μ , siehe Abbildung 5.34, jedoch keine Paarungseffekte. Dadurch wächst die Schichtdicke kontinuierlich ohne Plateau-effekt an, nachdem die Fundamentalwirbel gebildet wurden. Auch anhand des Energieverlaufs in Abbildung 5.36 und dem Verlauf der Subskalendissipation in Abbildung 5.37 ist deutlich der dissipative Charakter erkennbar, wodurch die Energie der kleinen Strukturen entzogen und das Paaren verhindert wird.

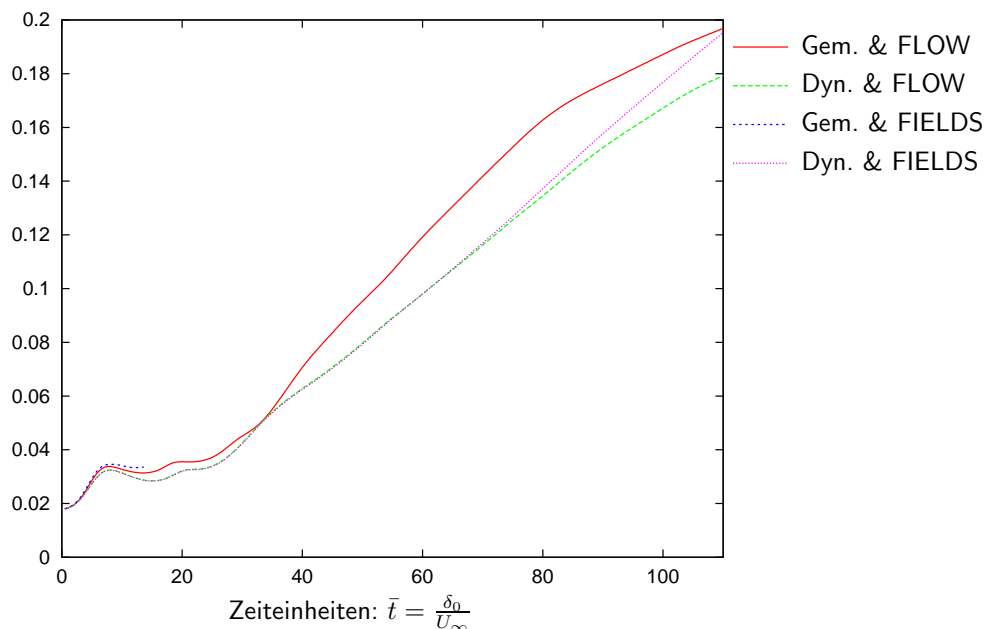


Abbildung 5.34: Re=714: Entwicklung der Impulsdicke μ beim gemischten und dynamischen Modell

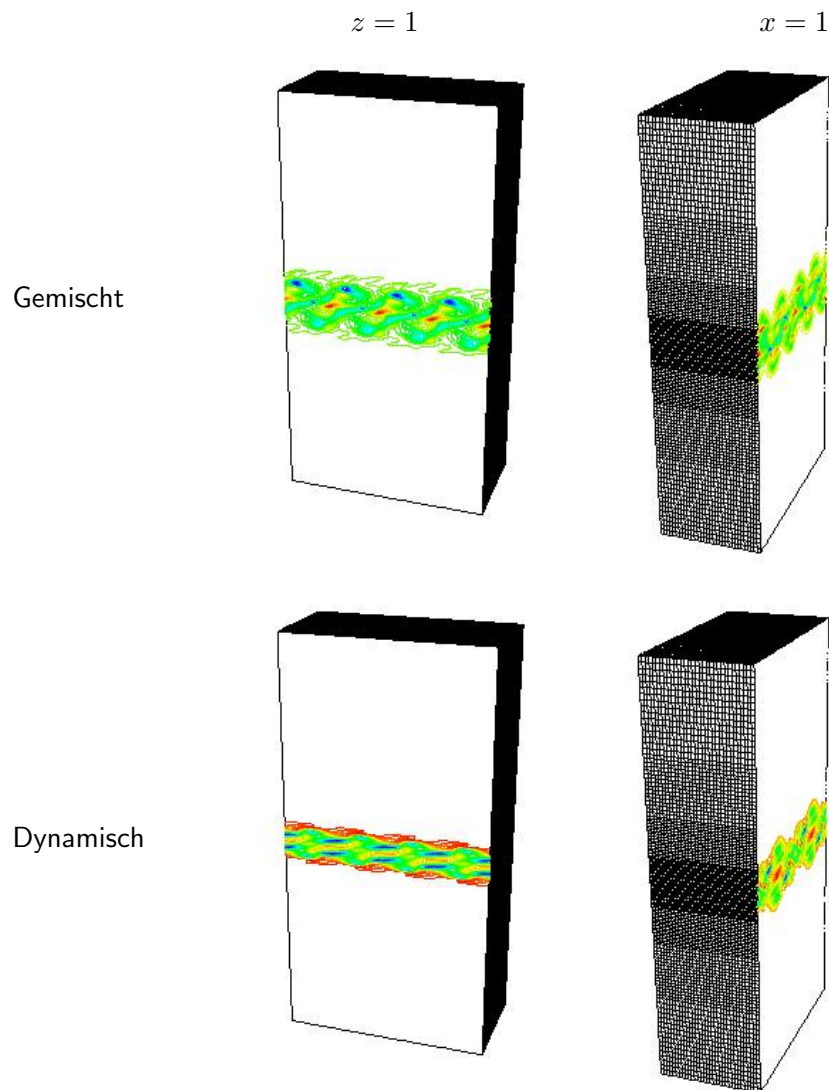


Abbildung 5.35: $Re=714$: Wirbelstärke ω_z bei $t = 50\bar{t}$ und FLOW

Beim dynamischen Modell ist das Verhalten bzw. das Resultat der beiden Stabilisierungsmethoden FIELDS und FLOW über einen weiten Zeitraum sehr ähnlich. Erst ab ungefähr $t = 80\bar{t}$ ist ein Unterschied im Energieverlauf, bei der Entwicklung der Impulsdicke und bei der Subskalendissipation erkennbar. Leider ist ein Vergleich der Verfahren beim gemischten Modell nicht möglich, da das Verfahren bei FIELDS wiederum ein Fehlverhalten aufweist, das aus dem Verlauf der Massenerhaltung in Abbildung 5.38 ersichtlich ist. Daher soll nun auf den Unterschied der beiden Turbulenzmodelle eingegangen werden. Das gemischte Modell resultiert bei diesem Fall in einer geringeren kinetischen Energie und einer stärkeren Aufweitung der Impulsdicke im Vergleich zum dynamischen Modell. Auch beim vorangegangenen „2d-Problem“ wies das gemischte Modell einen stärkeren Abfall der kinetischen Energie auf. Allerdings beeinflussen in diesem Fall die Störungen in z -Richtung fundamental das Verhalten des verwendeten

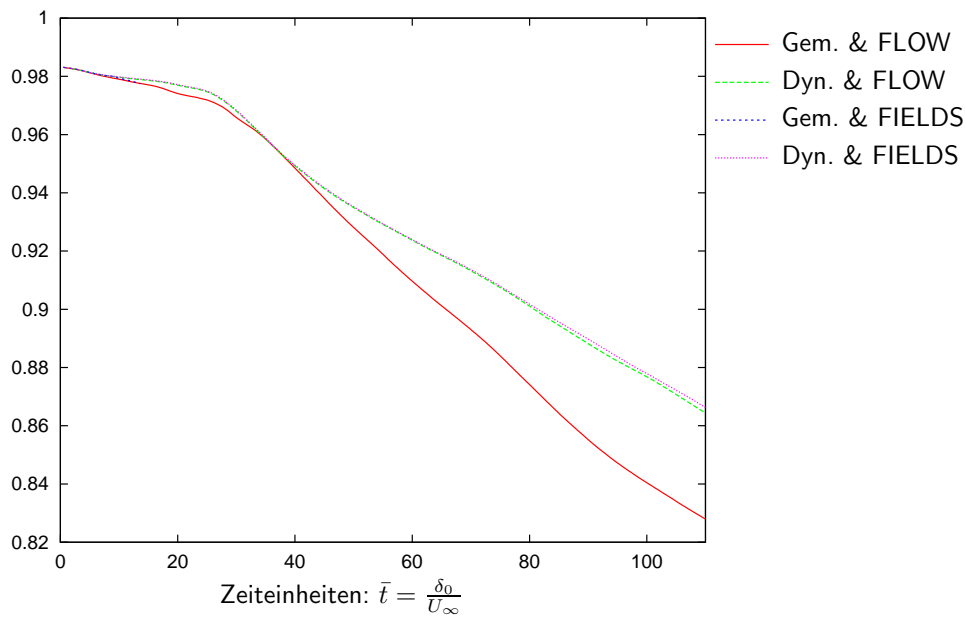


Abbildung 5.36: Re=714: Totale kinetische Energie beim gemischten und dynamischen Modell

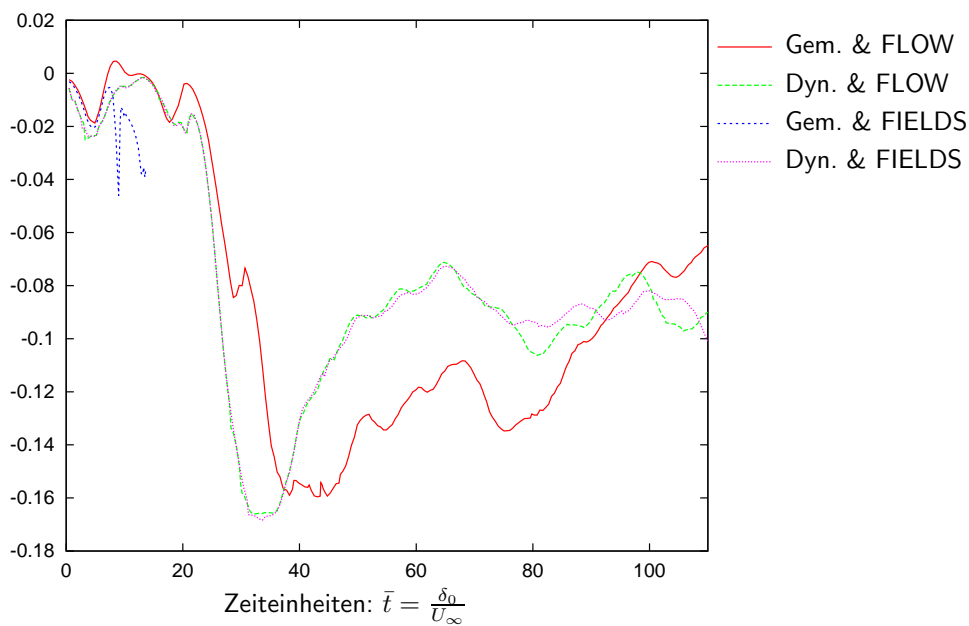


Abbildung 5.37: Re=714: Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ beim gemischten und dynamischen Modell

Turbulenzmodelles. Da das Verhalten der Strömung im Anfangsstadium bei beiden Turbulenzmodellen sehr ähnlich ist, kann nur durch die speziellen Eigenschaften der jeweiligen Modelle der unterschiedliche Verlauf nach der Entwicklung der Fundamentalwirbel erklärt werden. Bei der vorliegenden stark dreidimensionalen Strömung resultiert das gemischte Modell ab $t \approx 40\bar{t}$

einerseits in einer größeren Dissipation, wie aus Abbildung 5.37 ersichtlich ist, andererseits aber auch in einem größeren Massenerhaltungsfehler. Dies deutet darauf hin, daß der Einfluß des Skalenähnlichkeitsterms dominant ist, wodurch die Störung der Massenerhaltungsgleichung sehr groß wird. Aus Abbildung 5.38 geht dabei auch hervor, daß FIELDS in Kombination mit dem gemischten Modell zu keinem Ergebnis führt, da der Anstieg des Massenerhaltungsfehlers viel zu groß bzw. die Stabilisierung zu schwach ist, um das System sinnvoll lösen zu können. Da bei diesem Testfall eine echt dreidimensionale Entwicklung vorliegt, ist das Verhalten der Turbulenzmodelle viel unterschiedlicher als das beim vorangegangenen „2d-Problem“ der Fall war. Insbesondere ist beim dynamischen Modell die Struktur der resultierenden Wirbelstärke viel organisierter als beim gemischten Modell. Ab $t \approx 35\bar{t}$ entwickeln sich die Strömungen unterschiedlich, woraus auch die größere Aufweitung der Impulsdicke beim gemischten Modell resultiert.

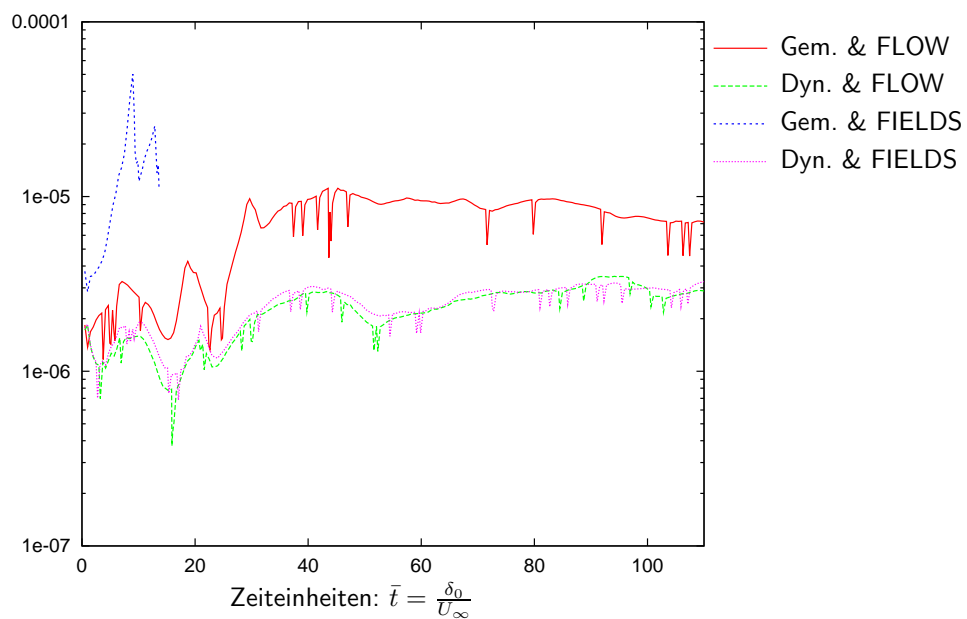


Abbildung 5.38: Re=714: Massenerhaltungsfehler $\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2$ beim gemischten und dynamischen Modell

Modell	Stabilisierung	Lin. Konv		Nichtlin. Konv.	
		$\kappa^t(u)$	$\kappa^t(p)$	$\psi^t(u)$	$\psi^t(p)$
Gemischt	FIELDS ⁴	0.014679	0.019918	0.342625	0.347522
	FLOW	0.012943	0.023774	0.206361	0.225175
Dynamisch	FIELDS	0.012794	0.039946	0.124660	0.096498
	FLOW	0.013388	0.039073	0.120726	0.094502

Tabelle 5.20: Konvergenzraten bei Re=714 gemittelt über $110\bar{t}$

⁴Bei dieser Kombination wurde nur über $t \approx 13\bar{t}$ gemittelt.

In Tabelle 5.20 sind die über $110\bar{t}$ gemittelten Konvergenzraten eingetragen. Dabei zeigt sich, daß die nichtlineare Reduktion beim gemischten Modell schlechter ausfällt, als dies beim dynamischen Modell der Fall ist. Auch hier spielt der Skalenähnlichkeitsterm die entscheidende Rolle. Dieser stellt einen Beitrag zur rechten Seite dar, der die nichtlineare Iteration verlangsamt. Das FLOW-Verfahren kann dabei das Problem sehr gut lösen, im Gegensatz zu FIELDS, das in diesem Fall schon sehr früh abbricht. Beim dynamischen Modell sind die Lösungseigenschaften der beiden Stabilisierungsvarianten vergleichbar, so daß dabei kein Vor- oder Nachteil der unterschiedlichen Verfahren ausgemacht werden kann.

Startlösung 3 bei $Re=700$

Schließlich soll eine dritte Möglichkeit der Störung des Startprofils vorgestellt werden, die ihrerseits wiederum zu einem anderen Charakter der Strömung führt.

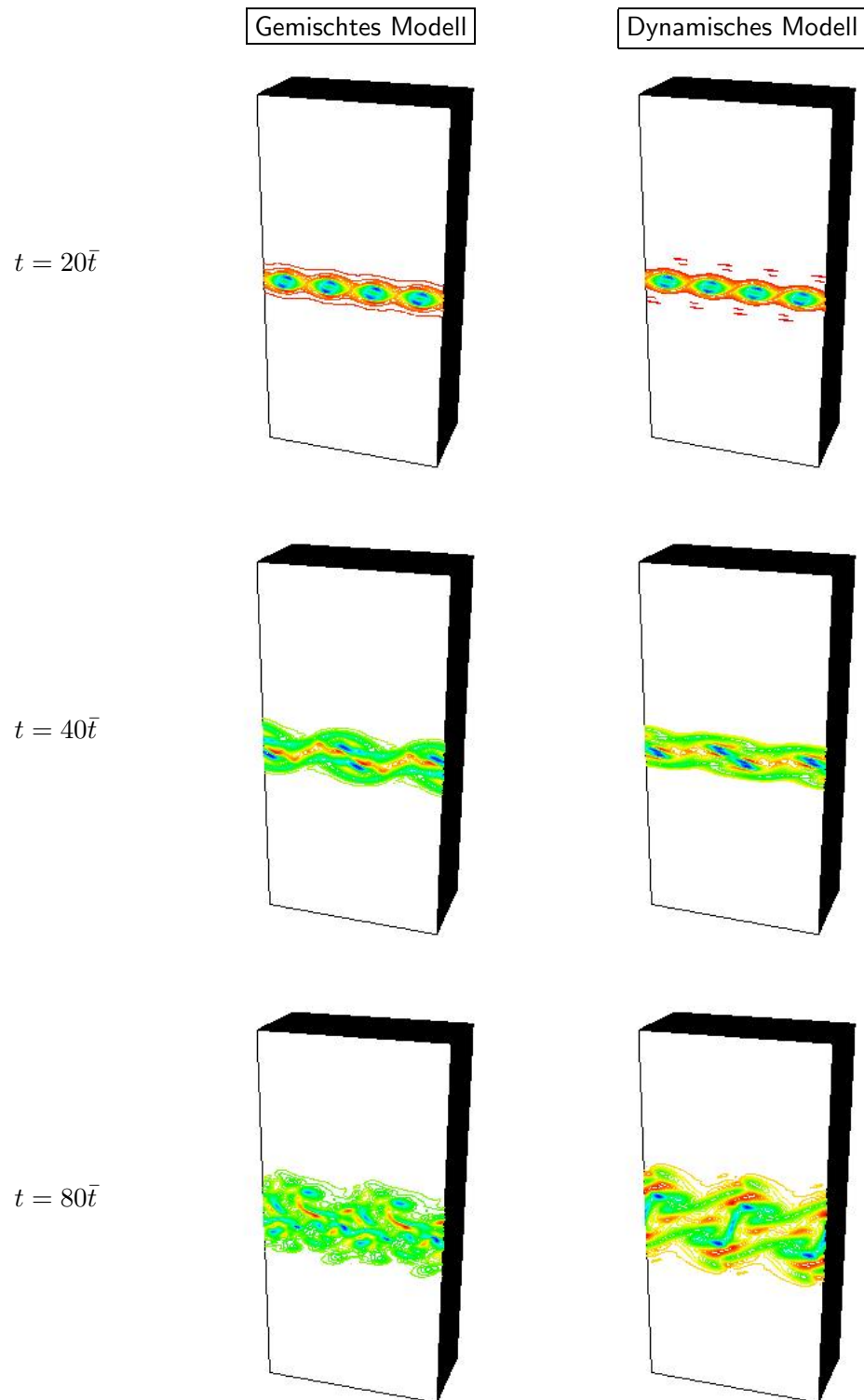
$$\mathbf{u}' = 0.001 \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi}{\partial y} - \frac{\partial \Psi}{\partial z} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial z} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } \Psi = e^{-\left(\frac{2y-2}{\delta}\right)^2} (\cos(4\pi x) + \cos(10\pi x) + \cos(8\pi z) + \cos(20\pi z)).$$

Diese Simulation wird bei $Re=700$ durchgeführt. Ein Vergleich mit einer Simulation bei $Re=714$ wie im vorigen Fall ergab nur marginale Unterschiede.

Das Resultat dieser Störung des Startprofils liefert eine in z -Richtung periodische Lösung, d.h. es liegt keine rein zweidimensionale Strömung wie im ersten und auch keine stark dreidimensional ausgeprägte wie im vorangegangenen Fall vor. In den Abbildungen D.11 bis D.14 im Anhang wird die resultierende Lösung für die beiden Turbulenzmodelle dargestellt. Exemplarisch soll hier für drei Zeitpunkte die je nach Turbulenzmodell unterschiedliche Lösung in Abbildung 5.39 demonstriert werden.

In diesem Fall findet das Paaren von Wirbeln statt, auch wenn sie sofort wieder in kleinere Strukturen zerfallen. Dies kann auch aus der Entwicklung der Impulsdicke μ in Abbildung 5.40 abgelesen werden. Es sind kleine etwas flacher ansteigende Teilstücke erkennbar, die den Beginn der Paarung mit sofortigem Zerfall in kleinere Strukturen widerspiegeln. Das gemischte Modell reagiert diesbezüglich früher, was auch aus den Abbildungen D.11 bis D.14 im Anhang deutlich wird, in denen die z -Komponente der Wirbelstärke dargestellt ist. Das dynamische Modell ist etwas zeitverzögert und resultiert in einer viel strukturierteren Lösung gegenüber der schon früh ziemlich ungeordneten Lösung des gemischten Modells. Dies läßt sich auch aus dem stärkeren Abfall der totalen kinetischen Energie ablesen (siehe Abbildung 5.41). Darin ist wiederum das Fehlverhalten der FIELDS-Stabilisierung beim gemischten Modell ersichtlich. Beim dynamischen Modell verhalten sich die beiden Stabilisierungsmethoden FIELDS und FLOW sehr ähnlich, v.a. ist kaum ein Unterschied im Energieniveau feststellbar. Ebenso ist das Verhalten der beiden Turbulenzmodelle über einen größeren Zeitraum sehr ähnlich. Bei den beiden Fällen davor unterschied sich die Entwicklung der totalen kinetischen Energie schon ab $t \approx 20\bar{t}$ im ersten Fall bzw. ab $t \approx 40\bar{t}$ im zweiten Fall. Hier allerdings ist erst ab $t \approx 55\bar{t}$ eine deutlich unterschiedliche Entwicklung feststellbar. Doch allein durch den Verlauf der kinetischen Energie läßt sich keine Aussage über den Charakter der Strömung treffen, wie durch den Vergleich mit den vorangegangenen Beispielen deutlich wird.

Abbildung 5.39: $Re=700$: ω_z in Ebene $z = 1$ bei FLOW

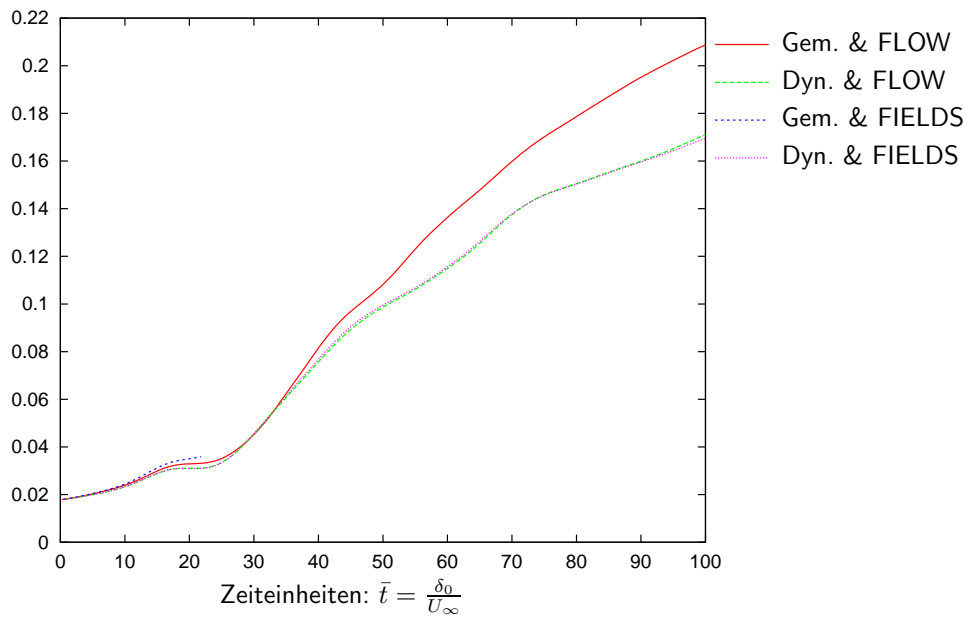


Abbildung 5.40: $Re=700$: Impulsdicke μ beim gemischten und dynamischen Modell

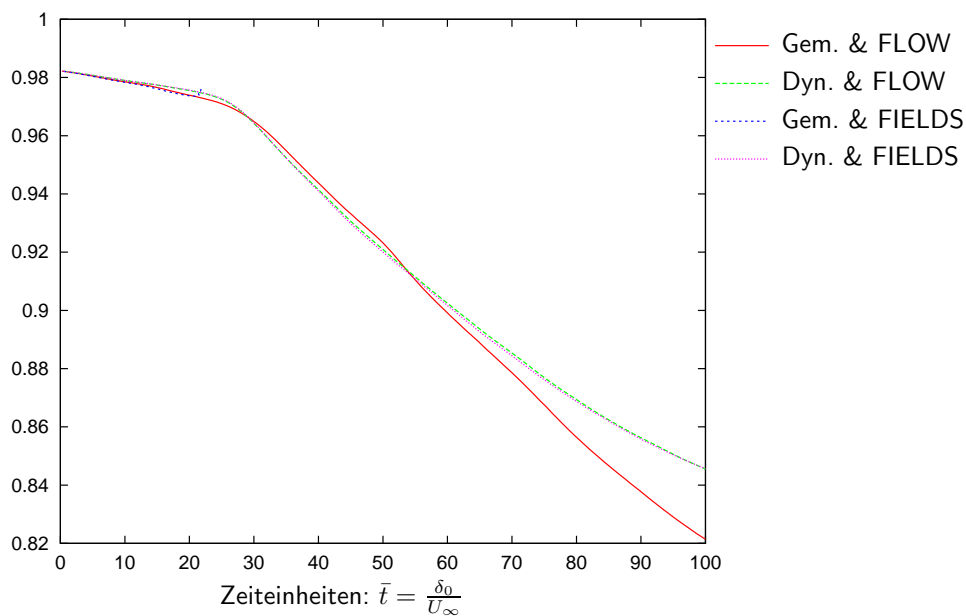


Abbildung 5.41: $Re=700$: Totale kinetische Energie beim gemischten und dynamischen Modell

Der Verlauf der Subskalendissipation aus Abbildung 5.42 ist ebenfalls sehr ähnlich zum vorangegangenen Beispiel bei $Re=714$ (siehe Abbildung 5.37), wobei aber in diesem Fall eine viel stärkere Dissipation vorliegt. Dies verdeutlicht das stärkere Abklingverhalten der totalen kinetischen Energie im Vergleich zum vorherigen Beispiel. In diesem Fall liegt eine weniger stark ausgeprägte 3d-Struktur der Strömung vor, wodurch mehr Energie dissipiert wird als

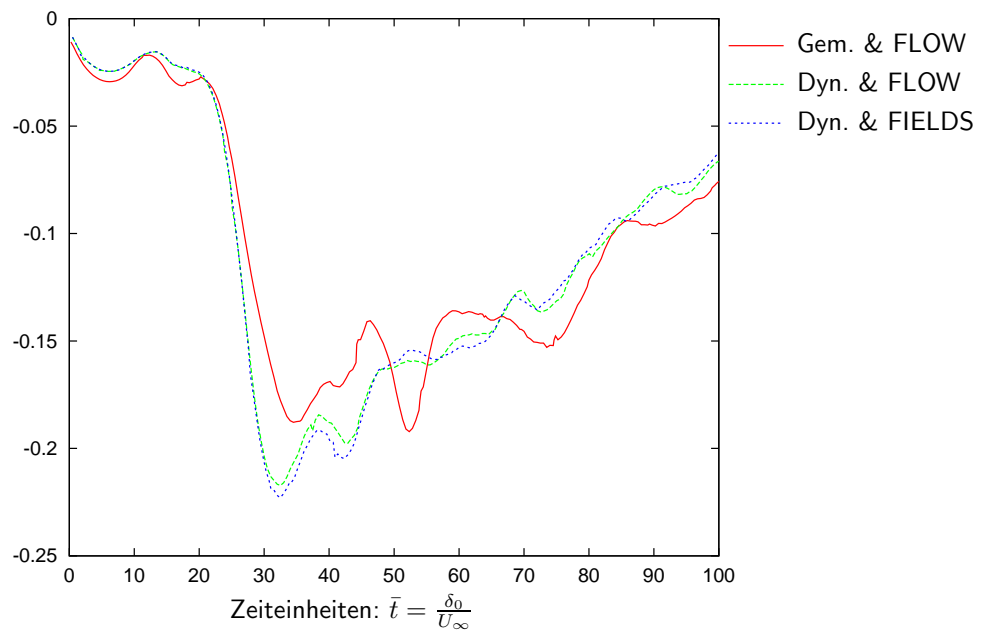


Abbildung 5.42: $Re=700$: Subskalendissipation $\bar{\varepsilon}_{SGS}$ beim gemischten und dynamischen Modell

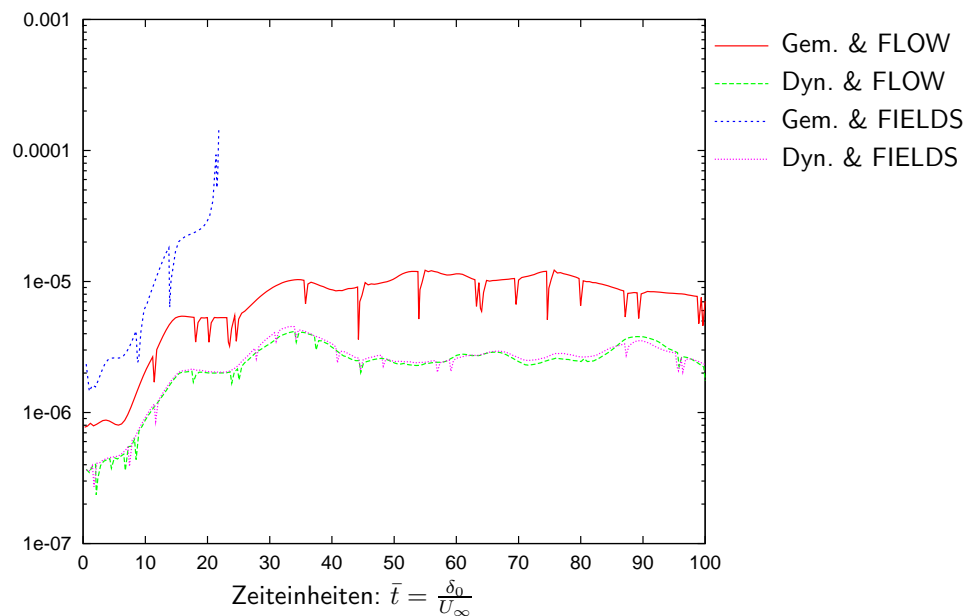


Abbildung 5.43: $Re=700$: Massenerhaltungsfehler $\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2$ beim gemischten und dynamischen Modell

im vorigen Fall, bei dem die Stärke der Strömungsstruktur in der dritten Raumrichtung die Energiedissipation verlangsamte.

Auch die Entwicklung des Massenerhaltungsfehlers ist ähnlich zum vorangegangenen Fall.

Modell	Stabilisierung	Lin. Konv		Nichtlin. Konv.	
		$\kappa^t(u)$	$\kappa^t(p)$	$\psi^t(u)$	$\psi^t(p)$
Gemischt	FIELDS ⁵	0.014769	0.022881	0.266789	0.261506
	FLOW	0.013911	0.024620	0.190519	0.202160
Dynamisch	FIELDS	0.015285	0.048207	0.122012	0.090940
	FLOW	0.016207	0.047894	0.118760	0.087288

Tabelle 5.21: Konvergenzraten bei $Re=700$ gemittelt über $100\bar{t}$

Zwischen den beiden Stabilisierungsvarianten FIELDS und FLOW in Kombination mit dem dynamischen Modell sind kaum Unterschiede feststellbar. Trotzdem ergibt sich für FLOW ein etwas geringerer Massenerhaltungsfehler, der nur gegen Ende der Simulation einen kurzen Überschwinger produziert. Die totale kinetische Energie und die Entwicklung der Impulsdicke sind jedoch für beide Stabilisierungen fast identisch. Berücksichtigt man diesen Sachverhalt bei der Beurteilung des Massenerhaltungsfehlers, kann man daraus schließen, daß die Unterschiede in der Massenerhaltung wohl eher von rein lokaler Natur sind, wenn Größen wie die Impulsdicke und die Energie übereinstimmen. Beim Massenerhaltungsfehler schlagen kleine lokale Abweichungen viel stärker zu Buche, als dies bei den anderen beiden Größen der Fall ist.

Zum Schluß sollen nun die Lösungseigenschaften der verschiedenen Stabilisierungsverfahren bei diesem Testfall diskutiert werden. In Tabelle 5.21 sind dafür die Konvergenzraten gemittelt über $100\bar{t}$ eingetragen. Diese sind mit den Werten bei $Re=714$ in Tabelle 5.20 vergleichbar. Auffallend ist, daß die nichtlineare Reduktion bei den Fällen $Re=700$ und $Re=714$ besser ist als beim „2d-Problem“ $Re=500$, sofern man das dynamische Modell als Turbulenzmodell einsetzt. Beim gemischten Modell ist jedoch die nichtlineare Konvergenz bei $Re=500$ schneller. Doch sind die Unterschiede nicht so groß, daß dieser Vergleich aussagekräftig wäre. Vielmehr ist beim Fall $Re=500$ die Konvergenz bei beiden Turbulenzmodellen etwa gleich, wohingegen bei den Fällen $Re=714$ und $Re=700$ das dynamische Modell in deutlich besseren Raten gegenüber dem gemischten Modell resultiert. Dies liegt v.a. am Skalenähnlichkeitsterm, der die nichtlineare Konvergenz verlangsamt. Bei $Re=500$ war der Einfluß dieses Terms geringer und damit die nichtlineare Konvergenz trotz der unterschiedlichen Turbulenzmodelle ähnlich. Bei den letzten beiden Fällen ist dagegen ein wesentlich größerer Einfluß des Skalenähnlichkeitsterms, z.B. bei der nichtlinearen Konvergenz, spürbar. Auch beim Massenerhaltungsfehler kann der größere Beitrag des Skalenähnlichkeitsterms abgelesen werden, da bei $Re=714$ und $Re=700$ im Gegensatz zum Fall bei $Re=500$ ein deutlicher Unterschied je nach Turbulenzmodell sichtbar ist. Die linearen Konvergenzraten sind dafür im Fall $Re=500$ geringfügig schlechter im Vergleich zu den anderen beiden Fällen. Da die linearen Raten aber ausgezeichnet sind, werden sie hier nicht weiter beurteilt. Viel entscheidender ist die nichtlineare Konvergenz bei einer turbulenten Simulation, da v.a. auch der Modellterm für den nächsten Schritt bestimmt werden muß und die Genauigkeit dadurch entscheidend vom vorangegangenen Schritt abhängt.

⁵Bei dieser Kombination wurde nur über $t \approx 22\bar{t}$ gemittelt.

Diskussion

Es wurden also drei unterschiedliche Arten der Störung mit unterschiedlich starker Wichtung vorgestellt. Diese resultieren in drei unterschiedlichen Arten von Strömungen: einen rein zwei-dimensionalen Fall bei der schwächsten Störung der Größenordnung 10^{-4} (Startlösung 1), einem schwach dreidimensionalen Fall bei einer mittleren Wichtung von 10^{-3} (Startlösung 3) und in eine stark dreidimensionale Strömung bei der stärksten Störung der Ordnung 10^{-2} (Startlösung 2). Je stärker die Wichtung ist, desto größer wird dadurch auch der positive Anteil von ω_z . Dieser positive Anteil wird hauptsächlich zur Charakterisierung von Turbulenz bei diesem Problemfall herangezogen. Allerdings sollte dieser erst im Laufe der Zeit entstehen und nicht von Anfang an in der Strömung vorhanden sein. Die Wahl der Startlösung ist also entscheidend für den Verlauf der Simulation.

Als Schlußfolgerung der drei getesteten Startlösungen ergibt sich: je stärker die Energiedissipation ist, desto größer wird die Impulsdicke bzw. desto mehr weitet sich das Strömungsprofil auf. Das ist unabhängig vom eigentlichen Charakter der Strömung. Liegt eine starke 3d-Struktur vor, kann die Energiedissipation trotzdem geringer ausfallen als es bei einem schwächeren 3d-Charakter der Fall ist (siehe Startlösung 2 im Vergleich zu 3). Desweiteren kann auch gefolgert werden, daß bei einem dreidimensionalen Charakter der resultierenden Strömung der Skalenähnlichkeitsterm beim gemischten Modell an Bedeutung gewinnt. Dies äußert sich allerdings auch in einem größeren Massenerhaltungsfehler, da der Beitrag dieses Terms als Quellterm in die Stabilisierung einfließt. Doch wächst der Fehler bei geeigneter Stabilisierung nicht kontinuierlich an, sondern bleibt beschränkt, auch wenn die Impulsdicke größer wird. Erfolgt jedoch ein zu starkes Anwachsen des Massenerhaltungsfehlers, liegt ein Fehlverhalten vor, das auf eine ungeeignete Stabilisierungsmethode zurückgeführt werden kann. Die jeweilige Stabilisierung muß eine ausreichende Kopplung der Geschwindigkeitskomponenten mit dem Druck liefern, v.a. wenn ein Quellterm wie beim gemischten Modell berücksichtigt werden muß.

Bezüglich der Lösbarkeit ergeben sich bei diesem Problemfall keine Schwierigkeiten, solange die Diskretisierung stabil bleibt und kein Fehlverhalten aufweist. Stellt sich jedoch ein unphysikalischer Effekt ein, so ist es gerechtfertigt, wenn die Simulation aufgrund von Lösungsschwierigkeiten abbricht. Das Ergebnis ist dann sowieso fragwürdig und kann nicht ausgewertet werden. Da die Konvergenzraten des reinen Mehrgitterverfahrens schon sehr gut sind, wird kein Vergleich mit dem durch das Bi-CGSTAB-Verfahren beschleunigten Lösungsalgorithmus getätigt. Der damit verbundene Aufwand wäre nicht gerechtfertigt.

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war, zwei Stabilisierungsvarianten für die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen sowohl im laminaren als auch im turbulenten Fall zu untersuchen. Die Unterschiede wurden neben Fehleruntersuchungen auch anhand des Konvergenzverhaltens des zur Lösung des diskreten Gleichungssystems verwendeten Mehrgitterverfahrens beurteilt. Hierbei handelte es sich um ein lineares geometrisches Mehrgitterverfahren, wobei die unvollständige Dreieckszerlegung mit Punktbloch-Anordnung als Glättungsoperator diente. Als Turbulenzmodell wurde die Grobstruktursimulation verwendet, um die nicht aufgelösten Strukturen zu modellieren. Hierzu wurden zwei verschiedene Subskalenmodelle betrachtet, das dynamische Modell von Germano/Lilly [GPMC91],[Lil92] und das gemischte Modell nach Zang et al. [ZSK93], die beide den enthaltenen Modellparameter dynamisch und lokal bestimmen. Da sowohl die Diskretisierung als auch die Grobstruktursimulation rein lokal anwendbar sind und auch auf unstrukturierten Gittern arbeiten können, war die Kombination dieser beiden eine naheliegende Option.

Die beiden Stabilisierungen, die in der Arbeit mit FIELDS und FLOW bezeichnet wurden, gehen auf Raw [Raw85] bzw. Karimian [KS95] zurück. Letztere stellt eine Modifikation von FIELDS dar und wurde ursprünglich für den schwach kompressiblen Ansatz konzipiert, bei dem FIELDS keine ausreichende Stabilisierung lieferte. In dieser Arbeit erfolgte die Übertragung auf den inkompressiblen Fall, für den sich durch die Modifikation gegenüber FIELDS deutliche Vorteile ergaben. Die nichtlineare Konvergenz des Newton-Verfahrens war je nach Problemfall deutlich schneller, und der durch die Stabilisierung eingebrachte Massenerhaltungsfehler konnte reduziert werden. Beide Aspekte sind sowohl für laminare als auch turbulente Simulationen entscheidend, da die nichtlineare Reduktion von großer Bedeutung ist. Zum anderen gilt, je weniger Störung in die Massenerhaltung eingebracht wird, desto bessere Resultate können erzielt werden, da das Gleichungssystem umso mehr dem kontinuierlichen System ähnelt. Allerdings ist dabei eine gewisse Optimierung zwischen ausreichender Stabilisierung (die sich auch durch das Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens äußert) und minimaler Störung der Massenerhaltung vonnöten. Die Notwendigkeit der Optimierung ergibt sich dadurch, daß ein kleiner Stabilisierungsterm nicht unbedingt einen kleinen Massenerhaltungsfehler liefert und auch nicht unbedingt zu einem stabilen System führt, was anhand der Stokes-Gleichung gezeigt werden konnte. Umgekehrt stabilisiert zwar ein großer Stabilisierungsterm das Gleichungssystem, wodurch das Mehrgitterverfahren problemlos konvergiert, dafür ist aber auch die Massenerhaltungsgleichung stark gestört. Zwischen diesen beiden Extremen muß ein Optimum gefunden werden, das allerdings nicht einfach zu finden ist, v.a. da nicht nur die Größe des Stabilisierungsterms wichtig ist. Auch die Form dieses Terms ist von Bedeutung, woraus sich der oben erwähnte reduzierte Massenerhaltungsfehler von FLOW gegenüber FIELDS ergab. Die Größe und Form der Stabilisierung sowie der resultierende Massenerhaltungsfehler müssen daher in ein ausgewogenes Verhältnis gebracht werden und wurden in dieser Arbeit anhand verschiedener laminarer und turbulenter Problemfälle gründlich untersucht.

Sowohl FIELDS als auch FLOW können rein lokal auf Elementebene bestimmt werden. In beiden Fällen ist dafür keine Information aus den Nachbarelementen erforderlich. Dadurch ist die zu erwartende Verbesserung von FLOW gegenüber FIELDS in Bezug auf die Massenerhaltung natürlich nicht allzu groß. Durch numerische Tests konnte jedoch eine Reduktion des Massenerhaltungsfehlers auch bei dem rein lokalen Ansatz gezeigt werden. Insbesondere erwies sich das Verfahren FLOW im turbulenten Fall als stabiler, v.a. wenn ein Quellterm durch das Turbulenzmodell eingebracht wurde. In solchen Situationen führte FIELDS teilweise zu unphysikalischen Ergebnissen, teilweise konnte das dabei resultierende Gleichungssystem aufgrund einer zu geringen Stabilisierungsstärke nicht gelöst werden. Auch in dieser Hinsicht erwies sich FLOW gegenüber FIELDS als eine deutliche Verbesserung, da die Kopplung zwischen den Geschwindigkeitskomponenten und dem Druck stärker ausfiel, was bei den turbulenten Simulationen am deutlichsten wurde. Dies stellt einen ersten Schritt in Richtung Optimierung zwischen ausreichender Stabilisierung und möglichst geringer Störung der Massenerhaltung dar.

Beide Stabilisierungen basieren im Wesentlichen auf einer vereinfachten Darstellung der Impulsgleichung auf Elementebene, woraus eine spezielle Interpolation gebildet wird. Hierbei geht unter anderem auch eine diskrete Form des Diffusionsoperators ein, der geeignet modelliert werden muß. Verschiedene Möglichkeiten hierfür, neben der von Raw vorgestellten Methode, mit unterschiedlich starken Konsequenzen für das resultierende Gleichungssystem, wurden in der Arbeit präsentiert. Im Falle der Stokes-Gleichung konnte für zwei der vorgestellten Möglichkeiten bei Vergrößerung des Elementseitenverhältnisses ein Verlust der Stabilisierung sowohl analytisch als auch numerisch demonstriert werden. Dieses Problem konnte aber durch eine Korrektur der Diffusionsapproximation umgangen werden. Gleichzeitig wurde dabei eine geringere Stabilisierungskonstante und auch ein geringerer Massenerhaltungsfehler gegenüber der Version von Raw erzielt, wobei das Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens vergleichbar blieb. Insbesondere wurde für eine zu kleine Stabilisierungskonstante gezeigt, daß keine ausreichende Stabilisierung erzielt wird und sogar der Massenerhaltungsfehler größer als erwartet ausfällt. Diese Untersuchungen sind daher ein weiterer Schritt in Richtung Optimierung zwischen Stabilität und Störung der Massenerhaltungsgleichung.

Auch im Hinblick auf die turbulenten Simulationen waren diese Untersuchungen entscheidend, da eine genaue Diskretisierung hierbei sehr wichtig ist. Dazu gehört nicht nur eine möglichst wenig gestörte Massenerhaltung, sondern auch eine angemessene Approximation des Konvektionsoperators. Dieser wurde stets mittels eines hybriden Verfahrens diskretisiert, das ein reines Aufwindverfahren und zentrale Differenzen mittels einer Konvexkombination verband. Die Wichtung zwischen beiden wurde abhängig von der lokalen Peclet-Zahl gewählt, so daß das Verfahren auf die lokale Dominanz von Konvektion (Aufwindverfahren) oder Diffusion (zentrale Differenzen) ausgerichtet werden konnte. Als bestes Aufwindverfahren stellte sich dabei eine Methode heraus, die als „Physical Advection Correction“ bezeichnet wird. Entscheidend hierfür war die durch das Verfahren eingebrachte numerische Diffusion. Anhand von laminaren Testbeispielen konnte der unterschiedlich starke diffusive Charakter der verschiedenen Methoden demonstriert werden, so daß Verfahren mit hoher Diffusion bei den turbulenten Simulationen ausgeschlossen werden konnten.

Die Zeitintegration erfolgte bei der hier vorgestellten Diskretisierung implizit. Das hat sowohl in Bezug auf die Stabilisierung, die ebenfalls vom Zeitschritt abhängt, als auch in Bezug auf die turbulenten Fälle Konsequenzen. Es müssen die in der Strömung enthaltenen Zeitgradienten angemessen approximiert werden, d.h. der Zeitschritt sollte insbesondere nicht zu groß sein

bei starken zeitlichen Veränderungen. Andererseits sollte er auch nicht zu klein sein, da bei einem impliziten Verfahren keine CFL-Bedingung erfüllt werden muß. Anhand eines laminaren Testfalls konnte gezeigt werden, daß ein zu kleiner Zeitschritt, allein durch den Einfluß der Stabilisierung, insgesamt einen größeren Fehler liefert, als dies bei einem größeren Zeitschritt der Fall ist. Auch hier ist eine optimale Wahl erforderlich, um den daraus resultierenden Fehler möglichst gering zu halten. Im turbulenten Fall muß diesbezüglich auch die durch den impliziten Ansatz eingebrachte Mittelung in der Zeit berücksichtigt werden. Auch dann ist man bestrebt, weder zu große (aufgrund der Mittelung) noch zu kleine (aufgrund $CFL > 1$ bzw. dem durch die Stabilisierung eingebrachten Fehler) Schrittweiten zu wählen. Diese Untersuchungen im instationären Fall sind ein dritter Schritt in Richtung Optimierung, wobei bei der Wahl des Zeitschritts in Kombination mit der Stabilisierung noch Forschungsbedarf besteht.

All diese Untersuchungen im laminaren und turbulenten Fall haben gezeigt, daß die Stabilisierung FLOW einen geringeren Massenerhaltungsfehler liefert, zu einer schnelleren nichtlinearen Konvergenz führt und auch im turbulenten Fall stabil ist. FIELDS ist dagegen eher für laminare Berechnungen mit wenig wirbelbehafteten Strömungen geeignet. Das optimale Stabilisierungsverfahren kann also nur abhängig vom Problem bestimmt werden, da die Strömungsstrukturen ebenfalls einen starken Einfluß auf das Verhalten der beiden Stabilisierungen besitzen. Sowohl für FIELDS als auch für FLOW kann jedoch durch eine geeignete Wahl der Diffusionsapproximation innerhalb der Stabilisierung der Massenerhaltungsfehler reduziert werden, wobei die Konvergenzeigenschaften des Mehrgitterverfahrens nahezu unberührt bleiben.

Als weiterführendes Forschungsthema bietet sich an, auch die Wahl der Zeitschrittweite zu optimieren. In dieser Arbeit war die Zeitschrittweite allein durch das Verhalten des Lösungsverfahrens bestimmt worden oder wurde a priori festgelegt. In dieser Hinsicht läßt sich die Approximation des zeitlichen Entwicklungsprozesses noch deutlich verbessern, zumal der Zeitschritt auch einen entscheidenden Einfluß auf die Stabilisierung besitzt.

Ein weiterer sehr interessanter Punkt ist die adaptive Gitterverfeinerung, vor allem im turbulenten Fall. Im Rahmen dieser Arbeit wurde darauf verzichtet, da der Schwerpunkt auf die Untersuchung der Eigenschaften der Diskretisierung und Stabilisierung gelegt wurde, um für weiterführende Arbeiten eine Basis zu schaffen. In zwei Raumdimensionen wurden allerdings schon erste Experimente mit adaptiver Verfeinerung im turbulenten Fall in [NW03] gemacht, die auf drei Raumdimensionen erweitert werden sollten. Doch ist der Aufwand und die Strategie der Adaption in drei Raumdimensionen ungleich komplexer als in zwei Raumdimensionen, daher besteht hier ebenfalls Forschungsbedarf. Hierzu gilt es v.a. Kriterien zur Adaption zu entwickeln, die auch das Turbulenzmodell mit einbeziehen. Der zu modellierende Teil der in der Strömung enthaltenen Strukturen, die durch die implizite Filterung des Gitters nicht mehr darstellbar sind, sollte sich dadurch minimieren lassen, sofern auch turbulente Informationen bei der Gitteradaption berücksichtigt werden.

Daran schließt sich unmittelbar eine Untersuchung anderer Turbulenzmodelle als den beiden in dieser Arbeit betrachteten an. Dies läßt sich unter anderem mit der Gitteradaption verbinden, wobei dabei auch der unterschiedliche Charakter der Modelle mit berücksichtigt werden sollte. Es sind eine Vielzahl von Modellen entwickelt worden, wobei in diesem Zusammenhang solche von Interesse sind, die dynamisch und rein lokal anwendbar sind, um die Möglichkeiten der Adaption nicht nur bei der Wahl des Gitters, sondern auch beim Modell selbst voll ausschöpfen zu können. Dies läßt sich schließlich mit adaptiven Mehrgittermethoden als Lösungsverfahren verbinden, so daß das Gesamtverfahren möglichst effizient bleibt.

A Diffusionslänge in drei Raumdimensionen

Die Herleitung der Diffusionslänge bzw. der Approximation des diffusiven Terms am Integrationspunkt wird für ein Hexaederelement in drei Raumdimensionen beschrieben. Zur Veranschaulichung dient Abbildung A.1, in der ein Integrationspunkt exemplarisch eingezeichnet ist, sowie die Nummern der Eckpunkte, die Längen der Kanten, die Normale am Integrationspunkt und die Diagonale vom Mittelpunkt der zugehörigen Kante zum Schwerpunkt des Elements.

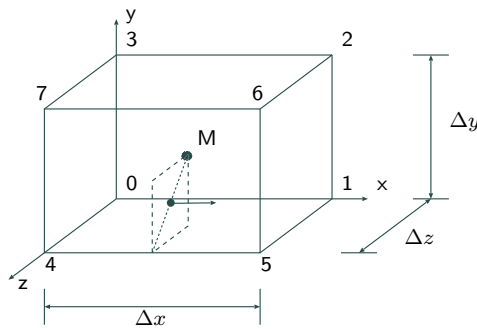


Abbildung A.1: Hexaederelement mit exemplarischem Integrationspunkt

Die Ansatzfunktionen für dieses Element werden der Vollständigkeit halber angeführt:

$$\begin{aligned}
 N_0 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} (\Delta x - x) (\Delta y - y) (\Delta z - z) & N_4 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} (\Delta x - x) (\Delta y - y) z \\
 N_1 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} x (\Delta y - y) (\Delta z - z) & N_5 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} x (\Delta y - y) z \\
 N_2 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} xy (\Delta z - z) & N_6 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} xyz \\
 N_3 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} (\Delta x - x) y (\Delta z - z) & N_7 &= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} (\Delta x - x) y z
 \end{aligned}$$

Es werden analog zum zweidimensionalen Fall zwei Ansätze betrachtet. Der eine geht von einem äquidistanten Ansatz für die zweiten Ableitungen aus, wobei Punkte innerhalb des Elementes approximiert werden müssen. Beim anderen Ansatz werden die zweiten Differenzen nicht zentriert um den Integrationspunkt gebildet, wodurch allerdings nur Punkte auf dem Rand approximiert werden müssen.

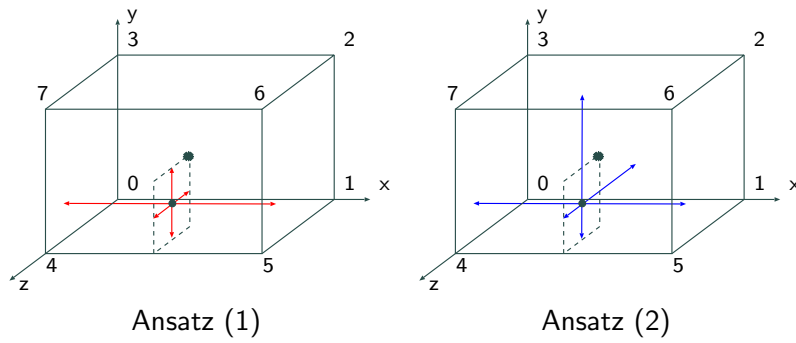


Abbildung A.2: Ansatz für die Diffusion

A.1 Ansatz (1)

Der Ansatz (1) aus Abbildung A.2 für den Laplace-Operator lautet damit:

$$(A.1) \quad \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} \approx \frac{\varphi^{x^+} - 2\varphi + \varphi^{x^-}}{\frac{1}{4}\Delta x^2} + \frac{\varphi^{y^+} - 2\varphi + \varphi^{y^-}}{\frac{1}{16}\Delta y^2} + \frac{\varphi^{z^+} - 2\varphi + \varphi^{z^-}}{\frac{1}{16}\Delta z^2}$$

Die Positionen x^\pm , y^\pm und z^\pm lauten:

$$\begin{aligned} x^+ &= \begin{pmatrix} \Delta x \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & y^+ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ \frac{1}{2}\Delta y \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & z^+ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} \\ x^- &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & y^- &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ 0 \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & z^- &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \frac{1}{2}\Delta z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und die Werte der Ansatzfunktionen an diesen Punkten:

	x^+	x^-	y^+	y^-	z^+	z^-
N_0	0	$\frac{3}{16}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{2}{16}$	0	$\frac{3}{16}$
N_1	$\frac{3}{16}$	0	$\frac{1}{16}$	$\frac{2}{16}$	0	$\frac{3}{16}$
N_2	$\frac{1}{16}$	0	$\frac{1}{16}$	0	0	$\frac{1}{16}$
N_3	0	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{16}$	0	0	$\frac{1}{16}$
N_4	0	$\frac{9}{16}$	$\frac{3}{16}$	$\frac{6}{16}$	$\frac{6}{16}$	$\frac{3}{16}$
N_5	$\frac{9}{16}$	0	$\frac{3}{16}$	$\frac{6}{16}$	$\frac{6}{16}$	$\frac{3}{16}$
N_6	$\frac{3}{16}$	0	$\frac{3}{16}$	0	$\frac{2}{16}$	$\frac{1}{16}$
N_7	0	$\frac{3}{16}$	$\frac{3}{16}$	0	$\frac{2}{16}$	$\frac{1}{16}$

Eingesetzt in Formel (A.1) ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} &\approx \frac{\frac{3}{16} \Phi_0 + \frac{3}{16} \Phi_1 + \frac{1}{16} \Phi_2 + \frac{1}{16} \Phi_3 + \frac{9}{16} \Phi_4 + \frac{9}{16} \Phi_5 + \frac{3}{16} \Phi_6 + \frac{3}{16} \Phi_7 - 2\varphi}{\frac{1}{4} \Delta x^2} \\
 &\quad \frac{\frac{3}{16} \Phi_0 + \frac{3}{16} \Phi_1 + \frac{1}{16} \Phi_2 + \frac{1}{16} \Phi_3 + \frac{9}{16} \Phi_4 + \frac{9}{16} \Phi_5 + \frac{3}{16} \Phi_6 + \frac{3}{16} \Phi_7 - 2\varphi}{\frac{1}{16} \Delta y^2} \\
 &\quad \frac{\frac{3}{16} \Phi_0 + \frac{3}{16} \Phi_1 + \frac{1}{16} \Phi_2 + \frac{1}{16} \Phi_3 + \frac{9}{16} \Phi_4 + \frac{9}{16} \Phi_5 + \frac{3}{16} \Phi_6 + \frac{3}{16} \Phi_7 - 2\varphi}{\frac{1}{16} \Delta z^2} \\
 &= \left(\frac{3}{4\Delta x^2} + \frac{3}{\Delta y^2} + \frac{3}{\Delta z^2} \right) (\Phi_0 + \Phi_1) + \left(\frac{1}{4\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) (\Phi_2 + \Phi_3) \\
 &\quad + \left(\frac{9}{4\Delta x^2} + \frac{9}{\Delta y^2} + \frac{9}{\Delta z^2} \right) (\Phi_4 + \Phi_5) + \left(\frac{3}{4\Delta x^2} + \frac{3}{\Delta y^2} + \frac{3}{\Delta z^2} \right) (\Phi_6 + \Phi_7) \\
 &\quad - \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{\Delta y^2} + \frac{32}{\Delta z^2} \right) \varphi \\
 &= \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{\Delta y^2} + \frac{32}{\Delta z^2} \right) \left(\frac{3}{32} (\Phi_0 + \Phi_1) + \frac{1}{32} (\Phi_2 + \Phi_3) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{9}{32} (\Phi_4 + \Phi_5) + \frac{3}{32} (\Phi_6 + \Phi_7) - \varphi \right) \\
 &= \underbrace{\left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{\Delta y^2} + \frac{32}{\Delta z^2} \right)}_{=\frac{1}{L_d^2}} \left(\sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip) - \varphi \right)
 \end{aligned}$$

Die Diffusionslänge L_d^2 kann dann ausgedrückt werden durch:

$$(A.2) \quad \frac{1}{L_d^2} = \frac{2\|\mathbf{n}\|^2}{|\text{SKV}|^2} + \frac{8d^2}{\|\mathbf{n}\|^2}$$

mit

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \Delta y \Delta z \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\text{SKV}| = \frac{1}{8} \Delta x \Delta y \Delta z, \quad d = \sqrt{\frac{1}{4} (\Delta y^2 + \Delta z^2)}$$

A.2 Ansatz (2)

Entsprechend erhält man für den Ansatz (2) aus Abbildung A.2:

$$(A.3) \quad \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} \approx \frac{\varphi^{x^+} - 2\varphi + \varphi^{x^-}}{\frac{1}{4} \Delta x^2} + \frac{\frac{\varphi^{y^+} - \varphi}{\|y^+ - ip\|} - \frac{\varphi - \varphi^{y^-}}{\|ip - y^-\|}}{\frac{1}{2} \|y^+ - y^-\|} + \frac{\frac{\varphi^{z^+} - \varphi}{\|z^+ - ip\|} - \frac{\varphi - \varphi^{z^-}}{\|ip - z^-\|}}{\frac{1}{2} \|z^+ - z^-\|}$$

Die Positionen x^\pm , y^\pm und z^\pm haben die Koordinaten:

$$\begin{aligned} x^+ &= \begin{pmatrix} \Delta x \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & y^+ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ \Delta y \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & z^+ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} \\ x^- &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & y^- &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ 0 \\ \frac{3}{4}\Delta z \end{pmatrix} & z^- &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\Delta x \\ \frac{1}{4}\Delta y \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und die Werte der Ansatzfunktionen an diesen Punkten sind:

	x^+	x^-	y^+	y^-	z^+	z^-
N_0	0	$\frac{3}{16}$	0	$\frac{2}{16}$	0	$\frac{6}{16}$
N_1	$\frac{3}{16}$	0	0	$\frac{2}{16}$	0	$\frac{6}{16}$
N_2	$\frac{1}{16}$	0	$\frac{2}{16}$	0	0	$\frac{2}{16}$
N_3	0	$\frac{1}{16}$	$\frac{2}{16}$	0	0	$\frac{2}{16}$
N_4	0	$\frac{9}{16}$	0	$\frac{6}{16}$	$\frac{6}{16}$	0
N_5	$\frac{9}{16}$	0	0	$\frac{6}{16}$	$\frac{6}{16}$	0
N_6	$\frac{3}{16}$	0	$\frac{6}{16}$	0	$\frac{2}{16}$	0
N_7	0	$\frac{3}{16}$	$\frac{6}{16}$	0	$\frac{2}{16}$	0

Eingesetzt in Formel (A.3) ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} &\approx \frac{\frac{3}{16}\Phi_0 + \frac{3}{16}\Phi_1 + \frac{1}{16}\Phi_2 + \frac{1}{16}\Phi_3 + \frac{9}{16}\Phi_4 + \frac{9}{16}\Phi_5 + \frac{3}{16}\Phi_6 + \frac{3}{16}\Phi_7 - 2\varphi}{\frac{1}{4}\Delta x^2} \\ &+ \frac{\frac{2}{16}\Phi_2 + \frac{2}{16}\Phi_3 + \frac{6}{16}\Phi_6 + \frac{6}{16}\Phi_7 - \varphi}{\frac{3}{8}\Delta y^2} - \frac{\varphi - \frac{2}{16}\Phi_0 - \frac{2}{16}\Phi_1 - \frac{6}{16}\Phi_4 - \frac{6}{16}\Phi_5}{\frac{1}{8}\Delta y^2} \\ &+ \frac{\frac{6}{16}\Phi_4 + \frac{6}{16}\Phi_5 + \frac{2}{16}\Phi_6 + \frac{2}{16}\Phi_7 - \varphi}{\frac{1}{8}\Delta z^2} - \frac{\varphi - \frac{6}{16}\Phi_0 - \frac{6}{16}\Phi_1 - \frac{2}{16}\Phi_2 - \frac{2}{16}\Phi_3}{\frac{3}{8}\Delta z^2} \\ &= \left(\frac{3}{4\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) (\Phi_0 + \Phi_1) + \left(\frac{1}{4\Delta x^2} + \frac{1}{3\Delta y^2} + \frac{1}{3\Delta z^2} \right) (\Phi_2 + \Phi_3) \\ &+ \left(\frac{9}{4\Delta x^2} + \frac{3}{\Delta y^2} + \frac{3}{\Delta z^2} \right) (\Phi_4 + \Phi_5) + \left(\frac{3}{4\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) (\Phi_6 + \Phi_7) \\ &- \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} + \frac{32}{3\Delta z^2} \right) \varphi \\ &= \left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} + \frac{32}{3\Delta z^2} \right) \left(\frac{3}{32} (\Phi_0 + \Phi_1) + \frac{1}{32} (\Phi_2 + \Phi_3) \right. \\ &\quad \left. + \frac{9}{32} (\Phi_4 + \Phi_5) + \frac{3}{32} (\Phi_6 + \Phi_7) - \varphi \right) \\ &= \underbrace{\left(\frac{8}{\Delta x^2} + \frac{32}{3\Delta y^2} + \frac{32}{3\Delta z^2} \right)}_{:= \frac{1}{L_d^2}} \left(\sum_{k=1}^{n_{co}} N_k(ip) \Phi_k - \varphi \right) \end{aligned}$$

In diesem Fall kann die Diffusionslänge ausgedrückt werden durch:

$$(A.4) \quad \frac{1}{L_d^2} = \frac{2\|\mathbf{n}\|^2}{|\mathbf{SKV}|^2} + \frac{8d^2}{3\|\mathbf{n}\|^2}$$

B Kanalströmung in zwei Raumdimensionen

Die Kanalströmung in zwei Raumdimensionen besitzt eine exakte Lösung. Dadurch kann man die Eigenschaften der Diskretisierung mit Hilfe des Fehlers der diskreten zur exakten Lösung beurteilen. Sowohl der lineare Fall der Stokes-Gleichung, als auch der nichtlineare Fall der Navier-Stokes Gleichung werden in Betracht gezogen. Beiden Fällen liegt dasselbe Gitter zugrunde, das zu den Wänden hin feiner aufgelöst ist als zur Mitte des Kanals. Zur Veranschaulichung dient Abbildung B.1, in der das grobe Gitter auf Ebene 0 dargestellt ist.

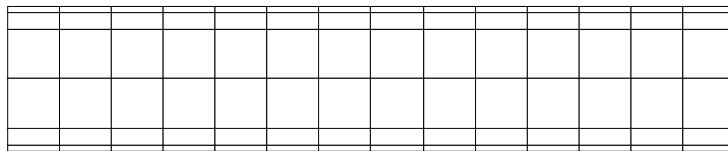
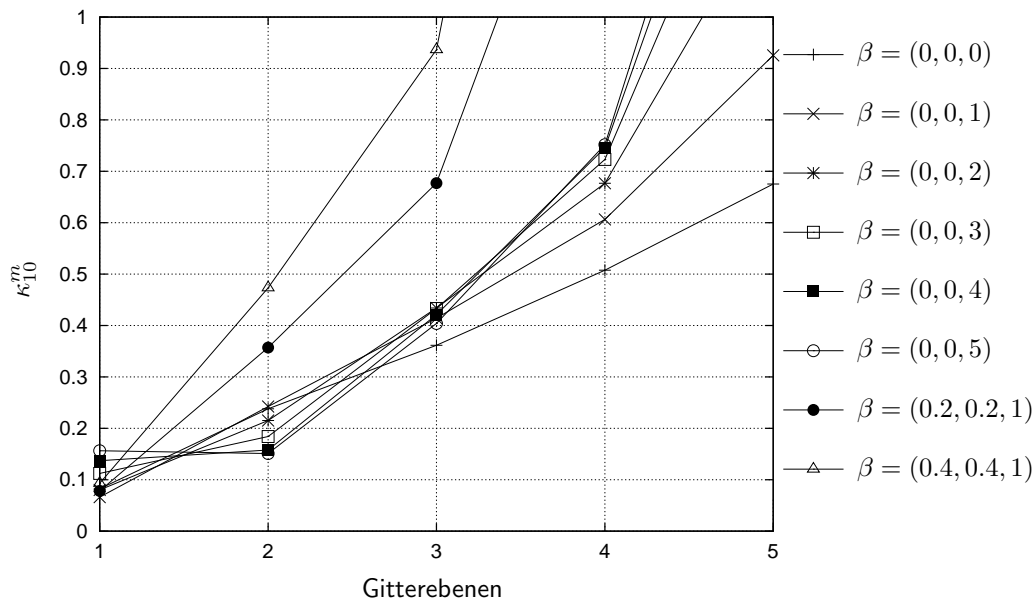


Abbildung B.1: Grobes Gitter mit maximalem Seitenverhältnis 8.6

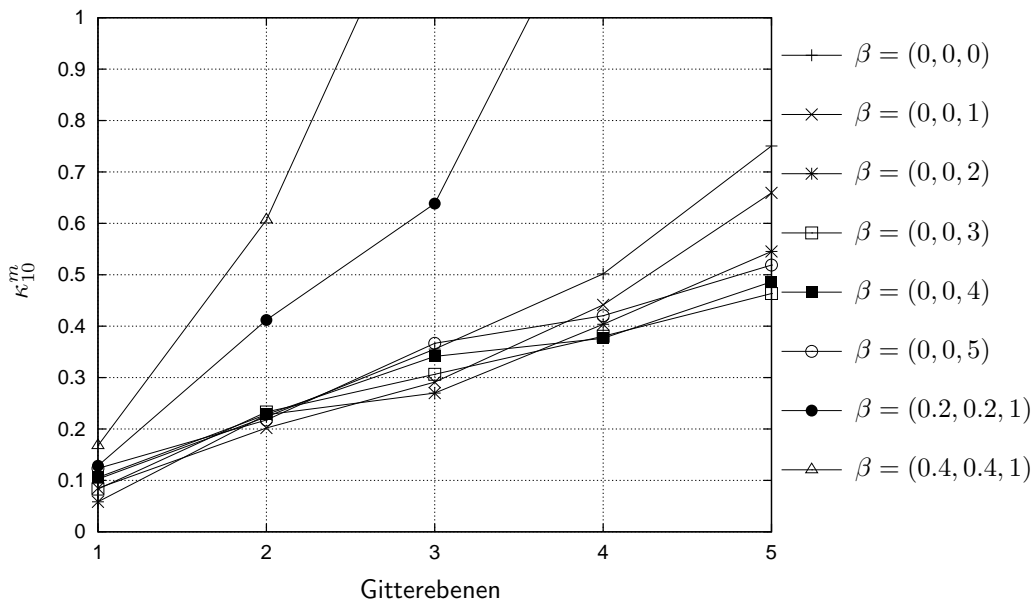
Das grobe Gitter wird fünf mal uniform verfeinert, so daß das feinste Gitter aus 86 657 Gitterpunkten und damit das zu lösende Problem aus 259 971 Unbekannten besteht. Als Glätter für das Mehrgitterverfahren wird die unvollständige Dreieckszerlegung mit β -Modifikation gewählt. Es werden unterschiedliche Kombinationen für β gewählt, um das Lösungsverfahren zu untersuchen. Dies geschieht anhand des Stokes-Falles. Für den Navier-Stokes-Fall ist jedoch die Fehlerentwicklung von Interesse, v.a. im Hinblick auf die verschiedenen Möglichkeiten, die Diskretisierung einzustellen.

B.1 Stokes-Fall

Für den hier vorliegenden linearen Fall wird ein reines Mehrgitterverfahren mit ILU_β als Glätter und unterschiedlichen Einstellungen verwendet. Es kommen unterschiedliche Zyklen zum Einsatz, und die Zahl der Glättungsschritte wird modifiziert. In den folgenden Graphiken sind die mittleren Konvergenzraten κ_{10}^m des Mehrgitterverfahrens über den Gitterebenen dargestellt.

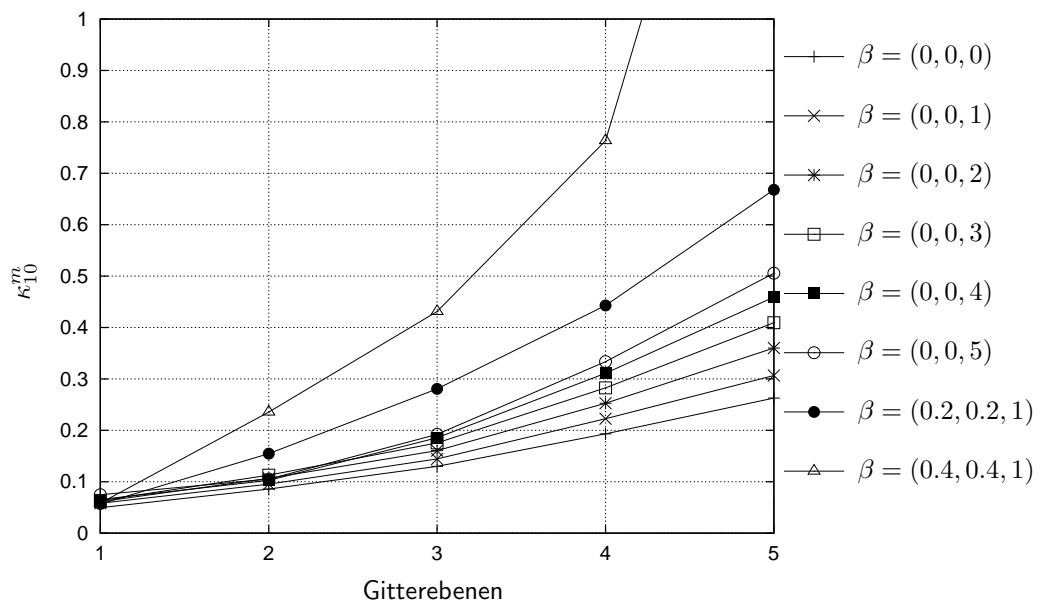


(a) Raw

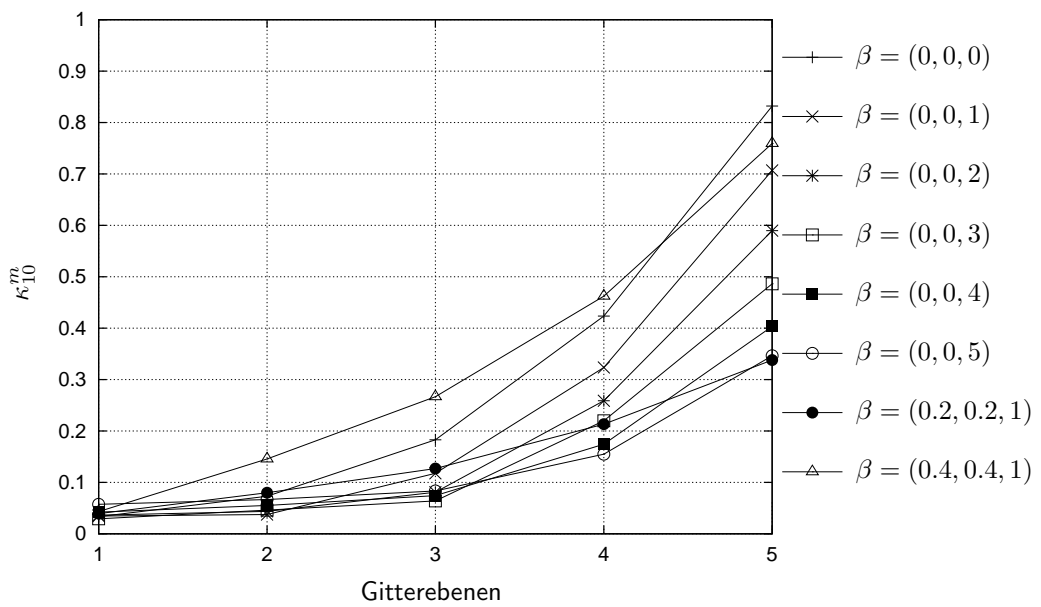


(b) Ansatz (2)_{kor}

Abbildung B.2: Konvergenzraten κ_{10}^m beim V(1,1)-Zyklus

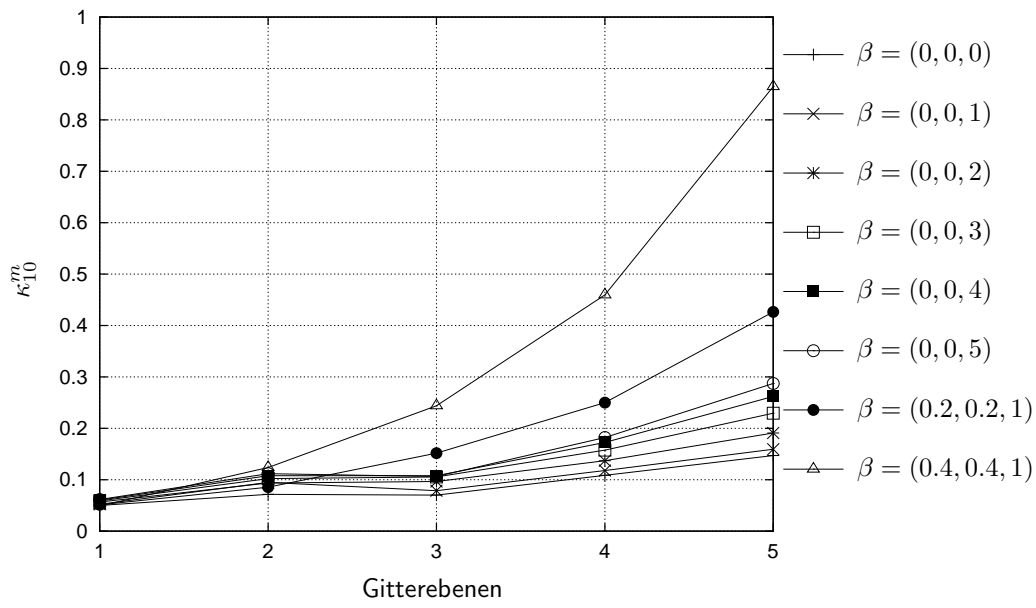


(a) Raw



(b) Ansatz $(2)_{korr}$

Abbildung B.3: Konvergenzraten κ_{10}^m beim V(2,2)-Zyklus

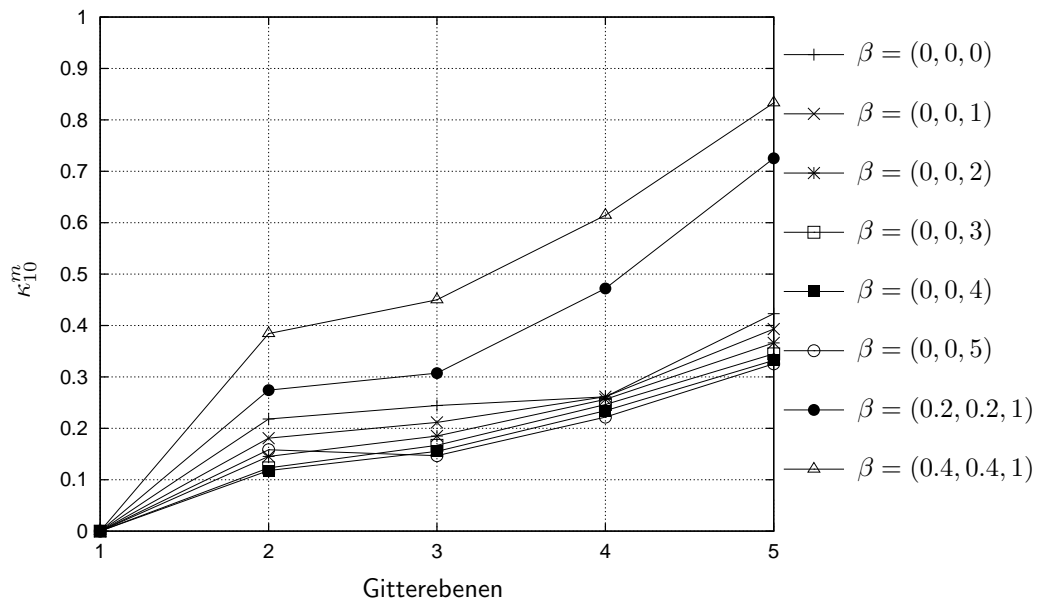


(a) Raw

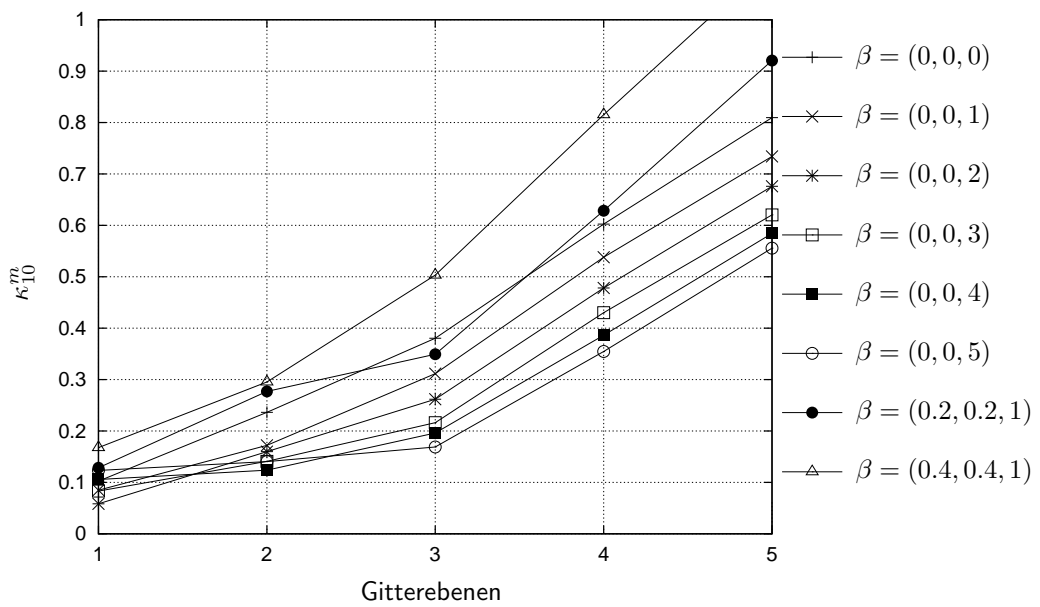


(b) Ansatz (2)_{korr}

Abbildung B.4: Konvergenzraten κ_{10}^m beim V(3,3)-Zyklus



(a) Raw



(b) Ansatz $(2)_{korr}$

Abbildung B.5: Konvergenzraten κ_{10}^m beim $W(1,1)$ -Zyklus

B.2 Navier-Stokes-Fall bei $Re=100$

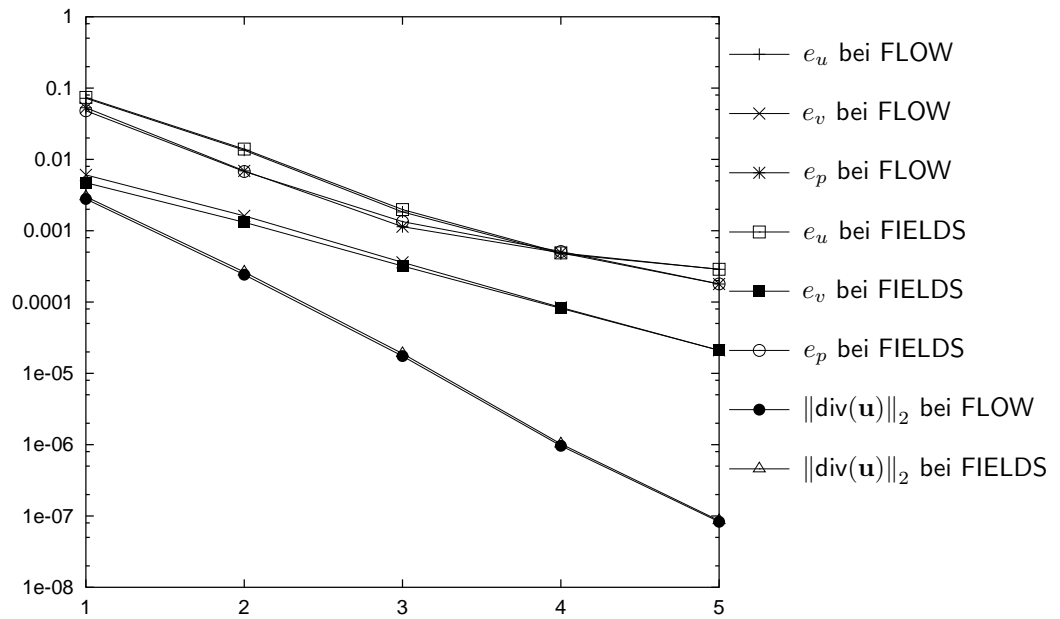
Die Einstellungen für die Diskretisierung und das Lösungsverfahren sind:

– nichtlineare Approximation	Fixpunkt
– linearer Löser	Bi-CGSTAB mit Mehrgitter als Vorkonditionierer
	V(2,2)-Zyklus bei Raw
	V(0,2)-Zyklus bei $(2)_{\text{kor}}$
	ILU $_{\beta}$ mit $\beta = (0.2, 0.2, 1)$
	keine Dämpfung, d.h. $\lambda = 1$
– max. Anzahl der linearen Schritte	40
– max. Anzahl der nichtlin. Schritte	15
– lineare Reduktion	mindestens 0.1 je nichtlinearem Schritt
– nichtlineare Reduktion	10^{-20} , d.h. es werden 15 Schritte ausgeführt
– Aufwindverfahren	POS und LPS
– Stabilisierung	FIELDS und FLOW
	mit jeweils Verfahren nach Raw und $(2)_{\text{kor}}$
– Zahl der Mehrgitterebenen	6
– grobes Gitter	105 Punkte bzw. 84 Elemente
– Verfeinerung	uniform
– max. Seitenverhältnis	8.58601
– min. Seitenverhältnis	1.05179

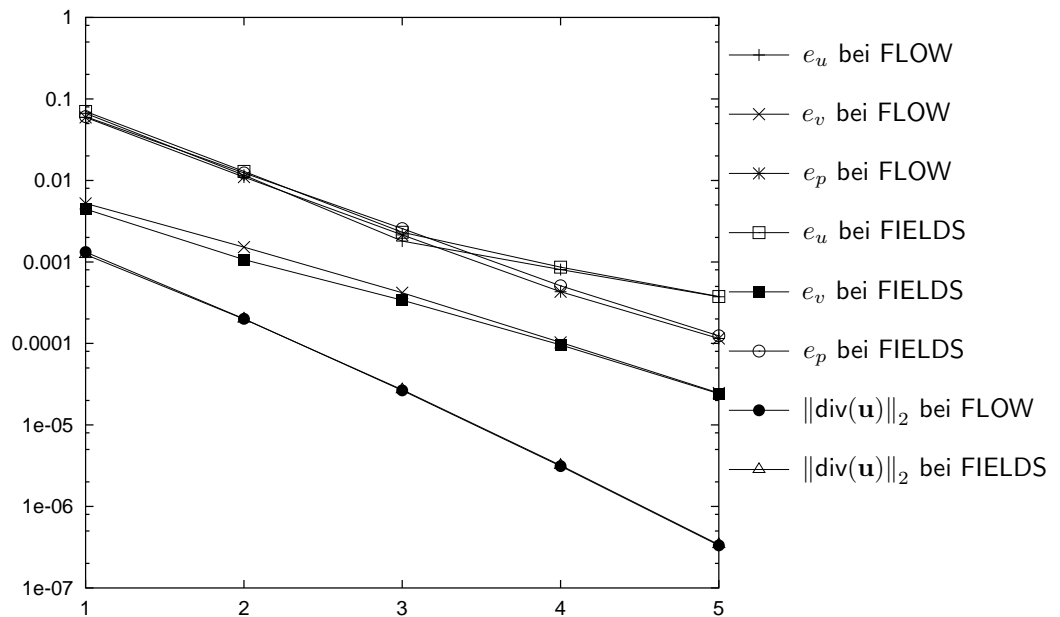
Fehlerentwicklung und Massenerhaltung

In den folgenden Graphiken wird die Entwicklung des Fehlers dargestellt. Auf der x-Achse sind die Gitterebenen aufgetragen, die y-Achse beschreibt den Fehler der Lösung als auch der Massenerhaltung. Es werden unterschiedliche Strategien zur Behandlung des konvektiven Terms in Betracht gezogen. Sowohl ein reines Aufwindverfahren, wie in Gleichung (2.24) beschrieben, kommt zum Einsatz, als auch die PAC-Methode wie in Gleichung (2.25) dargestellt.

In den Abbildungen bezeichne e_u den Fehler der u -Komponente. Entsprechend bezeichnen e_v und e_p die Fehler der v - und p -Komponenten. Die Entwicklung des Fehlers der v -Komponente ist dabei nicht so entscheidend, da dieser um mindestens eine Größenordnung geringer ist als die beiden anderen Fehlerkomponenten und auf den Gesamtfehler dadurch keinen großen Einfluß hat.

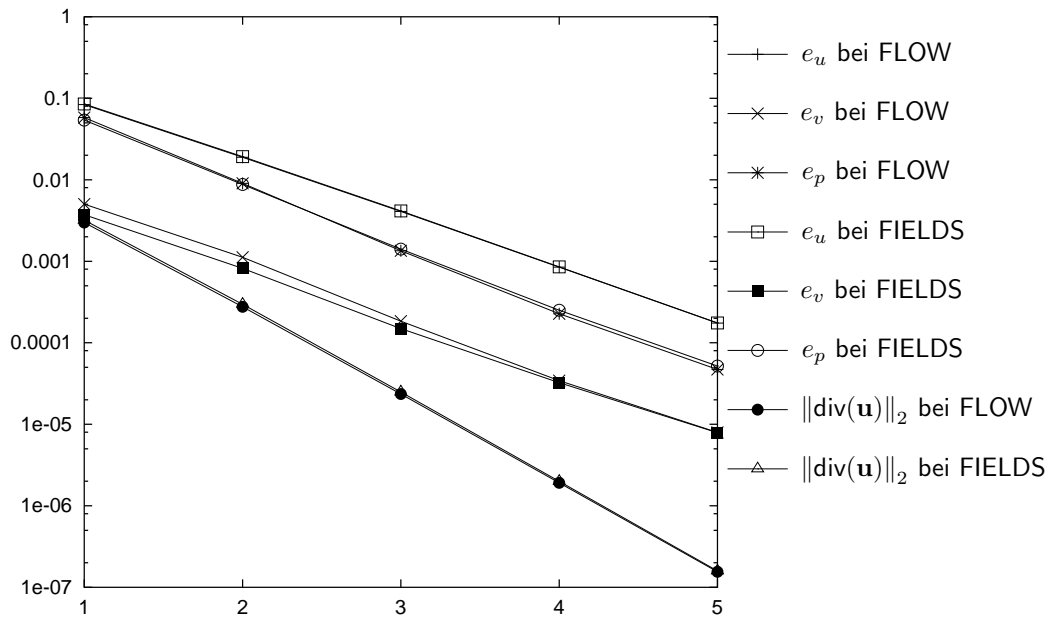


(a) LPS

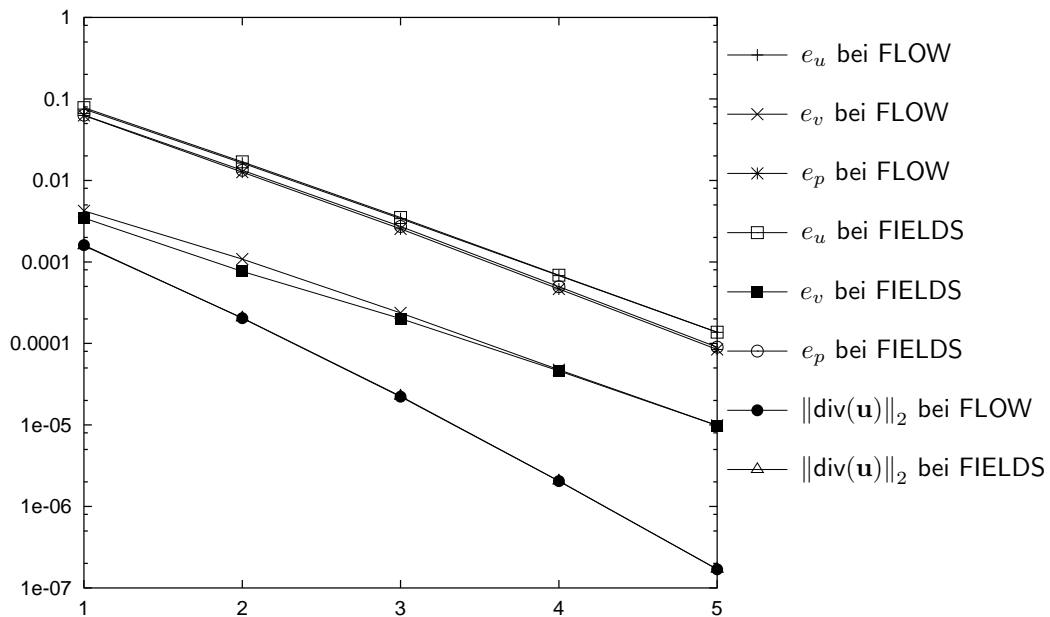


(b) POS

Abbildung B.6: Fehler bei reinem Aufwindverfahren und Raw

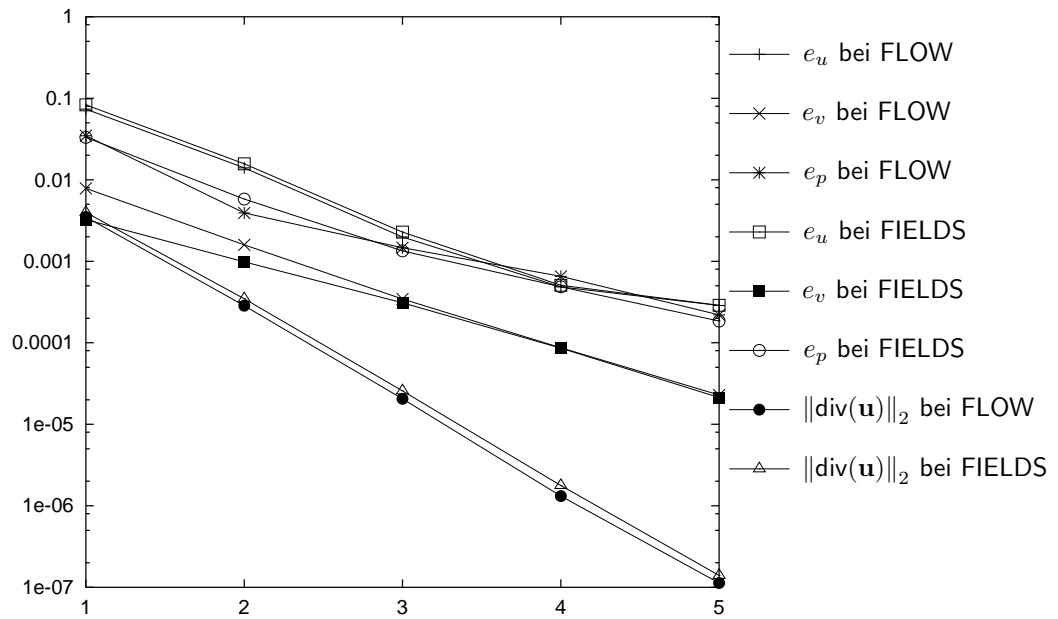


(a) LPS

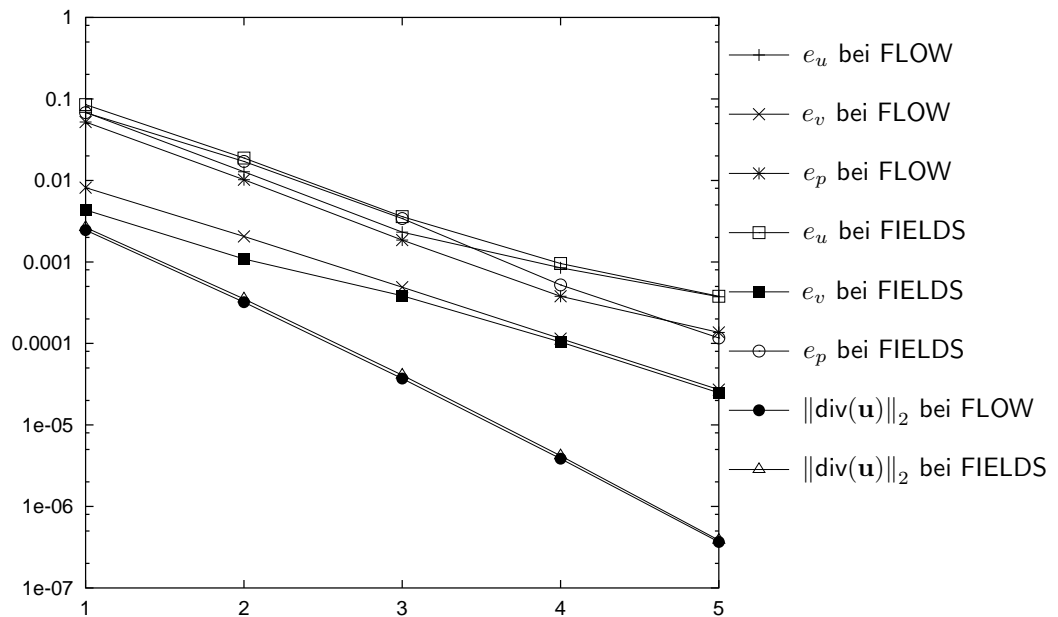


(b) POS

Abbildung B.7: Fehler bei reinem Aufwindverfahren und Variante $(2)_{\text{korr}}$

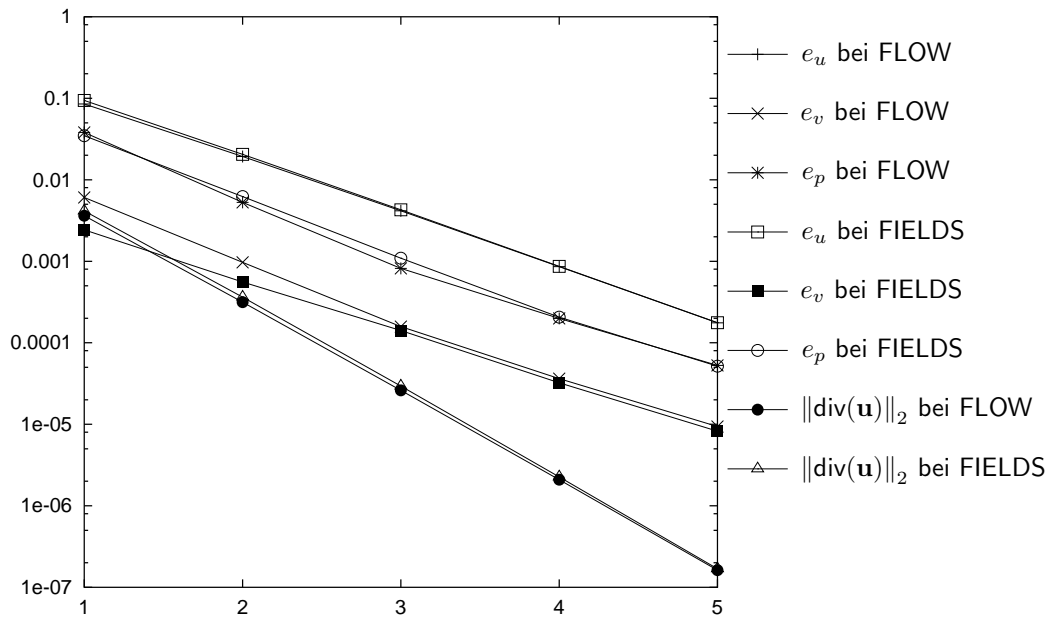


(a) LPS

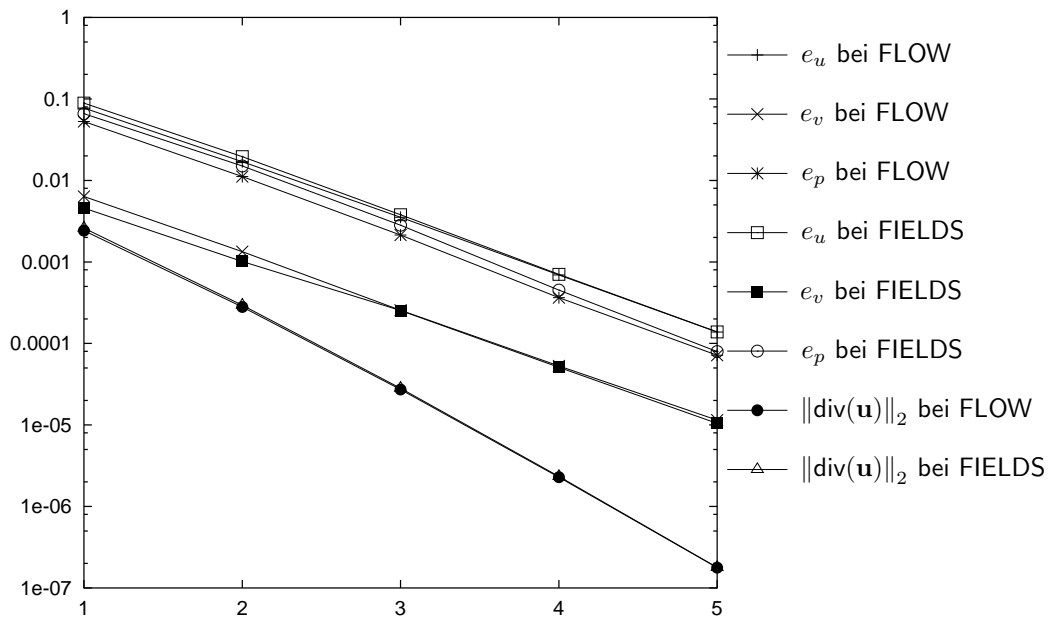


(b) POS

Abbildung B.8: Fehler bei PAC-Version und Raw



(a) LPS



(b) POS

Abbildung B.9: Fehler bei PAC-Version und Variante $(2)_{\text{korr}}$

C Chorin's abklingende Wirbel

In Abschnitt 5.1.5 wurde ein einfaches Testproblem mit einer exakten Lösung vorgestellt. Dadurch läßt sich der Fehler der berechneten zur exakten Lösung sehr leicht bestimmen und die eingesetzte Diskretisierung daran messen. Vor allem läßt sich dadurch auch beurteilen, wie sich die beiden in dieser Arbeit vorgestellten Stabilisierungsvarianten FIELDS aus Gleichung (2.16) und FLOW aus Gleichung (2.23) verhalten und miteinander vergleichen. Auch die in den Stabilisierungen verwendeten Diffusionsansätze nach Raw und (2) (siehe Abschnitt 2.5.2) verhalten sich unterschiedlich und werden daher ebenso in die Untersuchungen eingebunden.

In den nachfolgenden Abbildungen C.1 bis C.4 ist der Fehler der u -Komponente (der mit dem Fehler der v -Komponente übereinstimmt) und der p -Komponente über der Zeit aufgetragen. Darin werden jeweils die verschiedenen Diskretisierungsmöglichkeiten FIELDS und FLOW, als auch die beiden Ansätze nach Raw und (2) mit verschiedenen Zeitschrittweiten und dem LPS-Aufwindverfahren dargestellt.

Der Fehler der Massenerhaltung $\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2$ wird anschließend in den Abbildungen C.5 und C.6 wiederum über der Zeit und für die verschiedenen Diskretisierungsverfahren dargestellt.

Die verwendeten Gitter sind kartesisch mit Gitterweiten von $h = \frac{1}{16}$ bis $h = \frac{1}{128}$. Die jeweils verwendeten Zeitschrittweiten sind in den Graphiken vermerkt.

Aus Platzgründen und der besseren Übersicht wegen wurde darauf verzichtet, die Abbildungen der Fehler direkt in Abschnitt 5.1.5 einzufügen. Stattdessen werden sie hier im Anhang aufgeführt.

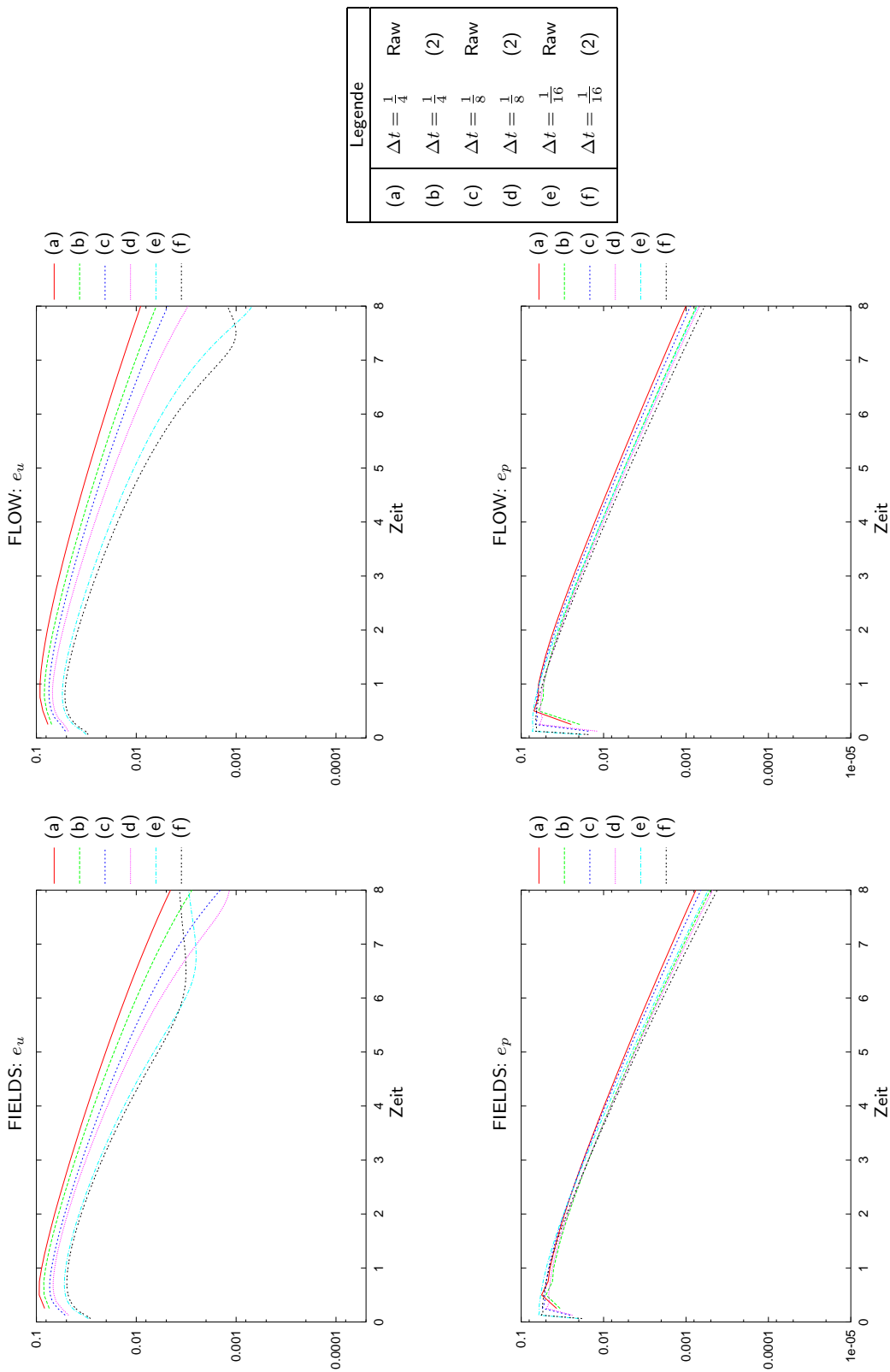


Abbildung C.1: Chorin-Problem: Fehler der Lösung auf Ebene 3, $h = \frac{1}{16}$

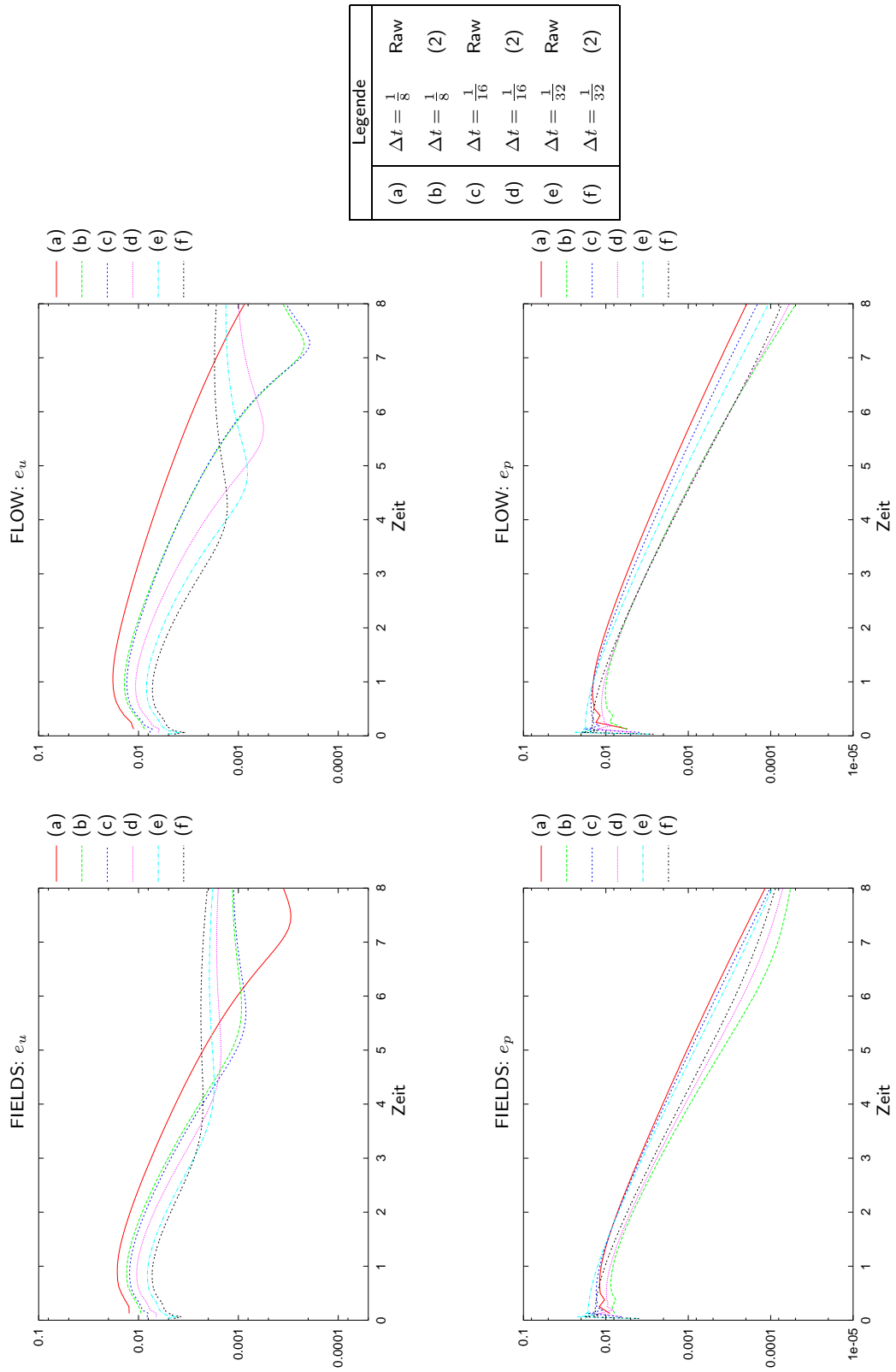


Abbildung C.2: Chorin-Problem: Fehler der Lösung auf Ebene 4, $h = \frac{1}{32}$

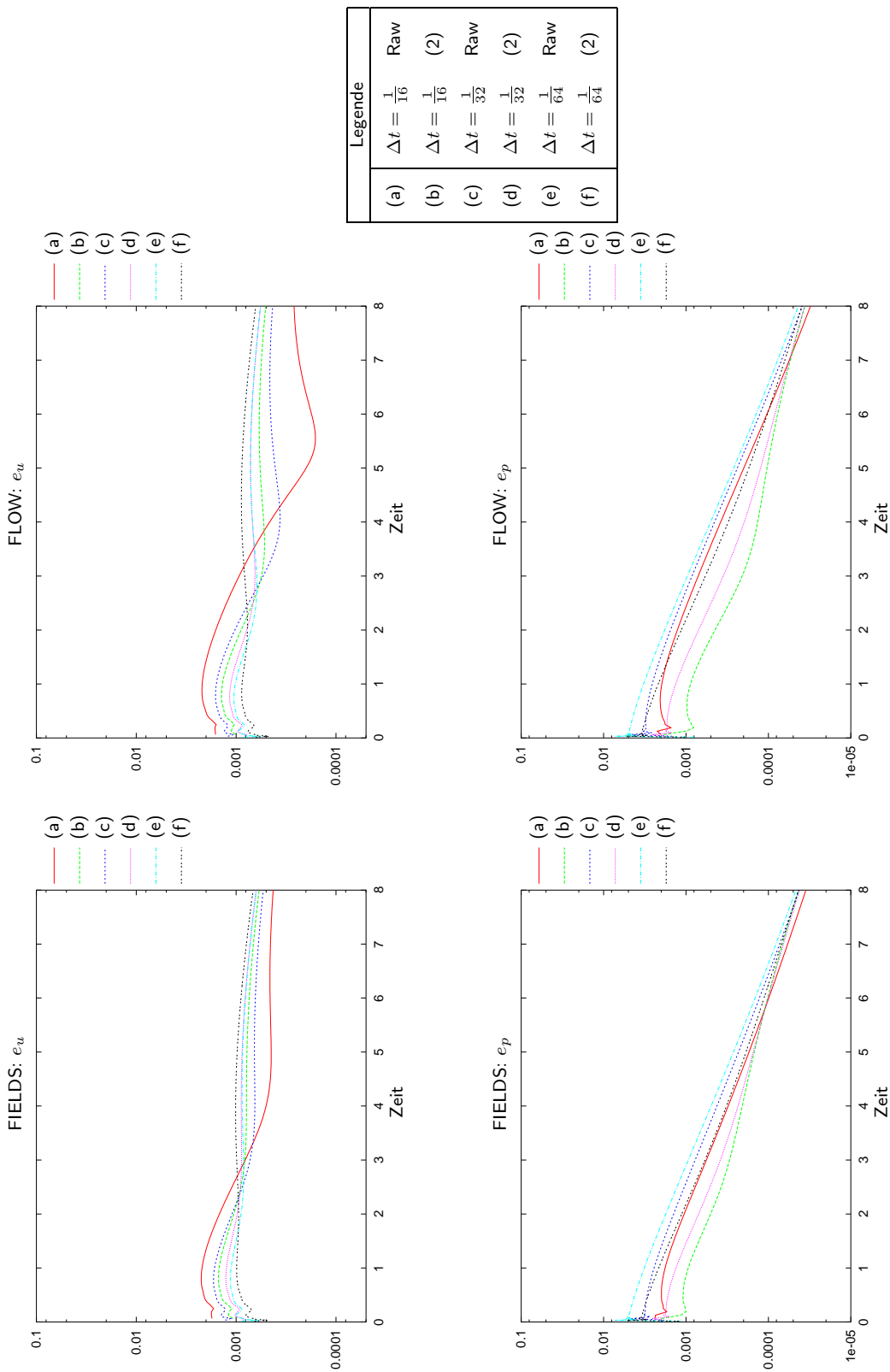


Abbildung C.3: Chorin-Problem: Fehler der Lösung auf Ebene 5, $h = \frac{1}{64}$

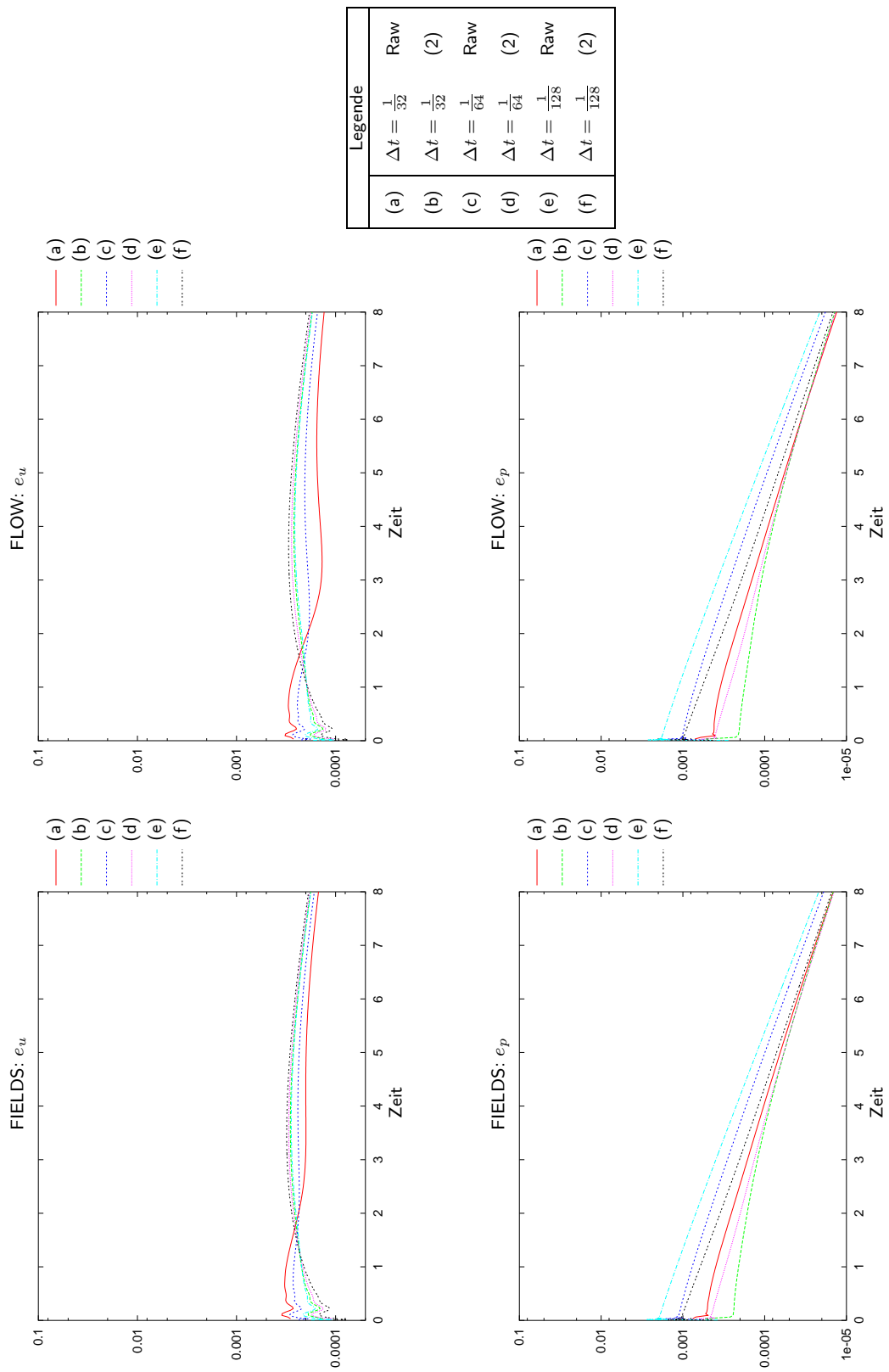


Abbildung C.4: Chorin-Problem: Fehler der Lösung auf Ebene 6, $h = \frac{1}{128}$

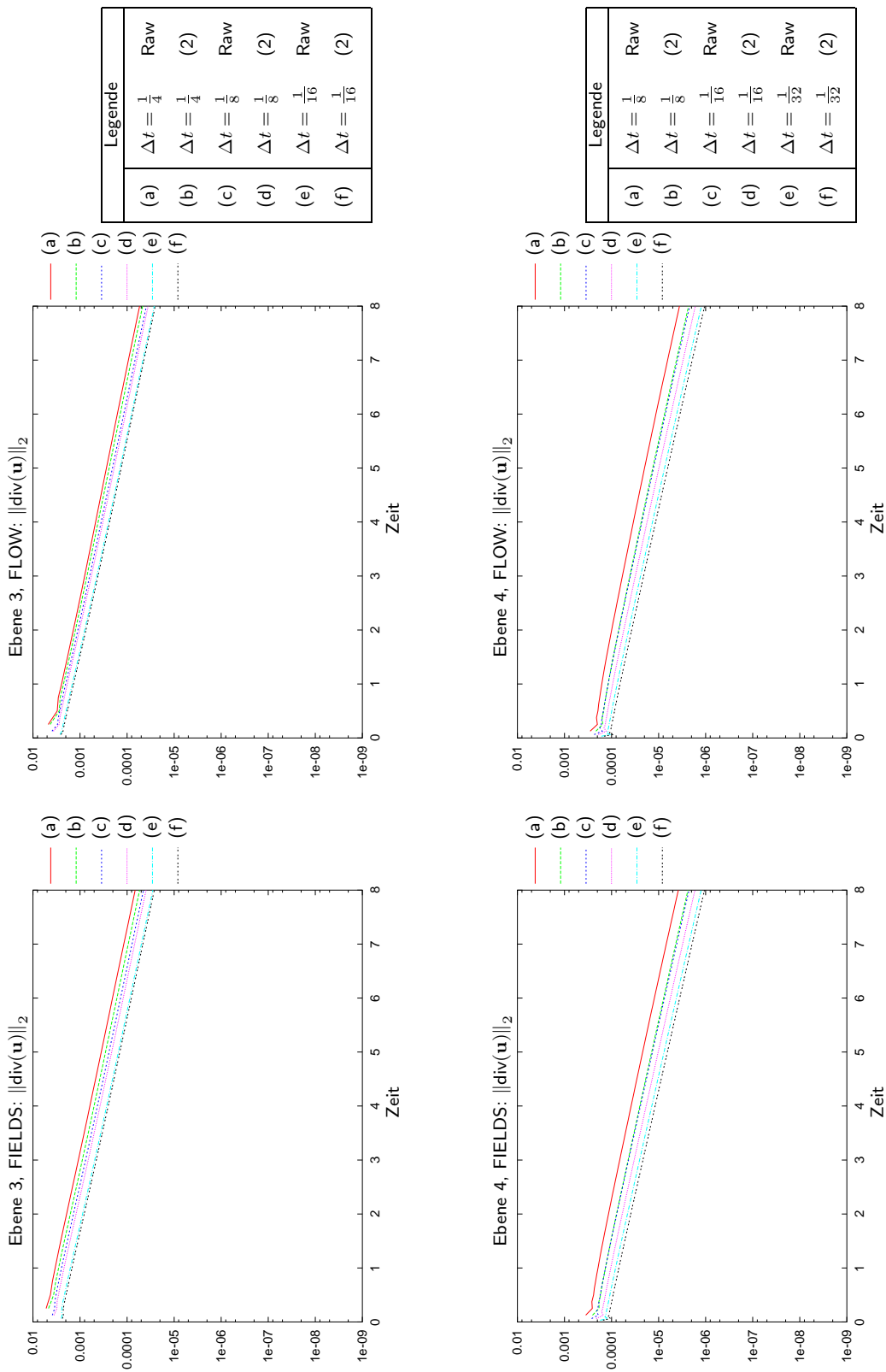


Abbildung C.5: Chorin-Problem: Fehler der Massenerhaltung auf den Ebenen 3 und 4, $h = \frac{1}{16}$ und $h = \frac{1}{32}$

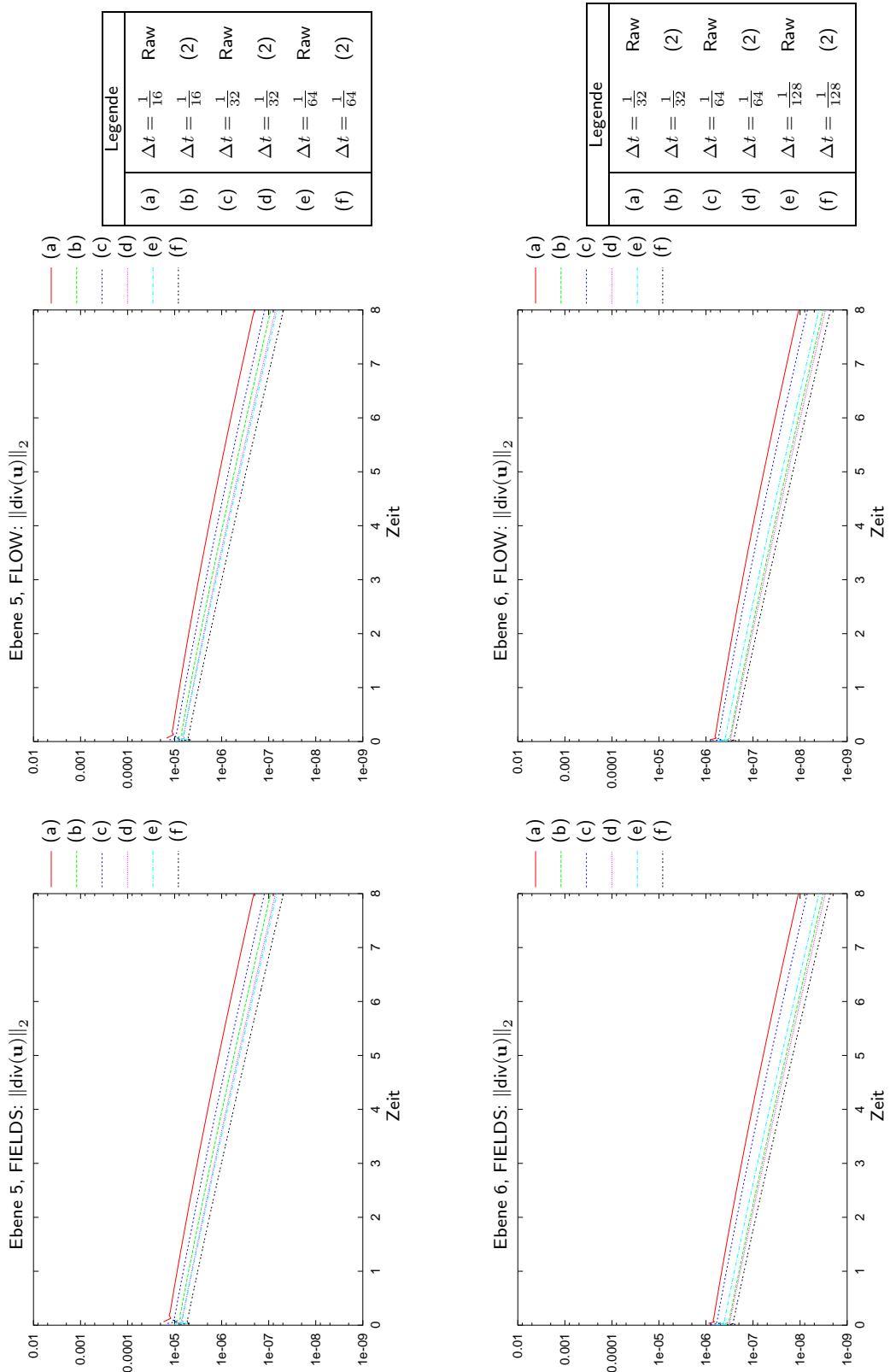


Abbildung C.6: Chorin-Problem: Fehler der Massenerhaltung auf den Ebenen 5 und 6, $h = \frac{1}{64}$ und $h = \frac{1}{128}$

D Mixing Layer

Das Mixing Layer Problem ist ein beliebtes Testproblem, um diverse Turbulenzmodelle miteinander zu vergleichen. Aus diesem Grund wird es auch in dieser Arbeit eingesetzt, wobei auch die verschiedenen Diskretisierungsverfahren in die Untersuchungen einbezogen werden. Die eingesetzte Diskretisierung und der dadurch eingebrachte Fehler beeinflusst natürlich auch eine turbulente Simulation ganz erheblich. Daher werden sowohl in zwei als auch in drei Raumdimensionen verschiedene Einstellungsmöglichkeiten für die Diskretisierung in Betracht gezogen und einander gegenübergestellt. Insbesondere wird dabei die Konzentration auf die beiden vorgestellten Stabilisierungen FIELDS aus Gleichung (2.16) und FLOW aus Gleichung (2.23) gelegt. Diese haben ein sehr unterschiedliches Verhalten, das v.a. auch bei turbulenten Simulationen in Erscheinung tritt. Auch die verschiedenen Ansätze zur Diffusionsapproximation innerhalb der Stabilisierung (Raw, (2) und (2)_{korr} aus Abschnitt 2.5.2) werden bei den Untersuchungen berücksichtigt.

D.1 in zwei Raumdimensionen

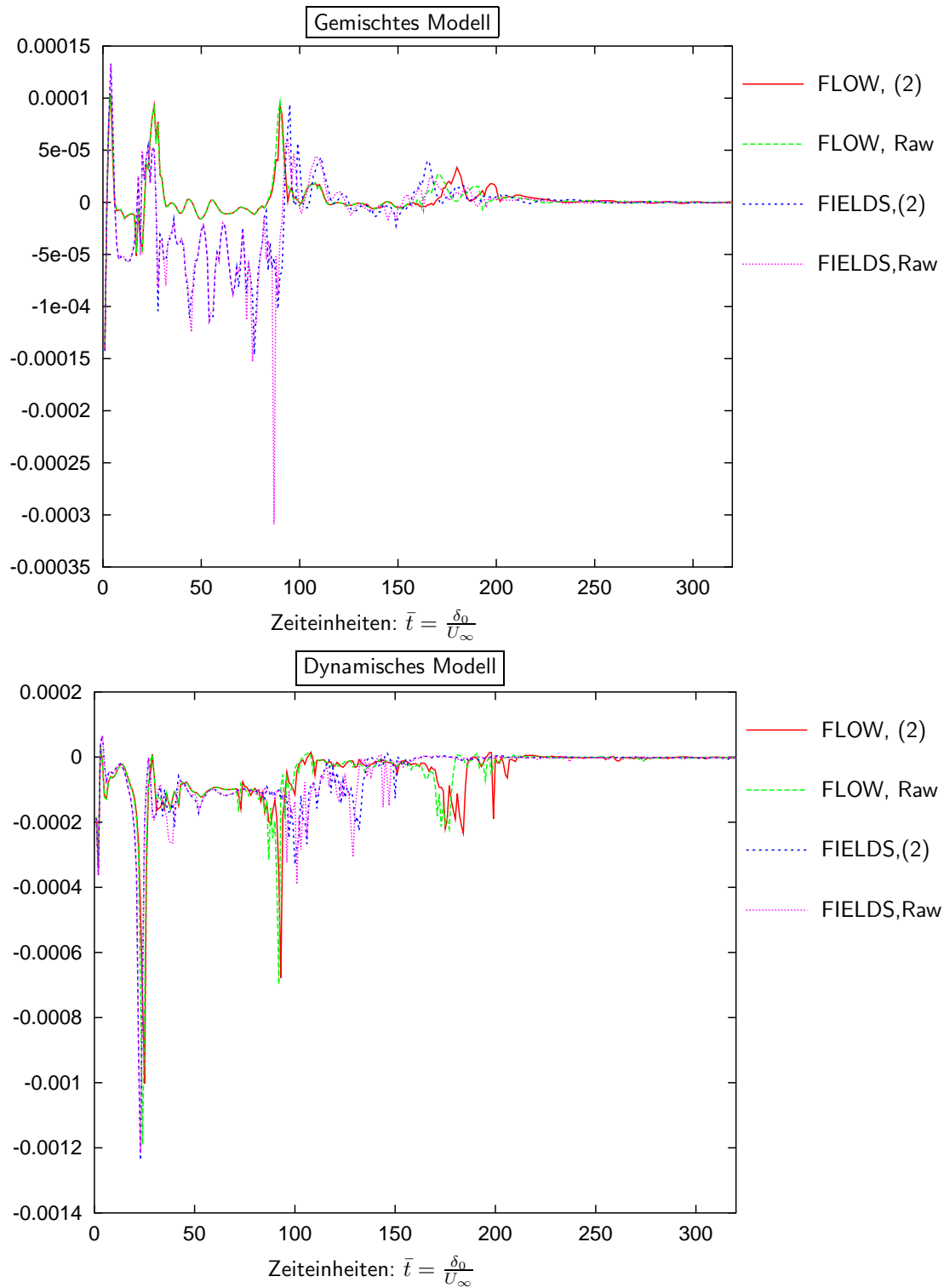
In Abschnitt 5.2.1 wurde in zwei Raumdimensionen das Mixing Layer Problem vorgestellt. Aus Gründen der besseren Übersicht wurde im dortigen Rahmen darauf verzichtet, alle Graphiken darzustellen. Dies soll nun an dieser Stelle erfolgen.

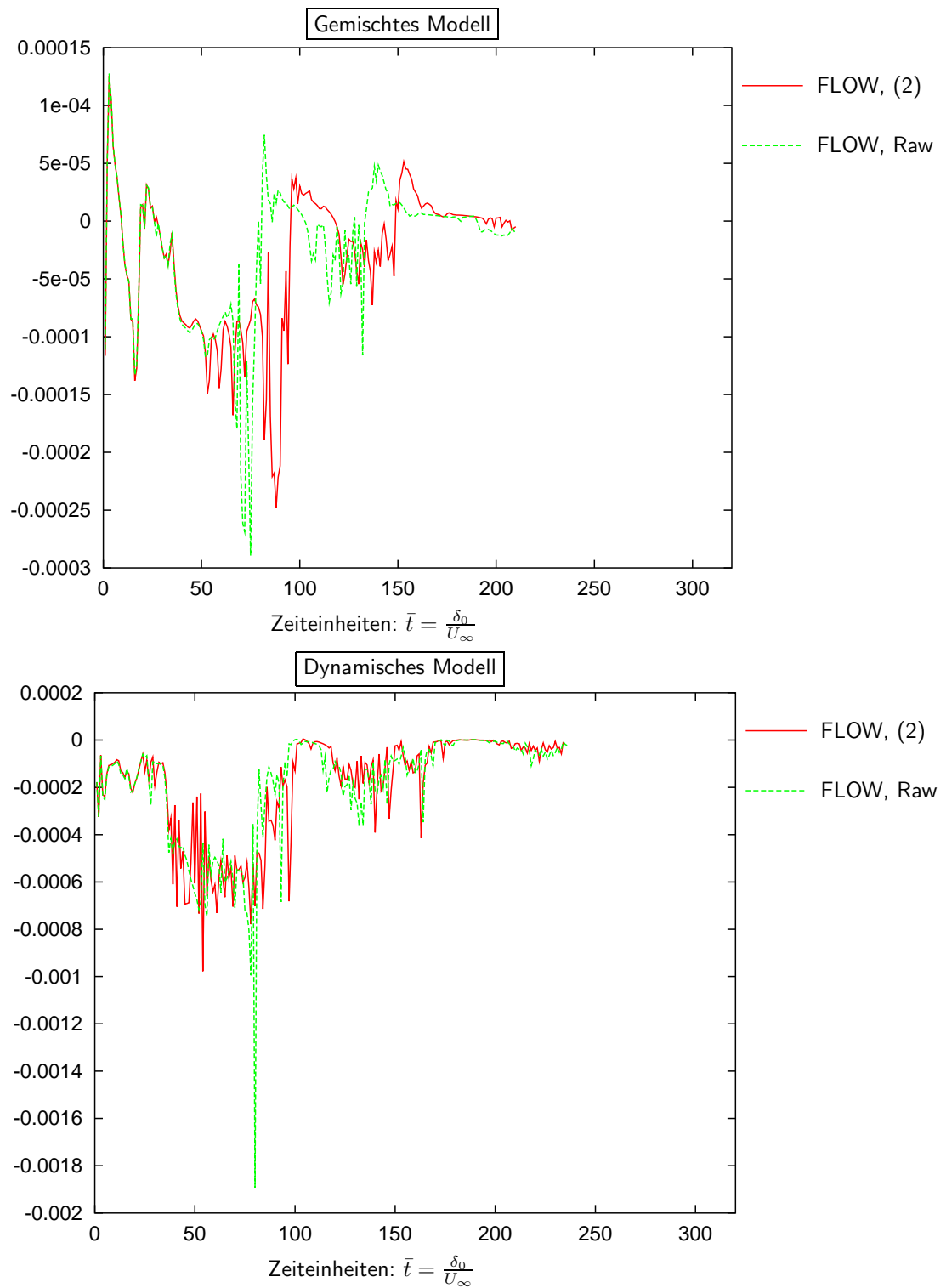
Es werden die beiden Stabilisierungsvarianten FIELDS und FLOW eingesetzt. Als Aufwindapproximation bei der Stabilisierung kommen die Verfahren LPS und POS aus Abschnitt 2.5.1 zum Einsatz. Die Diffusionsapproximation bei der Stabilisierung erfolgt durch die Version nach Raw und (2). Da das zugrunde liegende Gitter kartesisch ist, kann auf die korrigierte Variante (2)_{korr} in diesem Fall verzichtet werden.

Die Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ für die beiden Stabilisierungsvarianten FIELDS und FLOW mit dem LPS- und POS-Aufwindverfahren werden in den Abbildungen D.1 und D.2 für das gemischte und dynamische Modell dargestellt.

In Abbildung D.3 wird die resultierende Wirbelstärke für das FLOW-(2)-LPS-Verfahren in Kombination mit dem gemischten Modell und in Abbildung D.4 in Kombination mit dem dynamischen Modell im zeitlichen Verlauf präsentiert.

Schließlich ist in Abbildung D.5 der Massenerhaltungsfehler $\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2$ beim LPS-Aufwindverfahren für die beiden Turbulenzmodelle abgebildet. Auf die Darstellung des Massenerhaltungsfehlers beim POS-Verfahren wird aufgrund der zu großen Dissipation dieses Schemas verzichtet.

Abbildung D.1: Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ bei der Version mit LPS

Abbildung D.2: Subskalendissipation $\bar{\epsilon}_{SGS}$ bei der Version mit POS

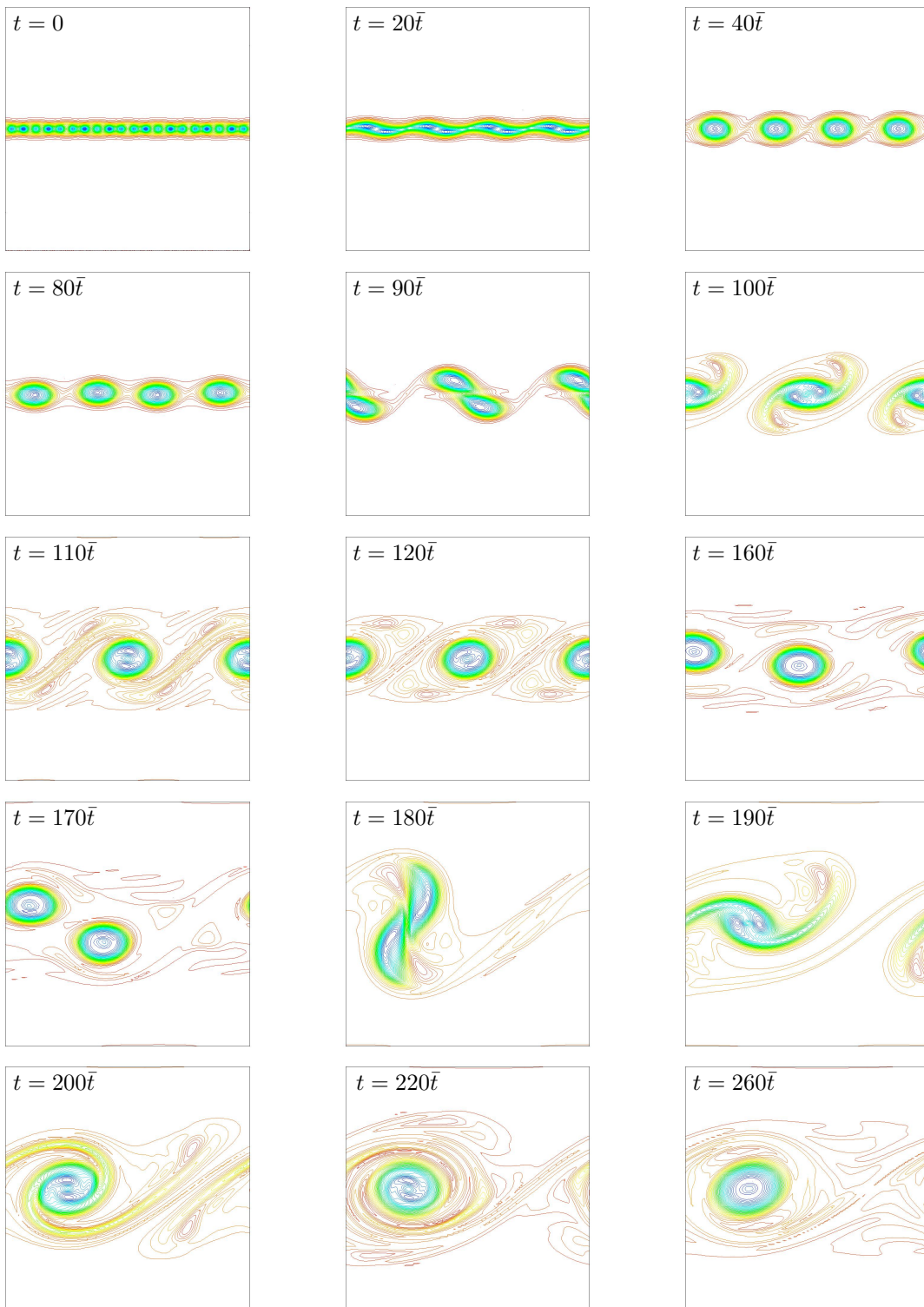


Abbildung D.3: Wirbelstärke beim FLOW-(2)-LPS-Verfahren und dem gemischten Modell

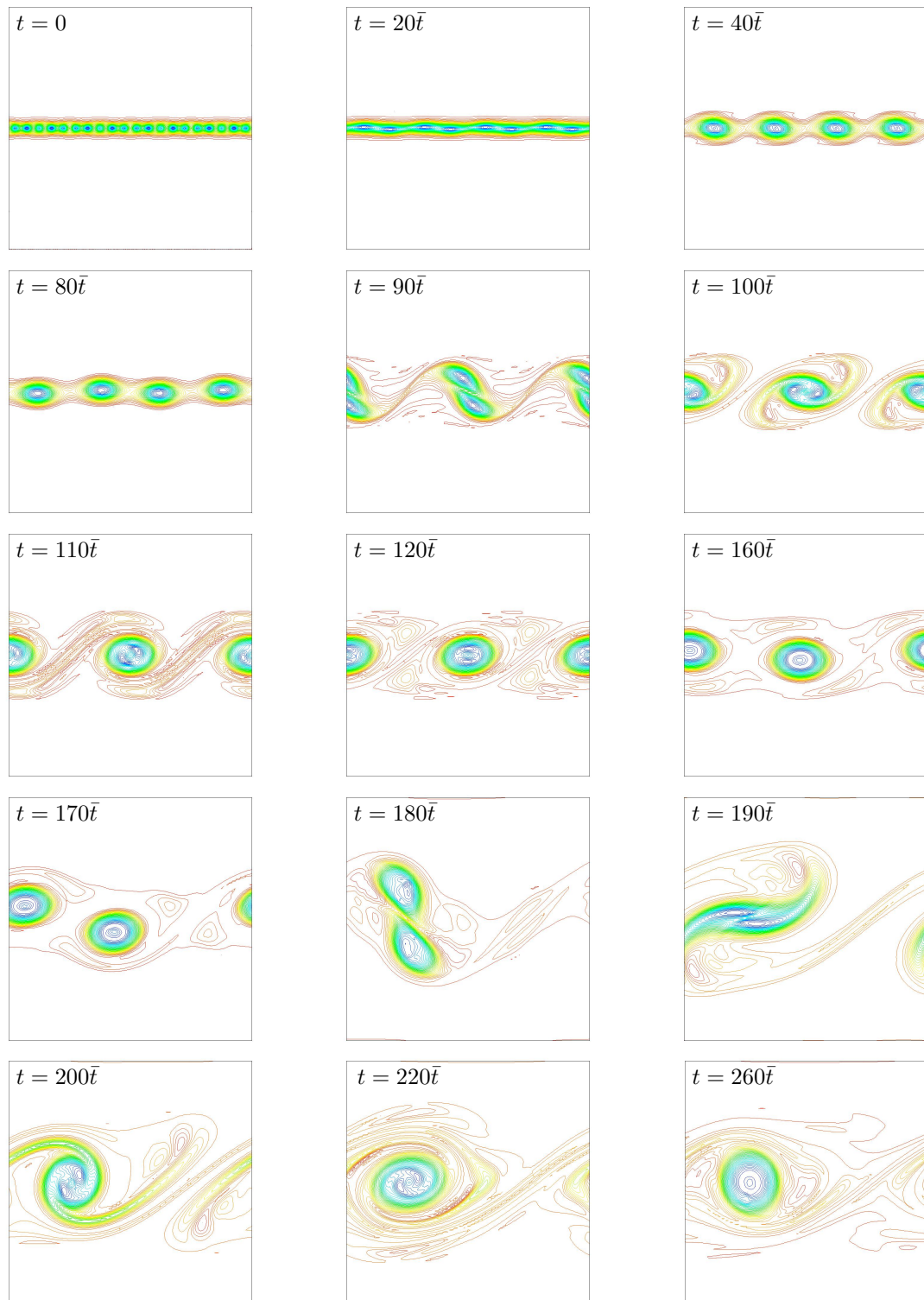
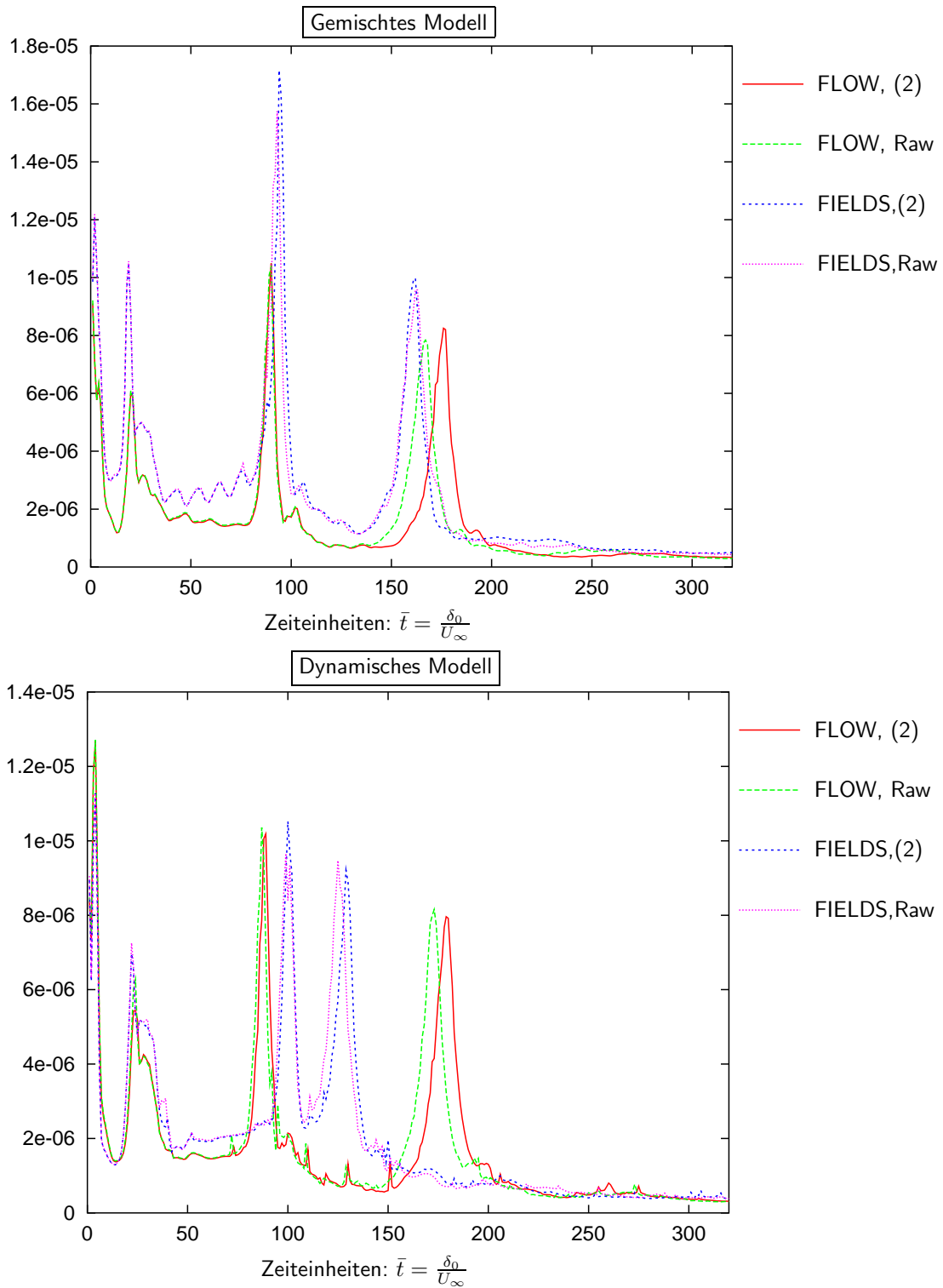


Abbildung D.4: Wirbelstärke beim FLOW-(2)-LPS-Verfahren und dem dynamischen Modell

Abbildung D.5: Massenerhaltung $\|\text{div}(\mathbf{u})\|_2$ beim LPS-Aufwind-Verfahren

D.2 in drei Raumdimensionen

In Abschnitt 5.2.2 wurde das Mixing Layer Problem in drei Raumdimensionen vorgestellt. Da in drei Raumdimensionen die Startlösung bzw. die aufgeprägte Störung entscheidend ist, wurden drei verschiedene Methoden unterschiedlicher Stärke vorgestellt.

Es wird sowohl das dynamische Modell aus Abschnitt 1.3.2 als auch das gemischte Modell aus Abschnitt 1.3.3 in Verbindung mit den Stabilisierungsverfahren FIELDS und FLOW betrachtet.

Zur Veranschaulichung der resultierenden Lösung wird für alle drei Startlösungen die z -Komponente der Wirbelstärke graphisch in den nachfolgenden Abbildungen dargestellt.

- **Startlösung 1:**

Die Lösung beim gemischten Modell mit der Stabilisierung FLOW zur Startlösung 1 von Seite 123 bei $Re=500$ ist in Abbildung D.6 aufgeführt.

Stärke der Störung 10^{-4} .

- **Startlösung 2:**

Für beide Turbulenzmodelle sind in den Abbildungen D.7 bis D.10 die resultierende Wirbelstärke der Startlösung 2 von Seite 128 bei $Re=714$ dargestellt.

Stärke der Störung 10^{-2} .

- **Startlösung 3:**

In den Abbildungen D.11 bis D.14 sind die Resultate der Startlösung 3 von Seite 132 bei $Re=700$ für das gemischte und dynamische Modell abgebildet.

Stärke der Störung 10^{-3} .

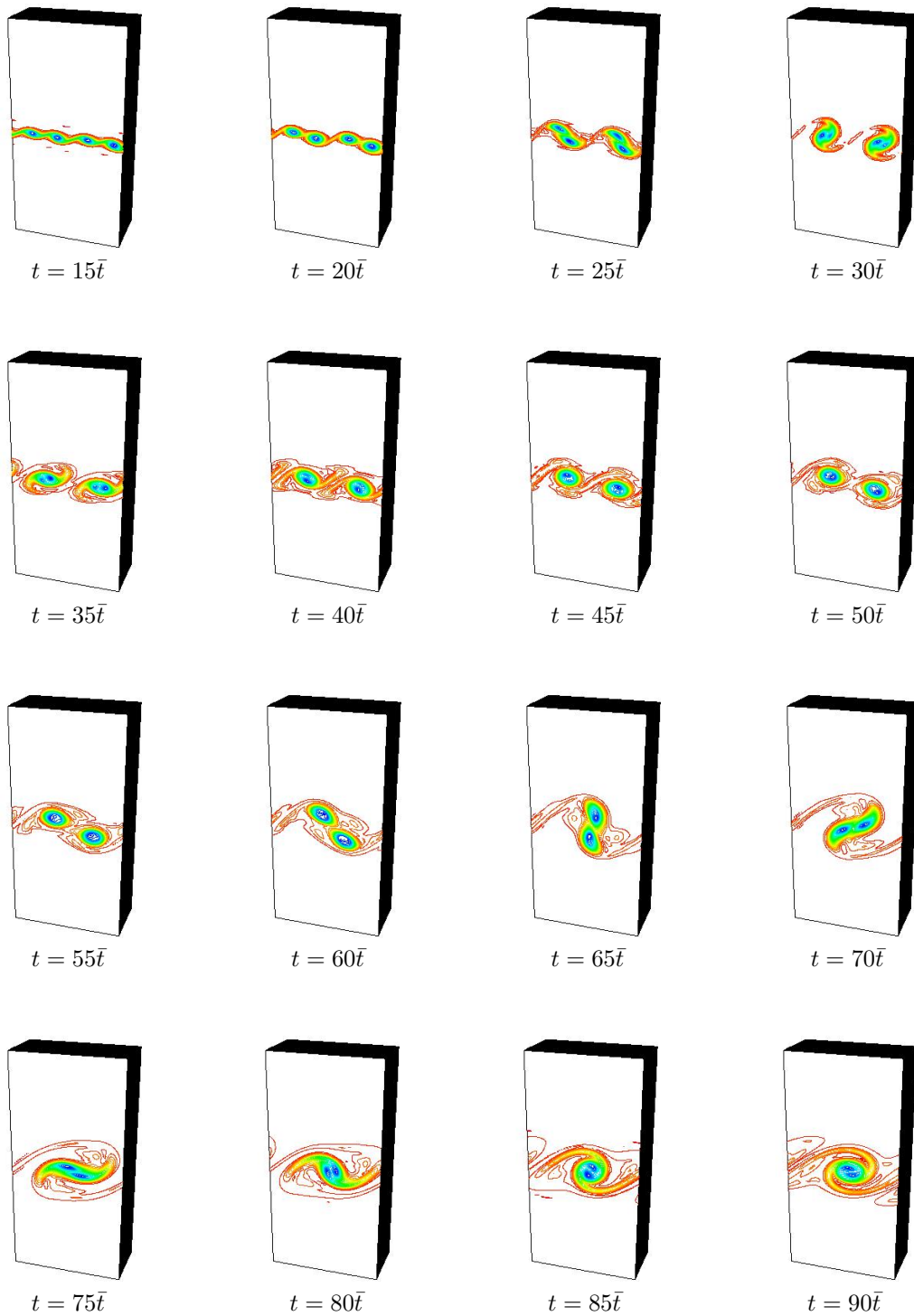


Abbildung D.6: Lösung des 3d-Mixing-Layer-Problems mit 2d-Charakter: ω_z in Ebene $z = 1$ beim gemischten Modell mit FLOW

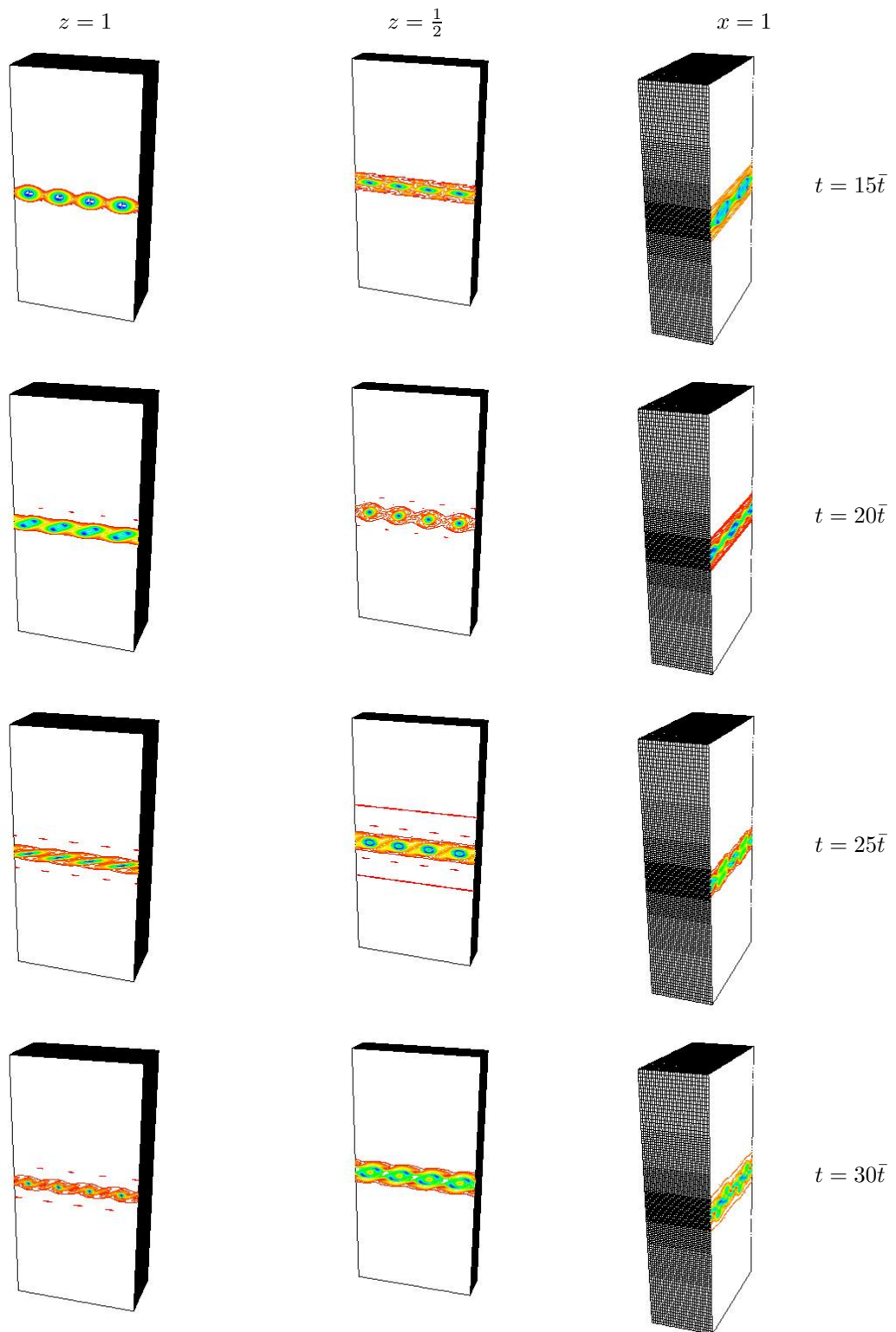


Abbildung D.7: Wirbelstärke ω_z in unterschiedlichen Schnittebenen bei $Re=714$, gemischtes Modell, FLOW

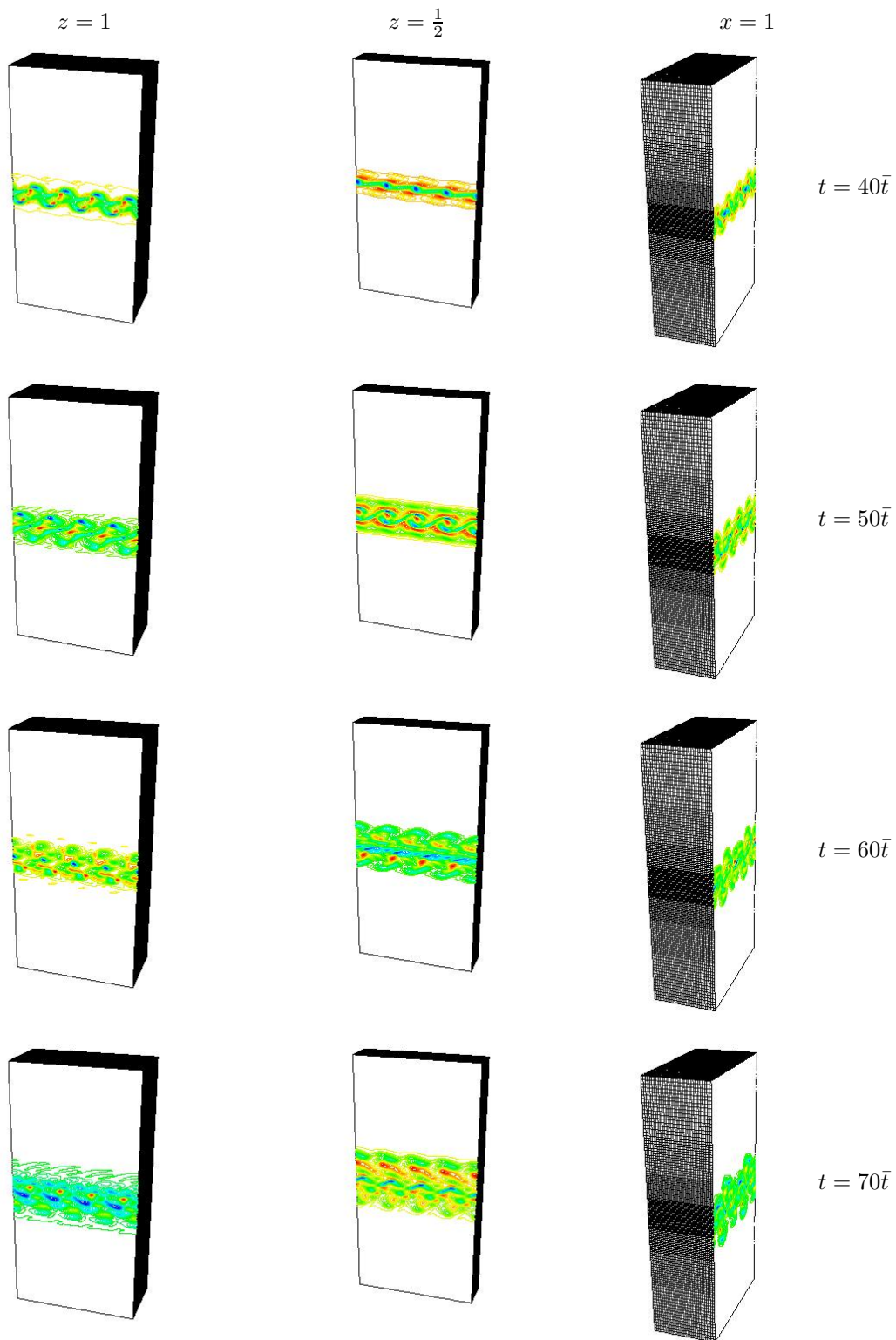


Abbildung D.8: Fortsetzung: Wirbelstärke ω_z in unterschiedlichen Schnittebenen bei $Re=714$, gemischtes Modell, FLOW

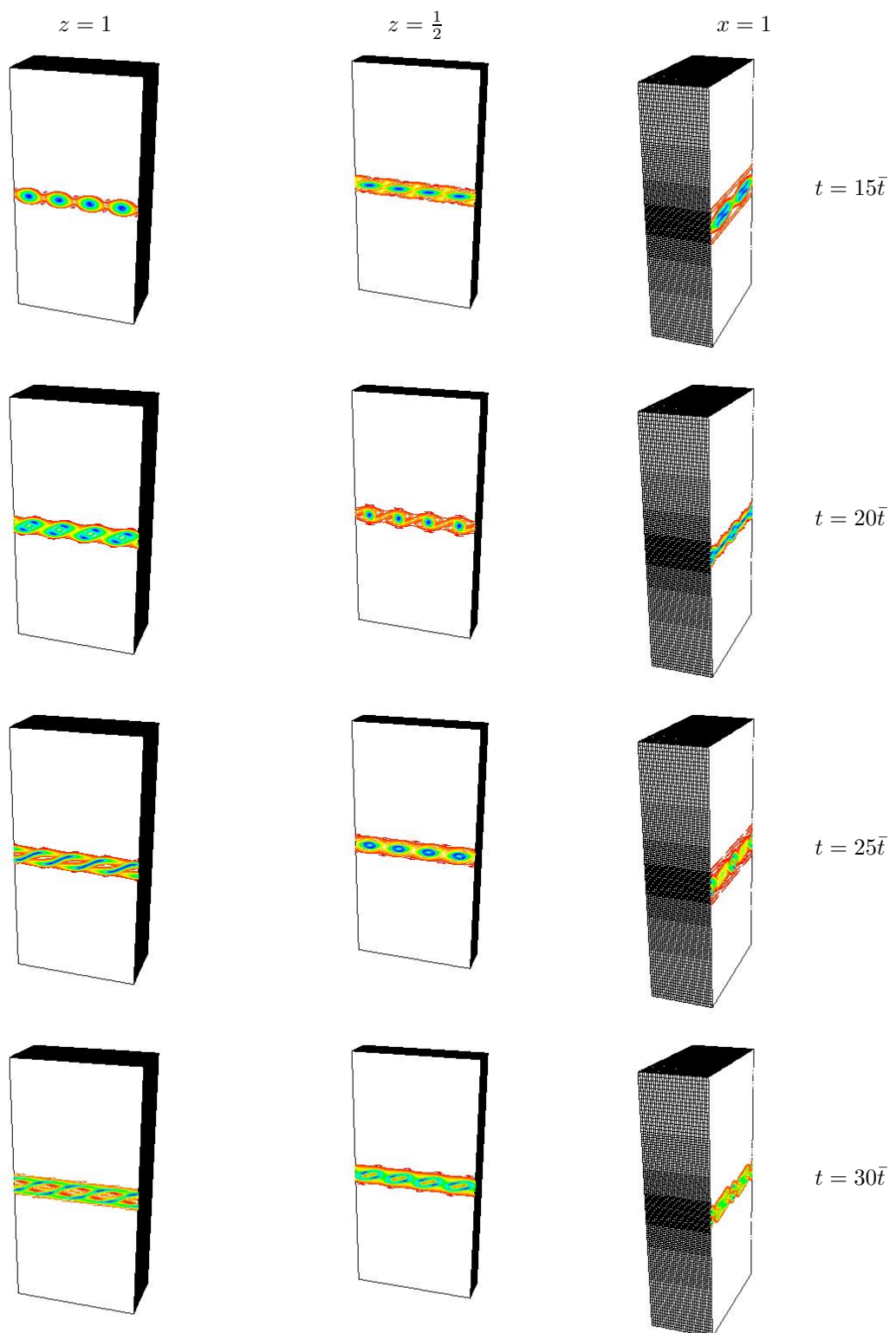


Abbildung D.9: Wirbelstärke ω_z in unterschiedlichen Schnittebenen bei $Re=714$, dynamisches Modell, FLOW

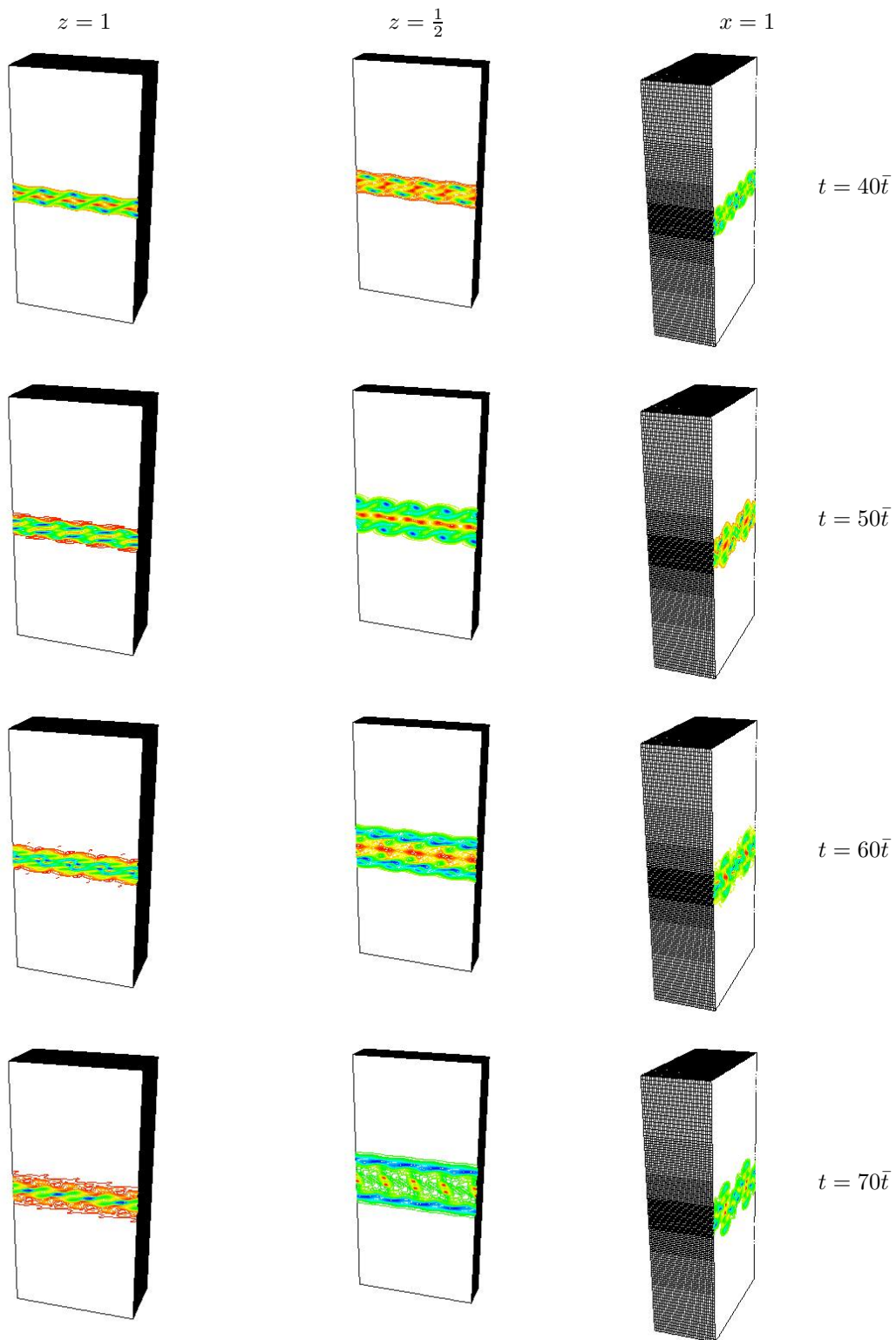
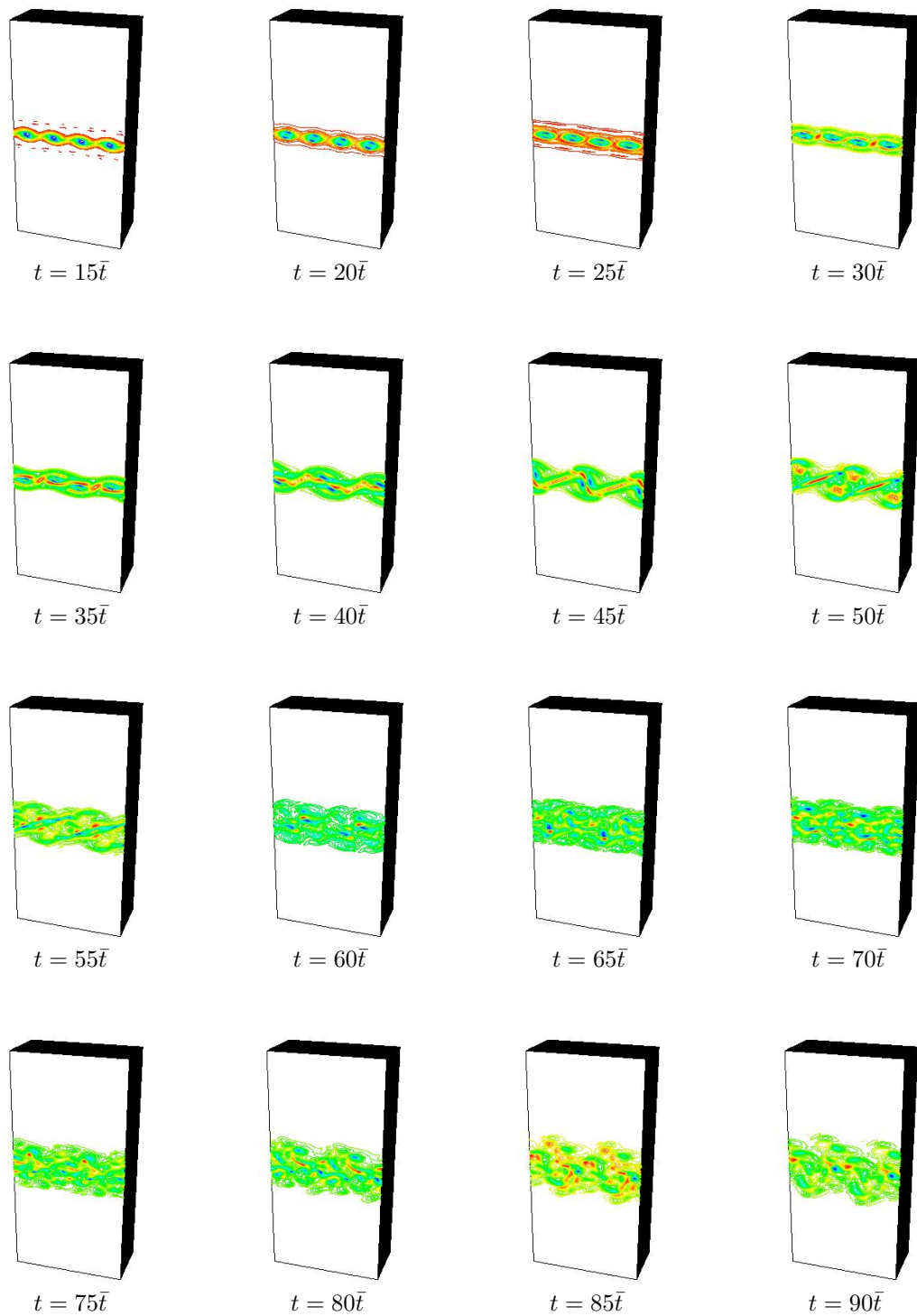


Abbildung D.10: Fortsetzung: Wirbelstärke ω_z in unterschiedlichen Schnittebenen bei $Re=714$, dynamisches Modell, FLOW

Abbildung D.11: $Re=700$: ω_z in Ebene $z = 1$ beim gemischten Modell mit FLOW

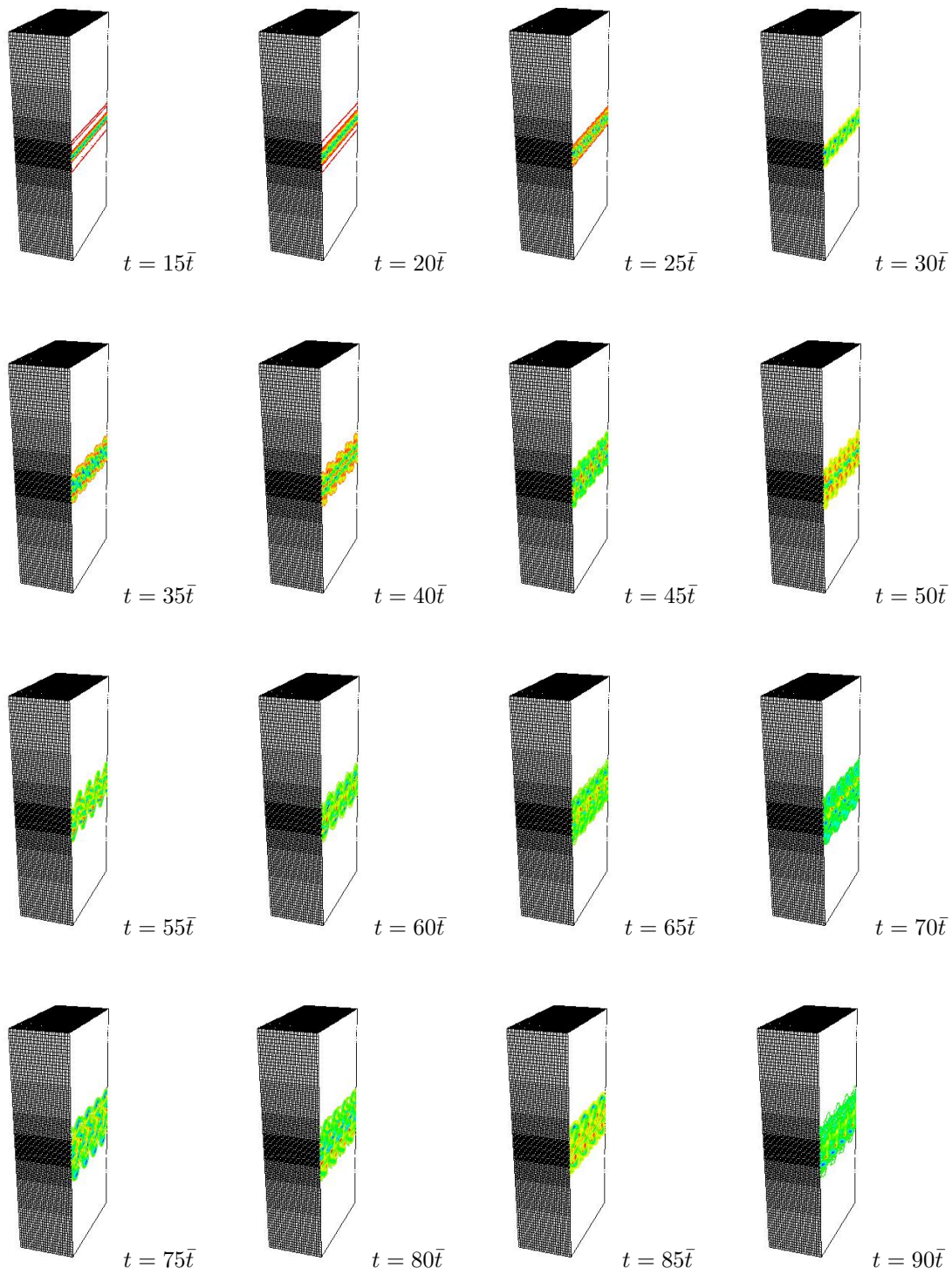
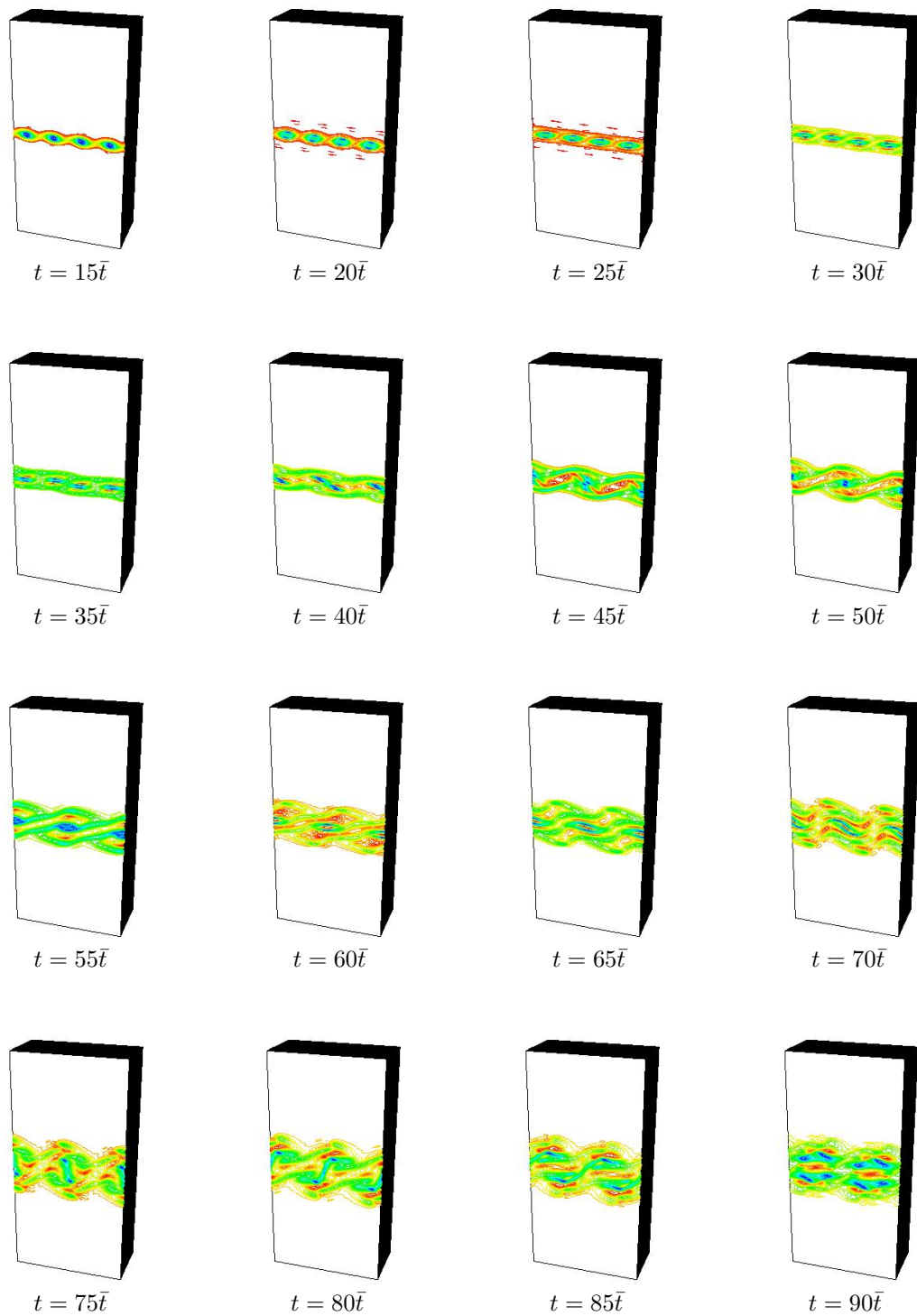


Abbildung D.12: $Re=700$: ω_z in Ebene $x = 1$ beim gemischten Modell mit FLOW

Abbildung D.13: $\text{Re}=700$: ω_z in Ebene $z = 1$ beim dynamischen Modell mit FLOW

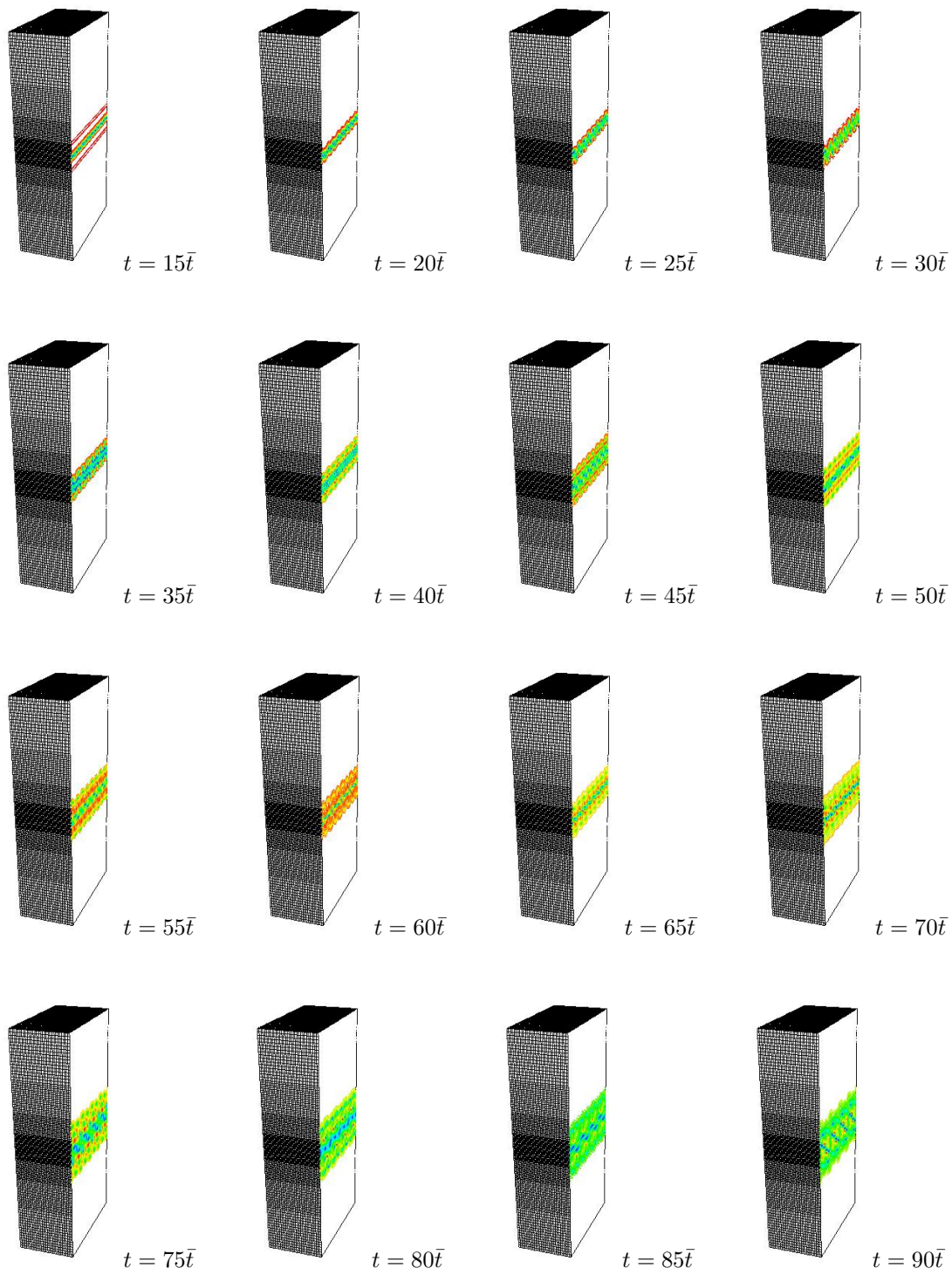


Abbildung D.14: $Re=700$: ω_z in Ebene $x = 1$ beim dynamischen Modell mit FLOW

Literaturverzeichnis

- [Ale77] ALEXANDER R. *Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods For Stiff O.D.E.'s*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 14:1006–1021, 1977.
- [BBC⁺94] BARRETT R., BERRY M., CHAN T.F., DEMMEL J., DONATO J., DONGARRA J., ELJKHOUT V., POZO R., ROMINE C. und DER VORST H.V. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, 2nd Edition*. SIAM, Philadelphia, PA, 1994.
- [BBJ⁺97] BASTIAN P., BIRKEN K., JOHANNSEN K., LANG S., NEUSS N., RENTZ-REICHERT H. und WIENERS C. *UG – A flexible software toolbox for solving partial differential equations*. Computing and Visualization in Science, 1:27–40, 1997.
- [BBJ⁺98] BASTIAN P., BIRKEN K., JOHANNSEN K., LANG S., REICHENBERGER V., WIENERS C., WITTUM G. und WROBEL C. *A parallel software-platform for solving problems of partial differential equations using unstructured grids and adaptive multigrid methods*. In: JÄGER W. und KRAUSE E. (Herausgeber) *High performance computing in science and engineering '98*, Seiten 326–339. Springer, 1998.
- [BJL⁺01] BASTIAN P., JOHANNSEN K., LANG S., NÄGELE S., WIENERS C., REICHENBERGER V., WITTUM G. und WROBEL C. *Advances in High-Performance Computing: Multigrid Methods for Partial Differential Equations and its Applications*. In: *High performance computing in science and engineering 2000*, Seiten 506–519. Springer, 2001.
- [BKNW97] BOERSMA B., KOOPER M., NIEUWSTADT F. und WESSELING P. *Local grid refinement in large-eddy simulations*. Journal of Engineering Mathematics, 32:161–175, 1997.
- [BR94] BREUER M. und RODI W. *Large-Eddy Simulation of Turbulent Flow through a Straight Square Duct and a 180° Bend*. Fluid Mechanics and its Applications, 26:273–285, 1994.
- [Bra97] BRAESS D. *Finite Elemente*. Springer, 1997.
- [BS89] BRONSTEIN I. und SEMENDJAJEW K. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch Thun, 24. Auflage, 1989.
- [Cho68] CHORIN A. *Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations*. Mathematics of Computation, 22(104):745–762, 1968.

- [DH91] DEUFLHARD P. und HOHMANN A. *Numerische Mathematik: eine algorithmisch orientierte Einführung*. de Gruyter Lehrbuch. de Gruyter, 1991.
- [FP97] FERZIGER J.H. und PERIĆ M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1997.
- [Frö98] FRÖHLICH J. *Large Eddy Simulation of Flow around Cylinders*. In: *Computational Fluid Dynamics '98*, Seiten 563–568. John Wiley & Sons, 1998. Invited Lectures, Minisymposia and Special Technological Sessions of the Fourth European Computational Fluid Dynamics Conference, 7-11 September 1998, Athens, Greece.
- [Ger92] GERMANO M. *Turbulence: the filtering approach*. Journal of Fluid Mechanics, 238:325–336, 1992.
- [GGS82] GHIA U., GHIA K. und SHIN C. *High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method*. Journal of Computational Physics, 48:387–411, 1982.
- [GPMC91] GERMANO M., PIOMELLI U., MOIN P. und CABOT W. *A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model*. Physics of Fluids A, 3:1760–1765, 1991.
- [Hac85] HACKBUSCH W. *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer, 1985.
- [Hac86] HACKBUSCH W. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1986.
- [Hac93] HACKBUSCH W. *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1993.
- [HC93] HOUGHTON E. und CARPENTER P. *Aerodynamics for Engineering Students*. Edward Arnold, 4. Auflage, 1993.
- [Hin75] HINZE J. *Turbulence*. McGraw Hill, 1975.
- [HMJ00] HUGHES T.J., MAZZEI L. und JANSEN K.E. *Large Eddy Simulation and the variational multiscale method*. Computing and Visualization in Science, 3:47–59, 2000.
- [HNRR99] HUURDEMAN B., NÄGELE S., REICHENBERGER V. und RENTZ-REICHERT H. *Multigrid Solution of the Incompressible Navier-Stokes Equations and its Application to Parallel Computers*. In: BUNGARTZ H.J., DURST F. und ZENGER C. (Herausgeber) *High Performance Scientific and Engineering Computing*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Seiten 51–60. Springer, 1999. Proceedings of the International FORTWIHR Conference on HPSEC, Munich, March 16-18, 1998.
- [HS52] HESTENES M. und STIEFEL E. *Methods of conjugate gradients for solving linear systems*. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 49:409–436, 1952.

- [Huu99] HUURDEMAN B. *Numerische Simulation inkompressibler turbulenter Strömungen mit Mehrgitterverfahren auf unstrukturierten Gittern*. Dissertation, Universität Stuttgart, 1999.
- [Joh02] JOHN V. *Large Eddy Simulation of Turbulent Incompressible Flows. Analytical and Numerical Results for a Class of LES Models*. Habilitationsschrift, 2002.
- [Kar94] KARIMIAN S. *Pressure-Based Control-Volume Finite-Element Method for Flow at All Speeds*. Dissertation, University of Waterloo, 1994.
- [KS95] KARIMIAN S. und SCHNEIDER G. *Pressure-Based Control-Volume Finite Element Method for Flow at all Speeds*. AIAA Journal, 33:1611–1618, 1995.
- [Lan01] LANG S. *Parallele Numerische Simulation instationärer Probleme mit adaptiven Methoden auf unstrukturierten Gittern*. Dissertation, Universität Stuttgart, 2001.
- [Lei90] LEITH C. *Stochastic backscatter in a subgrid-scale model: Plane shear mixing layer*. Physics of Fluids A, 2(3):297–299, 1990.
- [Lil92] LILLY D. *A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method*. Physics of Fluids A, 4:633–634, 1992.
- [LL66] LANDAU L. und LIFSCHITZ E. *Lehrbuch der theoretischen Physik, Hydrodynamik, Band IV*. Akademie-Verlag Berlin, 1966.
- [LSLRC88] LESIEUR M., STAQUET C., LE ROY P. und COMTE P. *The mixing layer and its coherence examined from the point of view of two-dimensional turbulence*. Journal of Fluid Mechanics, 192:511–534, 1988.
- [Mau99] MAURER J. *A Genuinely Multi-Dimensional Scheme for the Navier-Stokes Equations and its Application to LES with a Scale-Residual Model*. Dissertation, ETH Zürich, 1999.
- [Met03] METZNER M. *Mehrgitterverfahren für die kompressiblen Euler- und Navier-Stokes-Gleichungen mit besonderer Betrachtung des schwach kompressiblen Falles*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2003.
- [MG00] MAGAGNATO F. und GABI M. *A New Adaptive Turbulence Model for Unsteady Flow Fields in Rotating Machinery*. Proceedings of 8th International Symposium on Transport Phenomena and Dynamics in Rotating Machinery (ISROMAC-8), Honolulu, USA, 2000.
- [MR93] MOSER R.D. und ROGERS M.M. *The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: pairing and transition to turbulence*. Journal of Fluid Mechanics, 247:275–320, 1993.
- [MW99] MEISTER A. und WITZEL J. *Krylov Subspace Methods in Computational Fluid Dynamics*. Hamburger Beiträge zur angewandten Mathematik, Reihe F Computational Fluid Dynamics and Data Analysis 9, Universität Hamburg, 1999.
- [NW03] NÄGELE S. und WITTUM G. *Large-Eddy Simulation and Multigrid Methods*. Electronic Transactions on Numerical Analysis, 15:152–164, 2003.

- [Rai76] RAITHBY G. *Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 9:153–164, 1976.
- [Raw85] RAW M. *A New Control-Volume-Based Finite Element Procedure for the Numerical Solution of the Fluid Flow and Scalar Transport Equations*. Dissertation, University of Waterloo, 1985.
- [RFBP97] RODI W., FERZIGER J., BREUER M. und POURQUIÉ M. *Status of Large Eddy Simulation: Results of a Workshop*. Journal of Fluids Engineering, 119:248–262, 1997.
- [RR96] RENTZ-REICHERT H. *Robuste Mehrgitterverfahren zur Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichung: Ein Vergleich*. Dissertation, Universität Stuttgart, 1996.
- [RT74] RAITHBY G. und TORRENCE K. *Upstream-weighted differencing schemes and their application to elliptic problems involving fluid flow*. Computers & Fluids, 8(12):191–206, 1974.
- [SA99] STOLZ S. und ADAMS N. *An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation*. Physics of Fluids, 11(7):1699–1701, 1999.
- [Sag02] SAGAUT P. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows, An Introduction*. Scientific Computation. Springer, 2. Auflage, 2002.
- [SAK01] STOLZ S., ADAMS N. und KLEISER L. *An approximate deconvolution model for large-eddy simulation with application to incompressible wall-bounded flows*. Physics of Fluids, 13(4):997–1015, 2001.
- [SB90] STOER J. und BULIRSCH R. *Numerische Mathematik 2*. Springer, dritte Auflage, 1990.
- [Sma63] SMAGORINSKY J. *General circulation experiments with the primitive equations I. The basic experiment*. Monthly Weather Review, 9:99–164, 1963.
- [SR86] SCHNEIDER G. und RAW M. *A Skewed, Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite-Element Convection-Diffusion Computation*. Numerical Heat Transfer, 9:1–26, 1986.
- [SR87] SCHNEIDER G. und RAW M. *Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Colocated Variables - 1. Computational Procedure*. Numerical Heat Transfer, 11:363–390, 1987.
- [ST96] SCHÄFER M. und TUREK S. *Benchmark Computations of Laminar Flow Around a Cylinder*. In: HIRSCHL (Herausgeber) *Flow Simulation with High-Performance Computers II*, Band 52 von *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Seiten 547–566. Vieweg, 1996.
- [Sto93] STOER J. *Numerische Mathematik 1*. Springer, 6. verbesserte Auflage, 1993.
- [Tem84] TEMAM R. *Navier-Stokes Equations*. North-Holland, 1984.

- [TSB00] TERRACOL M., SAGAUT P. und BASDEVANT C. *A Multivel / Multiresolution Approach for Large-Eddy Simulation*. Proceedings of ECCOMAS 2000, Barcelona, 11-14 September, 2000.
- [VGK97] VREMAN B., GEURTS B. und KUERTEN H. *Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer*. Journal of Fluid Mechanics, 339:357–390, 1997.
- [Vok97] VOKE P. *Flow Past a Square Cylinder: Test Case LES2*. In: J. CHOLLET P.V. und KLEISER L. (Herausgeber) *Direct and Large-Eddy Simulation II: Proceedings of the Second ERCOFTAC Workshop*, Seiten 355–374. Kluwer Academic, 1997.
- [Vor92] VAN DER VORST H. *Bi-CGSTAB: A fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*. SIAM Journal on Scientific Statistical Computing, 13(2):631–644, 1992.
- [Wes92] WESSELING P. *An introduction to multigrid methods*. Wiley, 1992.
- [Wes01] WESSELING P. *Principles of Computational Fluid Dynamics*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer, 2001.
- [Wil93] WILCOX D. *Turbulence Modeling for Computational Fluid Dynamics*. DCW Industries, 1993.
- [Wit89] WITTUM G. *On the robustness of ILU smoothing*. SIAM Journal on Scientific Statistical Computing, 10:699–717, 1989.
- [Wit95] WITTUM G. *Multi-Grid Methods. An Introduction*. ICA-Bericht N95/5, Institut für Computeranwendungen, Universität Stuttgart, 1995.
- [YF93] YANG K.S. und FERZIGER J.H. *Large-Eddy Simulation of Turbulent Obstacle Flow Using a Dynamic Subgrid-Scale Model*. AIAA Journal, 31(8):1406–1413, 1993.
- [Zee90] DE ZEEUW P. *Matrix-dependent prolongations and restrictions in a blackbox multigrid solver*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 33:1–27, 1990.
- [ZSK93] ZANG Y., STREET R. und KOSEFF J. *A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows*. Physics of Fluids A, 12:3186–3195, 1993.