

Technische Universität Dresden

Fachrichtung Mathematik

Institut für Numerische Mathematik

Entwicklung eines impliziten LES Modells für kompressible Turbulenz

Diplomarbeit
zur Erlangung des ersten akademischen Grades
Diplommathematiker (Technomathematik)

vorgelegt von

Name: Franz

Vorname: Sebastian

geboren am: 29.12.1978

in: Dresden

Tag der Einreichung: 02. August 2004

Betreuer: Prof. Dr. rer. nat. habil. H.-G. Roos,
Prof. Dr.-Ing. habil. N.A. Adams

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Large-Eddy Simulation	4
2.1	Herleitung der LES-Gleichungen aus den kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen	4
2.2	Implizite Modellierung und die Analyse der modifizierten Differentialgleichung - MDEA	8
3	Definition und Analyse des Entfaltungsoperators	10
3.1	Herleitung des Entfaltungsoperators	10
3.1.1	Rekonstruktion in 2D	10
3.1.2	Erweiterung auf 3D	17
3.2	Analyse des Entfaltungsoperators	18
4	Das implizite SGS-Modell	21
4.1	Definition des Modells	21
4.2	Validierung des Moduls	27
4.3	MDEA mit MAPLE	30
5	Simulation isotroper Turbulenz	38
6	Zusammenfassung	45
7	Danksagung	45
A	Evolutionäre Optimierung	46
A.1	Selektion der Eltern	46
A.2	Rekombination	47
A.3	Mutation	47
A.4	Selektion der neuen Generation	48
	Literatur	49

1 Einleitung

In den Jahren 1822 und 1845 schrieben der französische Forscher Claude-Louis Navier und der englische Physiker George Stokes unabhängig voneinander ein System von Gleichungen auf, welches das Verhalten von inkompressiblen viskosen Fluiden beschreibt. Sie erweiterten die bekannten Euler-Gleichungen um die inneren Kräfte zwischen den Molekülen und schufen damit die Grundlagen der Strömungsmechanik. Das Gleichungssystem wurde später noch erweitert, um verschiedenen Aspekten realer Fluide Rechnung zu tragen, so z.B. der Kompressibilität oder auch chemischen Reaktionen. Dieser Diplomarbeit liegen die Navier-Stokes Gleichungen für kompressible Fluide in der Form partieller Differentialgleichungen für die Zustandsgrößen der Dichte ρ , der Impulse ρu_1 , ρu_2 , ρu_3 und der Gesamtenergie E zugrunde. Die Gleichungen sind in (2) auf Seite 4 zu finden. Da es für die meisten physikalisch relevanten Fälle nicht möglich ist, analytische Lösungen zu finden, werden numerische Lösungen gesucht, die das Strömungsverhalten in guter Näherung beschreiben.

Einer der aktuellen Forschungsschwerpunkte in der numerischen Simulation von Strömungen ist die Handhabung turbulenter Strömungen. Als turbulent wird eine Strömung bezeichnet, wenn deren Geschwindigkeitsfeld bezüglich Raum und Zeit über einem weiten Skalenbereich variiert. Die sogenannte Direkte Numerische Simulation (DNS), bei der die Navier-Stokes Gleichungen ohne zusätzliche Modellierung direkt diskretisiert werden, kann nur für kleine Reynoldszahlen Re und relativ einfache Geometrien angewandt werden, da Rechen- und Speicheraufwand mit Re^3 bzw. mit $Re^{9/4}$ anwachsen und für kompliziertere Problemstellungen die technischen Möglichkeiten übersteigen. Für praxisrelevante Konfigurationen können nur Näherungsrechnungen durchgeführt werden, die nicht mehr auf den exakten Navier-Stokes Gleichungen basieren, sondern z.B. auf den Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (RANS). Hierbei werden die Geschwindigkeiten in einen zeitlichen Mittelwert und zugehörige Fluktuation aufgespalten und die Navier-Stokes Gleichungen umgeformt, so dass wieder Navier-Stokes Gleichungen entstehen, aber diesmal für die Mittelwerte. Für die Kreuzkorrelationen der unbekanntenen Fluktuationen, die in die RANS-Gleichungen einfließen, müssen Modelle angegeben werden.

Einen anderen Weg beschreitet die in dieser Diplomarbeit angewandte Methode der Large-Eddy Simulation (LES). Hierbei werden die großen Strukturen im Strömungsfeld wie in einer DNS aufgelöst und berechnet, also exakt im Rahmen der numerischen Genauigkeit und die Effekte der kleinskaligen Wirbelstrukturen mit Hilfe von Modellen nachgebildet. Der Vorteil gegenüber den RANS-Methoden liegt darin, dass nun nicht nur zeitlich gemittelte Werte berechnet werden, sondern auch instationäre Vorgänge der Strömung vorhergesagt werden können. Damit verbunden ist ein höherer Aufwand, da ein Modell, welches die Interaktionen verschiedener Wirbelskalen nachbildet und oft auch ein feineres Gitter als bei den RANS-Methoden benötigt wird. Die Modelle sollen hauptsächlich den Energietransfer zwischen großen und kleinen Strukturen nachbilden. Dieser Transfer reicht von integralen Skalen bis hin zu den Kolmogorov-Skalen, in denen die Energie aufgrund molekularer Dissipation in innere Energie umgewandelt wird. Die Modelle können entwe-

der explizit als Terme in den Navier-Stokes Gleichungen vorgegeben werden oder implizit durch das Verfahren selbst.

In dieser Diplomarbeit wird der Weg über die implizite Modellierung beschritten und ein kürzlich für den eindimensionalen Fall vorgeschlagenes Modell [1] auf den kompressiblen dreidimensionalen Fall erweitert, sowie in ein bestehendes Programmpaket NSMB (Navier-Stokes-Multi-Block) implementiert. Für die Validierung des Moduls wurde der Taylor-Green Wirbel (siehe z.B. [2]) untersucht. Das eigentliche Ziel, die Simulation turbulenter isotroper Strömungen, wurde mit dem Referenzfall *ife96* aus [3] durchgeführt unter Nutzung von Startwerten, die das Programm COBOX [4] liefert.

Die Aufgabenstellung für die Diplomarbeit umfasste dabei folgende Punkte:

- Das Programmpaket NSMB etablieren und validieren
- Das XWENO-Modell implementieren
- Das Modell für Navier-Stokes Gleichungen verbessern mittels
 - evolutionärer Optimierung in 1D, siehe [1]
 - manueller Optimierung
- Analyse der modifizierten Differentialgleichung für effektiveres Modell durchführen
- Implizite LES Rechnungen für isotrope Turbulenz aufsetzen und analysieren

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in drei Teile. In den Abschnitten 2 und 3 werden die Methode der LES und der Entfaltungoperator hergeleitet und untersucht. Das Kapitel 4 behandelt die Definition des impliziten Modells, dessen Validierung mit dem oben geschilderten Testfall des Taylor-Green Wirbels und die Analyse mittels MAPLE. Den Abschluss bildet das Kapitel 5 über die Simulation der isotropen Turbulenz und deren Auswertung. Im Anhang wird kurz auf das spezielle Problem des Bestimmens optimaler Parameter mittels Evolutionärer Optimierung eingegangen. Die Programmtexte der für diese Diplomarbeit entwickelten Routinen zur Simulation und Analyse sind aufgrund ihres Umfangs nicht abgedruckt, sondern auf der beiliegenden CD zu finden. Die Eingabedateien für die Simulation mit NSMB sind ebenfalls auf der CD enthalten.

2 Large-Eddy Simulation

Die Idee der Large-Eddy Simulation (LES) besteht darin, das Strömungsfeld nicht bis hin zu den kleinsten Skalen aufzulösen, sondern eine gröbere Auflösung zu wählen. Da diese notwendigerweise weniger Information enthält, aber ähnlich gute Ergebnisse erzielen soll, müssen Modelle für die nicht-aufgelösten Terme, sogenannte Subgrid-Scale-Terme (SGS-Terme) zur Verfügung gestellt werden. Eines der am häufigsten genutzten SGS-Modelle wurde von Smagorinsky [5] eingeführt und später durch verschiedene Modifikationen verbessert.

Solche expliziten SGS-Modelle besitzen meist formal die Ordnung $O(h^2)$, d.h. für glatte Daten entstehen bei der Taylorentwicklung dieser Modelle nur Terme mit h^2 als Faktor. Um unerwünschte Interaktionen zwischen Diskretisierung und Modell zu verhindern, werden für die Diskretisierung der Differentialgleichungen Verfahren höherer Ordnung benötigt. In [6] wurde eine theoretische Analyse des Anteils des Diskretisierungsfehlers im Gesamtfehler durchgeführt und Diskretisierungsverfahren 2., 4., 6. und 8. formaler Ordnung verglichen. Ein Ergebnis dieser Analyse ist, dass die Diskretisierungsfehler der Verfahren 2. Ordnung den Einfluss des SGS-Modell überwiegen.

Andererseits kann eine Diskretisierung 2. Ordnung einen ähnlichen Effekt wie ein SGS-Modell hervorrufen. Dies ist die Motivation für implizite SGS-Modelle, wobei die modellierenden Terme nicht mehr explizit gegeben sind und einen physikalischen Hintergrund haben, sondern in der Diskretisierung verborgen liegen.

Dieses Kapitel beschreibt die Herleitung der grundlegenden Gleichungen für die LES auf mathematischem Weg und die Idee der Analyse der modifizierten Differentialgleichung als Hilfsmittel für die implizite Modellierung.

2.1 Herleitung der LES-Gleichungen aus den kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen

Die Grundgleichungen für die Berechnungen von kompressiblen Strömungen sind die kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen, welche Masseerhaltung, Impulserhaltung und Energieerhaltung beschreiben. Die Kurzform

$$\partial_t \mathbf{v} + \partial_1 \mathbf{F}_1(\mathbf{v}) + \partial_2 \mathbf{F}_2(\mathbf{v}) + \partial_3 \mathbf{F}_3(\mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

mit dem Zustandsvektor $\mathbf{v} = (\varrho, \varrho u_1, \varrho u_2, \varrho u_3, E)^T$, der Dichte, Impulse und Gesamtenergie beinhaltet, steht für folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho + \sum_j \partial_j (\varrho u_j) &= 0, \\ \partial_t (\varrho u_i) + \sum_j \partial_j (\varrho u_i u_j) + \partial_i p - \sum_j \partial_j \sigma_{ij} &= 0 \quad (i = 1, 2, 3), \\ \partial_t E + \sum_j \partial_j ((E + p)u_j) - \sum_{i,j} \partial_j (\sigma_{ij} u_i) + \sum_j \partial_j q_j &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Die partiellen Ableitungen ∂_t , ∂_1 , ∂_2 und ∂_3 sind dabei die Ableitungen bezüglich der Zeit, bzw. der drei Raumrichtungen. Die weiteren in (2) vorkommenden Größen sind der Druck

p , der mit der Gesamtenergie E in folgender Beziehung steht

$$E = \frac{p}{\kappa - 1} + \frac{1}{2} \sum_i \varrho u_i^2,$$

die j -te Komponente des Wärmestromes

$$q_j = \frac{\mu(T)}{(\kappa - 1)RePrM^2} \partial_j T$$

und der viskose Spannungstensor

$$\sigma_{ij} = \frac{\mu(T)}{Re} S_{ij}(\mathbf{u}).$$

Für die Berechnung der letzten beiden Größen werden noch Formeln für die Temperatur T , die Viskosität μ und den Verzerrungsgeschwindigkeitstensor S_{ij} benötigt:

$$\begin{aligned} T &= \kappa M^2 \frac{p}{\varrho}, \\ \mu(T) &= T^{\frac{3}{2}} \frac{1 + C}{T + C}, \\ S_{ij}(\mathbf{u}) &= \partial_j u_i + \partial_i u_j - \frac{2}{3} \delta_{ij} \sum_k \partial_k u_k. \end{aligned}$$

Die in den Formeln auftretenden Konstanten sind die Machzahl M , die Reynoldszahl Re , die Prandtlzahl Pr , der Isentropenexponent κ und die Sutherland-Konstante C . Diese Zahlen sind Stoffkonstanten bzw. Parameter und abhängig vom jeweils untersuchten Fall. Die nachfolgende Herleitung der Gleichungen für die LES für kompressible Strömungen wurde in Anlehnung an [7] und [8] durchgeführt.

Die LES wird hierbei als eine Finite Volumen Methode (FVM) interpretiert. Damit wird gleichzeitig erreicht, dass die Konservativität der Navier-Stokes Gleichungen (1) bei der Diskretisierung erhalten bleibt. Das Raumgebiet wird in Quader I_{ijl} zerlegt, die als kartesisches Produkt aufgefasst werden können:

$$I_{ijl} = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}] \times [z_{l-\frac{1}{2}}, z_{l+\frac{1}{2}}].$$

Der Mittelpunkt des Quaders habe die Koordinaten (x_i, y_j, z_k) und die Seitenlängen seien $h_{x_i} = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, $h_{y_j} = y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}}$, sowie $h_{z_l} = z_{l+\frac{1}{2}} - z_{l-\frac{1}{2}}$.

Die genutzte Filterung der hier untersuchten LES ist die Faltung mit dem top-hat-Filter G . Dieser ist für I_{ijl} definiert als

$$G_{ijl}(x, y, z) = \frac{1}{h_{x_i} h_{y_j} h_{z_l}} \begin{cases} 1 & \text{für } (x, y, z) \in I_{ijl} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Für die LES können auch andere Filter, wie spektrale Abschneide-Filter genutzt werden, bei denen sich das Verfahren nicht mehr als FVM interpretieren lässt.

Die Faltung mit G vereinfacht sich für eine beliebige integrierbare Größe f zur Integralmittelung über der Zelle I_{ijl}

$$\bar{f} := G_{ijl} * f = \frac{1}{h_{x_i} h_{y_j} h_{z_l}} \int_{I_{ijl}} f d\Omega.$$

Wenn f dabei einen Vektor darstellt, so ist die Integration komponentenweise zu verstehen. Für die kompressiblen Variablen wird ein dichtegewichteter Filter, der Favre-Filter definiert:

$$\tilde{f} = \frac{\bar{\rho} f}{\bar{\rho}}.$$

Im Gegensatz zum top-hat-Filter G kann die Reihenfolge von Filterung und partieller Ableitung beim Favre-Filter nicht vertauscht werden. Die Anwendung der Filterung auf die Kontinuitäts- und Impulsgleichung aus (2) erfolgt direkt und ergibt:

$$\partial_t \bar{\rho} + \sum_j \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad (3)$$

$$\partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \sum_j \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \partial_i \bar{p} - \sum_j \partial_j \check{\sigma}_{ij} = - \sum_j \partial_j \bar{\rho} \tau_{ij} + \sum_j \partial_j (\bar{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij}). \quad (4)$$

Die auftretenden neuen Terme entstehen aufgrund der Nichtlinearität der Impulsgleichungen und der Eigenschaften des Favre-Filters und sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j, \\ \tilde{T} &= \kappa M^2 \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}}, \\ \check{\sigma}_{ij} &= \frac{\mu(\tilde{T})}{Re} S_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}). \end{aligned}$$

Die Energiegleichung wird nicht gefiltert, sondern es wird für die aufgelöste Energie \check{E} eine Erhaltungsgleichung hergeleitet. Dafür werden folgende zwei Definitionen genutzt:

$$\begin{aligned} \check{E} &= \frac{\bar{p}}{\kappa - 1} + \frac{1}{2} \sum_i \bar{\rho} \tilde{u}_i^2, \\ \check{q}_j &= \frac{\mu(\tilde{T})}{(\kappa - 1) Re Pr M^2} \partial_j \tilde{T}. \end{aligned} \quad (5)$$

Die Erhaltungsgleichung der Energie entsteht nun aus der partiellen zeitlichen Ableitung von (5) und einer Entwicklungsgleichung für den Druck. Um die Darstellung der Herleitung zu vereinfachen, wird die Einsteinsche Summenkonvention, d.h. Summation über wiederholte Indizes, und die Gleichung (3) genutzt. Es entsteht

$$\partial_t \check{E} = \underbrace{\partial_t \frac{\bar{p}}{\kappa - 1}}_{E_{int}} + \underbrace{\partial_t \left(\frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \right)}_{E_{kin}}.$$

Die partiellen zeitlichen Ableitungen der beiden Energieanteile können wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
\partial_t E_{kin} &= \frac{1}{2} \partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i) \\
&= \frac{1}{2} (2 \tilde{u}_i \partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i) - \tilde{u}_i^2 \partial_t \bar{\rho}) \\
&= \tilde{u}_i \partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{1}{2} \tilde{u}_i^2 \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j), \\
\partial_t E_{int} &= \partial_t \frac{\bar{p}}{\kappa - 1}, \\
&= -\partial_j \bar{q} + \overline{\sigma_{ij} \partial_j u_i} - \frac{1}{\kappa - 1} \overline{u_j \partial_j p} - \frac{\kappa}{\kappa - 1} \overline{p \partial_j u_j}.
\end{aligned}$$

Damit entsteht unter Nutzung von (4)

$$\begin{aligned}
0 &= \partial_t \check{E} - \partial_t \frac{\bar{p}}{\kappa - 1} - \frac{1}{2} \partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i) \\
&= \partial_t \check{E} - \tilde{u}_i \partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i) - \frac{1}{2} \tilde{u}_i^2 \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j) + \partial_j \bar{q} - \overline{\sigma_{ij} \partial_j u_i} + \frac{1}{\kappa - 1} \overline{u_j \partial_j p} + \frac{\kappa}{\kappa - 1} \overline{p \partial_j u_j} \\
&= \partial_t \check{E} + \tilde{u}_i (\partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \partial_i \bar{p} - \partial_j \check{\sigma}_{ij} + \partial_j \bar{\rho} \tau_{ij} - \partial_j (\bar{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij})) \\
&\quad - \frac{1}{2} \tilde{u}_i^2 \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j) + \partial_j \bar{q} - \overline{\sigma_{ij} \partial_j u_i} + \frac{1}{\kappa - 1} \overline{u_j \partial_j p} + \frac{\kappa}{\kappa - 1} \overline{p \partial_j u_j}.
\end{aligned}$$

Nach Umordnen, Einsetzen der Subgridterme und Vereinfachen der rechten Seite entsteht

$$\begin{aligned}
&\partial_t \check{E} + \partial_j \check{q}_j \underbrace{-\check{\sigma}_{ij} \partial_j \tilde{u}_i - \tilde{u}_i \partial_j \check{\sigma}_{ij}}_{-\partial_j (\tilde{u}_i \check{\sigma}_{ij})} - \underbrace{\frac{1}{2} \tilde{u}_i^2 \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j) + \tilde{u}_i \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}_{\frac{1}{2} \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i^2)} + \underbrace{\frac{\kappa}{\kappa - 1} \tilde{u}_j \partial_j \bar{p} + \frac{\kappa}{\kappa - 1} \bar{p} \partial_j \tilde{u}_j}_{\frac{\kappa}{\kappa - 1} \partial_j (\bar{p} \tilde{u}_j)} \\
&\quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\partial_j ((\check{E} + \bar{p}) \tilde{u}_j)} \\
&= -\tilde{u}_i \partial_j (\bar{\rho} \tau_{ij}) - \frac{1}{\kappa - 1} \partial_j (\overline{u_j p} - \tilde{u}_j \bar{p}) - (\overline{p \partial_j u_j} - \bar{p} \partial_j \tilde{u}_j) \\
&\quad + (\overline{\sigma_{ij} \partial_j u_i} - \check{\sigma}_{ij} \partial_j \tilde{u}_i) + \tilde{u}_i \partial_j (\bar{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij}) + \partial_j (\check{q}_j - \bar{q}_j).
\end{aligned}$$

Es resultiert damit das folgende LES-Gleichungssystem, welches ein Navier-Stokes Gleichungssystem in den gefilterten, bzw. aufgelösten Variablen $\bar{\rho}$, $\bar{\rho} \tilde{u}_1$, $\bar{\rho} \tilde{u}_2$, $\bar{\rho} \tilde{u}_3$, \check{E} ist und dessen rechten Seite die SGS-Terme beinhaltet.

$$\begin{aligned}
&\partial_t \bar{\rho} + \sum_j \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \\
&\partial_t (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \sum_j \partial_j (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \partial_i \bar{p} - \sum_j \partial_j \check{\sigma}_{ij} = -\sum_j \partial_j \bar{\rho} \tau_{ij} + \sum_j \partial_j (\bar{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij}) \quad (6) \\
&\partial_t \check{E} + \sum_j \partial_j ((\check{E} + \bar{p}) \tilde{u}_j) - \sum_{i,j} \partial_j (\tilde{u}_i \check{\sigma}_{ij}) + \sum_j \partial_j \check{q}_j = -\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \sum_{i,j} \tilde{u}_i \partial_j (\bar{\rho} \tau_{ij}) & \alpha_4 &= \sum_{i,j} (\overline{\sigma_{ij} \partial_j u_i} - \check{\sigma}_{ij} \partial_j \tilde{u}_i) \\
\alpha_2 &= \frac{1}{\kappa-1} \sum_j \partial_j (\overline{u_j \bar{p}} - \tilde{u}_j \bar{p}) & \alpha_5 &= \sum_{i,j} \tilde{u}_i \partial_j (\bar{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij}) \\
\alpha_3 &= \sum_j (\overline{p \partial_j u_j} - \bar{p} \partial_j \tilde{u}_j) & \alpha_6 &= \sum_j \partial_j (\check{q}_j - \bar{q}_j)
\end{aligned}$$

In der expliziten Modellierung müssen für die nicht geschlossenen Terme der rechten Seite in (6) Modelle aufgestellt werden. In der Praxis werden nur die wichtigsten modelliert, d.h. τ_{ij} und $\alpha_1, \dots, \alpha_4$. In [7] wird gezeigt, dass in kompressiblen Mischungsschichten die restlichen Terme um eine Größenordnung kleiner sind und daher vernachlässigt werden können.

2.2 Implizite Modellierung und die Analyse der modifizierten Differentialgleichung - MDEA

Jedes in den gefilterten Variablen ausgedrückte Diskretisierungsverfahren kann als implizites SGS-Modell interpretiert werden. Für die Entscheidung, ob dieses implizite Modell sinnvoll ist, kann der formale Vergleich zwischen einem expliziten und dem impliziten Modell genutzt werden. Dies kann mit Hilfe der Analyse der modifizierten Differentialgleichung (modified-differential equation analysis - MDEA) geschehen. Die dafür nötigen Grundlagen werden in diesem Abschnitt erläutert.

Nach der Faltung mit G entsteht aus (1) die Gleichung

$$\partial_t \bar{\mathbf{v}} + G * \partial_1 \mathbf{F}_1(\mathbf{v}) + G * \partial_2 \mathbf{F}_2(\mathbf{v}) + G * \partial_3 \mathbf{F}_3(\mathbf{v}) =: \partial_t \bar{\mathbf{v}} + G * \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{v}) = 0. \quad (7)$$

In der Rechnung ist nur der gefilterte Zustandsvektor $\bar{\mathbf{v}}$ bekannt und die Größe \mathbf{v} ist rein formal definiert durch

$$\mathbf{v} = G^{-1} * \bar{\mathbf{v}}.$$

Diese Entfaltung kann nur näherungsweise gelöst werden. Der approximative Entfaltungsoperator wird mit \widehat{G}^{-1} bezeichnet und die damit entfaltete Größe $\hat{\mathbf{v}} := \widehat{G}^{-1}(\bar{\mathbf{v}})$. Die Integration über dem Raumgebiet mittels des Operators G wird ebenfalls nur näherungsweise mit einem numerischen Integrationsschema gelöst. Dies wird mit der Schreibweise \widehat{G} für die approximative Filterung beachtet. Als letztes wird zur Modellierung die Flussfunktion \mathbf{F} durch eine numerische Flussfunktion $\widehat{\mathbf{F}}$ ersetzt. Damit entsteht die modifizierte Differentialgleichung

$$\partial_t \bar{\mathbf{v}} + \widehat{G} * \operatorname{div} \widehat{\mathbf{F}}(\hat{\mathbf{v}}) = 0, \quad (8)$$

die für die Rechnungen genutzt wird. Ein implizites Modell wird mit der speziellen Wahl des approximativen Entfaltungsoperators \widehat{G}^{-1} , der numerischen Integration \widehat{G} und der numerischen Flussfunktion $\widehat{\mathbf{F}}$ festgelegt.

In der MDEA wird nun der numerische Fehler betrachtet, der aufgrund der Rechenvorschrift (8) entsteht, die anstelle von (7) genutzt wird. Dieser numerische Fehler ε_N lässt sich wie folgt berechnen:

$$\partial_t \bar{\mathbf{v}} + G * \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{v}) = G * \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{v}) - \widehat{G} * \operatorname{div} \widehat{\mathbf{F}}(\hat{\mathbf{v}}) =: \varepsilon_N. \quad (9)$$

Die linke Seite von (9) entspricht der linken Seite der LES-Gleichungen (6). Wenn die rechten Seiten ebenfalls näherungsweise übereinstimmen, so enthält das Modell, welches durch \widehat{G} , \widehat{G}^{-1} und $\widehat{\mathbf{F}}$ gegeben ist, ein implizites SGS-Modell. Um dies nachzuweisen, kann z.B. ein bereits existierendes explizites Modell anhand seiner Fehlerterme nachgebildet werden. Dies wurde im 1D-Fall in [1] am Beispiel des Smagorinsky-Modells durchgeführt. Es können aber auch theoretische Aussagen bezüglich erwarteter Fehlerterme in ε_N für die Modellierung genutzt werden.

Für diese Diplomarbeit wurde die MDEA mit Hilfe des Programmpaketes MAPLE¹ durchgeführt. Das genutzte Skript ist auf beiliegender CD zu finden.

¹MAPLE 9, Waterloo Maple Inc., <http://www.maplesoft.com>

3 Definition und Analyse des Entfaltungsoptors

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Definition und Analyse des in [1] vorgeschlagenen Entfaltungsoptors im Höherdimensionalen.

3.1 Herleitung des Entfaltungsoptors

Der Entfaltungsoptor soll approximativ die mittels Faltung durchgeführte Integralmitelung

$$\bar{f} = G * f$$

nach der ungefilterten Variablen f umkehren. Dabei werden die ENO-Methoden (essentially non-oscillatory), die in [9] eingeführt wurden, und deren Erweiterung als WENO-Methoden (weighted ENO) genutzt. Eine Übersicht über diese Verfahren und die damit verbundenen Entfaltungen bietet [10].

Der Grundgedanke besteht darin, mittels einer geeigneten polynomialen Interpolation aus mehreren gefilterten Werten die ungefilterten Werte in den Zellen wiederherzustellen.

3.1.1 Rekonstruktion in 2D

Im Folgenden wird der Entfaltungsoptor im Zweidimensionalen hergeleitet. Die ein-dimensionale Herleitung ist z.B. in [1] zu finden und die analoge Erweiterung auf den 3D-Fall wird im nächsten Abschnitt gezeigt.

Für die Rekonstruktion sind die Integralmittel einer beliebigen Funktion $f(x, y)$ über den Zellen I_{ij} der Gebietszerlegung gegeben:

$$\bar{f}_{ij} = \frac{1}{h_{x_i} h_{y_j}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(\xi, \eta) d\Omega, \quad \forall i, j.$$

Gesucht ist nun ein Polynom $p_{ij}^{r,s}(x, y)$ vom Grad $k - 1$, welches f im Inneren der Zelle I_{ij} mit Ordnung k approximiert, d.h.:

$$|p_{ij}^{r,s}(x, y) - f(x, y)| = O(h^k), \quad \forall (x, y) \in I_{ij},$$

mit $h = \max_{\forall i, \forall j}(h_{x_i}, h_{y_j})$. Das gesuchte Polynom soll dabei als eine Kombination der Zellmittel definiert werden:

$$p_{ij}^{r,s}(x, y) = \sum_{\xi=0}^{k-1} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{kr s \xi \eta}(x, y) \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}.$$

Für die Definition des Polynoms werden $k \times k$ zusammenhängende Zellen genutzt. Für die Wahl eines solchen Stencils S (engl. für Schablone), welcher die Zelle I_{ij} enthalten soll, stehen somit mehrere Möglichkeiten zur Wahl, die mit Hilfe der Parameter (r, s) ausgewählt werden. Dabei gibt r die Verschiebung der x -Komponente und s die Verschiebung

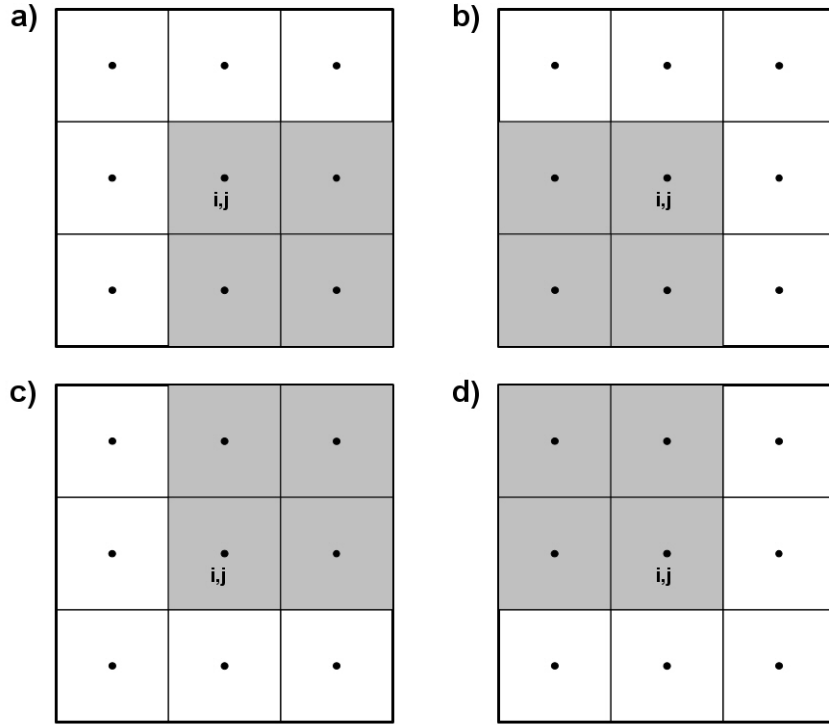


Abbildung 1: Mögliche Stencils S^{rs} für $k=2$, a) S^{00} , b) S^{10} , c) S^{01} , d) S^{11}

der y -Komponente an. Die Abbildung 1 zeigt die Möglichkeiten für S^{rs} für den Fall $k = 2$. Die Faktoren $c_{krs\xi\eta}(x, y)$ sollen dabei von der Funktion f unabhängig sein und nur von der Genauigkeitsordnung k , den Zelldimensionen h_x und h_y , der Position x, y innerhalb der Zelle I_{ij} und dem Stencil S^{rs} der entsprechenden Zellmittel abhängen.

Um diese Faktoren zu erhalten, wird zunächst die Stammfunktion von f betrachtet:

$$F(x, y) = \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y f d\Omega.$$

Die Werte von F in den Eckpunkten der Zellen sind aufgrund der Integralmittel \bar{f}_{ij} bekannt:

$$F\left(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}\right) = \int_{-\infty}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f d\Omega = \sum_{\eta=-\infty}^j \sum_{\xi=-\infty}^i \bar{f}_{\xi\eta} h_{x\xi} h_{y\eta}.$$

Das Polynom $P_{ij}(x, y)$ wird definiert als Lagrange-Interpolierende der Stammfunktion F in den Zelleckpunkten

$$\left\{ \left(x_{i-r+m-\frac{1}{2}}, y_{j-s+n-\frac{1}{2}} \right), m = 0, \dots, k, n = 0, \dots, k \right\}$$

des Stencils S^{rs} , welche innerhalb der Zelle I_{ij} mit der Ordnung k die Funktion F approximiert. Damit ist das Polynom P_{ij}^{rs} eindeutig bestimmt zu

$$P_{ij}^{rs}(x, y) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^k F\left(x_{i-r+m-\frac{1}{2}}, y_{j-s+n-\frac{1}{2}}\right) \cdot \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \frac{x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}{x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}} \prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \frac{y - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}}{y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}}. \quad (10)$$

Da

$$\sum_{m=0}^k \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \frac{x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}{x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}} = \sum_{n=0}^k \prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \frac{y - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}}{y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}} = 1$$

und

$$\begin{aligned} & F\left(x_{i+m-\frac{1}{2}}, y_{j+n-\frac{1}{2}}\right) - F\left(x_{i+m-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}\right) - \\ & F\left(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j+n-\frac{1}{2}}\right) + F\left(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}\right) = \sum_{\xi=0}^{m-1} \sum_{\eta=0}^{n-1} \bar{f}_{i+\xi, j+\eta} h_{x_\xi} h_{y_\eta} \end{aligned}$$

gilt, kann (10) wie folgt umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} & P_{ij}^{rs}(x, y) - F\left(x_{i-r+m-\frac{1}{2}}, y_{j-s-\frac{1}{2}}\right) - F\left(x_{i-r-\frac{1}{2}}, y_{j-s+n-\frac{1}{2}}\right) + F\left(x_{i-r-\frac{1}{2}}, y_{j-s-\frac{1}{2}}\right) = \\ & \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^k \sum_{\xi=0}^{m-1} \sum_{\eta=0}^{n-1} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta} h_{x_\xi} h_{y_\eta} \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \frac{x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}{x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}} \prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \frac{y - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}}{y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}} = \\ & \sum_{\xi=0}^{k-1} \sum_{\eta=0}^{k-1} \sum_{m=\xi+1}^k \sum_{n=\eta+1}^k h_{x_\xi} h_{y_\eta} \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \frac{x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}{x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}} \prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \frac{y - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}}{y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}. \end{aligned} \quad (11)$$

Da das ursprünglich gesuchte Polynom p_{ij}^{rs} die Größe f approximieren soll und f die gemischte Ableitung von F ist, wird (11) nach den beiden Variablen x und y abgeleitet:

$$\begin{aligned} p_{ij}^{rs}(x, y) & := \sum_{\xi=0}^{k-1} \sum_{\eta=0}^{k-1} \sum_{m=\xi+1}^k \sum_{n=\eta+1}^k h_{x_\xi} h_{y_\eta} \cdot \\ & \frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \prod_{\substack{l_2=0 \\ l_2 \neq l, m}}^k \left(x - x_{i-r+l_2-\frac{1}{2}}\right) \sum_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \prod_{\substack{t_2=0 \\ t_2 \neq t, n}}^k \left(y - y_{j-s+t_2-\frac{1}{2}}\right)}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \left(x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}\right) \prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \left(y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}}\right)} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}. \end{aligned}$$

Mit der Definition von

$$c_{krs\xi\eta}^{ij}(x, y) = \sum_{m=\xi+1}^k \sum_{n=\eta+1}^k h_{x_\xi} h_{y_\eta} \frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \prod_{\substack{l_2=0 \\ l_2 \neq l, m}}^k \left(x - x_{i-r+l_2-\frac{1}{2}} \right)}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \left(x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}} \right)} \frac{\sum_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \prod_{\substack{t_2=0 \\ t_2 \neq t, n}}^k \left(y - y_{j-s+t_2-\frac{1}{2}} \right)}{\prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \left(y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}} \right)} \quad (12)$$

ist das gesuchte Polynom p_{ij}^{rs} vollständig definiert:

$$p_{ij}^{rs}(x, y) = \sum_{\xi=0}^{k-1} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{krs\xi\eta}^{ij}(x, y) \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}. \quad (13)$$

Das Gewicht $c_{krs\xi\eta}^{ij}$ in (12) lässt sich umschreiben und damit die Analogie der eindimensionalen Entfaltungen zu den höherdimensionalen zeigen, siehe auch [10]:

$$c_{krs\xi\eta}^{ij}(x, y) = \underbrace{\sum_{m=\xi+1}^k h_{x_\xi} \frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \prod_{\substack{l_2=0 \\ l_2 \neq l, m}}^k \left(x - x_{i-r+l_2-\frac{1}{2}} \right)}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \left(x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}} \right)}}_{c_{kr\xi}^i(x)} \underbrace{\sum_{n=\eta+1}^k h_{y_\eta} \frac{\sum_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \prod_{\substack{t_2=0 \\ t_2 \neq t, n}}^k \left(y - y_{j-s+t_2-\frac{1}{2}} \right)}{\prod_{\substack{t=0 \\ t \neq n}}^k \left(y_{j-s+n-\frac{1}{2}} - y_{j-s+t-\frac{1}{2}} \right)}}_{\tilde{c}_{ks\eta}^j(y)}.$$

Damit entsteht aus (13)

$$p_{ij}^{rs}(x, y) = \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^i(x) \sum_{\eta=0}^{k-1} \tilde{c}_{ks\eta}^j(y) \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta} \quad (14)$$

und die 2D-Rekonstruktion kann als Nacheinanderausführung von zwei 1D-Rekonstruktionen aufgefasst werden.

Der Schwerpunkt dieser Diplomarbeit lag in der Untersuchung isotroper Strömungen, d.h. Strömungen, die keine bevorzugte Richtung besitzen und periodisch in alle Raumrichtungen sind. Daher wird für die weitere Untersuchung, wie auch in der Simulation, ein in jede Raumrichtung äquidistantes Gitter zugrunde gelegt, d.h. $h_{x_i} = h_x$, $h_{y_j} = h_y$ und $h_{z_l} = h_z$ für alle i, j, l , und periodische Randbedingungen angenommen. Die Gewichte $c_{kr\xi}(x)$ vereinfachen sich für $x = x_i + \lambda h_x$ mit $-\frac{1}{2} \leq \lambda \leq \frac{1}{2}$ zu

$$c_{kr\xi}^\lambda := c_{kr\xi}^i(x) = \sum_{m=\xi+1}^k \frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k \prod_{\substack{l_2=0 \\ l_2 \neq l, m}}^k \left(\lambda - (l_2 - r - \frac{1}{2}) \right)}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^k (m - l)}. \quad (15)$$

Eine analoge Beziehung gilt für $\tilde{c}_{ks\eta}^\lambda$ in der zweiten Raumrichtung. Die Gewichte sind somit im äquidistanten Fall konstant für alle Punkte des Gitters und können im Vorfeld der Programmierung berechnet werden.

Bislang wurde auf die Wahl des Stencils S^{rs} nicht eingegangen und die Gleichung (14) beschreibt die Rekonstruktion für einen festen Stencil S^{rs} . Dies entspricht dem ENO-Schema, bei dem aus der Menge aller Rekonstruktionen eine ausgewählt wird. Die ausgewählte Rekonstruktion nutzt dabei den Stencil, dessen Punktmenge ein Glattheitsmaß minimiert. Das WENO-Schema nutzt im Gegensatz dazu alle Rekonstruktionen, indem die möglichen Rekonstruktionen adaptiv gewichtet und linear kombiniert werden. Das in [1] vorgeschlagene implizite SGS-Modell beinhaltet das XWENO-Schema (extended WENO), eine Erweiterung des WENO-Schemas, in dem zusätzlich über alle $k = 1, \dots, K$ kombiniert wird.

Das WENO-Schema in 2D wird analog zum ENO-Schema als Nacheinanderausführung von zwei 1D WENO-Schemata aufgefasst. Die adaptiven Gewichte ω für die Linearkombination im WENO-Schema werden mit Hilfe eines Glattheitsmaßes bestimmt. Eine Möglichkeit dafür ist die Totalvariation (TV), welche in x -Richtung für \bar{f} als

$$\beta_{rsk}^x := \sum_{m=0}^{k-2} |\bar{f}_{i+m+r+1,j+s} - \bar{f}_{i+m+r,j+s}|$$

definiert ist. Ein anderes Maß ist von G.-S. Jiang und C.-W. Shu in [11] vorgestellt worden. Es ist definiert durch die Vorschrift:

$$\beta_{rsk}^x := \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} h_x^{2l-1} (\partial_1^l p_{ij}^{rs}(x))^2 dx. \quad (16)$$

Für $k = 2$ und 3 entstehen mit (16) die folgenden Maße:

$$\begin{aligned} \beta_{0,s,2}^x &= (\bar{f}_{i+1,j+s} - \bar{f}_{i,j+s})^2, \\ \beta_{1,s,2}^x &= (\bar{f}_{i,j+s} - \bar{f}_{i-1,j+s})^2, \\ \beta_{0,s,3}^x &= \frac{13}{12}(\bar{f}_{i,j+s} - 2\bar{f}_{i+1,j+s} + \bar{f}_{i+2,j+s})^2 + \frac{1}{4}(3\bar{f}_{i,j+s} - 4\bar{f}_{i+1,j+s} + \bar{f}_{i+2,j+s})^2, \\ \beta_{1,s,3}^x &= \frac{13}{12}(\bar{f}_{i-1,j+s} - 2\bar{f}_{i,j+s} + \bar{f}_{i+1,j+s})^2 + \frac{1}{4}(\bar{f}_{i-1,j+s} - \bar{f}_{i+1,j+s})^2, \\ \beta_{2,s,3}^x &= \frac{13}{12}(\bar{f}_{i-2,j+s} - 2\bar{f}_{i-1,j+s} + \bar{f}_{i,j+s})^2 + \frac{1}{4}(\bar{f}_{i-2,j+s} - 4\bar{f}_{i-1,j+s} + 3\bar{f}_{i,j+s})^2. \end{aligned}$$

Mit dem gewählten β -Maß und einem festen, von der Entfaltungsstelle (x, y) abhängigen Parameter γ wird die Größe

$$\alpha_{krs}^x = \frac{\gamma_{kr}^{\lambda_x}}{(\varepsilon + \beta_{rsk}^x)^2}$$

definiert. Der Wert ε mit $0 < \varepsilon \ll 1$ dient dabei zur Verhinderung der Division durch Null. Damit die Summe der Gewichte 1 ergibt, werden die Gewichte ω als

$$\omega_{krs}^x = \frac{\alpha_{krs}^x}{\sum_{t=0}^{k-1} \alpha_{kts}^x} \quad (17)$$

definiert. Damit in (17) keine Division durch Null auftritt, muss gefordert werden, dass für die freien Parameter $\gamma > 0$ gilt. Eine Alternative dazu wird in [12] vorgestellt.

Die Gewichte für die y -Richtung werden analog zu (17) definiert:

$$\omega_{krs}^y = \frac{\alpha_{krs}^y}{\sum_{t=0}^{k-1} \alpha_{krt}^y}.$$

Mit diesen Überlegungen ist die WENO-Methode vollständig definiert und die XWENO-Erweiterung als Linearkombination über k kann als Vorschrift notiert werden:

$$f_{i+\lambda_x, j+\lambda_y} = \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{r=0}^{k-1} \sum_{s=0}^{k-1} \omega_{krs}^x \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^{\lambda_x} \omega_{krs}^y \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{ks\eta}^{\lambda_y} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}. \quad (18)$$

Die Entfaltung wird benötigt, um den numerischen Fluss durch die Seiten der Zelle I_{ij} zu definieren. Für die anschließende numerische Integration wird eine Quadraturformel angewandt, die als Stützstellen die Seitenmittelpunkte nutzt. Somit werden nur die Rekonstruktionen an den vier Punkten $\{(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j), (x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}})\}$ benötigt. In jedem der Randpunkte einer Zelle kann die Approximation entweder von innen oder von außen durchgeführt werden, wie Abbildung 2 illustriert. Aufgrund der Nacheinanderausführung der 1D-Entfaltungen, sind die Parameter γ^{λ_x} die gleichen wie γ^{λ_y} für $\lambda_x = \lambda_y$. Somit existieren die Gewichte ω (und die freien Parameter γ) in zwei Sätzen, einmal γ^+ für die 1D-Entfaltung am linken Zellrand und einmal γ^- für die 1D-Entfaltung am rechten. Zusätzlich muss für die jeweils zweite Komponente eine Rekonstruktion in der Mitte des Intervalls vorgenommen werden. Dafür wird ein dritter Satz benötigt, welcher mit γ^0 bezeichnet wird. Zusammenfassend lassen sich die vier zu rekonstruierenden Werte der Zelle I_{ij} wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} f_{i+\frac{1}{2}, j}^- &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{r=0}^{k-1} \sum_{s=0}^{k-1} \omega_{krs}^{x-} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r,\xi} \omega_{krs}^{y0} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{k,s-\frac{1}{2},\eta} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}, \\ f_{i-\frac{1}{2}, j}^+ &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{r=0}^{k-1} \sum_{s=0}^{k-1} \omega_{krs}^{x+} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r-1,\xi} \omega_{krs}^{y0} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{k,s-\frac{1}{2},\eta} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}, \\ f_{i, j+\frac{1}{2}}^- &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{s=0}^{k-1} \sum_{r=0}^{k-1} \omega_{krs}^{y-} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{k,s,\eta} \omega_{krs}^{x0} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r-\frac{1}{2},\xi} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}, \\ f_{i, j-\frac{1}{2}}^+ &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{s=0}^{k-1} \sum_{r=0}^{k-1} \omega_{krs}^{y+} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{k,s-1,\eta} \omega_{krs}^{x0} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r-\frac{1}{2},\xi} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta}. \end{aligned} \quad (19)$$

Die Abbildung 3 zeigt symbolisch die Vorgehensweise für die WENO-Entfaltungen in

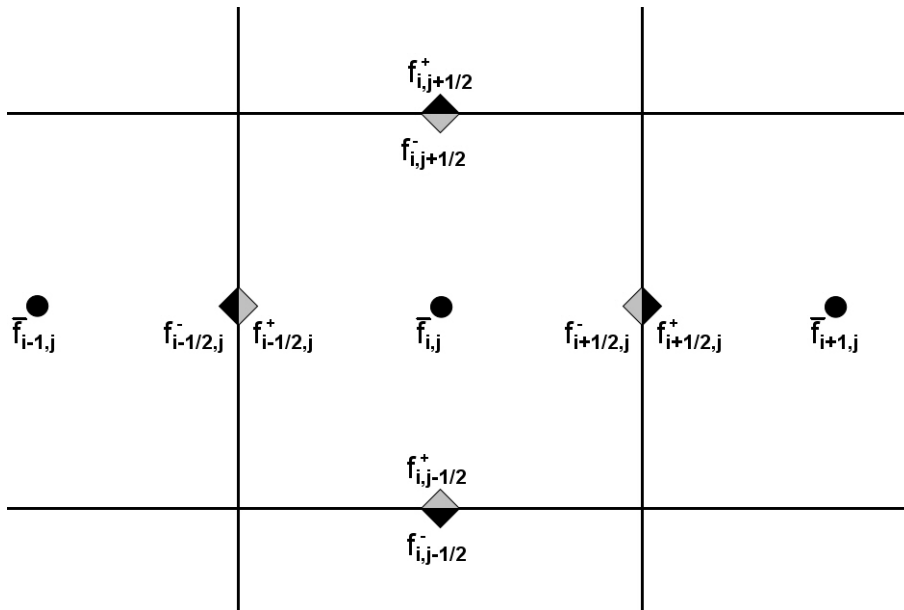


Abbildung 2: Rekonstruktion von innerhalb und außerhalb für Zelle I_{ij}

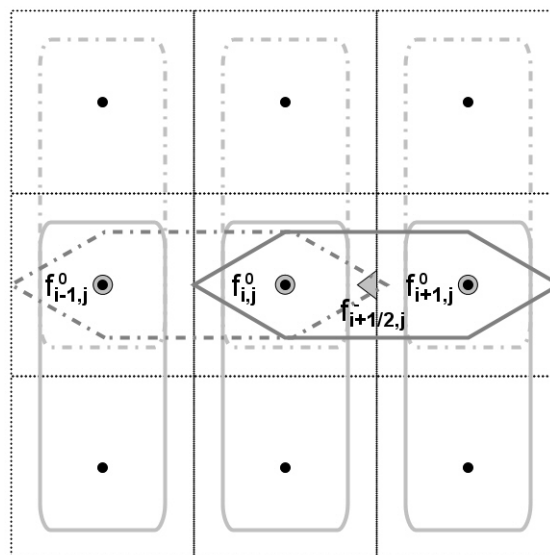


Abbildung 3: 2D-WENO-Entfaltung als 1D Entfaltungen für $f_{i+\frac{1}{2},j}^-$ mit $k = 2$

2D am Beispiel von $f_{i+\frac{1}{2},j}^-$ für $k = 2$. Dabei stellen die schwarzen Kreise die gefalteten Originaldaten \bar{f}_{ij} dar. Die abgerundeten Vierecke illustrieren die zentralen Entfaltungen in y -Richtung, deren Ergebnisse die grauen Kreise sind. Auf diese Zwischenergebnisse wird nun die $-$ -Entfaltung, symbolisiert durch die waagerechten Sechsecke, angewandt und der gesuchte Wert, das graue Dreieck, entsteht.

Für (19) wurde zusätzlich genutzt, dass für (15) mit $c_{k,r,\xi} := c_{kr\xi}^{\frac{1}{2}}$ die beiden Beziehungen gelten:

$$\begin{aligned} c_{kr\xi}^{-\frac{1}{2}} &= c_{k,r-1,\xi} \\ c_{kr\xi}^0 &= c_{k,r-\frac{1}{2},\xi}. \end{aligned}$$

Damit müssen nur die Werte für $c_{k,r,\xi}$ mit $r = -1, -\frac{1}{2}, \dots, k - \frac{3}{2}, k - 1$ berechnet werden. Diese können vor der Programmierung erzeugt werden und sind vom Gitter unabhängig. Im Falle nichtäquidistanter Gitter muss eine Funktion zur Berechnung der Faktoren definiert werden, die vor der Rechnung die vom Gitter abhängigen Faktoren berechnet. Die Reihenfolge der Summationen in (19) wurde so gewählt, dass die zentrale Entfaltung zuerst durchgeführt wird. In der Implementation wird zuerst das gesamte Feld entlang der zweiten Richtung zentral entfaltet und das daraus entstehende Feld genutzt, um die Entfaltung auf die Randpunkte zu vollenden. Damit werden Redundanzen in der Berechnung minimiert.

3.1.2 Erweiterung auf 3D

Die Herleitung des 3D Entfaltungsooperators verläuft analog der Herleitung im 2D. Die entstehende Formel für die Rekonstruktion mit dem XWENO-Schema ist dann die folgende:

$$f_{i+\lambda_x, j+\lambda_y, l+\lambda_z} = \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{r=0}^{k-1} \sum_{s=0}^{k-1} \sum_{t=0}^{k-1} \omega_{krst}^x \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^{\lambda_x} \omega_{krst}^y \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{ks\eta}^{\lambda_y} \omega_{krst}^z \sum_{\psi=0}^{k-1} c_{kt\psi}^{\lambda_z} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta, l-t+\psi} \quad (20)$$

Da auch hier nur die Werte an den sechs Zellwandmittelpunkten zur Flussberechnung entfaltet werden müssen, lässt sich (20) analog zu (19) vereinfachen. Als Beispiel ist für den Punkt $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_l)$ die Entfaltung nachfolgend angegeben.

$$f_{i+\frac{1}{2}, j, l}^- = \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} \sum_{r=0}^{k-1} \sum_{s=0}^{k-1} \sum_{t=0}^{k-1} \omega_{krst}^{x-} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r,\xi} \omega_{krst}^{y0} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{k,s-\frac{1}{2},\eta} \omega_{krst}^{z0} \sum_{\psi=0}^{k-1} c_{k,t-\frac{1}{2},\psi} \bar{f}_{i-r+\xi, j-s+\eta, l-t+\psi}$$

Implementiert wird dies in 3 Schritten. Zuerst werden die gefilterten Daten entlang der dritten Richtung zentral entfaltet. Die daraus resultierenden Daten werden entlang der zweiten Richtung zentral entfaltet und diese abschließend entlang der ersten Richtung auf den Zellrand.

3.2 Analyse des Entfaltungoperators

Wie im vorherigen Abschnitt zu sehen, lässt sich der WENO-Entfaltungoperator in 2D oder 3D als Hintereinanderausführung von eindimensionalen Rekonstruktionen betrachten. Daher wird die Analyse für den 1D-Fall durchgeführt und der XWENO-Fall gesondert betrachtet. Zur Untersuchung des Entfaltungoperators \widehat{G}^{-1} wird die Konsistenzanalyse in Teilprobleme aufgespalten.

Analysiert wird der Fehlerterm

$$\widehat{G}^{-1}(G * u) - u.$$

Dabei ist \widehat{G}^{-1} durch folgende Vorschrift definiert

$$\widehat{G}^{-1}(\bar{u}) := \sum_{r=0}^{k-1} \omega_{k,r} \sum_{\xi=0}^{k-1} \sum_{\mu=\xi+1}^k \underbrace{\frac{\sum_{\substack{p=0 \\ p \neq \mu}}^k \prod_{\substack{\nu=0 \\ \nu \neq p, \mu}}^k \lambda + r - \nu + \frac{1}{2}}{\prod_{\substack{\nu=0 \\ \nu \neq \mu}}^k \mu - \nu}}_{c_{kr\xi}^\lambda} \bar{u}_{i-r+\xi}$$

und bildet $\bar{u} = G * u$ auf \hat{u} im Bereich $x_{i-1/2} \leq x_i + \lambda h \leq x_{i+1/2}$ für $\lambda \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ ab. Im ersten Teil der Analyse wird der Fehler des ENO-Verfahrens

$$\sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^\lambda \bar{u}_{i-r+\xi} - u(x_i + \lambda h) \quad (21)$$

bei festem r betrachtet. Der zweite Teil beschäftigt sich mit

$$\sum_{r=0}^{k-1} \omega_{k,r} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^\lambda \bar{u}_{i-r+\xi} - u(x_i + \lambda h), \quad (22)$$

also mit dem WENO-Verfahren. Der dritte Teil geht kurz auf das XWENO-Verfahren und dessen formale Fehlerordnung ein.

Für die Konsistenzanalyse wird die Taylorentwicklung von \bar{u} ausgedrückt durch $\partial_x^n u$ benötigt. Die Taylorreihe lautet formal:

$$\bar{u}(x_i + \eta h) = \sum_{n=0}^{\infty} \partial_x^n u(x_i) \frac{h^n}{(n+1)!} \left[\left(\eta + \frac{1}{2} \right)^{n+1} - \left(\eta - \frac{1}{2} \right)^{n+1} \right].$$

Teil 1 ENO

Mittels Taylorreihenentwicklung von u und \bar{u} wird der Konsistenzfehler von (21) untersucht. Die entstehende Beziehung ist:

$$\sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^\lambda \bar{u}_{i-r+\xi} - u(x_i + \lambda h) = \sum_{n=0}^{\infty} \partial_x^n u(x_i) \frac{h^n}{(n+1)!} \left[\sum_{\xi=0}^{k-1} c_{kr\xi}^\lambda \left((-r + \xi + \frac{1}{2})^{n+1} - (-r + \xi - \frac{1}{2})^{n+1} \right) - (n+1)\lambda^n \right].$$

Da der ENO-Entfaltungoperator eine Lagrange-Interpolation vom Grad $k - 1$ ist, gilt für den Interpolationsfehler formal mindestens $O(h^k)$. Tabelle 1 zeigt die führenden Fehlerterme für $k = 1, 2, 3$. Dabei ist zu erkennen, dass für jede Kombination

k	r	Fehlerterme
1	0	$-\partial_x u(x_i)\lambda h$
2	0	$\frac{1}{24}\partial_{xx}u(x_i)(1 + 12\lambda - 12\lambda^2)h^2$
	1	$\frac{1}{24}\partial_{xx}u(x_i)(1 - 12\lambda - 12\lambda^2)h^2$
3	0	$\frac{1}{24}\partial_{xxx}u(x_i)(\lambda - 1)(1 + 8\lambda - 4\lambda^2)h^3$
	1	$\frac{1}{24}\partial_{xxx}u(x_i)\lambda(1 + 8(\lambda + 1) - 4(\lambda + 1)^2)h^3$
	2	$\frac{1}{24}\partial_{xxx}u(x_i)(\lambda + 1)(1 + 8(\lambda + 2) - 4(\lambda + 2)^2)h^3$

Tabelle 1: Führende Fehlerterme für $k=1,2,3$

k, r ausgewählte Punkte $x_i + \lambda h$ existieren, so dass die Entfaltung formal die erhöhte Konsistenzordnung $O(h^{k+1})$ besitzt.

Teil 2 WENO

In diesem Abschnitt wird die gewichtete Kombination der ENO-Terme untersucht, also der Fehler in (22). Zusätzlich wurden für die Untersuchung die Parameter γ normiert:

$$\sum_{r=0}^{k-1} \gamma_{kr} = 1. \quad (23)$$

Dies ist sinnvoll, da die entstehenden Gewichte ω nach (17) ebenfalls normiert sind und somit nur das Verhältnis der Parameter zueinander wichtig ist. Aufgrund von (17) trifft dies auf die Glattheitsfunktion β zu, so dass nur das Verhältnis der β -Werte der einzelnen Stencils zueinander interessiert. Damit können Faktoren, die in allen β vorkommen, weggelassen werden.

Da die Konstante ε um einige Größenordnungen kleiner als h ist und die β im Falle der Totalvariation formal von der Ordnung $O(h)$ bzw. im Falle der Definition nach [11] von der Ordnung $O(h^2)$ sind, können aus oben genannten Gründen die h -Potenzen gekürzt werden. Für die Analyse sind die β somit $O(1)$ und beeinflussen die Konsistenz des Entfaltungoperators nicht. Die maximal erreichbare Konsistenzordnung wird trotzdem von der Glattheitsfunktion beeinflusst. Im Extremfall wird von allen möglichen Termen nur ein einziger genutzt. Damit liegt für diesen Fall als Konsistenzordnung die der zugehörigen ENO-Methode zugrunde. Für den Fall eines glatten Verlaufs, d.h. für $\omega = \gamma$ kann die Ordnung verbessert werden. Dies soll nachfolgend untersucht werden.

(a) $\mathbf{k} = 2$

Für $\lambda = 0$ ergibt sich aufgrund von (23) keine Verbesserung der formalen Fehlerordnung, und sie bleibt $O(h^2) = O(h^{2k-2})$.

Für $\lambda \neq 0$ bietet folgende Wahl der Parameter eine Verbesserung der Fehlerordnung auf $O(h^{2k-1})$:

$$\begin{aligned}\gamma_{2,0} &= \frac{12\lambda^2 + 12\lambda - 1}{24\lambda}, \\ \gamma_{2,1} &= -\frac{12\lambda^2 - 12\lambda - 1}{24\lambda}.\end{aligned}$$

(b) **k = 3**

Für $\lambda = \pm\frac{1}{2} \mp \frac{1}{3}\sqrt{3}$ kann die formale Fehlerordnung nur auf $O(h^4) = O(h^{2k-2})$ verbessert werden. Für die anderen Punkte des Intervalls ist mit der Wahl der Parameter

$$\begin{aligned}\gamma_{3,0} &= \frac{80\lambda^4 + 160\lambda^3 - 120\lambda^2 - 200\lambda + 9}{80(12\lambda^2 - 12\lambda - 1)}, \\ \gamma_{3,1} &= -\frac{960\lambda^6 - 5360\lambda^4 + 4548\lambda^2 - 49}{40(144\lambda^4 - 168\lambda^2 + 1)}, \\ \gamma_{3,2} &= \frac{80\lambda^4 - 160\lambda^3 - 120\lambda^2 + 200\lambda + 9}{80(12\lambda^2 + 12\lambda - 1)}\end{aligned}$$

eine Verbesserung auf $O(h^{2k-1})$ möglich und für $\lambda = 0$ sogar auf $O(h^6) = O(h^{2k})$.

(c) **allgemein**

Mittels obiger Wahl der Parameter können weitere Fehlerterme unterdrückt werden. Damit ist für fast alle Punkte des Intervalls eine formale Konsistenzordnung von $O(h^{2k-1})$ möglich. In den Punkten, in denen die optimalen Parameterfunktionen für λ eine Polstelle besitzen, kann noch die Konsistenzordnung $O(h^{2k-2})$ erreicht werden. Für ungerade k erreicht die Entfaltung bei $\lambda = 0$ die Ordnung $O(h^{2k})$.

Teil 3 XWENO

Die XWENO-Methode wird als 3D-Methode genutzt. Nachdem die WENO-Entfaltungen über alle Raumrichtungen durchgeführt wurden, wird über $k = 1, \dots, K$ summiert. Im allgemeinen wird damit keine Erhöhung der Konsistenzordnung erreicht, da sich die führenden Fehlerterme zweier WENO-Rekonstruktionen nicht überlagern und somit nicht auslöschen können. Dies ist auch nicht bezweckt, da die Motivation der XWENO-Methode in der Beeinflussung der Fehlerterme niedriger Ordnung mit den Parametern γ begründet liegt.

4 Das implizite SGS-Modell

Dieses Kapitel befasst sich mit der Definition des verwendeten impliziten Modells für die Large-Eddy Simulation, dessen Validierung und der MDEA in MAPLE.

4.1 Definition des Modells

Wie bereits in Abschnitt 2.2 erwähnt, wird das implizite SGS-Modell mit drei Festlegungen definiert. Zum Ersten durch den Entfaltungoperator \widehat{G}^{-1} , der die gefilterten Daten näherungsweise entfaltet, zum Zweiten durch den numerischen Fluss \widehat{F} und zum Dritten durch die numerische Integration über die Seitenfläche der Zelle \widehat{G} .

1. Der Entfaltungoperator \widehat{G}^{-1}

Für den Entfaltungoperator wird zuerst die Anzahl der Polynome festgelegt. Um einerseits Möglichkeiten zum Formen der Fehlerterme zu haben, andererseits nicht zu viele Parameter festlegen und optimieren zu müssen, wurde $K = 3$ gesetzt. Damit werden Polynome vom nullten bis zweiten Grad für die Entfaltung verwendet. Mit n_x, n_y und n_z als Anzahl der Punkte in x -, y - und z -Richtung gelten für die in diesem Abschnitt auftretenden Indizes folgende Bereiche:

$$\begin{aligned} k = 1, \dots, K \quad i = 1, \dots, n_x \quad r = 0, \dots, k-1, \\ j = 1, \dots, n_y \quad s = 0, \dots, k-1, \\ l = 1, \dots, n_z \quad t = 0, \dots, k-1. \end{aligned}$$

Die Entfaltung in x -Richtung wird durchgeführt, indem zuerst das gesamte Zustandsfeld $\bar{u}_{i,j,l}$ in z -Richtung zentral entfaltet wird, d.h.:

$$f_{i,j,l}^k := \sum_{t=0}^{k-1} \omega_{kt}^{z0} \sum_{\psi=0}^{k-1} c_{k,t-\frac{1}{2},\psi} \bar{u}_{i,j,l-t+\psi}, \quad \forall i, j, l, k.$$

Die dabei benutzten adaptiven Gewichte ω sind wie in (17) definiert und die Glattheitsmaße β werden für jeden Punkt entlang der z -Richtung mittels der \bar{u} berechnet (hier am Beispiel der Totalvariation):

$$\begin{aligned} \beta_{tk}^z &= \sum_{m=0}^{k-2} |\bar{u}_{i,j,l+m+t+1} - \bar{u}_{i,j,l+m+t}|, \quad \forall t, k, \\ \alpha_{kt}^z &= \frac{\gamma_{kt}^0}{(\varepsilon + \beta_{tk}^z)^2}, \quad \forall t, k, \\ \omega_{kt}^{z0} &= \frac{\alpha_{kt}^z}{\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_{ks}^z}, \quad \forall t, k. \end{aligned}$$

Die Felder $f_{i,j,l}^k$ werden in y -Richtung ebenfalls zentral entfaltet. Es entstehen

$$g_{i,j,l}^k := \sum_{s=0}^{k-1} \omega_{ks}^{y0} \sum_{\eta=0}^{k-1} c_{k,s-\frac{1}{2},\eta} f_{i,j-s+\eta,l}^k, \quad \forall i, j, l, k$$

mit den Gewichten

$$\begin{aligned}\beta_{sk}^y &= \sum_{m=0}^{k-2} |f_{i,j+m+s+1,l}^k - f_{i,j+m+s,l}^k|, \quad \forall s, k, \\ \alpha_{ks}^y &= \frac{\gamma_{ks}^0}{(\varepsilon + \beta_{sk}^y)^2}, \quad \forall s, k, \\ \omega_{ks}^{y0} &= \frac{\alpha_{ks}^y}{\sum_{t=0}^{k-1} \alpha_{kt}^y}, \quad \forall s, k.\end{aligned}$$

Als vorletzter Schritt werden die Felder $g_{i,j,l}^k$ in x -Richtung auf die Seitenflächen entfaltet. Damit entstehen

$$\begin{aligned}h_{i+\frac{1}{2},j,l}^{k-} &:= \sum_{r=0}^{k-1} \omega_{kr}^{x-} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r,\xi} g_{i+r-\xi,j,l}^k, \quad \forall i, j, l, k, \\ h_{i-\frac{1}{2},j,l}^{k+} &:= \sum_{r=0}^{k-1} \omega_{kr}^{x+} \sum_{\xi=0}^{k-1} c_{k,r-1,\xi} g_{i+r-\xi,j,l}^k, \quad \forall i, j, l, k\end{aligned}\tag{24}$$

mit den Gewichten

$$\begin{aligned}\beta_{rk}^x &= \sum_{m=0}^{k-2} |g_{i+m+r+1,j,l}^k - g_{i+m+r,j,l}^k|, \quad \forall r, k, \\ \alpha_{kr}^{x+} &= \frac{\gamma_{kr}^+}{(\varepsilon + \beta_{rk}^x)^2}, \quad \forall r, k, \\ \alpha_{kr}^{x-} &= \frac{\gamma_{kr}^-}{(\varepsilon + \beta_{rk}^x)^2}, \quad \forall r, k, \\ \omega_{kr}^{x+} &= \frac{\alpha_{kr}^{x+}}{\sum_{t=0}^{k-1} \alpha_{kt}^{x+}}, \quad \forall r, k, \\ \omega_{kr}^{x-} &= \frac{\alpha_{kr}^{x-}}{\sum_{t=0}^{k-1} \alpha_{kt}^{x-}}, \quad \forall r, k.\end{aligned}$$

Der abschließende Schritt ist die Linearkombination über die einzelnen WENO-Entfaltungen (24). Dabei werden alle Klassen gleich gewichtet, und die fertig entfaltenen Größen entstehen:

$$\begin{aligned}u_{i+\frac{1}{2},j,l}^- &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} h_{i+\frac{1}{2},j,l}^{k-}, \quad \forall i, j, l, \\ u_{i-\frac{1}{2},j,l}^+ &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{K} h_{i-\frac{1}{2},j,l}^{k+}, \quad \forall i, j, l.\end{aligned}\tag{25}$$

Für die Entfaltung in y - und z -Richtung wird das Verfahren analog angewandt, und es entstehen die gesuchten entfaltenen Größen $u_{i,j\pm\frac{1}{2},l}^\mp$ und $u_{i,j,l\pm\frac{1}{2}}^\mp$. Damit ist der Entfaltungsoperator als Algorithmus für das implizite Modell definiert.

2. Numerischer Fluss $\widehat{\mathbf{F}}$

Für die Modellierung und Implementation wird nur der konvektive Fluss nachgebildet. Die viskosen Anteile werden separat von dem Programmpaket NSMB berechnet. Der konvektive Fluss besteht aus drei Anteilen, je einem für die jeweilige Raumrichtung. Mit der Notation aus (1) sind die drei konvektiven Flüsse wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{F}}_1^{\mathbf{K}} \left(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2},j,l}^- \right) &= \begin{pmatrix} \widehat{\varrho u_1} \\ \widehat{\varrho u_1 \varrho u_1} + \widehat{p} \\ \widehat{\varrho} \\ \widehat{\varrho u_1 \varrho u_2} \\ \widehat{\varrho} \\ \widehat{\varrho u_1 \varrho u_3} \\ \widehat{\varrho} \\ \frac{\kappa}{\kappa - 1} \widehat{p} + \frac{\widehat{\varrho u_1} \widehat{\varrho u_1}^2 + \widehat{\varrho u_2}^2 + \widehat{\varrho u_3}^2}{2\widehat{\varrho}} \end{pmatrix}, \\
\widehat{\mathbf{F}}_2^{\mathbf{K}} \left(\mathbf{u}_{i,j\pm\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j\pm\frac{1}{2},l}^- \right) &= \begin{pmatrix} \widehat{\varrho u_2} \\ \widehat{\varrho u_2 \varrho u_1} \\ \widehat{\varrho} \\ \widehat{\varrho u_2 \varrho u_2} + \widehat{p} \\ \widehat{\varrho} \\ \widehat{\varrho u_2 \varrho u_3} \\ \widehat{\varrho} \\ \frac{\kappa}{\kappa - 1} \widehat{p} + \frac{\widehat{\varrho u_2} \widehat{\varrho u_1}^2 + \widehat{\varrho u_2}^2 + \widehat{\varrho u_3}^2}{2\widehat{\varrho}} \end{pmatrix}, \quad (26) \\
\widehat{\mathbf{F}}_3^{\mathbf{K}} \left(\mathbf{u}_{i,j,l\pm\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l\pm\frac{1}{2}}^- \right) &= \begin{pmatrix} \widehat{\varrho u_3} \\ \widehat{\varrho u_3 \varrho u_1} \\ \widehat{\varrho} \\ \widehat{\varrho u_3 \varrho u_2} \\ \widehat{\varrho} \\ \widehat{\varrho u_3 \varrho u_3} + \widehat{p} \\ \widehat{\varrho} \\ \frac{\kappa}{\kappa - 1} \widehat{p} + \frac{\widehat{\varrho u_3} \widehat{\varrho u_1}^2 + \widehat{\varrho u_2}^2 + \widehat{\varrho u_3}^2}{2\widehat{\varrho}} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Dabei ist κ der Isentropenexponent. Die Größen $\widehat{(\)}$ sind Abkürzungen und bezeichnen die arithmetischen Mittel der entfalteten Größen am jeweiligen Punkt. Für den Index $(i + \frac{1}{2}, j, l)$ in $\widehat{\mathbf{F}}_1^{\mathbf{K}}$ gilt beispielsweise:

$$\widehat{\varrho} = \frac{1}{2} \left(\varrho_{i+\frac{1}{2},j,l}^+ + \varrho_{i+\frac{1}{2},j,l}^- \right).$$

Analog dem Lax-Friedrichs Flussschema wird von dem konvektiven Fluss ein Modellterm abgezogen, welcher nur die Impulsgleichungen beeinflusst. Für die Notation werden die Entfaltungsstellen der Impulse ϱu_1 , ϱu_2 , ϱu_3 weggelassen. Diese sind festgelegt durch die jeweiligen Argumente des Flusskorrekturterms. Die Flusskorrektur

hat damit die folgende Form:

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{F}}_1^{\mathbf{M}} \left(\mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i\pm\frac{1}{2},j,l}^- \right) &= \begin{pmatrix} 0 \\ C_{s1} \frac{(\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-) |\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-|}{\hat{\varrho}} \\ C_{s2} \frac{(\varrho u_2^+ - \varrho u_2^-) |\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-|}{\hat{\varrho}} \\ C_{s2} \frac{(\varrho u_3^+ - \varrho u_3^-) |\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-|}{\hat{\varrho}} \\ 0 \end{pmatrix}, \\
\widehat{\mathbf{F}}_2^{\mathbf{M}} \left(\mathbf{u}_{i,j\pm\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j\pm\frac{1}{2},l}^- \right) &= \begin{pmatrix} 0 \\ C_{s2} \frac{(\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-) |\varrho u_2^+ - \varrho u_2^-|}{\hat{\varrho}} \\ C_{s1} \frac{(\varrho u_2^+ - \varrho u_2^-) |\varrho u_2^+ - \varrho u_2^-|}{\hat{\varrho}} \\ C_{s2} \frac{(\varrho u_3^+ - \varrho u_3^-) |\varrho u_2^+ - \varrho u_2^-|}{\hat{\varrho}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (27) \\
\widehat{\mathbf{F}}_3^{\mathbf{M}} \left(\mathbf{u}_{i,j,l\pm\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l\pm\frac{1}{2}}^- \right) &= \begin{pmatrix} 0 \\ C_{s2} \frac{(\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-) |\varrho u_3^+ - \varrho u_3^-|}{\hat{\varrho}} \\ C_{s2} \frac{(\varrho u_2^+ - \varrho u_2^-) |\varrho u_3^+ - \varrho u_3^-|}{\hat{\varrho}} \\ C_{s1} \frac{(\varrho u_3^+ - \varrho u_3^-) |\varrho u_3^+ - \varrho u_3^-|}{\hat{\varrho}} \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Die Konstanten C_{s1} und C_{s2} sind Modellparameter und die Entfaltungen sind in die jeweilige Raumrichtung zu verstehen.

Mit (26), (27) und $\mathbf{F}^{\mathbf{V}}$ für den viskosen Flussanteil ist der numerische Fluss \widehat{F} somit vollständig definiert:

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{F}}_1 \left(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l} \right) &= \widehat{\mathbf{F}}_1^{\mathbf{K}} \left(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^- \right) - \widehat{\mathbf{F}}_1^{\mathbf{M}} \left(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^- \right) + \mathbf{F}_1^{\mathbf{V}} (\bar{\mathbf{u}}_{i,j,l}) \\
\widehat{\mathbf{F}}_2 \left(\mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l} \right) &= \widehat{\mathbf{F}}_2^{\mathbf{K}} \left(\mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^- \right) - \widehat{\mathbf{F}}_2^{\mathbf{M}} \left(\mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^- \right) + \mathbf{F}_2^{\mathbf{V}} (\bar{\mathbf{u}}_{i,j,l}) \\
\widehat{\mathbf{F}}_3 \left(\mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l} \right) &= \widehat{\mathbf{F}}_3^{\mathbf{K}} \left(\mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^- \right) - \widehat{\mathbf{F}}_3^{\mathbf{M}} \left(\mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^- \right) + \mathbf{F}_3^{\mathbf{V}} (\bar{\mathbf{u}}_{i,j,l})
\end{aligned} \quad (28)$$

3. Numerische Integration $\widehat{\mathbf{G}}$

Die numerische Integration, symbolisch ausgedrückt mit dem Operator $\widehat{\mathbf{G}}$, soll die Integralmittelung über die Seitenfläche der Zelle nähern. Bekannt sind dabei die Werte in den Seitenmittelpunkten aller Zellen. Darauf kann nun eine Quadraturformel des Newton-Cotes Typs angewandt werden. Der einfachste Ansatz ist, als gesuchtes Integralmittel den Wert im Seitenmittelpunkt zu nehmen. Dabei wird

formal ein numerischer Fehler von

$$\frac{1}{h_x h_y} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f d\Omega - f(x_i, y_j) = \frac{1}{24} (h_x^2 \partial_{11} f + h_y^2 \partial_{22} f) + O(h^4)$$

erzeugt. Mit einem größeren Differenzenstern kann eine höhere numerische Genauigkeit erreicht werden.

In der MDEA wird der Effekt der numerischen Integration auf die Fehlerterme in die Analyse einbezogen. Es zeigt sich am Beispiel der Kontinuitätsgleichung, dass mit numerischen Integrationsverfahren höherer formaler Ordnung die Fehlerterme in der MDEA nicht vollständig eliminiert werden können. Andererseits kann ein speziell angepasster Differenzenstern diese verbleibenden Fehlerterme unterdrücken. Die Tabelle 2 zeigt drei verschiedene Differenzensterne, die formale Fehlerordnung

Differenzenstern	Fehlerordnung	Fehlerterme der MDEA
[1]	$O(h^2)$	$-\frac{1}{72} h_x^2 (\partial_{113} \overline{\rho u_3} + \partial_{112} \overline{\rho u_2}) +$ $-\frac{1}{72} h_y^2 (\partial_{122} \overline{\rho u_1} + \partial_{223} \overline{\rho u_3}) +$ $-\frac{1}{72} h_z^2 (\partial_{233} \overline{\rho u_2} + \partial_{133} \overline{\rho u_1}) + O(h^4)$
$\frac{1}{24} \begin{bmatrix} & 1 & & \\ 1 & 20 & 1 & \\ & 1 & & \end{bmatrix}$	$O(h^4)$	$-\frac{1}{36} h_x^2 (\partial_{113} \overline{\rho u_3} + \partial_{112} \overline{\rho u_2}) +$ $-\frac{1}{36} h_y^2 (\partial_{122} \overline{\rho u_1} + \partial_{223} \overline{\rho u_3}) +$ $-\frac{1}{36} h_z^2 (\partial_{233} \overline{\rho u_2} + \partial_{133} \overline{\rho u_1}) + O(h^4)$
$\frac{1}{72} \begin{bmatrix} & 1 & & \\ 1 & 68 & 1 & \\ & 1 & & \end{bmatrix}$	$O(h^2)$	$-\frac{5}{5184} h_x^4 \partial_{1111} (\partial_2 \overline{\rho u_2} + \partial_3 \overline{\rho u_3}) +$ $-\frac{5}{5184} h_y^4 \partial_{2222} (\partial_3 \overline{\rho u_3} + \partial_1 \overline{\rho u_1}) +$ $-\frac{5}{5184} h_z^4 \partial_{3333} (\partial_1 \overline{\rho u_1} + \partial_2 \overline{\rho u_2}) +$ $\frac{1}{2592} h_x^2 h_y^2 \partial_{11223} \overline{\rho u_3} +$ $\frac{1}{2592} h_x^2 h_z^2 \partial_{11233} \overline{\rho u_2} +$ $\frac{1}{2592} h_y^2 h_z^2 \partial_{12233} \overline{\rho u_1} + O(h^6)$

Tabelle 2: Differenzensterne und deren Fehlerterme in der Kontinuitätsgleichung

des zugehörigen Integrationsschemas und die Fehlerterme der MDEA der Kontinuitätsgleichung bei optimaler Parameterwahl.

Da ein größerer Differenzenstern einen erhöhten Rechenaufwand bedeutet, wird für das Modell nur die einfachste Quadraturformel genutzt. Die Möglichkeit, genauere Quadraturformeln einzubinden, ist dabei im Programm ebenfalls gegeben.

Das SGS-Modell ist somit vollständig definiert und die modifizierte Differentialgleichung (8) kann wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\mathbf{u}} + \frac{1}{h_x} \left(\widehat{\mathbf{F}}_1 \left(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j,l}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l} \right) - \widehat{\mathbf{F}}_1 \left(\mathbf{u}_{i-\frac{1}{2},j,l}^+, \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2},j,l}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i-1,j,l} \right) \right) + \\ \frac{1}{h_y} \left(\widehat{\mathbf{F}}_2 \left(\mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j+\frac{1}{2},l}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l} \right) - \widehat{\mathbf{F}}_2 \left(\mathbf{u}_{i,j-\frac{1}{2},l}^+, \mathbf{u}_{i,j-\frac{1}{2},l}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j-1,l} \right) \right) + \\ \frac{1}{h_z} \left(\widehat{\mathbf{F}}_3 \left(\mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l+\frac{1}{2}}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l} \right) - \widehat{\mathbf{F}}_3 \left(\mathbf{u}_{i,j,l-\frac{1}{2}}^+, \mathbf{u}_{i,j,l-\frac{1}{2}}^-, \bar{\mathbf{u}}_{i,j,l-1} \right) \right) = 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Die Größen \mathbf{u}^\pm sind die entfalteten Vektoren zu $\bar{\mathbf{u}}$, die analog zu (25) komponentenweise berechnet werden.

In dem Modell (29) existieren Modellparameter, die noch festzulegen sind. Dies sind für die Entfaltung die Sätze der γ^+ , γ^- und γ^0 und für den numerischen Fluss die Konstanten C_{s1} und C_{s2} .

Damit bei der Entfaltung keine unphysikalische Bevorzugung einer Richtung eintritt, gibt es eine Symmetriebedingung zwischen den γ^+ und γ^- , sowie in den γ^0 :

$$\begin{aligned} \gamma_{k,r}^- &= \gamma_{k,k-1-r}^+, & r &= 0, \dots, k-1, \\ \gamma_{k,r}^0 &= \gamma_{k,k-1-r}^0, & r &= 0, \dots, k-1. \end{aligned}$$

Aufgrund der Normierung (17) können als weitere Einschränkungen die Bedingungen

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{k-1} \gamma_{k,r}^+ &= 1, & k &= 1, \dots, K, \\ \sum_{r=0}^{k-1} \gamma_{k,r}^0 &= 1, & k &= 1, \dots, K \end{aligned}$$

genutzt werden. Die so eingeschränkte Parametermenge ist in Tabelle 3 notiert. Wie zu

k	r	$\gamma_{k,r}^0$	γ_{kr}^+	γ_{kr}^-
1	0	1	1	1
2	0	$\frac{1}{2}$	$1 - \gamma_{21}^+$	γ_{21}^+
	1	$\frac{1}{2}$	γ_{21}^+	$1 - \gamma_{21}^+$
3	0	γ_{32}^0	$1 - \gamma_{32}^+ - \gamma_{31}^+$	γ_{32}^+
	1	$1 - 2\gamma_{32}^0$	γ_{31}^+	γ_{31}^+
	2	γ_{32}^0	γ_{32}^+	$1 - \gamma_{32}^+ - \gamma_{31}^+$

Tabelle 3: Parameterauswahl für das implizite Modell

erkennen ist, sind somit noch vier Parameter für die Entfaltung und die Konstanten C_{s1} und C_{s2} unbestimmt. Diese Werte festzulegen ist das Ziel der abschließenden Modellierung. Dies kann entweder mittels der MDEA geschehen oder mit Hilfe geeigneter Optimierungsstrategien. In dieser Diplomarbeit wurde hauptsächlich die MDEA verfolgt und

die Grundlagen zur Optimierung mittels Evolutionärer Optimierung gelegt, siehe Kapitel A im Anhang. Für die Optimierung können verschiedene Größen betrachtet werden, so z.B. das Spektrum der turbulenten kinetischen Energie über den Wellenzahlen oder die numerische Viskosität. Als zu optimierende Größe dient die Abweichung von theoretischen Aussagen. Dafür wurde ein Programm geschrieben und validiert, welches diese Optimierung durchführt.

4.2 Validierung des Moduls

Für die Validierung des programmierten Moduls wurde der 2D Taylor-Green Wirbel untersucht. Dies ist eine analytische 2D-Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen auf einem periodischen Gebiet. In einem würfelförmigen Raumgebiet mit Kantenlänge 2π gelten für die Zustandsgrößen:

$$\begin{aligned} \varrho &= 1, \\ u_1 &= -\sqrt{a} \cos(kx) \sin(ky) e^{-2k^2 t/Re}, \\ u_2 &= \sqrt{a} \sin(kx) \cos(ky) e^{-2k^2 t/Re}, \\ u_3 &= 0, \\ p &= p_{ref} - \frac{a}{4} (\cos(2kx) + \cos(2ky)) e^{-4k^2 t/Re}. \end{aligned}$$

Für die Simulation wurden die folgenden physikalischen Konstanten gewählt:

$$\begin{array}{llll} \text{Isentropenexponent } \kappa & = & 1.4, & \text{Wellenzahl } k & = & 1, \\ \text{Machzahl } M & = & 0.2, & \text{Anfangsamplitude } a & = & 0.0016, \\ \text{Reynoldszahl } Re & = & 1, & \text{Referenzdruck } p_{ref} & = & \frac{1}{\kappa M^2}. \end{array}$$

Die numerische Konstanten sind:

$$\begin{aligned} \gamma_{32}^0 &= 0.4, \\ \gamma_{21}^+ &= 0.33, \\ \gamma_{31}^+ &= 0.44, \\ \gamma_{32}^+ &= 0.36, \\ C_{s1} &= 0.05, \\ C_{s2} &= 0.01. \end{aligned}$$

Das Glattheitsmaß zur Wichtung der adaptiven Gewichte der Entfaltung wurde nach [11] berechnet. Simulationen mit der Totalvariation als Maß lieferten vergleichbare Ergebnisse. Des Weiteren wurde für die Viskosität gefordert, dass diese identisch mit $1/Re$ sei. Um diesen Wert zu erreichen, wurden die weiteren physikalischen Konstanten in der NSMB-Eingabedatei entsprechend angepasst.

Die theoretischen Aussagen für den Taylor-Green Wirbel sind die folgenden:

- die Wirbelstrukturen sind ortsstabil,
- die kinetische Energie nimmt über die Zeit exponentiell mit dem Exponenten $-4t/Re$ ab.

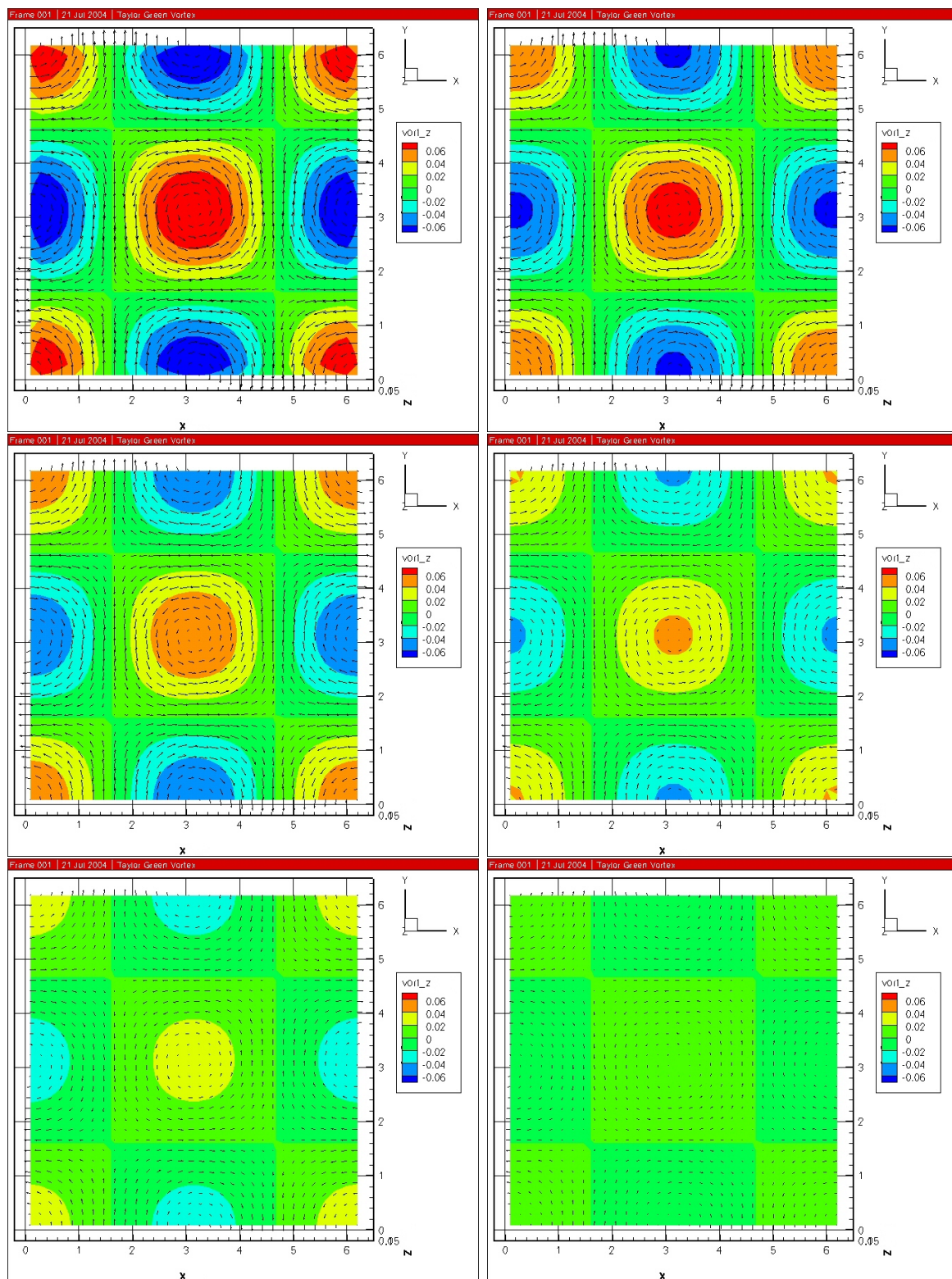


Abbildung 4: Zeitliche Entwicklung des Taylor-Green Wirbels für $t=0, 0.075, 0.150, 0.300, 0.500, 0.700$ (von links oben nach rechts unten)

Obwohl der Taylor-Green Wirbel eine Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen ist, gelten die Aussagen näherungsweise für kleine Machzahlen auch für die kompressiblen Rechnungen. Die Simulationen zeigen, dass die Dichte sich kaum ändert und nahezu konstant den Wert 1 besitzt.

Der Testfall überprüft die konvektiven Terme der Simulation nur insofern, dass diese sich aufgrund der Symmetrie der Lösung herausheben sollten. Da in der Implementierung des XWENO-Modells in NSMB nur die konvektiven Flüsse verändert wurden, ist dies als erste Überprüfung ausreichend. Die Abbildung 4 zeigt die zeitliche Entwicklung der Wirbelstrukturen bis zu einer Zeit von $t = 0.7$. Dargestellt ist zum Einen die Geschwindigkeit als Vektor und zum Anderen die z -Komponente der Wirbelstärke (vorticity) als farbige Kontur. Die Wirbelstärke ist definiert als:

$$\boldsymbol{\omega} = \text{rot} \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \partial_2 u_3 - \partial_3 u_2 \\ \partial_3 u_1 - \partial_1 u_3 \\ \partial_1 u_2 - \partial_2 u_1 \end{pmatrix}.$$

Die Abbildung 5 zeigt die Energieabklingrate für drei verschiedene Verfahren. Darin

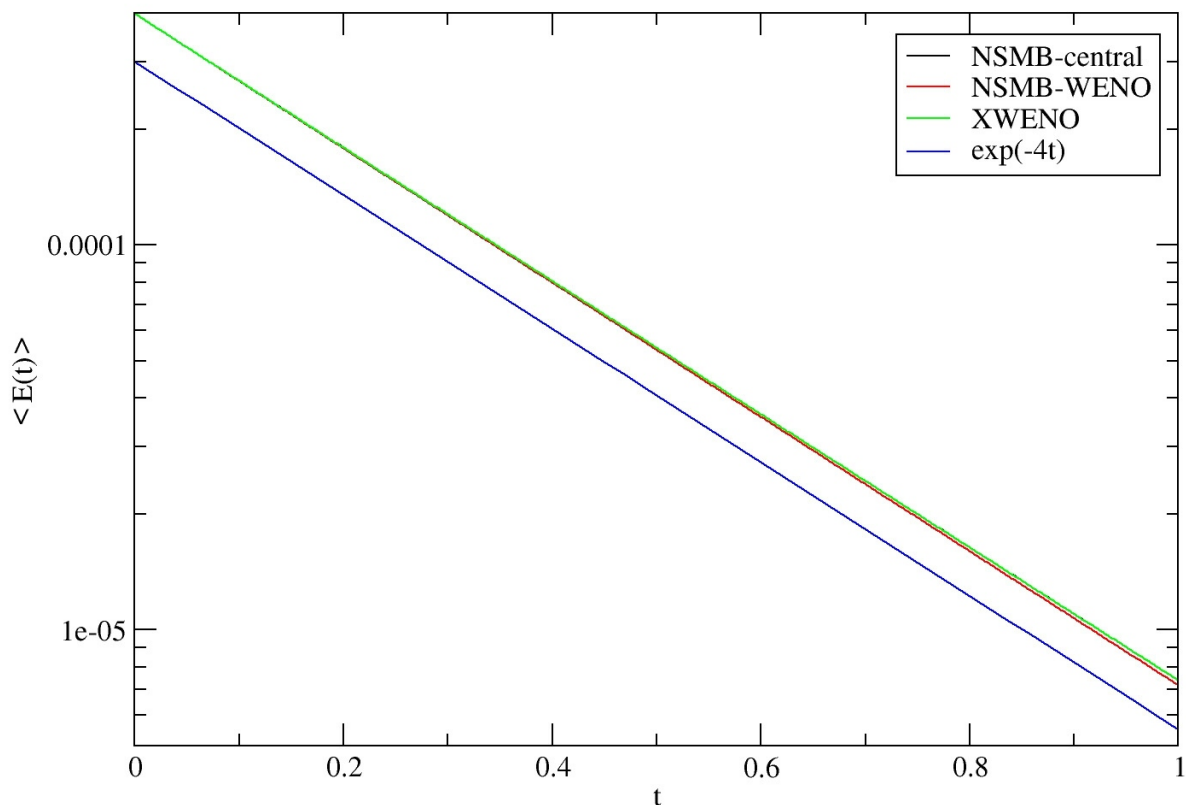


Abbildung 5: Zeitliche Entwicklung der kinetischen Energie des Taylor-Green Wirbels

wurden ein in NSMB implementiertes zentrales Differenzenverfahren und ein WENO-Verfahren mit Roe-Flussberechnung mit dem XWENO-Modell unter gleichen Anfangsbe-

dingungen verglichen. Es ist dabei zu sehen, dass die Verfahren identische exponentielle Abklingraten aufweisen. Bei stärkerer Vergrößerung ist zu sehen, dass sich die Kurve für das XWENO-Modell und das zentrale Verfahren exakt überlagern, hingegen das NSMB-WENO-Verfahren eine etwas stärkere Dissipation besitzt. Da der Unterschied aber minimal ist bedeutet dies, dass die konvektiven Terme, die bei den drei Verfahren verschieden sind, sich wie erwartet eliminieren.

4.3 MDEA mit MAPLE

Für die Analyse der modifizierten Differenzialgleichung wurden zunächst die beiden Terme

$$\mathbf{F}^A := G * \operatorname{div} \mathbf{F}(G^{-1} \bar{\mathbf{u}}) \quad (30)$$

und

$$\mathbf{F}^N := \widehat{G} * \operatorname{div} \widehat{\mathbf{F}}(\widehat{G}^{-1} \bar{\mathbf{u}}) \quad (31)$$

analysiert. Mit $F_{n,m}^A$ bzw. $F_{n,m}^N$ seien die einzelnen Summanden der konvektiven Terme des analytischen Flusses (30) bzw. des numerischen Flusses (31) bezeichnet.

Untersucht wird die Differenz von (30) und (31) über einer beliebigen Zelle I_{ijk} . Es treten Fehlerterme auf, die für die Analyse in Termen der Ableitungen der Größen $\bar{\mathbf{u}}$ in der Zellmitte aufgeschrieben werden. Dabei werden nur Terme bis vierter Ordnung in h betrachtet und Terme höherer Ordnung gestrichen. Die MDEA kann aber im Prinzip für beliebig hohe Ordnung durchgeführt werden. Des Weiteren werden für die formale Analyse glatte Daten angenommen und damit in dem Entfaltungsoperator in (31) die adaptive Wichtung mittels β unterlassen.

Die MAPLE-Routinen spalten sich dabei in zwei verschiedene Skripte auf, das eine für die XWENO-Entfaltung und das andere für die Flussberechnung. Mittels Speichern von Zwischenergebnissen wird die Datenübergabe zwischen den verschiedenen Skripten vollzogen. Bei der Flussberechnung wird ebenfalls auf das Hilfsmittel der Speicherung rechenintensiver Ergebnisse zurückgegriffen, da bei wiederholter Ausführung damit weniger Aufwand verbunden ist, und MAPLE bei der Berechnung Speicherplatz belegt, diesen aber nicht wieder freigibt. Ein Neustart von MAPLE und Einlesen der gespeicherten Daten umgeht dieses Problem.

1. Der Entfaltungsoperator G^{-1} in (30)

Zunächst wird die näherungsweise Faltung in 3D mit Hilfe der Taylorentwicklung hergeleitet. Dazu wird der Faltungsoperator G , angewandt auf eine beliebige Funktion $f \in C^\infty(\mathbb{R})$, mittels Taylorentwicklung der Größe f ausgedrückt. Die Entwicklungsstelle ist der Zellmittelpunkt (x_i, y_j, z_k) , und $f(x_i, y_j, z_k)$ wird im Folgenden mit f_{ijk} abgekürzt.

$$\begin{aligned} \bar{f}_{ijk} &= G * f = \frac{1}{h_x h_y h_z} \int_{I_{ijk}} f(x, y, z) d\Omega \\ &= \frac{1}{h_x h_y h_z} \int_{I_{ijk}} \sum_{|\alpha|=0}^{\infty} \frac{\partial_\alpha f_{ijk}}{\alpha_1! \alpha_2! \alpha_3!} (x - x_i)^{\alpha_1} (y - y_j)^{\alpha_2} (z - z_k)^{\alpha_3} d\Omega. \end{aligned}$$

Dabei ist $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ ein Multiindex. Die durchgeführte Integration ist in jeder Raumrichtung symmetrisch zu dem Mittelpunkt des Integrationsgebietes. Somit

fallen bei der Integration alle bzgl. des Entwicklungspunktes ungeraden Funktionen weg, z.B. in x -Richtung alle Funktionen g mit $g(x_i - \eta) = -g(x_i + \eta)$, η beliebig. Übrig bleiben nach dieser Überlegung in obiger Taylorentwicklung nur die Terme mit geraden α , so dass $\alpha = (2\beta_1, 2\beta_2, 2\beta_3) =: 2\beta$ angenommen werden kann. Die Faltung vereinfacht sich damit zu:

$$\begin{aligned} \bar{f}_{ijk} &= \sum_{|\beta|=0}^{\infty} \frac{\partial_{(2\beta)} f_{ijk}}{(2\beta_1)!(2\beta_2)!(2\beta_3)!} \frac{1}{h_x h_y h_z} \int_{I_{ijk}} (x - x_i)^{2\beta_1} (y - y_j)^{2\beta_2} (z - z_k)^{2\beta_3} d\Omega \\ &= \sum_{|\beta|=0}^{\infty} \frac{\partial_{(2\beta)} f_{ijk}}{(2\beta_1+1)!(2\beta_2+1)!(2\beta_3+1)!} \left(\frac{h_x}{2}\right)^{2\beta_1} \left(\frac{h_y}{2}\right)^{2\beta_2} \left(\frac{h_z}{2}\right)^{2\beta_3}. \end{aligned} \quad (32)$$

Analoge Gleichungen können für die Ableitungen von \bar{f} aufgeschrieben werden. Wird nun der Vektor $(\bar{f}, \partial_1 \bar{f}, \partial_2 \bar{f}, \partial_3 \bar{f}, \partial_{11} \bar{f} \dots)^T$ betrachtet, kann die Gleichung (32) für \bar{f} und dessen Ableitungen in Matrixform geschrieben werden. Da nur eine näherungsweise Faltung bis 4. Ordnung betrachtet wird, werden alle Terme 5. Ordnung in h weggelassen, und ebenso alle Ableitungen 5. Ordnung. Es entsteht eine obere Dreiecksmatrix, die mit $\underline{\mathbf{G}}$ bezeichnet wird. Zur Illustration ist für den 2D-Fall die Matrix $\underline{\mathbf{G}}$ in Abbildung 6 angegeben.

$$\underline{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{24}h_x^2 & 0 & \frac{1}{24}h_y^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{1920}h_x^4 & 0 & \frac{1}{576}h_x^2 h_y^2 & 0 & \frac{1}{1920}h_y^4 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24}h_x^2 & 0 & \frac{1}{24}h_y^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24}h_x^2 & 0 & \frac{1}{24}h_y^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24}h_x^2 & 0 & \frac{1}{24}h_y^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24}h_x^2 & 0 & \frac{1}{24}h_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24}h_y^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Abbildung 6: Matrix $\underline{\mathbf{G}}$ für Faltung in 2D in Richtung x und y

Die Faltung kann nun wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} \bar{f}_{ijk} \\ \partial_1 \bar{f}_{ijk} \\ \partial_2 \bar{f}_{ijk} \\ \partial_3 \bar{f}_{ijk} \\ \partial_{11} \bar{f}_{ijk} \\ \partial_{12} \bar{f}_{ijk} \\ \partial_{13} \bar{f}_{ijk} \\ \partial_{22} \bar{f}_{ijk} \\ \partial_{23} \bar{f}_{ijk} \\ \vdots \end{pmatrix} = \underline{\mathbf{G}} \begin{pmatrix} f_{ijk} \\ \partial_1 f_{ijk} \\ \partial_2 f_{ijk} \\ \partial_3 f_{ijk} \\ \partial_{11} f_{ijk} \\ \partial_{12} f_{ijk} \\ \partial_{13} f_{ijk} \\ \partial_{22} f_{ijk} \\ \partial_{23} f_{ijk} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (33)$$

Der Grund, die Gleichung (32) nicht nur für \bar{f} , sondern auch für dessen Ableitungen zu betrachten, liegt darin, dass (33) mit der Inversen von \mathbf{G} nach der ungefilterten Variable f_{ijk} aufgelöst werden kann. Es ist somit möglich, mit (33) die Faltung im Mittelpunkt der Zelle I_{ijk} rückgängig zu machen.

Für die Entfaltungen an den Zellgrenzen wird auf die gleiche Weise vorgegangen und als Entwicklungspunkt für die Taylorentwicklung die zu entfaltende Stelle genutzt. Für die Entfaltung in x -Richtung entsteht die folgende Taylorreihe mit dem Multiindex $\alpha = (\beta_1, 2\beta_2, 2\beta_3)$:

$$\bar{f}_{ijk} = f_{i\pm\frac{1}{2},j,k} + \sum_{|\alpha|=1}^{\infty} \frac{\partial_{\alpha} f_{ijk}}{(\beta_1 + 1)!(2\beta_2 + 1)!(2\beta_3 + 1)!} (\mp h_x)^{\beta_1} \left(\frac{h_y}{2}\right)^{2\beta_2} \left(\frac{h_z}{2}\right)^{2\beta_3}. \quad (34)$$

Analoge Gleichungen können für die anderen Raumrichtungen aufgestellt werden. Mit (34) kann die zugehörige Faltungsmatrix \mathbf{G} aufgestellt und diese invertiert werden. Da nur die entfaltete Größe f selbst gesucht ist und nicht deren Ableitungen, wird nur die erste Zeile der Entfaltungsmatrix benötigt. Für die Entfaltung an den Punkten $(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$ entsteht beispielsweise die folgende Beziehung:

$$\begin{aligned} f_{i\pm\frac{1}{2},j,k} &= \bar{f}_{ijk} \pm \frac{1}{2} h_x \partial_1 \bar{f}_{ijk} + \frac{1}{24} (2h_x^2 \partial_{11} \bar{f}_{ijk} - h_y^2 \partial_{22} \bar{f}_{ijk} - h_z^2 \partial_{33} \bar{f}_{ijk}) \\ &\mp \frac{1}{48} h_x (h_y^2 \partial_{122} \bar{f}_{ijk} + h_z^2 \partial_{133} \bar{f}_{ijk}) \\ &+ \frac{1}{5760} (-8h_x^4 \partial_{1111} \bar{f}_{ijk} + 7h_y^4 \partial_{2222} \bar{f}_{ijk} + 7h_z^4 \partial_{3333} \bar{f}_{ijk}) \\ &- \frac{1}{576} (2h_x^2 h_y^2 \partial_{1122} \bar{f}_{ijk} + 2h_x^2 h_z^2 \partial_{1133} \bar{f}_{ijk} - h_y^2 h_z^2 \partial_{2233} \bar{f}_{ijk}) + O(h^5). \end{aligned}$$

2. Berechnung der allgemeinen Fehlerterme

Für die Berechnung der auftretenden Fehlerterme werden die einzelnen Summanden der beiden konvektiven Flüsse noch einmal analysiert und die auftretenden Symmetrien ausgenutzt. Für die beiden Flüsse gilt, ($i, j = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned} F_{1,j}^A &= \partial_j \overline{\varrho u_j} & F_{1,j}^N &= \widehat{G}_j * \frac{\widehat{\varrho u_j}}{h_j} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j} \\ F_{i+1,j}^A &= G_j * \frac{\widetilde{\varrho u_i} \widetilde{\varrho u_j}}{h_j \widetilde{\varrho}} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j} & F_{i+1,j}^N &= \widehat{G}_j * \frac{\widehat{\varrho u_i} \widehat{\varrho u_j}}{h_j \widehat{\varrho}} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j} \\ F_{i+1,4}^A &= \partial_i \bar{p} & F_{i+1,4}^N &= \widehat{G}_i * \frac{\widehat{p}}{h_i} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_i \mathbf{e}_i}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_i \mathbf{e}_i} \\ F_{5,j}^A &= G_j * \frac{\widetilde{E}_{kin} \widetilde{\varrho u_j}}{h_j \widetilde{\varrho}} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j} & F_{5,j}^N &= \widehat{G}_j * \frac{\widehat{E}_{kin} \widehat{\varrho u_j}}{h_j \widehat{\varrho}} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j} \\ F_{5,4}^A &= \frac{\kappa}{\kappa - 1} \sum_{j=1}^3 \partial_j \bar{p} & F_{5,4}^N &= \frac{\kappa}{\kappa - 1} \sum_{j=1}^3 \widehat{G}_j * \frac{\widehat{p}}{h_j} \Big|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j \mathbf{e}_j}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichne \mathbf{x} den Ortsvektor des Zellmittelpunktes und \mathbf{e}_j den j -ten Einheitsvektor. Außerdem gelte $h_1 = h_x, h_2 = h_y, h_3 = h_z$ und G_j bzw. \widehat{G}_j bezeichne die 2D-Faltung bzw. die numerische 2D-Integration senkrecht zur Raumrichtung \mathbf{e}_j . Hier und im Folgenden wird mit $\widetilde{(\)}$ die analytisch entfaltete Größe $G^{-1}(\widetilde{(\)})$ bezeichnet, die wie in (34) berechnet wird, und mit $\widehat{(\)}$ das arithmetische Mittel der entfalteten Größen nach dem XWENO-Schema. Die Abkürzungen \widehat{E}_{kin} bzw. \widetilde{E}_{kin} sind die kinetischen Energien, berechnet aus den entfalteten Größen.

Für die zusätzliche Flusskorrektur \mathbf{F}^M lassen sich ebenfalls die Terme in obiger Schreibweise notieren:

$$F_{i+1,j}^M = C_s \widehat{G}_j * \frac{(\varrho u_i^+ - \varrho u_i^-) |\varrho u_j^+ - \varrho u_j^-|}{h_j \widehat{\varrho}} \Bigg|_{\mathbf{x}-\frac{1}{2}h_j\mathbf{e}_j}^{\mathbf{x}+\frac{1}{2}h_j\mathbf{e}_j},$$

$$F_{i+1,4}^M = 0.$$

Für $i = j$ gilt $C_s = C_{s1}$ und ansonsten $C_s = C_{s2}$. Der gesuchte numerische Fehler lässt sich mit diesen Ausdrücken wie folgt berechnen:

$$\varepsilon_N(1) = \sum_{j=1}^3 F_{1,j}^A - F_{1,j}^N,$$

$$\varepsilon_N(i) = \sum_{j=1}^4 F_{i,j}^A - (F_{i,j}^N - F_{i,j}^M), \quad i = 2, 3, 4,$$

$$\varepsilon_N(5) = \sum_{j=1}^4 F_{5,j}^A - F_{5,j}^N.$$

Mit den folgenden Definitionen

$$M = \partial_1 \overline{\varrho u_1} - \widehat{G}_1 * \frac{\widehat{\varrho u_1}}{h_x} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}$$

$$I = G_1 * \frac{\widetilde{\tau \varrho u_1}}{h_x \widetilde{\varrho}} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} - \widehat{G}_1 * \frac{\widehat{\tau \varrho u_1}}{h_x \widehat{\varrho}} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}$$

$$I^M = C_s \widehat{G}_1 * \frac{(\tau^+ - \tau^-) |\varrho u_1^+ - \varrho u_1^-|}{h_x \widehat{\varrho}} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \quad (35)$$

$$E = G_1 * \frac{\widetilde{E}_{kin} \widetilde{\varrho u_1}}{h_x \widetilde{\varrho}} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} - \widehat{G}_1 * \frac{\widehat{E}_{kin} \widehat{\varrho u_1}}{h_x \widehat{\varrho}} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}$$

$$P = \partial_1 \bar{p} - \widehat{G}_1 * \frac{\widehat{p}}{h_x} \Bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}},$$

wobei τ als Platzhalter für einen der Impulse ϱu_i , $i = 1, 2, 3$ dient, und einer Vorschrift $ZP(f, n)$, die folgende zyklische Permutationen in f n -mal ausführt

$$\begin{array}{ccccc}
\overline{\varrho u_1} & \widetilde{\varrho u_1} & \widehat{\varrho u_1} & \partial_1 & h_x \\
\Downarrow & \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow \\
\overline{\varrho u_2} & \widetilde{\varrho u_2} & \widehat{\varrho u_2} & \partial_2 & h_y \\
\Downarrow & \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow \\
\overline{\varrho u_3} & \widetilde{\varrho u_3} & \widehat{\varrho u_3} & \partial_3 & h_z \\
\Downarrow & \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow & \Downarrow \\
\overline{\varrho u_1} & \widetilde{\varrho u_1} & \widehat{\varrho u_1} & \partial_1 & h_x
\end{array}$$

können die einzelnen Anteile im numerischen Fehler ε_N wie folgt berechnet werden ($i, j = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned}
F_{1,j}^A - F_{1,j}^N &= ZP(M, j - 1), \\
F_{i+1,j}^A - F_{i+1,j}^N - F_{i+1,j}^M &= ZP(I - I^M, j - 1)|_{\tau=\varrho u_i}, \\
F_{i+1,4}^A - F_{i+1,4}^N &= ZP(P, i - 1), \\
F_{5,j}^A - F_{5,j}^N &= ZP(E, j - 1), \\
F_{5,4}^A - F_{5,4}^N &= \frac{\kappa}{\kappa - 1} \sum_{j=1}^3 ZP(P, j - 1).
\end{aligned}$$

Für die Berechnung der Terme M, I, I^M, E und P wurden in MAPLE Routinen geschrieben, um sie zu berechnen. Die anderen Anteile in ε_N können mit oben genannter Permutation berechnet werden. Für die Analyse werden nur die in (35) bezeichneten Terme betrachtet und damit der gesamte Fehler zusammengesetzt.

Das Ergebnis der MDEA sind Fehlerterme, die teilweise von den freien Parametern abhängen. Bei einem Abgleich mit einem existierenden Modell können dann, soweit möglich, die Fehlerterme angepasst werden.

• Die Kontinuitätsgleichung - M

In dem numerischen Fehler der Kontinuitätsgleichungen sind nur die Größe M und deren zyklische Permutationen enthalten. Die Größe M berechnet sich für die in Tabelle 3 angegebene Parametermenge zu:

$$M = \left(-\frac{1}{6} \gamma_{21}^+ + \frac{1}{18} \right) h_x^2 \partial_{111} \overline{\varrho u_1} + \frac{1}{72} (h_y^2 \partial_{122} \overline{\varrho u_1} + h_z^2 \partial_{133} \overline{\varrho u_1}).$$

Da die Kontinuitätsgleichung in (6) auf der rechten Seite keinen SGS-Term enthält, ist es sinnvoll, $\gamma_{21}^+ = \frac{1}{3}$ zu setzen, um den ersten Ausdruck zu eliminieren. Die übrig bleibenden Fehlerterme lassen sich mit dieser Wahl nicht beeinflussen. Diese können eliminiert werden, wenn ein spezieller Differenzenstern für die numerische Integration verwendet wird, siehe Tabelle 2. Mit dieser Integration und obiger Wahl für γ_{21}^+ entsteht

$$M = -\frac{1}{5184} (5h_z^4 \partial_{13333} \overline{\varrho u_1} - 2h_y^2 h_z^2 \partial_{12233} \overline{\varrho u_1} + 5h_y^4 \partial_{12222} \overline{\varrho u_1}).$$

Da der größere Differenzenstern einen höheren Rechenaufwand bedeutet und in MAPLE die Terme der anderen Gleichungen in angemessener Rechenzeit nicht mehr auszuwerten sind, wird nur mit der 1-Punkt Integration gearbeitet.

In der ersten Komponente des numerischen Fehlerterms stehen somit nur Terme 2. Ordnung der jeweiligen Querrichtungen, d.h. es treten nur Terme der Form $h_i^2 \partial_{1ii} u_j$ mit $i \neq j$ auf.

- **Der Druckterm - P**

Da die Berechnung von P identisch zu der Berechnung von M ist, wobei nur ρu_1 durch p ersetzt wurde, gelten die gleichen Aussagen wie oben.

- **Die Impulsgleichung - I**

Es zeigt sich, dass im Zähler von I keine Terme der formalen Ordnungen $O(1)$ oder $O(h)$ vorhanden sind. Damit erzeugt das implizite Modell die gleiche formale Fehlerordnung wie explizite Modelle.

Für obige Wahl von $\gamma_{21}^+ = \frac{1}{3}$ entfällt der Term vor h_x^2 ebenfalls. Dies entspricht den 1D-Ergebnissen, in denen der h_x^2 -Term nur von der Flusskorrektur $\widehat{\mathbf{F}}^{\mathbf{M}}$ abhängt. Um die Darstellung und Diskussion der restlichen Fehlerterme zu vereinfachen, werden im Weiteren Ableitungen in den Querrichtungen vernachlässigt. Die vollständigen Fehlerterme sind im MAPLE-Skript auf beiliegender CD zu finden.

Mit obiger Vereinfachung und der Abkürzung

$$I_\rho = 720\rho^4 + 600h_x^2\rho^2(2\rho\partial_{11}\rho - 3(\partial_1\rho)^2) + h_x^4\rho^3\partial_{1111}\rho(108 - 160\gamma_{32}^+ - 160\gamma_{31}^+) + h_x^4(1485(\partial_1\rho)^4 - 1980\rho\partial_{11}\rho(\partial_1\rho)^2 + 670(\rho\partial_{11}\rho)^2) + O(h^5)$$

für den Nenner von I , reduziert sich I zu:

$$I = -8h_x^4\rho(7 - 10\gamma_{31}^+ - 10\gamma_{32}^+)\frac{1}{I_\rho} \left(\rho^2(\partial_1\bar{\tau}\partial_{1111}\overline{\rho u_1} + \partial_1\overline{\rho u_1}\partial_{1111}\bar{\tau}) - \rho\partial_1\rho(\bar{\tau}\partial_{1111}\overline{\rho u_1} + \overline{\rho u_1}\partial_{1111}\bar{\tau}) - \rho\partial_{1111}\rho(\bar{\tau}\partial_1\overline{\rho u_1} + \overline{\rho u_1}\partial_1\bar{\tau}) + 2\bar{\tau}\overline{\rho u_1}\partial_1\rho\partial_{1111}\rho \right) + O(h^6).$$

Damit enthält I Terme mit vierten Ableitungen eines Impulses in einer Raumrichtung. Solche hyperviskosen Terme verursachen Hyperdissipation, d.h. verstärkte Dissipation kinetischer Energie bei großen Wellenzahlen. Im vollständigen I -Term sind weitere Umverteilungsterme enthalten, die Energie zwischen verschiedenen Skalen verteilen. Des Weiteren ist I vollständig symmetrisch bezüglich der beiden Impulse $\bar{\tau}$ und $\overline{\rho u_1}$, d.h. die Symmetrie bleibt auch in den Fehlertermen erhalten. Die vollständigen Fehlerterme enthalten zusätzlich Terme für $h_y^2, h_z^2, h_y^4, h_z^4, h_x^2 h_y^2, h_x^2 h_z^2$ und $h_y^2 h_z^2$.

Wie zu sehen ist, kann der Hyperdissipationsanteil mit Hilfe der freien Parameter γ in seiner Stärke beeinflusst werden. Es ist allerdings zu berücksichtigen, dass aufgrund der zyklischen Permutationen von I in $\varepsilon_N(i)$ bei den vollständigen Fehlertermen weitere Anteile hinzukommen.

- **Die Impulsgleichung - Flusskorrektur - I^M**

In der Berechnung des Terms I^M tritt der Faktor $|\widehat{\varrho u_1}^+ - \widehat{\varrho u_1}^-|$ für die beiden Zellränder auf. Dabei gilt formal

$$\begin{aligned} |\widehat{\varrho u_1}^+ - \widehat{\varrho u_1}^-|_{x_{i+\frac{1}{2}}} &= \frac{1}{3} h_x \left| \partial_1 \overline{\varrho u_1} + \frac{1}{2} h_x \partial_{11} \overline{\varrho u_1} + \frac{1}{3} h_x^2 \partial_{111} \overline{\varrho u_1} (1 - 2\gamma_{31}^+ - \gamma_{32}^+) + O(h^3) \right|, \\ |\widehat{\varrho u_1}^+ - \widehat{\varrho u_1}^-|_{x_{i-\frac{1}{2}}} &= \frac{1}{3} h_x \left| \partial_1 \overline{\varrho u_1} - \frac{1}{2} h_x \partial_{11} \overline{\varrho u_1} + \frac{1}{3} h_x^2 \partial_{111} \overline{\varrho u_1} (1 - 2\gamma_{31}^+ - \gamma_{32}^+) - O(h^3) \right|. \end{aligned}$$

Um die Multiplikation mit $|\widehat{\varrho u_1}^+ - \widehat{\varrho u_1}^-|$ analysieren zu können, werden die genäherten Beziehungen

$$|\widehat{\varrho u_1}^+ - \widehat{\varrho u_1}^-|_{x_{i\pm\frac{1}{2}}} \approx \underbrace{\text{sign}(\partial_1 \overline{\varrho u_1})}_{sig} (\widehat{\varrho u_1}^+ - \widehat{\varrho u_1}^-)_{x_{i\pm\frac{1}{2}}}$$

für die beiden Zellränder genutzt. Mit diesen Näherungen, der Annahme verschwindender Ableitungen in den Querrichtungen und mit

$$I_\varrho^M = 3(144\varrho^2 + 12h_x^2(2\varrho\partial_{11}\varrho - 3\partial_1\varrho^2) + 2h_x^4\varrho\partial_{1111}\varrho(11 - 16\gamma_{31}^+ - 16\gamma_{32}^+) + h_x^4\partial_{11}\varrho^2)$$

kann I^M wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} I^M &= \frac{4C_s sig}{I_\varrho^M} \left(12h_x^2 (\varrho (\partial_1 \bar{\tau} \partial_{11} \overline{\varrho u_1} + \partial_{11} \bar{\tau} \partial_1 \overline{\varrho u_1}) - \partial_1 \bar{\tau} \partial_1 \overline{\varrho u_1} \partial_1 \varrho) \right. \\ &\quad - h_x^4 ((8\gamma_{31}^+ + 4\gamma_{32}^+ - 3)\varrho (\partial_1 \bar{\tau} \partial_{1111} \overline{\varrho u_1} + \partial_{1111} \bar{\tau} \partial_1 \overline{\varrho u_1}) \\ &\quad + (4 - 8\gamma_{31}^+ - 4\gamma_{32}^+) \partial_1 \varrho (\partial_{1111} \bar{\tau} \partial_1 \overline{\varrho u_1} + \partial_1 \bar{\tau} \partial_{111} \overline{\varrho u_1}) \\ &\quad - (4 - 8\gamma_{31}^+ - 4\gamma_{32}^+) \varrho (\partial_{1111} \bar{\tau} \partial_{11} \overline{\varrho u_1} + \partial_{11} \bar{\tau} \partial_{111} \overline{\varrho u_1}) \\ &\quad \left. - \partial_{11} \bar{\tau} \partial_1 \overline{\varrho u_1} \partial_{11} \varrho - \partial_1 \bar{\tau} \partial_{11} \overline{\varrho u_1} \partial_{11} \varrho + 3\partial_{11} \bar{\tau} \partial_{11} \overline{\varrho u_1} \partial_1 \varrho) \right) \\ &\quad + O(h^6). \end{aligned}$$

Die Flusskorrektur beinhaltet somit einen Dissipationsanteil, der sich als zweite Ableitung eines Impulses in einer Raumrichtung darstellt, Umverteilungsterme und einen Hyperdissipationsanteil. Da mit der Konstanten C_s der Dissipationsanteil skaliert werden kann, hat diese Größe einen erheblichen Einfluss auf das Energieabklingverhalten der turbulenten Feinstrukturen.

Die vollständigen Fehlerterme enthalten zusätzliche Fehlerterme für $h_x^2 h_y^2$ und $h_x^2 h_z^2$.

- **Die Energiegleichung - E**

Die Analyse des E -Terms erfolgt analog zu der des Impulsterms. Auch hier treten keine Terme der formalen Ordnungen $O(1)$ und $O(h)$ auf und der Term 2. Ordnung in h_x entfällt mit der Wahl $\gamma_{21}^+ = \frac{1}{3}$. Im Falle verschwindender Querableitungen bleibt nur ein Term mit h_x^4 stehen:

Mit der Abkürzung

$$\begin{aligned} E_\varrho &= 360\varrho^4 + 600h_x^2\varrho^2(2\varrho\partial_{11}\varrho - 3\partial_1\varrho^2) \\ &\quad + 4h_x^4\varrho^3\partial_{1111}\varrho(27 - 40\gamma_{31}^+ - 40\gamma_{32}^+) \\ &\quad + 15h_x^4(90\varrho^2\partial_{11}\varrho^2 - 268\varrho\partial_{11}\varrho\partial_1\varrho^2 + 201\partial_1\varrho^4), \end{aligned}$$

erhält man

$$\begin{aligned}
E &= \frac{8h_x^4(7 - 10\gamma_{31}^+ - 10\gamma_{32}^+)}{E_\varrho} \cdot \\
&\left(\varrho(2\bar{\tau}\partial_1\varrho - \partial_1\bar{\tau}\varrho)(\overline{\varrho u_3}\partial_{1111}\overline{\varrho u_3} + \overline{\varrho u_2}\partial_{1111}\overline{\varrho u_2} + \overline{\varrho u_1}\partial_{1111}\overline{\varrho u_1}) \right. \\
&\quad - \bar{\tau}\varrho^2(\partial_1\overline{\varrho u_3}\partial_{1111}\overline{\varrho u_3} + \partial_1\overline{\varrho u_2}\partial_{1111}\overline{\varrho u_2} + \partial_1\overline{\varrho u_1}\partial_{1111}\overline{\varrho u_1}) \\
&\quad + \varrho(2\bar{\tau}\partial_{1111}\varrho - \partial_{1111}\bar{\tau}\varrho)(\overline{\varrho u_2}\partial_1\overline{\varrho u_2} + \overline{\varrho u_1}\partial_1\overline{\varrho u_1} + \overline{\varrho u_3}\partial_1\overline{\varrho u_3}) \\
&\quad \left. + (\varrho\partial_1\varrho\partial_{1111}\bar{\tau} + \varrho\partial_{1111}\varrho\partial_1\bar{\tau} - 3\bar{\tau}\partial_{1111}\varrho\partial_1\varrho)(\overline{\varrho u_1}^2 + \overline{\varrho u_2}^2 + \overline{\varrho u_3}^2) \right) + O(h^6).
\end{aligned}$$

Damit enthält der Energieterm ebenfalls nur Hyperdissipations- und Umverteilungsterme. In den vollständigen Fehlertermen treten zusätzliche Terme, wie in dem I -Term auf.

Die für diese Diplomarbeit geschriebenen MAPLE-Routinen können als Gerüst für weitere Untersuchungen auch anderer impliziter Modelle dienen. Dafür müssen nur jeweils die numerischen Flüsse ausgetauscht werden.

5 Simulation isotroper Turbulenz

Um das Modell auf isotrope kompressible Turbulenz anzuwenden, wurde der Referenzfall *ife96* aus [3] untersucht. In diesem wird eine periodische Anfangsströmung in einem Würfel mit einer Kantenlänge von 2π vorgegeben, die sich in eine isotrope Turbulenz entwickelt. In [4] wurde dies in dem Programm COBOX als pseudospektrale DNS auf einem Gitter mit 96^3 Punkten simuliert. Diese Rechnungen des COBOX-Programms wurden als Anfangs- und Vergleichsdaten für die LES-Simulationen genutzt.

Dazu wurde mit COBOX für die erste Untersuchung eine DNS bis zum Zeitpunkt $t = 0.5$ durchgeführt und das Strömungsfeld herausgeschrieben. Für den zweiten Fall wurden die Anfangsdaten bei $t = 0$ ohne DNS entnommen. Für die LES wurde das von COBOX gelieferte Datenfeld ausgedünnt und Daten für ein Gitter mit 32^3 Punkten generiert.

Die physikalischen Parameter für den Fall *ife96* sind

$$\begin{aligned} M &= 0.7, \quad \kappa = 1.4, \\ Re &= 166 \end{aligned}$$

mit im Spektralraum erzeugten Anfangsdaten. Dafür wurden den Geschwindigkeiten zufällige Phasen zugeordnet und die Amplituden so gewählt, dass das in Abbildung 7 zu

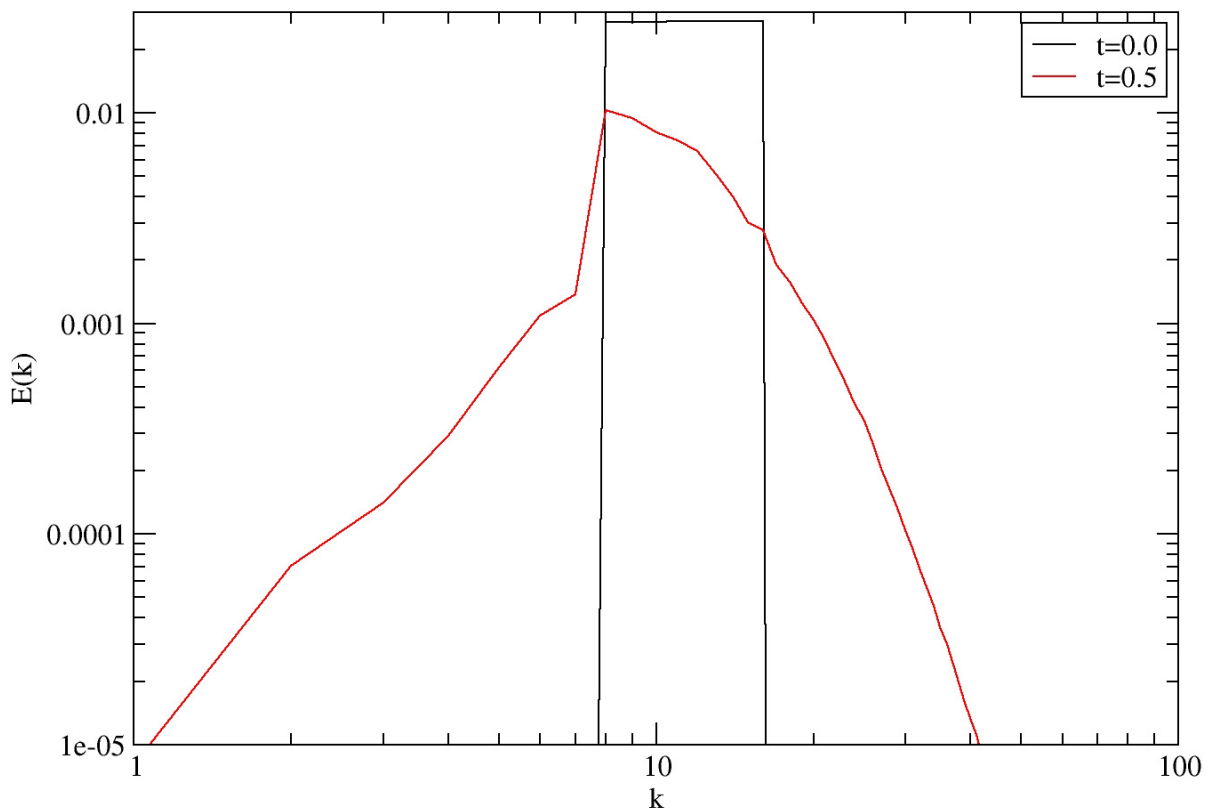


Abbildung 7: Spektren der turbulenten kinetischen Energie für $t = 0$ und $t = 0.5$

sehende top-hat Spektrum der turbulenten kinetischen Energie (TKE) entstand. Dabei besitzen nur die Wellenzahlen im Bereich von 8 bis 16 Energie. Genauere Angaben dazu sind in [3] und [4] zu finden. Die zweite Kurve in der gleichen Abbildung zeigt das Spektrum nach Ablauf von 0.5 Zeiteinheiten, berechnet mit COBOX. Es ist zu sehen, dass nun auch andere Wellenzahlen energietragend sind, insbesondere hohe Wellenzahlen. Diese sind hauptsächlich für die Energiedissipation verantwortlich.

Im ersten untersuchten Fall werden die Daten der entwickelten Strömung nach 0.5 Zeiteinheiten genutzt. Wie in Abbildung 8 zu sehen ist, zeigen sich im Verlauf der TKE der

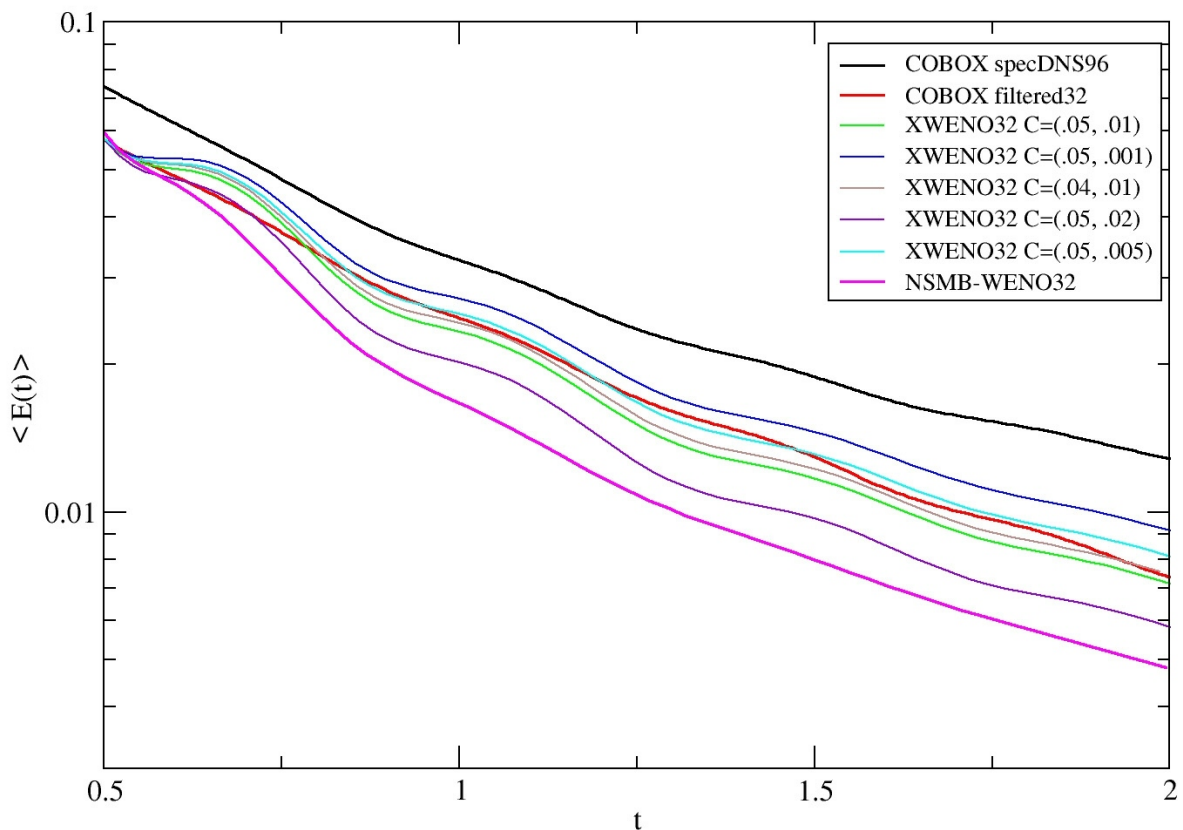


Abbildung 8: Verlauf der turbulenten kinetischen Energie im Fall 1

LES-Simulationen starke Schwankungen, die in der COBOX-Simulation nicht auftraten. Diese Effekte resultieren wahrscheinlich zum Einen aus Aliasing-Fehlern beim Ausdünnen des Feldes und zum Anderen daraus, dass die ausgedünnten Geschwindigkeits-, Dichte- und Druckfelder nicht vollständig zueinander passen. Daher durchläuft die Strömung zunächst eine Transiente, in deren Ablauf die Schwankung abklingen. Dabei zeigt sich, dass das in NSMB implementierte WENO-Schema die Schwankungen stärker dämpft als die XWENO-Schemata. Das WENO-Schema besteht aus einer eindimensionalen WENO-Entfaltung formal 5. Ordnung ($k = 3$), welche die charakteristischen Größen entfaltet, und einer Flussberechnung nach Roe.

Für das XWENO-Schema wurde das Glattheitsmaß für die adaptiven Gewichte nach [11]

berechnet und folgende numerische Parameter für die Entfaltung genutzt:

$$\begin{aligned}\gamma_{32}^0 &= 0.4, \\ \gamma_{21}^+ &= 0.33, \\ \gamma_{31}^+ &= 0.44, \\ \gamma_{32}^+ &= 0.36.\end{aligned}$$

Die Konstanten C_{s1} und C_{s2} wurden für die verschiedenen Simulationen variiert und sind in der Legende der Abbildung 8 als $C = (C_{s1}, C_{s2})$ zu finden. Ein Vergleich der beiden Glattheitsmaße wurde ebenfalls durchgeführt. Dabei stellt sich das Maß nach [11] als etwas dissipativer als das Maß gemäß der Totalvarianz heraus.

Da aufgrund der Schwingung im Verlauf der TKE der Vergleich zwischen den einzelnen Methoden schwierig ist, und nach Abklingen der Schwingung die TKE bereits stark gedämpft ist, wurde im zweiten Fall die Strömung von Anfang an simuliert. Der Verlauf der TKE ist in Abbildung 9 zu sehen. Dabei wurden die gleichen numerischen Parameter

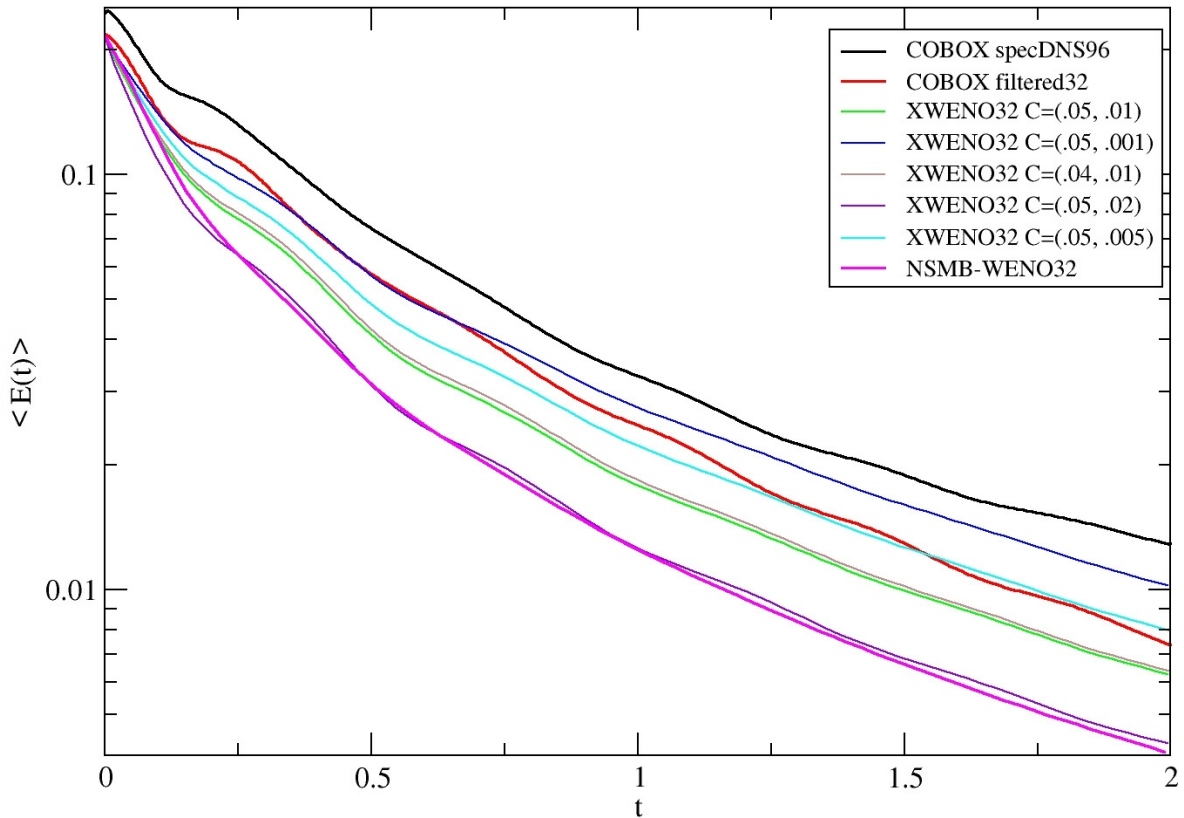


Abbildung 9: Verlauf der turbulenten kinetischen Energie im Fall 2

wie im ersten Fall genutzt und der Einfluss der Konstanten C_{s1} und C_{s2} untersucht. Die resultierenden Kurven sollen nun ausführlicher besprochen werden.

Die schwarze Kurve in der Abbildung 9 zeigt den Verlauf der TKE, die mit dem COBOX-Programm berechnet wurde. Da dies eine Gitterauflösung von 96^3 benutzt, werden mehr

energieträgende Skalen aufgelöst, als auf dem Gitter der LES. Um eine Vergleichsgröße mit der niedrigeren Auflösung zu besitzen, wurde die TKE der spektralen DNS einem spektralen Abschneide-Filter unterzogen. Dabei wurden alle Skalen abgeschnitten, die in einem Gitter der Auflösung 32^3 nicht mehr aufgelöst werden können, d.h. alle Wellenzahlen größer als 15. Diese Vergleichsgröße der gefilterten spektralen DNS ist als rote Kurve zu sehen.

Erwünschtes Ziel der Modellierung war es, eine der spektralen DNS ähnliche Energiedissipation zu erreichen und zumindest besser als das vorhandene WENO-Verfahren zu sein. Der Verlauf der TKE für das WENO-Verfahren ist als magenta Kurve in Abbildung 9 wiederzufinden. Durch Variation der beiden Modellierungskonstanten C_s , wurden verschiedene Simulationen erzeugt. Als Referenzpunkt der Parameter diente dabei $C_{s1} = 0.05$, $C_{s2} = 0.01$. Die zugehörige Kurve der TKE ist die grüne Kurve. Eine Reduzierung der Konstante C_{s1} , welche die Dämpfung der $\rho u_i u_i$ -Komponenten ($i = 1, 2, 3$) beeinflusst, auf den Wert 0.04 hat kaum Einfluss auf das Verhalten der TKE, wie in der braunen Kurve zu sehen ist.

Einen wesentlich stärkeren Einfluss hat die Konstante C_{s2} , welche die gemischten Produkte $\rho u_i u_j$, ($i \neq j$) dämpft. Eine Erhöhung auf den Wert 0.02 dämpft die TKE so stark, dass der Verlauf der TKE dem des WENO-Verfahrens aus NSMB entspricht, siehe lila Kurve. Eine Reduzierung hingegen belässt mehr Energie in der Strömung, so dass Energiedissipation in der Größenordnung der gefilterten spektralen DNS erreicht werden kann ($C_{s2} = 0.005$, cyan Kurve) oder sogar wesentlich mehr Energie erhalten bleibt ($C_{s2} = 0.001$, blaue Kurve).

In der MDEA des Modells in Kapitel 4.3 ist zu sehen, dass der Energieterm keine Dissipationsterme und keinen Fehlerterm 2. Ordnung in h besitzt. In expliziten Modellen hingegen besitzt auch die Energiegleichung einen solchen Modellterm formal 2. Ordnung. Um zu untersuchen, ob deshalb das Modell erweitert werden sollte, wird als weitere zu untersuchende Größe die Dichteverianz betrachtet. Diese wird berechnet mit:

$$\langle \rho'^2 \rangle = \frac{1}{n_1 n_2 n_3} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{k=1}^{n_3} (\rho_{ijk} - \langle \rho \rangle)^2,$$

wobei $\langle \rho \rangle$ die mittlere Dichte bezeichnet. In Abbildung 10 ist deren Verlauf für den Fall 2 aufgetragen. Es ist zu sehen, dass die Kurven der verschiedenen XWENO-Simulationen einen zueinander ähnlichen Verlauf haben und in der Größenordnung der spektralen DNS entsprechen. Unterschiedlich zum Verlauf der COBOX-Simulation ist hingegen, dass die Dichteverianz bei den XWENO-Simulationen stärker abfällt.

Das WENO-Verfahren aus NSMB besitzt eine deutlich geringere Dichteverianz. Dies deutet auf eine stärkere Dämpfung in diesem Verfahren hin. Dass die Dichteverianz des XWENO-Modells die gleiche Größenordnung wie die spektrale DNS besitzt, weist darauf hin, dass kein zusätzlicher Modellierungsterm für die Energiegleichung benötigt wird.

Als abschließender Vergleich werden die Spektren der TKE zu verschiedenen Zeiten für die spektrale DNS und die LES-Methoden verglichen. In Abbildung 11 sind die Spektren der TKE für zwei verschiedene Zeitpunkte zu sehen. Es zeigt sich, dass die anfängliche Verteilung der TKE über der Wellenzahl durch die XWENO-Methoden gut realisiert wird.

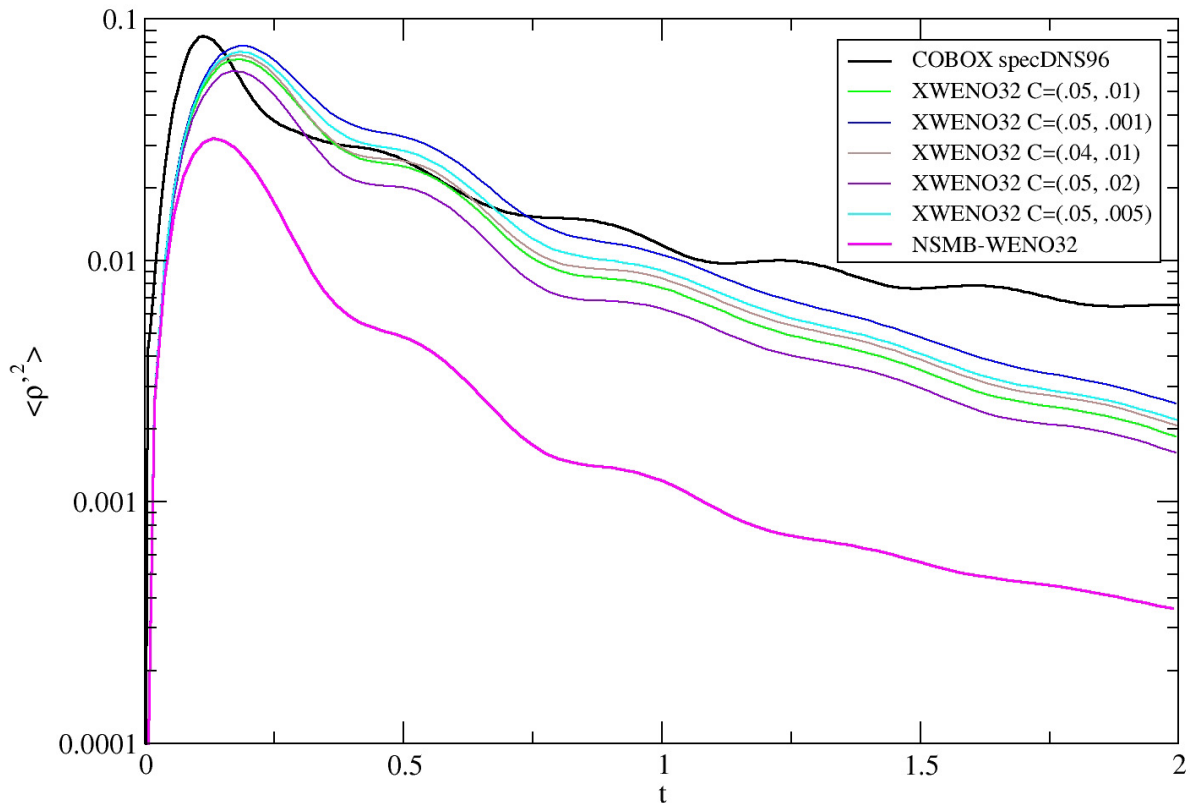


Abbildung 10: Verlauf der Dichteverianz im Fall 2

Sie weisen dabei einen höheren Energieanteil auf, als die NSMB-WENO Methode. In der späteren Entwicklung hingegen zeigt sich, dass der Abfall der Energie über der Wellenzahl schlechter als durch die NSMB-WENO Simulation genähert wird. Die eindimensionalen Untersuchung in [1] zeigte, dass die Entfaltungskonstanten den Verlauf des Spektrums beeinflussen. Somit sollten für die weitere Optimierung und Verbesserung des Modells zusätzlich die Parameter der Entfaltung variiert werden, um ein optimales Modell zu finden. Da die manuelle Suche nach einem optimalen Parametersatz nicht sinnvoll ist, wird dazu ein Optimierungsalgorithmus genutzt, siehe Kapitel A im Anhang. Die Optimierung wurde in dieser Diplomarbeit nicht durchgeführt und bleibt weiterführenden Untersuchungen überlassen. Es ist zu bemerken, dass der Optimierungsalgorithmus aus Anhang A in [1] verwendet wurde.

Als letzte Illustration zu dem Fall *ife96* sind in Abbildung 12 Isoflächen des Betrages der Wirbelstärke in 3D dargestellt. Das Strömungsfeld im oberen Bild wurde mit dem XWENO-Modell berechnet und die Konstanten $C_{s1} = 0.05$, $C_{s2} = 0.01$ gesetzt. Im unteren Bild ist das mit COBOX berechnete und gefilterte Strömungsfeld dargestellt. Es ist dabei deutlich zu sehen, dass das gesamte Volumen von einer Vielzahl kleinskaliger Strukturen durchsetzt ist. Im qualitativen Vergleich der beiden Visualisierungen in Abbildung 12 zeigt sich, dass die Strukturen der LES denen der DNS entsprechen. Da die DNS zum gleichen Zeitpunkt mehr Energie als die LES enthält, ist im unteren Bild die Wirbelstärke größer.

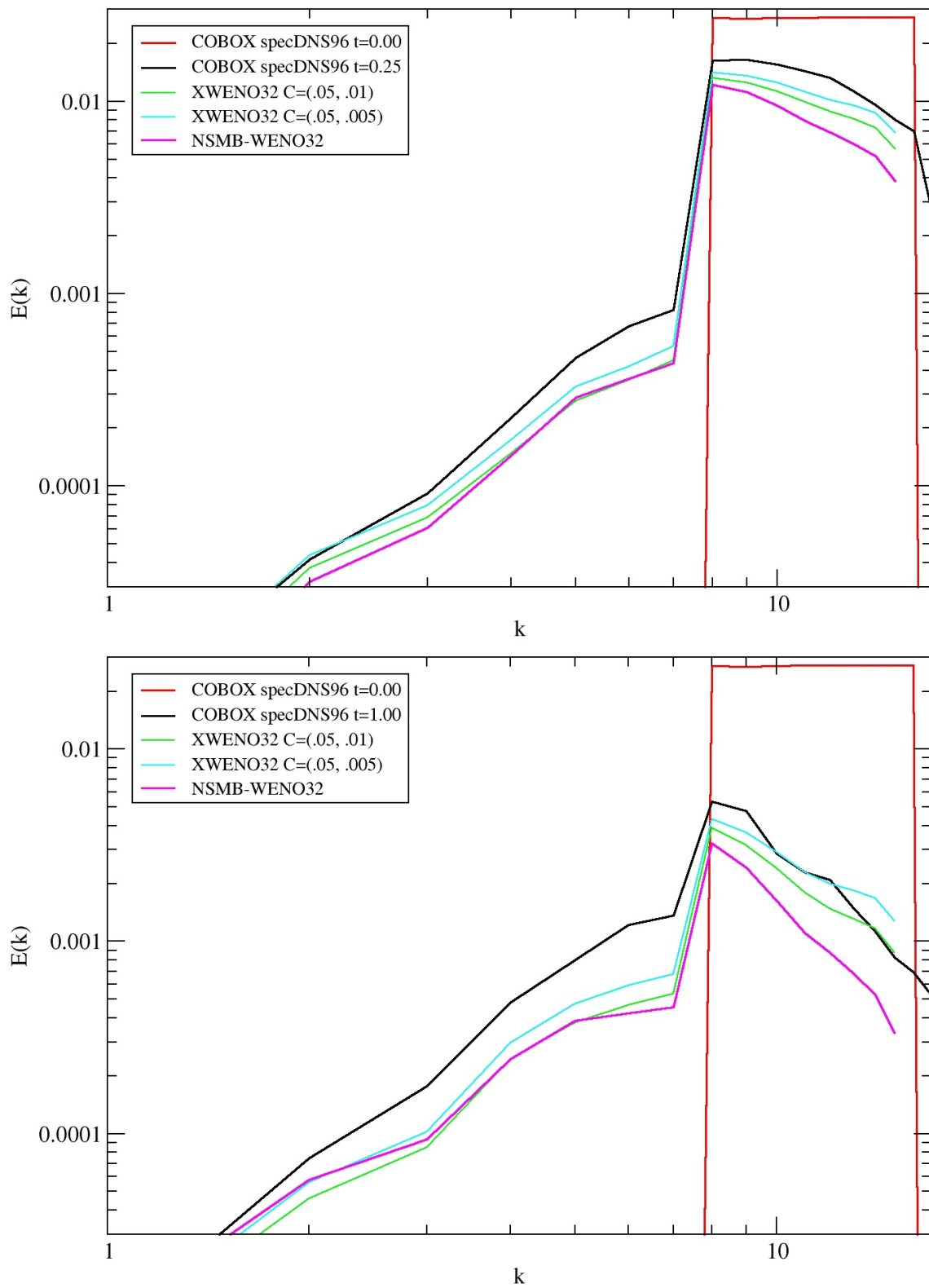


Abbildung 11: Vergleich der Spektren der turbulenten kinetischen Energie zum Zeitpunkt 0.25 (oben) und zum Zeitpunkt 1.00 (unten)

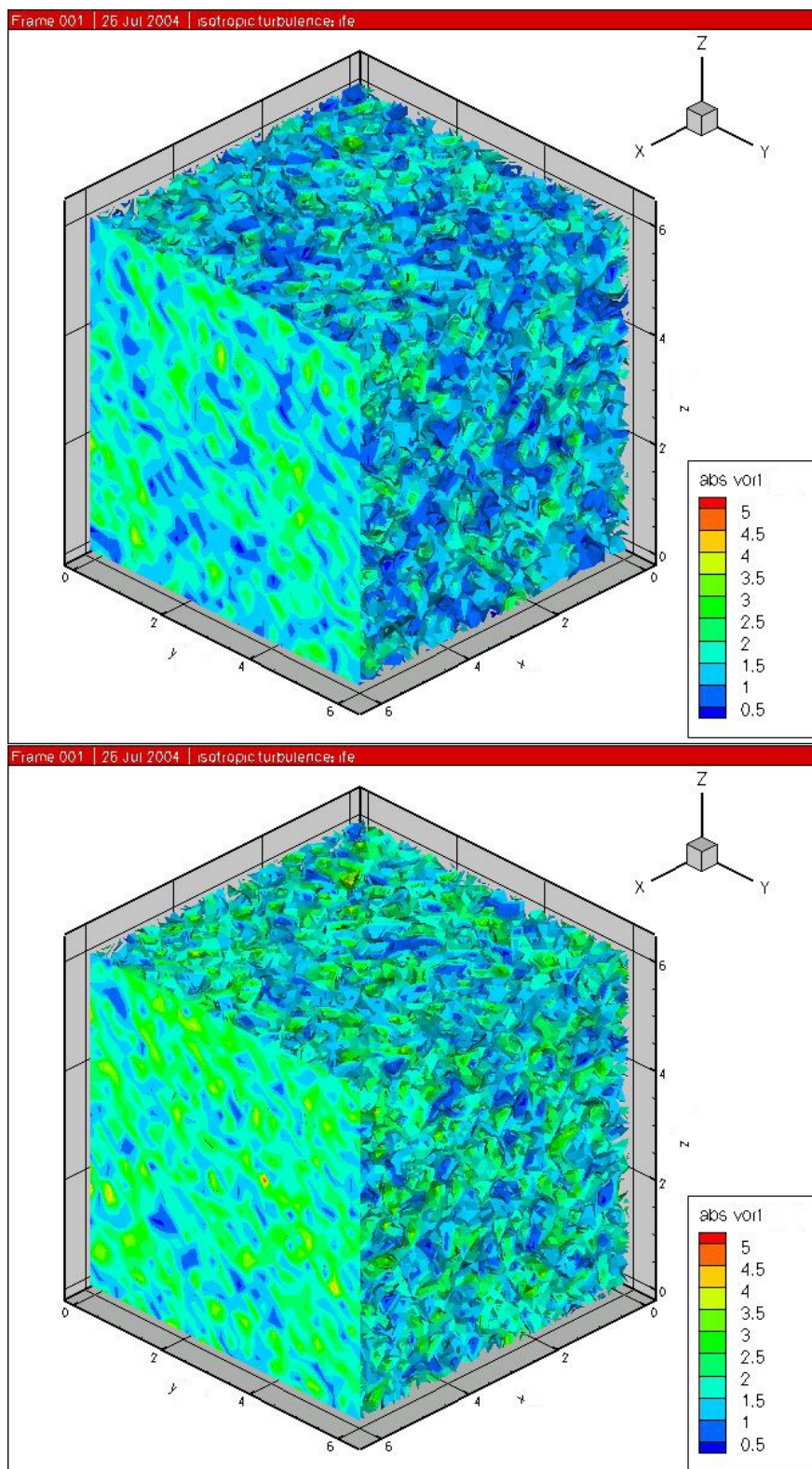


Abbildung 12: Momentaufnahme der absoluten Wirbelstärke zum Zeitpunkt $t = 0.5$, berechnet mit dem XWENO-Modell (oben) und COBOX (unten)

6 Zusammenfassung

In dieser Diplomarbeit dient das in [1] eingeführte eindimensionale Subgrid-Scale-Modell für die Large-Eddy Simulation als Grundlage für die Entwicklung eines Modells für kompressible Turbulenz. Aus dem im ursprünglichen Modell enthaltenen eindimensionalen Entfaltungsoperator wird ein Operator für den dreidimensionalen Fall entwickelt und auf Konsistenz untersucht.

Darauf aufbauend wird mit diesem Entfaltungsoperator und der Definition eines numerischen Flusses das XWENO-Modell für die implizite LES-Modellierung kompressibler Turbulenz aufgestellt.

Die rechen-technische Umsetzung des Modells geschieht in dem Programmpaket NSMB, welches etabliert und validiert wurde. Für NSMB wurde dazu ein Modul in Fortran geschrieben, welches die Entfaltung und die Flussberechnung des XWENO-Modells vornimmt.

Die Analyse der modifizierten Differentialgleichung wird in MAPLE durchgeführt. Dazu wurden im Rahmen dieser Diplomarbeit Routinen geschrieben, welche die gewünschten Fehlerterme für die Analyse berechnen. Zusätzlich sind die Routinen einfach zu erweitern, um andere implizite Modelle analysieren zu können.

Die Simulationsrechnungen für kompressible Turbulenz wurden anhand des Referenzfalles *ife96* aus [3] für verschiedene Parameter durchgeführt, um ein geeignetes Modell zu finden und damit gezeigt, dass das hier beschriebene Modell bereits gute Ergebnisse liefert.

Da die manuelle Suche nach den optimalen Parametern nicht sinnvoll ist, wurden für die weitere, automatisierte Optimierung Routinen geschrieben und validiert, mit deren Hilfe eine evolutionäre Optimierung durchgeführt werden kann. Angewandt wurden diese Routinen bereits in [1]. Weiterführende Arbeiten in Richtung der Optimierung bleiben nachfolgenden Projekten überlassen.

7 Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei allen bedanken, die mich während meiner Diplomphase unterstützt haben. Speziell danken möchte ich

- Prof. H.-G. Roos für die fachlichen Hinweise und kritischen Ratschläge auf dem numerischen Gebiet,
- Prof. N.A. Adams und Stefan Hickel für die wöchentlichen Treffen und die immer offene Tür, welche viele Probleme beseitigte und neue Ideen hervorbrachte und
- dem gesamten Institut für Strömungsmechanik für die herzliche Aufnahme, sowie die Bereitstellung eines Arbeitsplatzes mit moderner Technik.

Ein besonderer Dank geht an meine Eltern, für die immerwährende Unterstützung vor, während und neben dem Studium.

Last but not least, danke ich meinen Freunden, speziell Rick-Rainer Ludwig und Thomas Krause, die mit ihren Korrekturhinweisen halfen, die Fehlerrate dieser Arbeit zu reduzieren.

A Evolutionäre Optimierung

Dieses Kapitel beinhaltet eine Kurzeinführung in die Problematik der Optimierung und der damit verbundenen Suche nach optimalen Parametern für das implizite Modell. Wie in den vorherigen Abschnitten erläutert, beinhaltet das implizite Modell eine Reihe von Parametern, mit denen das Modell beeinflusst werden kann. Die Schwierigkeit der Optimierung im Rahmen der turbulenten Strömungen besteht hauptsächlich darin, dass die Fitness-Funktion, also die zu optimierende Größe, nicht differenzierbar und bei zufälligen Startwerten sogar mehrdeutig ist.

Übliche Optimierungsstrategien unter Ausnutzung lokaler Anstiege versagen daher, und es wird auf die Evolutionäre Optimierung ausgewichen. Diese imitiert den natürlichen Vorgang der Evolution und setzt die Konzepte der Selektion, Rekombination und Mutation in Algorithmen um. Damit ist die Evolutionäre Optimierung eine gesteuerte zufällige Suche nach einem Optimum.

Um den Prozess der Evolution nachzubilden, wird eine Menge von Punkten, genannt *Individuen*, aus dem Suchraum gewählt. Diese Menge wird als *Generation* bezeichnet. Jedes Individuum hat dabei eigene *Gene* und eine eigene *Fitness*, die den Koordinaten im Suchraum bzw. dem Wert der Zielfunktion entsprechen. Nach der Initialisierung der ersten Generation mit zufälligen Werten läuft die Optimierung in Runden mit den folgenden Schritten:

1. Selektion der Eltern
2. Rekombination
3. Mutation
4. Selektion der neuen Generation

Die Optimierung wird beendet, wenn entweder ein Optimierungskriterium erfüllt ist oder eine Maximalanzahl von Runden durchlaufen ist. Die Gene des besten Individuums werden dann als quasi-optimale Lösung angesehen.

Für einen Überblick über Genetische Algorithmen seien [13] und [14] empfohlen. Genauer auf Evolutionäre Algorithmen gehen [15] und [16] ein, in denen auch Testfälle für die Optimierung beschrieben sind.

A.1 Selektion der Eltern

Die Auswahl geeigneter Elternpaare soll zwei verschiedenen Aspekten genügen. Zum Einen sollen Individuen mit einer hohen Fitness häufiger ausgewählt werden, zum Anderen auch Individuen mit einer schlechten Fitness Nachwuchs produzieren können. Die Gründe dafür sind einerseits die Verbesserung der durchschnittlichen Fitness der Generation und andererseits die Erhaltung der Vielfalt der Individuen, um lokalen Optima entkommen zu können. Der Algorithmus muss eine Balance zwischen weiter Streuung der Individuen und Verfeinerung am Optimum gewährleisten. Daher wird die Selektion zufällig ausgeführt mit einer höheren Wahrscheinlichkeit für bessere Individuen.

Für die Auswahl der Individuen wurden zwei verschiedene Algorithmen umgesetzt.

- **Roulette-Selektion**

Die Auswahlwahrscheinlichkeit, ist hierbei direkt proportional zur individuellen Fitness. Anschaulich ist dies mit einem Roulette-Tisch zu erklären, dessen Fächer Breiten proportional zur Fitness des Individuums haben. Wenn die Kugel in einem solchen Fach liegen bleibt, ist das entsprechende Individuum gewählt.

- **Turnier-Selektion**

Ein Turnier einer gegebenen Größe, d.h. eine Menge an konkurrierenden Individuen, wird mit zufällig gezogenen Individuen gefüllt. Dabei können Individuen auch mehrmals vorhanden sein. Das Individuum mit der besten Fitness ist der Gewinner des Turniers und damit als ein Elternteil gewählt.

A.2 Rekombination

Jedes der gewählten Elternpaare produziert zwei neue Individuen, den *Nachwuchs*. Dieser entsteht durch Rekombination der Gene seiner Eltern. Die Rekombination soll dabei die Eigenschaften der Eltern mischen. Folgende zwei Methoden wurden implementiert:

- **2-Punkt Crossover**

Wie in der natürlichen DNA können die Gene als lineare Kette dargestellt werden. Die Ketten der beiden Eltern werden an zwei zufälligen Stellen überkreuzt und zwischen diesen beiden Überkreuzungen werden die Gene getauscht. Wenn die beiden gewählten Punkte identisch sind, so wird ein 1-Punkt Crossover durchgeführt und von der Überkreuzung bis zum Ende der Kette die Gene getauscht. Die neu entstandenen Genketten sind die Gene des Nachwuchses.

- **Arithmetischer Crossover**

Hierbei wird für jedes Gen eine unabhängige zufällige Variable $r_i \in (0, 1)$ gewählt und die Gene des Nachwuchses als Konvexkombination der Elterngene generiert. Für ein Gen i zeigen dies folgende Formeln, wobei o^1, o^2 den ersten und zweiten Nachwuchs und p^1, p^2 den ersten und zweiten Elternteil bezeichnet:

$$o_i^1 := p_i^1 + r_i p_i^2, \quad o_i^2 := p_i^1 + (1 - r_i) p_i^2.$$

A.3 Mutation

Damit die neu erzeugten Individuen über dem Suchraum weiter verteilt sind, durchlaufen die Gene aller erzeugten Individuen eine Mutation. Dabei wird dem Gen-Vektor ein zentrierter Zufallsvektor aufaddiert, dessen Komponenten entweder normalverteilt oder gleichverteilt sind. Die Varianz bzw. Spannweite der Verteilung wird dynamisch angepasst. Für die Anpassung wird geprüft, ob die Individuen nahe dem Optimum sind oder nicht. Dies wird mittels zweier von mir entwickelter Kriterien entschieden:

- **Neue Individuen**

In diesem Kriterium wird die Rate neuer Individuen im oberen Drittel der aktuellen Generation betrachtet. Diese Rate wird gesteuert, und es wird versucht, sie konstant

zu halten.

Wenn die Rate zu groß ist wird angenommen, dass die Individuen weit vom Optimum entfernt sind und die Varianz wird erhöht. Wenn die Rate zu klein ist, liegt das Optimum in der Nähe und die Varianz wird verkleinert, um die lokale Umgebung genauer zu durchsuchen.

- **Durchschnittsalter**

In diesem Kriterium wird versucht, das Durchschnittsalter des oberen Drittels einer Generation konstant zu halten. Die Idee ist die gleiche wie im ersten Kriterium. Wenn das Durchschnittsalter zu klein ist, wird die Varianz erhöht und ansonsten verringert.

Beide Kriterien verringern in der Nähe eines Optimums die Varianz. Aber es gibt dabei Unterschiede zwischen den beiden Kriterien. Das erste verfeinert die Suche in der Nähe des Optimums wesentlich stärker, hingegen scheint das zweite die Gegend des globalen Optimums besser zu finden. Somit ist am günstigsten eine gemischte Strategie zu nutzen. Dazu wird zuerst das zweite Kriterium verwendet und nach der Hälfte der Evolutionsschritte auf das erste Kriterium umgeschaltet.

A.4 Selektion der neuen Generation

Zusammen mit dem Nachwuchs existieren zu diesem Zeitpunkt μ Individuen aus der alten Generation und λ Nachwuchs-Individuen. Um daraus eine neue Generation der gleichen Größe μ wie der alten Generation zu erzeugen, sind zwei Strategien des Typs $\mu + \lambda$ implementiert, d.h. die neue Generation wird aus allen vorhandenen Individuen gewählt. In der ersten Methode werden einfach die besten μ Individuen für die neue Generation genommen. Diese Entscheidung ist eine sehr harte, und die Vielfalt der Individuen wird sehr schnell reduziert. In der zweiten Methode wird analog der Selektion der Eltern eine Turnier-Entscheidung genutzt und λ -mal das schlechteste Individuum eines Turniers entfernt. In beiden Methoden überlebt damit immer das derzeit beste Individuum, und ein bereits erreichtes Quasi-Optimum wird immer in die nächste Generation übernommen.

Literatur

- [1] N.A. Adams, S. Hickel, S. Franz: Implicit Subgrid-Scale Modelling by Adaptive Deconvolution, erscheint in JCP, 2004
- [2] N.D. Sandham, W.C. Reynolds: A Numerical Investigation of Compressible Mixing Layer, Rep TF-45, Stanford University, 1989
- [3] G.A. Blaisdell, N.N. Mansour, W.C. Reynolds: Numerical Simulations of Compressible Homogeneous Turbulence, Rep TF-50, Stanford University, 1991
- [4] D. Obrist: Ein Pseudospektralverfahren zur direkten numerischen Simulation isotroper kompressibler Turbulenz, ETH Zürich, 1997
- [5] J. Smagorinsky: General circulation experiments with the primitive equations Mon. Weath. Rev. 93, 1963
- [6] S. Ghosal: An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence, J. Comput. Phys. 125, 1996
- [7] B. Vreman: Direct and Large-Eddy Simulation of the Compressible Turbulent Mixing Layer, PhD thesis, University of Twente, 1995
- [8] B. Vreman, B. Geurts, H. Kuerten: A priori tests of Large Eddy Simulation of the compressible plane mixing layer, J. Eng. Math. 29, 1995
- [9] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, S. Chakravarthy: Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes, J. Comp. Phys. 71, 1987
- [10] C.-W. Shu: Essentially non-oscillatory and weighted essentially nonoscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, in: B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu, E. Tadmor, A. Quarteroni (Eds.): Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations, Vol. 1697 of Lecture Notes in Mathematics, Springer, 1998
- [11] G.-S. Jiang, C.-W. Shu: Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes, J. Comput. Phys. 126, 1996
- [12] J. Shi, C. Hu, C.-W. Shu: A Technique of Treating Negative Weights in WENO Schemes, NASA/CR-2000-210632, ICASE Report No. 2000-49
- [13] D. Beasley, D.R. Bull, R.R. Martin: An overview of genetic algorithms: Part 1, fundamentals, University Computing. 15, 1993
- [14] D. Beasley, D.R. Bull, R.R. Martin: An overview of genetic algorithms: Part 2, research topics, University Computing. 15, 1993
- [15] T. Jansen: Evolutionäre Algorithmen (Vorlesungsskript), Universität Dortmund, 2003
- [16] T. Back, D.B. Fogel, Z. Michalewicz: Handbook of Evolutionary Computation, University Oxford Press, 1997

ERKLÄRUNG

Hiermit erkläre ich, dass ich die am heutigen Tag eingereichte Diplomarbeit zum Thema „Entwicklung eines impliziten LES Modells für kompressible Turbulenz“ unter der Betreuung von Prof. H.-G. Roos und Prof. N.A. Adams selbstständig erarbeitet, verfasst und Zitate kenntlich gemacht habe. Andere als die angegebenen Hilfsmittel wurden von mir nicht benutzt.

02. August 2004

Datum

Unterschrift