

PIK Report

No. 109

MOLOCH

EIN STRÖMUNGSVERFAHREN FÜR
INKOMPRESSIBLE STRÖMUNGEN

- Technische Referenz 1.0 -

Matthias Münch



POTSDAM INSTITUTE
FOR
CLIMATE IMPACT RESEARCH (PIK)

Autor:

Dipl.-Ing. Matthias Münch
Freie Universität Berlin, Institut für Mathematik
FB Mathematik und Informatik
Arnimallee 6, D-14195 Berlin
Tel.: +49-30-838-75375
Fax: +49-30-838-54977
E-mail: muench@math.fu-berlin.de

Ansprechpartner:

Dr. Nicola Botta
Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung e.V.
Tel.: +49-331-288-2657
E-mail: Nicola.Botta@pik-potsdam.de

Prof. Dr.-Ing. Rupert Klein

Freie Universität Berlin, Institut für Mathematik
Tel.: +49-30-84185-355
E-mail: Rupert.Klein@zib.de

Herausgeber:

Prof. Dr. F.-W. Gerstengarbe

Technische Ausführung:

U. Werner

POTSDAM-INSTITUT
FÜR KLIMAFOLGENFORSCHUNG
Telegrafenberg
Postfach 60 12 03, 14412 Potsdam
GERMANY

Tel.: +49 (331) 288-2500
Fax: +49 (331) 288-2600
E-mail-Adresse: pik@pik-potsdam.de

Abstract

Many flows relevant for climate research, weather forecasting, heating, ventilation, air-conditioning (HVAC), and fire safety are characterized by relatively small velocities compared to the speed of sound. The efficient computation of such low Mach number flows requires computational methods that avoid the Courant-Friedrich-Lewy time step restriction, based on the speed of sound. An essential issue in the context meteorological flow modelling, as investigated at the Potsdam Institute for Climate Impact Research, is the construction of efficient numerical schemes for such flows that are in conservation form with respect to all physically conserved quantities, i.e., mass, momentum, and energy.

Extending initial developments by *Klein et. al* [9, 13, 15, 19, 20], a new scheme for such flows is currently under development which accounts for flows in three space dimensions, is fully conservative, with second order accuracy and covers the entire regime $0 \leq M \leq 1$.

To transfer this scheme to practical applications, the author has created the programm code MOLOCH. This technical report collects the background theory of the scheme and describes the current state of its implementation. The code is based on a finite-volume method using a cartesian grid. Currently, the scheme is limited to Zero-Mach number.

The first four chapters describe the mathematical background of the scheme. After a short presentation of the underlying set of equations, the result of a one-scale asymptotic analysis is discussed to elucidate the main problems in the context of constructing numerical simulation schemes, and to motivate the construction of the method.

Chapter 5 describes the details of the numerical technique and provides additional information regarding the discretization and the implementation of boundary conditions.

Chapter 6 describes the implementation of gravitational forces, necessary to run the falling droplet test case, which will be described in Chapter 7. An empirical convergence study confirms the predicted second order accuracy of the implemented scheme.

Current work in progress aims at extending the scheme presented here to the meteorologically important class anelastic, instead of incompressible, flow models. The computational code structure as presented here will transfer to these applications without change.

Vorwort

Zielsetzung für die Entwicklung des Programmcodes MOLOCH ist die Berechnung von dreidimensionalen Strömungen im gesamten Bereich der Mach-Zahl $0 \leq M \leq 1$ unter exakter Einhaltung der physikalischen Erhaltungseigenschaften. Derartige Problemstellungen treten in zahlreichen Anwendungsgebieten auf, bei denen die auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten starke Veränderungen aufweisen. Beispiele hierfür sind Simulationen von bodennahen Strömungen, bspw. zur Vorhersage des Ausbreitungsverhaltens von Schadstoffwolken, die Vorhersage der Rauch- und Wärmeausbreitung bei Bränden in Gebäuden oder die Simulation von Verbrennungsprozessen in Gasturbinen.

Diese Referenz beschreibt die Implementierung einer Verfahrenserweiterung für inkompressible Strömungen ($M = 0$) in einem Godunov-Typ-Verfahren. Grundlage ist der durch Herrn Prof. R. Klein 1995 veröffentlichte Verfahrensansatz [13], der in Zusammenarbeit mit Herrn Dr. N. Botta, Herrn Dr. K.J. Geratz und Herrn T. Schneider weiterentwickelt wurde.

Mit dem Ziel die Erkenntnisse dieser Arbeiten für das Regime $M = 0$ in einer Programmversion zusammenzufassen und nutzbar zu machen, erfolgte die Entwicklung des Programms MOLOCH durch den Autor dieses Berichtes. In Zusammenarbeit mit Herrn Prof. Klein und vielen anderen konnten hierbei weitere Verfahrensverbesserungen erzielt werden. Herrn Dr. Schneider und Herrn Dr. Oevermann sei an dieser Stelle für die Unterstützung bei der Implementierung eines algebraischen Mehrgitterverfahrens gedankt. Im Zuge der Implementierung konnte auch die neue Idee der tri-/bilinearen Interpolation in den Projektionsmethoden umgesetzt werden, die das Verfahren weiter stabilisierte. Für fachlichen Rat zur Konfigurierung des Mehrgitterlösers standen dankenswerterweise Herr Prof. Dr. R. Krause und Herr Prof. Dr. O. Knio zur Verfügung. Unterstützung bei der Fehlersuche, insbesondere im Zusammenhang mit den Randbedingungen der Projektionsschritte, leistete Herr Dr. H. Schmidt.

Abschließend sei an dieser Stelle den Autoren der Open Software Bewegung gedankt. Insbesondere der GNU-C Compiler, der DDD-Debugger, das Dokumentationsprogramm Doxygen, der Editor Emacs, das Textsatzsystems \LaTeX sowie das Grafikprogramm xfig haben großen Anteil am Entstehen dieser Arbeit. Das verwendete Debian GNU/Linux System hat mich hierbei nie im Stich gelassen.

Berlin, März 2007

Matthias Münch

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	ix
1 Einleitung	1
1.1 Gliederung	2
2 Mathematisches Modell	4
2.1 Gleichungssystem	5
3 Dimensionsanalyse	6
3.1 Motivation	6
3.2 Dimensionslose Kennzahlen	8
3.3 Wahl geeigneter Referenzgrößen	8
3.4 Entdimensioniertes Gleichungssystem	10
4 Asymptotische Analyse	12
4.1 Asymptotische Analyse für $M = 0$	13
4.2 Konsequenz der asymptotischen Analyse	15
5 Verfahrenskonstruktion	18
5.1 Projektionsverfahren für $M = 0$	19
5.1.1 Prädiktorschritt	20
5.1.2 Korrektorschritt	25
5.2 Lösungsverfahren	35
5.3 Bestimmung der Referenz-Mach-Zahl M	36
5.4 Randbedingungen	36
5.4.1 Block-Rand	38
5.4.2 Periodischer Rand	40
5.4.3 Null-Gradient Rand	40
5.4.4 Feste Wand	41
6 Erweiterung des Projektionsverfahrens	45
6.1 Gravitation	45
6.1.1 Ergebnis der Asymptotischen Analyse	45
6.1.2 Modifikation der Verfahrenskonstruktion ($M = 0$)	46

7	Verfahrenstest	49
7.1	Konvergenzberechnung	49
7.2	Wirbelfeld mit konstanter Dichte	50
7.3	Wirbelfeld mit variabler Dichte	51
7.4	Gravitationsfeld mit ruhendem Medium	53
7.5	Im Gravitationsfeld advektierter Wirbel	55
7.6	Gravitation mit Scherströmung	56
7.7	Fallender „Tropfen“	58
8	Anhang	61
8.1	Details zur Dimensionsanalyse	62
8.1.1	Dimensionslose Massenbilanz	62
8.1.2	Dimensionslose Impulsbilanz	62
8.1.3	Dimensionslose Energiebilanz	63
8.1.4	Dimensionslose Druckzustandsgleichung	63
8.2	Details zur Asymptotik	64
8.2.1	Herleitung der asymptotischen Gleichungssätze	64
8.3	Details zur Verfahrenskonstruktion	68
8.3.1	Verfügbare Limiterfunktionen	68

Abbildungsverzeichnis

2.1	Kontrollvolumen, Erhaltungsansatz	4
3.1	Verwendete SI-Einheiten	9
4.1	Die Mach-Zahl M als Maßstabsfaktor	16
4.2	Druckskalen im Bereich $M \ll 1$	16
5.1	5 Punktestern, 1. Projektion	30
5.2	Duales Gitter	31
5.3	9 Punktestern, 2. Projektion	33
5.4	Duales Teilvolumen \bar{V}	33
5.5	Duales Gitter	34
5.6	Rechengitter mit Hilfszellen	37
5.7	Notation der Hilfszellen	37
5.9	Hilfzellensetzung am Null-Gradient Rand	40
5.10	Hilfzellen feste Wand	41
5.11	Duales Kontrollvolumen an fester Wand	44
7.1	Konvergenzstudie konstante Dichte, mit Limiter	50
7.2	Konvergenzstudie konstante Dichte, ohne Limiter	51
7.3	Konvergenzstudie konstante Dichte, mit Limiter	51
7.4	Minion Testfall mit variabler Dichte	52
7.5	Konvergenzstudie variable Dichte	52
7.6	Gravitationsbox in Ruhe, Hydrostatik	54
7.7	Gravitationsbox in Ruhe, v -Geschwindigkeit	54
7.8	Advektion mit Gravitation, Dichteverteilung	56
7.9	Scherströmung mit Gravitation, Dichteverteilung	57
7.10	Konvergenzstudie ohne Limiter	57
7.11	Dichte und Wirbelstärke	58
7.12	Testfall „fallender Tropfen“, 3d Fläche	59
7.13	Testfall „fallender Tropfen“, 2d Kontour	60
8.1	Stückweise lineare Rekonstruktion einer Verteilung	68

Nomenklatur

Lateinische Zeichen

A	Fläche
c	Schallgeschwindigkeit
dA	allgemeines Flächenelement
e	Summe aus innerer und kinetischer Energie
e	Fehler
\vec{F}_{Vol}	Vektor aller angreifenden Volumenkräfte
\vec{g}	Gravitationsvektor $\vec{g} = [0, g, 0]^T$
g	Gravitationsbeschleunigung
$\vec{F}(\vec{U})$	Flußvektor der Erhaltungsgrößen, hier $\vec{F}(\vec{U}) = [\rho, \rho\vec{v}, \rho e]^T$
h	spezifische Enthalpie
l	Länge
\vec{n}	Normalenvektor
p	Druck
t	Zeit
\vec{U}	Vektor der Erhaltungsgrößen
V	Volumen
u, v, w	Komponenten des Geschwindigkeitsvektors im Raum
\vec{v}	Geschwindigkeitsvektor $\vec{v} = [u, v, w]^T$
\vec{x}	Ortsvektor $\vec{x} = [x, y, z]^T$

Ähnlichkeitskennzahlen

Fr	Froude-Zahl
M	Mach-Zahl
Sr	Strouhal-Zahl

Mathematische Ausdrücke, Operatoren und Indizes

\vec{a}	Vektor im physikalischen Raum \mathbb{R}^3
\vec{A}	Vektor im Zustandsraum $\mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}$
$\vec{\vec{A}}$	Matrix (Tensor 2. Stufe)
∇	Nabla-Operator, $\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right]^T$
\mathcal{L}	Mathematischer Operator
O	Ordnung
\circ	Dyadisches Produkt
\cdot	Euklidisches Skalarprodukt
Δt	Zeitschrittweite
Δx	Gitterweite in x-Richtung
ϕ^n	Größe ϕ zum Zeitniveau des n-ten Zeitschrittes
ϕ^{n+1}	Größe ϕ zum Zeitniveau des n+1-ten Zeitschrittes
ϕ^*	Größe ϕ nach der 1. Projektion
ϕ^{**}	Größe ϕ nach dem Prädiktor
$\phi_{i,j}$	Größe ϕ am Achsenindex i und j
<i>Euler</i>	Eulergleichungen
<i>Korr</i>	Korrektor
<i>Prä</i>	Prädiktor
<i>Vol</i>	Volumen
<i>ref</i>	Referenz

Griechische Zeichen

γ	Isentropenexponent
Π	allgemeine dimensionslose Kennzahl
π	Hilfsvariable für den asymptotischen Druckansatz
ρ	Dichte
ϕ	allgemeine Größe
ψ	allgemeine Größe
θ	allgemeine Größe
$\vec{\Omega}_{Vol}$	Vektor der äußeren Einflüsse auf das Volumen V

1 Einleitung

Explizite Godunov-Typ-Verfahren (GDT-Verfahren), wie bspw. das HLLE-Verfahren, erlauben eine relativ genaue approximative Wiedergabe von Druckstößen und Diskontinuitäten in kompressiblen Strömungen. Die Stabilität dieser expliziten Lösungsverfahren verlangt jedoch eine Begrenzung der Zeitschrittweite des numerischen Verfahrens (CFL-Bedingung)¹.

Die Kompressibilität einer Strömung wird durch die Mach-Zahl M definiert, die sich über das Verhältnis von Strömungs- zu Schallgeschwindigkeit berechnen lässt. Während in kompressiblen Strömungen ($M = 1$) Strömungs- und Schallgeschwindigkeiten von der gleichen Größenordnung $O(1)$ sind, ändert sich dieses Verhältnis für Strömungen $M < 1$ in Richtung $O(M^{-1})$. Im Grenzfall $M = 0$ strebt dieses Verhältnis dann gegen Unendlich und der zulässige Zeitschritt wird unendlich klein. Die Anwendung eines expliziten GDT-Verfahrens im Strömungsbereich $0 \leq M \ll 1$ wird daher aufgrund der einzuhaltenden Zeitschrittweitenbedingung zu einer extrem hohen Anzahl von Rechenschritten führen. Dies führt nicht nur zu erheblich höheren Rechenzeiten, sondern auch zu einem größeren Einfluss numerischer Effekte auf die berechnete Lösung (numerische Dissipation).

Um die Limitierung durch die CFL-Bedingung für den Strömungsbereich $M \ll 1$ zu umgehen, wurden semi-implizite Verfahren entwickelt, die die schnellen akustischen Signalgeschwindigkeiten implizit diskretisieren, die langsameren konvektiven Strömungsterme jedoch weiterhin explizit behandeln, so dass die Zeitschrittweite nur durch die Strömungsgeschwindigkeit bestimmt wird. Für die Berechnung derartiger inkompressibler Strömungen sind zahlreiche Verfahrensansätze publiziert worden (vergl. SIMPLE-Verfahren von Patankar [18], PISO-Verfahren [11], Projektionsverfahren von Bell et al. [2] und Almgren et al. [1]).

Alle diese Verfahren sind jedoch entweder auf bestimmte Anwendungsgebiete bzw. Strömungsregime beschränkt, nicht in Erhaltungsform oder erfüllen eine andere der unten aufgeführten Anforderungen nicht. Ein allgemeinerer Ansatz findet sich in Klein [13]. Dieser Ansatz zielt auf eine Verfahrenskonstruktion die kontinuierlich im gesamten Bereich von $0 \leq M \leq 1$ anwendbar

¹Die Courant-Friedrich-Levy-Bedingung (CFL-Bedingung) verlangt eine Zeitschrittbegrenzung, so dass advektierte Größen innerhalb eines Zeitschrittes keine Zelle vollständig durchströmen.

ist, im Bereich $M = 1$ in ein GDT-Verfahren übergeht und die nachfolgenden Anforderungen erfüllt:

1. Anwendbar in 1, 2 und 3 Raumdimensionen.
2. Einhaltung der Erhaltungseigenschaften für Masse, Impuls und Energie.
3. Global und lokal zweiter Ordnung genau in Raum und Zeit.
4. Verwendung der bewährten expliziten, hochauflösenden „shock-capturing-Verfahren“ (Godunov-Typ-Verfahren) im kompressiblen Strömungsbereich $M = 1$.
5. Verwendung effizienter impliziter Verfahren im Bereich $0 \leq M < 1$.
6. Darstellung großer Dichteamplituden im inkompressiblen Bereich.
7. Akurate Beschreibung langwelliger Akustik aufgrund von Druckamplituden der Größenordnung $\delta p/p_\infty = O(M)$ bzw. von schwachen nichtlinearen Akustikwellen bei kleinen Machzahlen.

Nachdem in [13] mit Hilfe einer systematischen asymptotischen Analyse des Gleichungssystems die prinzipielle Machbarkeit für eindimensionale Probleme gezeigt wurde, konnte *Geratz* [9] diesen Ansatz für Mach-Zahlen $0 \leq M \ll 1$ auf zwei Raumdimensionen erweitern. Durch *Schneider* wurde das Verfahren dann für $M = 0$ auf drei Raumdimensionen fortentwickelt [15, 19, 20]. Die dreidimensionale Berechnung für $M \ll 1$ ist hingegen noch Gegenstand aktueller Forschung *Klein* [14].

Mit dem Ziel, den für den Bereich verschwindender Mach-Zahl $M = 0$ bereits vorhandenen Verfahrensansatz in die praktische Anwendung zu bringen, wurde vom Autor dieses Berichtes der Programmcode *MOLOCH* geschrieben. Aufbauend auf den oben zitierten Veröffentlichungen von *Klein*, *Geratz* und *Schneider* wurde einerseits das Verfahren weiterentwickelt, andererseits mußten Fragestellungen, wie bspw. die Berücksichtigung einer blockweisen Gebietszerlegung, die Implementierung effizienter linearer Gleichungslöser, die Erweiterung der Randbedingungen, sowie zahlreiche Modifikationen im Detail der verwendeten Projektionsmethoden gelöst werden.

1.1 Gliederung

Auf der Basis der zitierten Arbeitsergebnisse beschreibt diese Dokumentation die Verfahrenskonstruktion unter Berücksichtigung neuerer Erkenntnisse und Lösungsansätze und deren Umsetzung in dem Programmcode *MOLOCH*.

Da die Verfahrenskonstruktion einerseits recht anspruchsvoll ist, andererseits aus didaktischen Gründen nicht strikt von der numerischen Umsetzung getrennt werden sollte, sind alle Details zur Implementierung mit einem kursiven Schrifttyp abgesetzt. Für das prinzipielle Verständnis des Verfahrensaufbaus können diese Passagen übersprungen werden. Ist der Aufbau von Projektionsverfahren bekannt, liefern diese Detailpassagen vertiefende Informationen zur Implementierung des Verfahrens.

Nach Vorstellung des Gleichungssystems für eine reibungsfreie Strömung mit Gravitation im nächsten Kapitel, wird dieses im dritten Kapitel mit Hilfe der Dimensionsanalyse entdimensioniert. Durch die Einführung dimensionsloser Kennzahlen entsteht ein entdimensioniertes Gleichungssystem, aus dem im vierten Kapitel durch Asymptotische Analyse die Problembeschreibenden Gleichungen führender Ordnung herausgearbeitet, sowie einige Nebenbedingungen ermittelt werden.

Im fünften Kapitel wird dann die Verfahrenskonstruktion anhand der Eulergleichungen beschrieben, sowie die Randbehandlung diskutiert. Die Beschränkung auf die Eulergleichungen ist der Didaktik geschuldet und keinesfalls als Einschränkung des vorgestellten Verfahrens zu verstehen.

Im sechsten Kapitel erfolgt die Erweiterung des Verfahrens um die Berücksichtigung der Gravitation. Mit dieser Erweiterung lassen sich bereits die Fähigkeiten des Verfahrensansatzes darstellen. Dies ist Thema des letzten Kapitels in dem numerische Eigenschaften und Rechenergebnisse des beschriebenen Verfahrens vorgestellt werden. Die Resultate wurden mit dem vom Autor erstellten Programmcode MOLOCH erzeugt.

2 Mathematisches Modell

Die Beschreibung der Strömung erfolgt mit Hilfe der physikalischen Größen in Abhängigkeit von Ort und Zeit auf Grundlage des Euler'schen Ansatzes. Er beruht auf der makroskopischen Betrachtungsweise der Strömungsgrößen, die zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort vorherrschen. Der Zusammenhang zu den molekularen Eigenschaften bzw. dem Verhalten der Moleküle des Fluids entsteht über die Kontinuumsannahme. Diese geht davon aus, dass das Fluid durch das gemittelte Molekülverhalten eines Volumenbereiches in Form von makroskopischen Fluideigenschaften (wie z.B. Temperatur, Druck, Dichte, usw.) beschrieben werden kann.

Verhält sich das Fluid in guter Näherung wie ein Kontinuum, können die Wechselwirkung zwischen den benachbarten Volumenbereichen (die Flußvektoren zwischen den Volumina) mathematisch als Funktionen der lokalen Eigenschaften und ihrer ersten Ableitungen beschrieben werden. Da jeder dieser ortsfesten Mittelwerte somit die Fluideigenschaften seiner näheren Umgebung angibt, läßt sich das Strömungsgebiet in ortsfeste kleine Volumenelemente aufteilen, in denen die Fluideigenschaften durch diese Mittelwerte repräsentiert werden. Die Wechselwirkung zwischen den benachbarten Volumenelementen ergibt sich unmittelbar aus dem Erhaltungsprinzip der klassischen Physik.

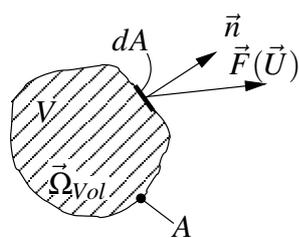


Abbildung 2.1:
Kontrollvolumen

Die Abbildung 2.1 zeigt ein durchströmtes Kontrollvolumen V mit der Oberfläche $A = \partial V$, dem Flächenelement dA und dem zugehörigen Normalenvektor \vec{n} . Das Erhaltungsprinzip besagt, dass die zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen \vec{U} im Volumen V plus der Fluß $\vec{F}(\vec{U})$ normal über die Oberfläche A gleich der Wirkung äußerer Einflüsse $\vec{\Omega}_{Vol}$ auf V ist

$$\frac{d}{dt} \int_V \vec{U} dV + \oint_A \vec{F}(\vec{U}) \cdot \vec{n} dA = \int_V \vec{\Omega}_{Vol} dV. \quad (2.1)$$

Die Erhaltungseigenschaft dieser integralen Erhaltungsgleichungen gilt sowohl global im ganzen Strömungsgebiet, als auch auch lokal in jedem einzelnen Kontrollvolumen.

2.1 Gleichungssystem

Die Darstellung des Projektionsverfahrens erfolgt aus Gründen der Übersichtlichkeit an den Eulergleichungen, die den einfachsten Fall einer reibungsfreien, nicht-reaktiven Strömung darstellen. Um jedoch an einem praktischen Rechenbeispiel die Fähigkeiten des Verfahrens demonstrieren zu können, werden die Eulergleichungen um die Berücksichtigung der Gravitationsbeschleunigung g erweitert. Diese Beschränkung ist keinesfalls als Einschränkung des vorgestellten Verfahrensansatzes auf derartige Strömungen zu verstehen, sondern dient allein der Übersichtlichkeit der Darstellung.

Als Erhaltungsgrößen werden die Dichte ρ , die Impulsdichte $\rho\vec{v}$ sowie die Energiedichte ρe eingeführt, so dass sich mit $\vec{U} = [\rho, \rho\vec{v}, \rho e]^T$ aus (2.1) die integralen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie ergeben:

Massenbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0$$

Impulsbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p \vec{n} dA = \int_V \rho \vec{g} dV \quad (2.2)$$

Energiebilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \int_V \rho \vec{g} \cdot \vec{v} dV$$

Den Zusammenhang zwischen dem Druck p und der Energiedichte ρe stellt die Druckzustandsgleichung her

$$p = (\gamma - 1) \left(\rho e - \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right), \quad (2.3)$$

die auf der Annahme idealen Gasverhaltens und konstanter spezifischer Wärmekapazitäten, respektive eines konstanten Isentropenexponenten γ basiert.

3 Dimensionsanalyse

Das in Kapitel 2 aufgestellte Gleichungssystem ist dimensionsbehaftet. Das heißt, dass jeder Größe definierte Maßeinheiten zugeordnet sind (z.B. der Masse das kg)¹. Unter mathematischen, numerischen bzw. experimentellen Gesichtspunkten ist es jedoch häufig vorteilhafter dimensionslose und normierte Größen zu verwenden.

Dieses Kapitel gibt zunächst einen kurzen Überblick über die Vorteile sowie eine Einführung in die Dimensionsanalyse. Anschließend werden die in dieser Dokumentation benötigten dimensionslosen Kennzahlen beschrieben, um dann das in Kapitel 2 aufgestellte Gleichungssystem zu entdimensionieren.

3.1 Motivation

Die Dimensionsanalyse bietet unter numerischen Gesichtspunkten eine Reihe von Vorteilen:

1. Die Anzahl der Einflussparameter eines Systems lässt sich verringern. Somit sinkt der Aufwand bei Parameterstudien.
2. Durch die Definition dimensionsloser Kennzahlen lässt sich das betrachtete System charakterisieren und mit anderen vergleichen. Dies erlaubt eine Skalierung der Größen, so dass z.B. experimentelle Untersuchungen am Modell stellvertretend für nicht oder schwer handhabbare reale Konfiguration durchgeführt werden können.
3. Es lassen sich systemeigene „Maßstäbe“ einführen, die eine anschaulichere Interpretationsmöglichkeit des Systemverhaltens liefern. Mit Hilfe des beschreibenden Gleichungssystems können die dimensionslosen Kennzahlen Aussagen über das Lösungsverhalten der Gleichung bzw. die Wichtung einzelner Terme liefern.

¹Die Zuordnung ist gesetzlich geregelt, um die Austauschbarkeit von Daten und Messergebnissen zu gewährleisten. Zuständig ist das „Internationale Büro für Maße und Gewichte (BIPM)“, welches u.a. das Internationale Einheitensystem (SI) festlegt hat.

4. Die Normierung verringert das Auftreten numerischer Fehler. Digitale Rechenanlagen speichern Gleitkommazahlen im IEEE-Format als Mantisse und Exponent. Der Darstellungsfehler steigt deshalb mit dem Zahlenwert an. Daher können Rechenoperationen mit Zahlen stark unterschiedlicher Größenordnung aufgrund der beschränkten Mantissenlänge zu großen Abbruchfehlern führen.
5. Eine dimensionslose Lösung enthält alle dimensionsbehafteten Lösungen, deren Parameter zu gleichen dimensionslosen Kennzahlen führen. Aus einer dimensionslosen Lösung lässt sich somit eine Schar von gleichwertigen dimensionsbehafteten Lösungen bilden, die sich nur durch ihre Skalierung unterscheiden.

Die Dimensionsanalyse entstammt dem Problem in experimentellen Arbeiten die Anzahl der Variablen auf die für die Problembeschreibung charakteristischen Größen zu reduzieren [3, 4]. Dieses Hilfsmittel eignet sich aus den oben genannten Gründen auch für numerische Berechnungen.

Die Transformation in ein dimensionsloses Gleichungssystem berücksichtigt keine neuen physikalischen Sachverhalte. Durch die Auswahl geeigneter gewählter Referenzgrößen können jedoch die für das betrachtete Problem interessierenden Systemeigenschaften sichtbar gemacht werden. Referenzgrößen sind dimensionsbehaftete Größen, die in einem geeignet räumlich und zeitlich abgrenzten Lösungsraum des Gleichungssystems dessen Lösungsverhalten wesentlich bestimmen. Ihre Wahl bestimmt somit einerseits das Untersuchungsziel, andererseits normieren sie die dimensionsbehafteten Größen und sorgen somit für eine Begrenzung des verwendeten Zahlenbereichs. Ferner lassen sich durch Produkte von dimensionsbehafteten Referenzgrößen ϕ_{ref} dimensionslose Kennzahlen Π bilden

$$\Pi = \prod_i \phi_{i,ref}^{\alpha_i} \quad \text{mit } [\Pi] = 1. \quad (3.1)$$

Werden bei der Dimensionsanalyse n dimensionsbehaftete Referenzgrößen ϕ_{ref} mit m Basiseinheiten verwendet, resultieren hieraus nach dem 1914 von *Edgar Buckingham* [3] aufgestellten Π -Theorem minimal $n - m$ dimensionslosen Kennzahlen Π . Damit reduziert sich die Zahl der Einflussgrößen des dimensionslosen Gleichungssystems von n auf $n - m$, da nur noch diese dimensionslosen Kennzahlen variiert werden müssen. Probleme die durch dasselbe Gleichungssystem mit ähnlichen dimensionslosen Kennzahlen beschrieben werden, sind somit ähnlich. Aus diesem Grund sind dimensionslose Kennzahlen ein wichtiges Hilfsmittel für die Untersuchung des Systemverhaltens.

3.2 Dimensionslose Kennzahlen

Seit Einführung des Buckingham Theorems sind zahlreiche dimensionslose Kennzahlen definiert worden (siehe z.B. S. Bc 1 ff in [26]). Dimensionslose Kennzahlen sind Konstanten, die eine Eigenschaft im betrachteten Gebiet beschreiben. Die Einbeziehung variabler stoffabhängiger Größen, wie z.B. der dynamischen Viskosität μ , geschieht über hierfür zu wählende Referenzgrößen. Diese repräsentieren den im betrachteten Gebiet zu erwartenden Wert. Für die Beschreibung der betrachteten reibungsfreien, nicht-reaktiven, auftriebsbehafteten Strömung sind folgende dimensionslosen Kennzahlen wesentlich:

Mach-Zahl:

$$M = \frac{v_{ref}}{c_{ref}} = \sqrt{v_{ref}^2 \frac{\rho_{ref}}{p_{ref}}} \hat{=} \frac{\text{Strömungsgeschwindigkeit}}{\text{Schallgeschwindigkeit}}$$

Kennzeichnet den Einfluss der Kompressibilität. Charakteristische Grenzwerte sind $M = 0$ für eine inkompressible Strömung, sowie $M = 1$ für eine voll-kompressible Strömung.

Froude-Zahl:

$$Fr = \frac{v_{ref}}{\sqrt{g_{ref} l_{ref}}} \hat{=} \frac{\text{Strömungsgeschwindigkeit}}{\text{barotrope Schwerewellengeschw.}}$$

Charakterisiert das Auftriebsverhalten, welches sich aus dem Verhältnis der auf eine Fluidoberfläche wirkenden Trägheitskräfte zur Schwerkraft ergibt. Die Längenangabe l_{ref} ist dabei die charakteristische Länge (z.B. eines bewegten Fremdkörpers im Fluid).

Strouhal-Zahl:

$$Sr = \frac{l_{ref}}{v_{ref} t_{ref}} \hat{=} \frac{\text{Advektionszeit}}{\text{Referenzzeit}}$$

Skalenverhältnis zwischen der aus der Referenzlängen und -geschwindigkeit abgeleiteten Referenzzeit und der gewählten Referenzzeit.

3.3 Wahl geeigneter Referenzgrößen

Abstrakt betrachtet ist die numerische Modellierung von Strömungen die Berechnung einer zeitlichen und räumlichen Informationsausbreitung. Hierbei

werden Informationen mit der Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} bzw. der Schallgeschwindigkeit c transportiert. Dieser Transport wird durch das Gleichungssystem (2.2) beschrieben und es stellt sich die Frage, wodurch dieses Gleichungssystem für sehr kleine Mach-Zahlen beeinflusst wird.

In den Erhaltungsgleichungen und der Zustandsgleichung des Drucks werden physikalische Größen mit den folgenden Basiseinheiten des SI-Einheitensystems verwendet:

	SI-Einheit	Massenbilanz	Impulsbilanz	Energiebilanz	Druckzustandsgleichung.
Länge	m	✓	✓	✓	✓
Zeit	s	✓	✓	✓	✓
Masse	kg	✓	✓	✓	✓

Abbildung 3.1: Verwendet SI-Einheiten

Aus der Dimensionsanalyse (Π -Theorem) ist bekannt, dass mit $m = 3$ Basiseinheiten auch mindestens 3 unabhängige Referenzgrößen bestimmt werden müssen, die alle auftretenden Basiseinheiten abdecken. Mit dem Ziel der Darstellung des Einflusses der Mach-Zahl werden die Dichte, die konvektive Strömungsgeschwindigkeit, der Druck und die Länge als Basis-Referenzgrößen festgelegt. Hinzu kommen die Referenzgrößen zur Normierung der stoffspezifischen Größen und Transportkoeffizienten, so dass die folgenden 5 unabhängigen Referenzgrößen verwendet werden

$$\rho_{ref}, v_{ref}, p_{ref}, l_{ref}, g_{ref} \quad (3.2)$$

Aus ihnen lassen sich weitere abgeleitete Referenzgrößen herleiten, die die Bildung der dimensionslosen Kennzahlen vereinfachen.

$$\begin{aligned} \text{Schallgeschwindigkeit} & \quad c_{ref} = \sqrt{\frac{p_{ref}}{\rho_{ref}}} \\ \text{Energie} & \quad e_{ref} = \frac{p_{ref}}{\rho_{ref}} \\ \text{Zeit} & \quad t_{ref} = \frac{l_{ref}}{v_{ref}} \end{aligned}$$

Jede im dimensionsbehafteten Gleichungssystem auftretende dimensionsbehaftete Größe ϕ^* (von nun an mit einem $*$ gekennzeichnet) wird mit der Umwandlungsvorschrift

$$\phi^* = \phi \cdot \phi_{ref} \quad (3.3)$$

in eine dimensionslose Größe ϕ umgewandelt. Dies gilt auch für die „versteckten“ Dimensionen bspw. in den Differentialoperatoren

$$\nabla^* = \nabla \cdot l_{ref}^{-1}.$$

Zum besseren Verständnis sind exemplarisch einige dimensionslose Größen angegeben.

$$\rho = \frac{\rho^*}{\rho_{ref}}, \quad \vec{x} = \frac{\vec{x}^*}{l_{ref}} = (x, y, z)^T, \quad e = \frac{e^*}{\frac{p_{ref}}{\rho_{ref}}}$$

Durch Einsetzen von problemtypischen Zahlenwerten in die unabhängigen Referenzgrößen (3.2) wird das Gleichungssystem dann normiert. Die ausführliche Beschreibung der Entdimensionierung des Gleichungssystems findet sich im Anhang 8.1.

3.4 Entdimensioniertes Gleichungssystem

Nach der Entdimensionierung lauten die Erhaltungsgleichungen:

Massenbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0$$

Impulsbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A \frac{p}{M^2} \vec{n} dA = \frac{1}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} dV \quad (3.4)$$

Energiebilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \frac{M^2}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} \cdot \vec{v} dV$$

sowie die **Druckzustandgleichung**

$$p = (\gamma - 1) \left(\rho e - M^2 \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \right), \quad (3.5)$$

respektive die Definition der dimensionslosen Energiedichte

$$\rho e = \frac{p}{(\gamma - 1)} + M^2 \frac{\rho \vec{v} \cdot \vec{v}}{2}. \quad (3.6)$$

Wie vom Π -Theorem postuliert, läßt sich die Zahl der Einflußgrößen von den zur Normierung erforderlichen 5 unabhängigen Referenzgrößen (3.2) auf die 2 dimensionslosen Kennzahlen M und Fr reduzieren. Die Strouhal-Zahl St ist identisch 1 und kann hier nicht variiert werden. Der Isentropenexponent γ wird über das betrachtete Fluid festgelegt. Durch die Dimensionsanalyse kann nun der Einfluß der physikalischen Prozesse über die Größenordnung der jeweiligen dimensionslosen Kennzahlen abgeschätzt werden. Beispielsweise ist im dimensionsbehafteten Gleichungssystem (2.2) nicht ersichtlich, dass sich der Einfluß der Gravitation in der Energie- und Impulsbilanz unterschiedlich auswirkt, respektive in der Energiebilanz auch noch von der Mach-Zahl abhängig ist.

Die Entdimensionierung wurde mit dem Ziel durchgeführt, den Einfluß des Verhältnisses der Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} zur Schallgeschwindigkeit c auf das Lösungsverhalten des Gleichungssystems zu untersuchen. Hierzu wurden die Referenzgrößen derart gewählt, dass die Mach-Zahl M als eine der dimensionslosen Kennzahlen entstand. In quadratischer Form tritt sie in der dimensionslosen Energiebilanz im Zähler, in der dimensionslosen Impulsbilanz und der Druckzustandsgleichung dagegen im Nenner auf. Außer in der Massenbilanz treten in den beiden anderen Bilanzgleichungen neben der Mach-Zahl M auch noch die Froude-Zahl Fr auf.

Physikalisch kennzeichnet die Mach-Zahl die Kompressibilität der Strömung. Eine Strömung mit kleiner Mach-Zahl wird daher als schwach-kompressibel, eine mit verschwindender Mach-Zahl als inkompressibel bezeichnet.

Treten im Wesentlichen Strömungsgeschwindigkeiten in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit auf, ergibt sich die Mach-Zahl zu $M \approx 1$ und die Struktur des dimensionslosen Gleichungssystems ändert sich gegenüber dem dimensionsbehafteten nicht. Sind die Strömungsgeschwindigkeiten der betrachteten Strömungen dagegen klein im Vergleich zur Schallgeschwindigkeit bzw. tendieren gegen Null, wird auch die Mach-Zahl klein bzw. tendiert gegen Null. Während dies in der Energiebilanz zu einem verschwindenden Einfluß der Gravitationskraft führt, tendiert in der Impulsbilanz der Druckterm gegen Unendlich und der kinetische Energieanteil der Druckzustandsgleichung verschwindet. Für den Grenzfall $M \mapsto 0$ werden diese Gleichungen singular. Dies hat Auswirkungen auf die mathematische Struktur und das Lösungsverhalten dieses Gleichungssystems.

Als sehr nützliches Hilfsmittel zur Untersuchung derartiger Grenzfälle hat sich die asymptotische Analyse erwiesen. Mit ihrer Hilfe soll der Grenzfall verschwindender Mach-Zahl genauer betrachtet werden.

4 Asymptotische Analyse

Ausgangspunkt der asymptotischen Analyse sind die mit Hilfe der Dimensionsanalyse ermittelten dimensionslosen Eulergleichungen in der Form

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0 \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A \frac{p}{M^2} \vec{n} dA &= \vec{0} \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

mit $\rho e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{M^2}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v}$.

Der Einfluss einer kleiner werdenden Mach-Zahl zeigt sich in der dimensionslosen Form deutlich. Für $M = 0$ wird der letzte Term in der Impulsbilanz singulär und der kinetische Energieanteil der Energiedichte verschwindet.

Mit Hilfe einer systematischen asymptotischen Analyse kann das Verhalten des Gleichungssystems in solchen Grenzfällen analysiert werden, um daraus Ansätze für einen effizienteren Umgang mit dem allgemeingültigen Gleichungssystem zu erhalten. Es zeigt sich, dass sich für dieses Gleichungssystem der Strömungsbereich $0 \leq M \leq 1$ anhand der Referenz-Mach-Zahl M in drei charakteristische Teilbereiche unterteilen lässt (siehe auch 5.3):

1. den inkompressiblen¹ Strömungsbereich $M = 0$
2. den schwachkompressiblen Strömungsbereich $0 < M \ll 1$
3. den kompressiblen Strömungsbereich $M = 1$

Fortan wird nur der inkompressible Strömungsbereich $M = 0$ betrachtet.

¹Inkompressible Strömungen sind bspw. nicht-reaktive Strömungen, deren Dichte entlang von Teilchenbahnen konstant sind. Strömungen konstanter Dichte sind in dieser Definition als Grenzfall enthalten.

4.1 Asymptotische Analyse für $M = 0$

Für die asymptotische Analyse im Limes $M = 0$ wird nur die Referenz-Mach-Zahl M variiert². Somit reicht die Betrachtung einer Orts- und Zeitskala zur Beschreibung der räumlichen und zeitlichen Entwicklung aus. Die zu untersuchende Referenz-Mach-Zahl M wird als Parameter in einer Reihenentwicklung

$$\phi = \phi^{(0)} + M\phi^{(1)} + M^2\phi^{(2)} + O(M^3) \quad (4.2)$$

für jede auftretende Größe $\phi(\vec{x}, t)$ (hier ρ , ρe , \vec{v} und p) verwendet. Die derart approximierten Größen werden in das dimensionslose Gleichungssystem (4.1) eingesetzt, und die entstehenden Terme nach Potenzen der Mach-Zahl M^0 , M^1 , usw. sortiert³.

Mit der Annahme, dass für jede einzelne Ordnung von M die Ausgangsgleichung vollständig erfüllt sein muss, lässt sich für jede Ordnung von M eine eigene Gleichung aufstellen⁴. Hieraus ergibt sich im Limes $M = 0$ ein Gleichungssatz für die führende Ordnung M^0 . Dieser besitzt gegenüber den Ausgangsgleichungen eine veränderte Impuls- und Energiebilanz

$$\int_V (\rho\vec{v})^{(0)} dV + \oint_A (\rho\vec{v})^{(0)} \circ \vec{v}^{(0)} \cdot \vec{n} dA + \oint_A p^{(2)} \vec{n} dA = \vec{0} \quad (4.3)$$

$$\int_V (\rho e)^{(0)} dV + \oint_A [(\rho e)^{(0)} + p^{(0)}] \vec{v}^{(0)} \cdot \vec{n} dA = 0, \quad (4.4)$$

eine veränderte Energiedichte

$$(\rho e)^{(0)} = \frac{p^{(0)}}{(\gamma - 1)}, \quad (4.5)$$

sowie für M^{-1} und M^{-2} zwei Bedingungen für die Drücke $p^{(0)}$ und $p^{(1)}$

$$\oint_A p^{(0)} \vec{n} dA = 0 \quad \text{und} \quad \oint_A p^{(1)} \vec{n} dA = 0. \quad (4.6)$$

²Weitere dimensionslose Kennzahlen (wie Reynolds-Zahl Re oder Froude-Zahl Fr usw.) werden als konstant ungleich Null angenommen.

³Hierzu wird der Begriff der *Ordnung* verwendet. Dieser benennt den Zahlenbereich, indem sich die betrachteten Größen bewegen. Bspw. repräsentiert $O(M^2)$ die zweite Ordnung. Die Ordnung mit dem größten Zahlenwert, die also das Ergebnis dominiert, wird auch als führende Ordnung bezeichnet. Im betrachteten Fall ist dies $O(M^0)$.

⁴Die nach Ordnung sortierten Gleichungen werden ausführlicher im Anhang 8.2 gezeigt.

Die Massenbilanz ändert sich in führender Ordnung nicht. In der Impulsbilanz (4.3) tritt an Stelle des Druckes p im asymptotischen System der Druck $p^{(2)}$, in der Energiebilanz (4.4) der Druck $p^{(0)}$ auf. Ebenfalls aus der Impulsbilanz resultiert die Bedingung, dass die Drücke $p^{(0)}$ und $p^{(1)}$ homogen im Raum sein müssen (vergl. (4.6)). Sie sind somit nur noch von der Zeit abhängig.

Druckzerlegung

Im Limes $M = 0$ wirken zwei verschiedene, voneinander unabhängige Drücke. Dies ist der thermodynamische Druck $p^{(0)}$, der lediglich eine Funktion der Zeit ist und der hydrodynamische Druck $p^{(2)}$, der örtlich und zeitlich variabel ist. Der Druck $p^{(1)}$ tritt im Limes $M = 0$ in der führenden Ordnung nicht auf. Ihm kommt erst bei der Betrachtung schwachkompressibler Strömungen eine Bedeutung zu (siehe auch S. 15)⁵.

Die asymptotische Analyse motiviert eine Druckzerlegung, um die unterschiedlichen Wirkungen des Druckes im dimensionslosen Gleichungssystem zu berücksichtigen. In [13] wird deshalb für den Druck p im dimensionslosen Gleichungssystem (4.1) folgende Druckzerlegung eingeführt

$$p = p_0 + M^2 p_2. \quad (4.7)$$

Das Gleichungssystem für $M = 0$

Durch Einsetzen von (4.7) in die dimensionslosen Eulergleichungen (4.1) und Grenzübergang $M = 0$ verändern sich die Impuls- und Energiebilanz, während die Massenbilanz unverändert bleibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0 \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p_2 \vec{n} dA &= \vec{0} \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p_0] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Definition der Energiedichte bzw. die Druckzustandsgleichung lautet

$$\rho e = \frac{p_0}{\gamma - 1} \quad \text{bzw.} \quad p_0 = (\gamma - 1) \rho e. \quad (4.9)$$

⁵Durch eine Mehrskalenganalyse für kleine Mach-Zahlen mit zwei Ortsskalen, zur separaten Auflösung der Strömungs- und Schallgeschwindigkeit, kann ihm die Bedeutung eines akustischen Druckes zugewiesen, der den Einfluss akustischer Wellen berücksichtigt (siehe [13, 15]).

Hinzugekommen ist die Bedingung für den Druck p_0 aus (4.6)

$$\oint_A p_0 \vec{n} dA = 0. \quad (4.10)$$

Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld

Wird in der Energiebilanz von (4.8) die Energiedichte durch (4.9) ersetzt, entsteht eine Gleichung für den Druck p_0

$$\frac{d}{dt} \int_V \frac{p_0}{\gamma-1} dV + \oint_A \frac{\gamma p_0}{\gamma-1} \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0.$$

In dieser tritt der Druck p_2 nicht auf. Dies gilt auch für die Definition der Energiedichte, weswegen der Einfluss des Druckes p_2 auf die Impulsbilanz in (4.8) beschränkt ist.

Aufgrund von (4.10) ist der Druck p_0 räumlich konstant. Für konstante Isentropenexponenten γ liefert obige Gleichung eine Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld, die durch den Druck führender Ordnung p_0 bestimmt wird. Die rechte Seite beschreibt die zeitliche Entwicklung des Druckes p_0

$$\oint_A \vec{v} \cdot \vec{n} dA = - \frac{|V|}{\gamma p_0} \frac{dp_0}{dt} \quad \text{mit } \gamma = \text{const.} \quad (4.11)$$

Aufgabe des Druckes p_2

Die aus der asymptotischen Analyse resultierende Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld (4.11) wird offenbar in der Impulsgleichung nicht berücksichtigt. Diese ist vielmehr von der Energiegleichung entkoppelt. Dem bisher nicht weiter bestimmten Druck p_2 kommt daher die Aufgabe zu, die Einhaltung dieser Divergenzbedingung (4.11) in der Impulsbilanz von (4.8) zu garantieren, auf die der Druck p_0 im Regime $M = 0$ keinen Einfluss mehr hat.

4.2 Konsequenz der asymptotischen Analyse

Die asymptotische Analyse zeigt, dass sich der Druck p im Bereich $M \ll 1$ in drei Bestandteile mit verschiedener physikalischer Bedeutung aufspalten lässt, die auf unterschiedlichen Raumskalen wirken.

$$p(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = p^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + M p^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + M^2 p^{(2)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t). \quad (4.12)$$

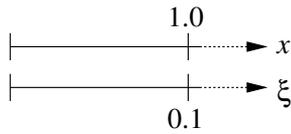


Abbildung 4.1:
M-Skalierung

Hierbei übernimmt die Ordnung der Referenz-Mach-Zahl M die Funktion des Maßstabsfaktors. Bspw. gilt für die nebenstehende Abbildung $\xi = Mx$ mit $M = 0.1$, weshalb ξ die größere Skala ist. Die Abb. 4.2 stellt den Druckzerlegungsansatz (4.12) graphisch dar:

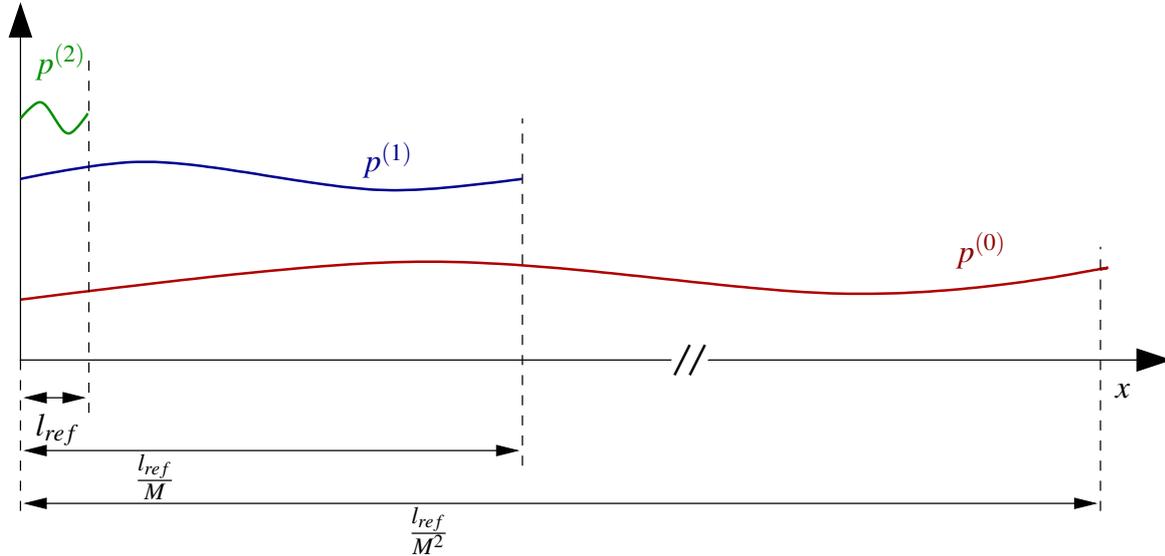


Abbildung 4.2: Druckskaleten im Bereich $M \ll 1$

Die Referenzlänge des Strömungsgebietes $x = l_{ref}$ ist die kleinste Skala, auf der Entropiefluktuationen und Wirbelstrukturen aufgelöst werden. Die größere akustische Skala $\xi = Mx$ berücksichtigt hingegen die akustischen Druckschwankungen ([9], S.14). Den Drücken kommt folgende Bedeutung zu:

$p^{(0)}$: Thermodynamischer Hintergrunddruck p_0

Der Druck führender Ordnung berücksichtigt, dass in Systemen mit charakteristischen Abmessungen im Bereich der Referenzlänge l_{ref} langwellige Akustiken stets zu derart schnellen Druckänderungen führen, dass diese quasihomogen im gesamten System wirken. Somit ist $p^{(0)}$ auf der Skala l_{ref} nur noch eine zeitabhängige Größe und $p_0 = f(t)$.

Auf der superakustischen Skala l_{ref}/M^2 hat $p^{(0)}$ hingegen Variationen der Größenordnung $O(1)$ und ist dort eine zeit- und ortsabhängige Größe.

$p^{(1)}$: Akustischer Druck p_1

Der akustische Druck berücksichtigt Akustiken, die bereits auf der akustischen Skala l_{ref}/M Variationen der Größenordnung $O(1)$ besitzen. Die im betrachteten System mit der Referenzlänge l_{ref} resultierenden lokalen Druckänderungen sind dann im Regime $M \ll 1$ in der Größenordnung

$O(M)$ und lassen sich nicht mehr dem global wirkenden thermodynamischen Hintergrundsdruck $p^{(0)}$ zuordnen. Daher gilt $p_1 = f(\vec{x}, t)$.

$p^{(2)}$: Hydrodynamischer Druck p_2

Der hydrodynamische Druck berücksichtigt die lokalen Änderungen in den kleinskaligen Strömungsstrukturen der Referenzlänge l_{ref} , auch hydrodynamische Skala genannt. Die Variationen von $p^{(2)}$ sind auf dieser Skala in der Größenordnung $O(1)$. Diesem Druck kommt die Aufgabe zu, für die Einhaltung der Divergenzbedingung des Geschwindigkeitsfeldes zu sorgen. Es gilt ebenfalls $p_2 = f(\vec{x}, t)$.

Begründung des Druckzerlegungsansatzes

Wie in Abbildung 4.1 dargestellt, lässt das inkompressible Strömungsregime $M = 0$ keine hochfrequenten Akustiken im Zeitskalenbereich $O(l_{ref}/c_{ref})$ zu. Deshalb treten Druckveränderungen im Bereich $O(M)$ nicht auf, weshalb der akustische Druck $p^{(1)}$ entfällt. Es reicht die Betrachtung einer Orts- und Zeitskala und der Druckzerlegungsansatz lautet:

$$p(\vec{x}, t) = p_0(t) + M^2 p_2(\vec{x}, t)$$

Im Regime $M = 1$ entfällt hingegen die Notwendigkeit die Auswirkungen des Druckes auf unterschiedlichen Skalen zu betrachten. Alle Drücke sind nun Variationen der Größenordnung $O(1)$ auf der Referenzlänge l_{ref} und können allein durch den Druck p dargestellt werden.

Abschließend sei noch darauf hingewiesen, dass die für das Geschwindigkeitsfeld bei der Berechnung von inkompressiblen Strömungen variabler Dichte einzuhaltende Divergenzbedingung aus der Energiebilanz resultiert. Die in der Literatur häufig angeführte Divergenzbedingung aus der Massenbilanz tritt hier noch gar nicht auf. Sie entsteht erst für inkompressible Strömungen konstanter Dichte. Gerade die Dichteunterschiede sind jedoch für die auftriebsbehafteten Strömungen ursächlich. Die Anwendung eines für inkompressible Strömungen konstanter Dichte konstruierten Verfahrens auf Strömungen variabler Dichte ist daher stets mit weitergehenden Annahmen verbunden. Die Zulässigkeit dieser Annahmen ist für den konkreten Anwendungsfall zu überprüfen.

5 Verfahrenskonstruktion

Die asymptotische Analyse zeigt, dass sich der inkompressible Fall mit dem asymptotisch ermittelten Gleichungssystem beschreiben lässt. Hierbei wird berücksichtigt, dass sich mit der Änderung der Referenz-Mach-Zahl des Gleichungssystems (4.1) auch der mathematische Charakter und somit das Ausbreitungsverhalten lokaler Störungen ändert. Während das Gleichungssystem für $M = 1$ einen hyperbolischen Charakter besitzt, muss für $M = 0$ die hyperbolisch-elliptische Charaktereigenschaft berücksichtigt werden .

Unter Berücksichtigung dieser Charaktereigenschaften beschreiben *Klein et al.* [13, 15, 14, 20] einen Ansatz für ein „All-Mach-Verfahren“ $0 \leq M \leq 1$ auf Basis der für $M = 1$ etablierten Godunov-Typ-Verfahren (GDT). Die in dieser Arbeit beschriebene Verfahrenskonstruktion beschränkt sich jedoch auf das Regime $M = 0$. Die Erweiterung auf das Regime $M \ll 1$ ist noch Gegenstand laufender Untersuchungen.

Ausgehend von einem Standard GDT-Verfahren wird das GDT-Verfahren derart erweitert, dass es im Fall $M = 0$ eine erste approximierete Lösung liefert (Prädiktorschritt). Diese Lösung wird dann durch implizite Korrekturen der Geschwindigkeitsfelder so korrigiert, dass die Lösung die durch die asymptotische Analyse ermittelten Bedingungen erfüllt (Korrektorschritt). Diese Korrektur wird als Projektion bezeichnet, da ein zuvor im Prädiktor falsch berechneter Geschwindigkeitsvektor mit Hilfe einer Projektion auf den richtigen Geschwindigkeitsvektor korrigiert wird. Für $M = 1$ entfallen die für $M = 0$ notwendigen Erweiterungen und aus dem erweiterten GDT-Verfahren wird wieder ein herkömmliches GDT-Verfahren.

In diesem Kapitel wird die Verfahrenskonstruktion vorgestellt, die im Kontext der Finite-Volumen-Methode auf einem kartesischen Gitter mit in jeder Raumrichtung konstanter Gitterweite erfolgt. Abhängige Zustandsgrößen sind die konservativen Variablen Dichte ρ , Impulsdichte $\rho\vec{v}$ und Energiedichte ρe , die zellzentriert gespeichert werden. Aus Gründen der Anschaulichkeit werden zweidimensionale Beispiele für die Diskretisierungen verwendet.

5.1 Projektionsverfahren für $M = 0$

Die grundlegende Idee der Verfahrenskonstruktion ist, dass der explizite Prädiktorschritt $\mathcal{L}_{Euler,Prä}$ im Regime $M = 1$ das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0 \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p \vec{n} dA &= \vec{0} \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

$$\text{mit } \rho e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v}$$

löst, wohingegen er im Regime $M = 0$ ein möglichst gute Approximation des asymptotisch entwickelten Gleichungssystems (4.8)

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0 \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p_2 \vec{n} dA &= \vec{0} \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p_0] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

$$\text{mit } \rho e = \frac{p_0}{\gamma - 1}$$

liefert. Die im Regime $M = 0$ auftretenden Approximationsfehler werden durch einen zusätzlichen Korrektorschritt $\mathcal{L}_{Euler,Korr}$ behoben, so dass die asymptotisch ermittelte Divergenzbedingung (4.11) sowie die angestrebte Verfahrensgenauigkeit erreicht wird. Für das Regime $M = 0$ folgt daher

$$\mathcal{L}_{Euler}^{\Delta t} = \mathcal{L}_{Euler,Prä}^{\Delta t} + \mathcal{L}_{Euler,Korr}^{\Delta t} \tag{5.3}$$

Der explizite Prädiktor muss zur Lösung von (5.1) aus Stabilitätsgründen die CFL-Bedingung

$$\frac{|u|(1 + M^{-1})\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

einhalten. Dies führt im Regime $M = 0$ zu sehr kleinen Zeitschrittweiten und somit zu einem ineffizienten Verfahren.

Der Grund für diese Ineffizienz liegt in der Berücksichtigung der Schallgeschwindigkeit, bzw. der daraus resultierenden langwelligen Akustik. Im Regime $M = 0$ wird der lokale Einfluss der langwelligen Akustik jedoch nicht aufgelöst, sondern global durch den thermodynamischen Hintergrundsdruck p_0 berücksichtigt (vergl. Abb. 4.2). Wird stattdessen eine künstliche Schallgeschwindigkeit c^* verwendet, die in der Größenordnung der Strömungsgeschwindigkeit liegt, wird die Zeitschrittweite im Regime $M = 0$ nur noch durch die Strömungsgeschwindigkeit limitiert. Die Ursache für die Ineffizienz ist beseitigt, jedoch muss die künstliche Schallgeschwindigkeit c^* für das Regime $M = 1$ wieder in die richtige Definition der Schallgeschwindigkeit übergehen.

5.1.1 Prädiktorschritt

Das nachfolgende Hilfssystem erfüllt in Abhängigkeit der Referenz-Mach-Zahl M alle diese Anforderungen der betrachteten Regime und bildet die Basis für das erweiterte GDT-Verfahren.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0 \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p \vec{n} dA &= \vec{0} \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + \pi] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

mit $\rho e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{M^2}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v}$
und $\pi = (1 - M^2)(p_0 + M^2 p_2) + M^2 p$

System I : Für $M = 1$ repräsentiert das Hilfs-Gleichungssystem (5.4) mit $\pi = p$ das für dieses Regime zu lösende Gleichungssystem (5.1), nachfolgend *System I* genannt.

*System I**: Für $M = 0$ ergibt sich aus dem Hilfssystem (5.4) mit $\pi = p_0$ das *System I**. Der Druckterm in der Impulsbilanz von (5.4) verschwindet, weil sich aufgrund des Druckzerlegungsansatzes (4.7) und der Druckbedingung (4.10) für $M = 0$ der Druck p auf den Druck führender Ordnung p_0 reduziert. Diese gilt in analoger Weise für den Druck in der Definition der Energiedichte

$$\rho e = \frac{p_0}{\gamma - 1}, \tag{5.5}$$

so dass auch die für das Regime $M = 0$ veränderte Definition der Energiedichte (4.9) mit diesem Ansatz berücksichtigt wird.

Die weitere Verfahrenskonstruktion erfolgt im Kontext eines Finite-Volumen-Verfahrens, wobei der Zustandsvektor \vec{U} die Erhaltungsgrößen $\rho, \rho\vec{v}, \rho e$ enthält

$$\frac{d}{dt} \int_V \vec{U} dV = - \oint_A \vec{F} \cdot \vec{n} dA. \quad (5.6)$$

Für die Konstruktion des zu erweiternden GDT-Verfahrens lässt sich mit Hilfe des Operator-Splitting nach *Strang* [22] das Gleichungssystem (5.4) in eine Folge von eindimensionalen Operatoren zerlegen¹

$$\vec{U}_t + \vec{F}_x^{**} + \vec{G}_y^{**} + \vec{H}_z^{**} = 0.$$

$\vec{F}_x^{**}, \vec{G}_y^{**}$ und \vec{H}_z^{**} sind die Flüsse des Gleichungssystems (5.4) über die jeweiligen Zellflächen A des betrachteten Kontrollvolumens V in den verschiedenen Koordinatenrichtungen. Der Index $**$ kennzeichnet, dass weder das für die Flussberechnung verwendete Geschwindigkeitsfeld auf der Zellfläche, noch das mit diesen Flüssen berechnete zellzentrierte Geschwindigkeitsfeld die Divergenzbedingung (4.11) erfüllt. Aus der Kopplung der einzelnen physikalischen Operatoren, ausgehend vom Zeitpunkt t^n , ergibt sich die Zwischenlösung zum Zeitniveau $t^{n+1,**}$

$$\vec{U}^{n+1,**} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{L}_x^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_y^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_z^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_z^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_y^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_x^{\frac{\Delta t}{2}} \end{bmatrix}}_{\mathcal{L}_{Euler,Prä}^{\Delta t}} \vec{U}^n \quad (5.7)$$

$$\mathcal{L}_x : \vec{U}_t + \vec{F}_x^{**} = 0 \quad \mathcal{L}_y : \vec{U}_t + \vec{G}_y^{**} = 0 \quad \mathcal{L}_z : \vec{U}_t + \vec{H}_z^{**} = 0.$$

Der hochgestellte Index am Strang-Operator gibt den Zeitschritt für den Operator an. Da sich die Flussoperatoren nur in der Raumrichtung unterscheiden, wird für die weitere Diskussion nur noch die x -Richtung betrachtet. Dann reduziert sich (5.6) auf die eindimensionale Form

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} = 0. \quad (5.8)$$

Unter der vereinfachenden Annahme von stückweisen linearen Zuständen in jedem Gitterintervall folgt

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{U}} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} = \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \vec{A}(\vec{U}) \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} = 0. \quad (5.9)$$

¹Nach *Strang* [22] ist die aus den Teillösungen zusammengesetzte Lösung in Raum und Zeit zweiter Ordnung genau, wenn dies auch für jede der verwendeten Teillösungen gilt.

Die Matrix $\vec{A}(\vec{U})$ wird Jacobi-Matrix genannt und besitzt die für das Lösungsverfahren relevanten Eigenwerte $u \pm c$ und u .

Erweitertes Godunov-Typ-Verfahren

Grundlage für das erweiterte GDT-Verfahren ist ein eindimensionales HLLC-Lösungsverfahren nach *Harten, Lax, van Leer und Einfeldt* [8, 10]. Für die Konstruktion der Zellflächenzustände wird ein in Raum und Zeit approximierendes MUSCL-Verfahren in steigungslimitierten charakteristischen Variablen verwendet. Nachfolgend wird auf die für die Erweiterungen notwendigen Details des Verfahrens eingegangen².

Die notwendigen Erweiterungen eines Standard-GDT-Verfahrens ergeben sich anhand des Vergleichs zwischen dem System I und I^* , sowie der aus der Asymptotik gewonnenen Erkenntnisse:

- In der Impulsbilanz (5.4) tritt die Mach-Zahl nicht auf. Bis auf die veränderte Energiebilanz ähnelt das System I^* dem für $M = 1$. Das System I^* hat ferner die gleichen konvektiven Flüsse, wie das für $M = 0$ zu lösende Gleichungssystem (4.8), weil aufgrund der Druckbedingung (4.10) der in der Impulsbilanz auftretende Druckterm verschwindet.
- Die Schallgeschwindigkeit des Systems I^* darf aufgrund der CFL-Bedingung nur in der Größenordnung der Strömungsgeschwindigkeit liegen. Sonst wird die Zeitschrittweite des expliziten GDT-Verfahrens für $M = 0$ durch die Schallgeschwindigkeit c dominiert und das Verfahren mit einer gegen Null gehenden Zeitschrittweite ineffizient. Dies kann mit der von *Klein* [14] aufgrund einer charakteristische Analyse für das System I^* vorgeschlagenen erweiterten Definition der Schallgeschwindigkeit

$$c^{*2} = \underbrace{\gamma \frac{p}{\rho}}_{c^2} + (\gamma - 1) \frac{\pi - p}{\rho} \quad (5.10)$$

$$\text{mit } \pi = (1 - M^2)(p_0 + M^2 p_2) + M^2 p$$

verhindert werden. Diese hat den Vorteil, dass für $M = 1$ die Erweiterung wieder entfällt und die Berechnung der Eigenwerte der Jacobi-Matrix $u \pm c^*$ und u für beide Regime formal gleich bleibt. Auch der hyperbolische Charakter bleibt erhalten³.

²Eine umfassendere Beschreibung von GDT-Verfahren findet sich z.B. in *LeVeque* [16].

³Der Index * kennzeichnet die derart erweiterte Definition der Schallgeschwindigkeit. Sie ist nicht identisch mit dem Index *, der sich auf die Einhaltung der Divergenzbedingung bezieht.

- Durch die formal unveränderten Eigenwerte bleiben auch die Berechnungsvorschriften der Eigenvektoren unverändert, so dass damit operierende Lösungsverfahren weiter benutzt werden können, wenn die Definition des Schallgeschwindigkeit (5.10) berücksichtigt wird.

Die Erweiterung eines Standard-GDT-Verfahrens erfordert somit:

1. die Einführung der Referenz-Mach-Zahl M , die sich aus den im Strömungsfeld auftretenden Geschwindigkeiten bestimmt (Details siehe 5.3),
2. die Einführung eines räumlich homogenen Druckes p_0 , der das Oberflächenintegral (4.10) einhält,
3. die erweiterte Definition der Schallgeschwindigkeit (5.10),
4. eine veränderte Berechnungsvorschrift für den Druck

$$p = (\gamma - 1) \left(\rho e - M^2 \frac{\rho \vec{v}^2}{2} \right) \quad (5.11)$$

5. und die Erweiterung der Berechnung des Energiedichteflusses, sowie der gemittelten Schallgeschwindigkeit im Flusslöser.

Die Tatsache, dass das erweiterte GDT-Verfahren zwar einen vollständigen Zeitschritt ausführt, die Lösung aufgrund der nicht eingehaltenen Divergenzbedingung (4.11) jedoch nur vorläufig ist, wird durch den hochgestellten Index $**$ gekennzeichnet. Es ergibt sich damit folgender prinzipieller Verfahrensablauf:

1. Berechnung der Zustände an den Zellflächen
Aus den zellzentrierten Erhaltungsgrößen zum derzeitigen Zeitniveau t^n wird mit Hilfe des MUSCL-Verfahrens der Zustand dieser Größen an den Zellflächen zum Zeitniveau $t^{n+1/2,**}$ bestimmt⁴.
2. Berechnung der Flüsse über die Zellflächen
Mit Hilfe der zuvor ermittelten linken und rechten Zustände an jeder Zellfläche, ergibt sich an jeder Zellfläche die Aufgabe ein Riemann-Problem zu lösen, um den Fluss der Erhaltungsgrößen über die Zellfläche zu bestimmen. Dies geschieht im Verfahren durch die Verwendung eines approximierten Riemannlösers (HLLE-Verfahren).

⁴Bereits die derart ermittelten Zellflächengeschwindigkeiten erfüllen nicht mehr die Divergenzbedingung (4.11).

3. Berechnung der zellzentrierten Erhaltungsgrößen $\vec{U}^{n+1,\star\star}$
 Mit den zuvor berechneten Flüssen zum Halbzeitniveau $t^{n+1/2,\star\star}$ lassen sich die neuen zellzentrierten Erhaltungsgrößen $\vec{U}^{n+1,\star\star}$ am Ende des Prädiktorschrittes berechnen

$$\vec{U}_i^{n+1,\star\star} = \vec{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\vec{F}_{i+1/2}^{n+1/2,\star\star} - \vec{F}_{i-1/2}^{n+1/2,\star\star} \right). \quad (5.12)$$

Hierbei repräsentiert \vec{U}_i^n die Approximation der räumlichen Mittelwerte der Erhaltungsgrößen \vec{U} in der Zelle i zur Zeit t^n

$$\vec{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \vec{U}(t^n, x) dx + O(\Delta x^2) \quad (5.13)$$

und

$$\vec{F}_{i\pm 1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \vec{F}(t, x_{i\pm 1/2}) dt + O(\Delta t^2) \quad (5.14)$$

die Approximation des Flusses auf dem Zellrand. Die Zeitschrittweite Δt ergibt sich aus

$$\Delta t = CFL \frac{\Delta x_{MIN}}{u_{MAX}} = \frac{MIN(\Delta x, \Delta y)}{MAX(|u|, |v|) + c^*} \quad (5.15)$$

Anmerkung zur Implementierung:

Im Programmcode *MOLOCH* verwendet der im Prädiktor eingesetzte approximierte Riemannlöser von Harten, Lax, van Leer und Einfeldt [8, 10] (HLLC-Verfahren) für die MUSCL-Rekonstruktion charakteristische Variablen. Somit lassen sich Änderungen im Zustand (z.B. die Einwirkung eines Druckstoßes) anhand des Signalverlaufes auf der dazugehörigen Charakteristik beschreiben. Da sich durch die erweiterte Definition der Schallgeschwindigkeit (5.10) im System I^* die formale Berechnungsvorschrift für Eigenwerte und -vektoren nicht ändert, bietet sich dieser Ansatz für die Berücksichtigung der erweiterten Schallgeschwindigkeit c^* an.

Aus dem gleichen Grund muss an dieser Stelle nicht weiter auf das HLLC-Verfahren eingegangen werden, da lediglich die Berechnungsvorschrift der Schallgeschwindigkeit im Verfahren geändert wird. Die Definition des Zellflächenflusses ergibt sich unmittelbar aus dem Hilfssystem (5.4). Ausführlichere Beschreibungen zu Godunov-Typ-Verfahren sind unter anderem in LeVeque [16] zu finden.

5.1.2 Korrektorschritt

Mit der Aufteilung (5.3) folgt dem Prädiktor- nun der Korrektoroperator

$$\mathcal{L}_{Euler}^{\Delta t} = \mathcal{L}_{Euler,Prä}^{\Delta t} + \mathcal{L}_{Euler,Korr}^{\Delta t},$$

der die im Prädiktor fehlerhaft approximierten Flüsse über die Zellflächen korrigiert. Ein Vergleich des mit dem Hilfssystem I^* (5.4) berechneten und dem für das Regime $M = 0$ geforderten Fluss aus (4.8)

$$\vec{F}_{(4.8)} - \vec{F}_{(5.4)} = \begin{bmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \circ \vec{v} + \vec{\mathcal{E}} p_2 \\ [\rho e + p_0] \vec{v} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \circ \vec{v} + \vec{\mathcal{E}} p \\ [\rho e + \pi] \vec{v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vec{\mathcal{E}} (p_2 - p) \\ [p_0 - \pi] \vec{v} \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

zeigt, dass mit $\pi = p_0$ nur ein notwendiger Korrekturfluss für die Impulsdichte verbleibt, wenn $p_0 - \pi = 0$ erfüllt ist. Hieraus folgen zwei Erkenntnisse:

1. Die Bedingung $p_0 - \pi = 0$ ist zumindest zu Beginn eines Zeitschrittes bei t^n erfüllt. Somit sind die im Prädiktor auf den Zellflächen berechneten Werte für $\rho^{n+1/2,**}$ und $(\rho e)^{n+1/2,**}$ eine Approximation erster Ordnung der Größen aus (4.8) (vergl. Klein [14])⁵:

$$(\rho, \rho e, p)_{i \pm 1/2}^{n+1/2,*} = (\rho, \rho e, p)_{i \pm 1/2}^{n+1/2,**}. \quad (5.17)$$

2. Der im Prädiktor ausgelassene p_2 -Term erfordert zwei Korrekturen. Mit Hilfe eines ersten Projektionsschrittes sind die Fehler zu korrigieren, die durch die Verwendung des vorläufigen, nicht die Divergenzbedingung erfüllenden Geschwindigkeitsfeldes \vec{v}^{**} bei der Berechnung der Flüsse über die Zellflächen entstehen. Aufgrund von (5.16) und der Einhaltung der Bedingung $p_0 - \pi = 0$ gilt dann nach der 1. Projektion

$$(\rho, \rho e)^{n+1} = (\rho, \rho e)^{n+1,*}. \quad (5.18)$$

Im zweiten Projektionsschritt muss der Fluss aufgrund des ausgelassenen Druckterms der Impulsbilanz berücksichtigt und die Einhaltung der Divergenzbedingung für das zellzentrierte Geschwindigkeitsfeld sichergestellt werden. Der Korrektorschritt hat demzufolge für die Einhaltung der Divergenzbedingung (4.11) auf zwei verschiedenen, entkoppelten, d.h. versetzt angeordneten Geschwindigkeitsfeldern zu sorgen.

⁵Der Index * kennzeichnet den Zustand, bei dem das Geschwindigkeitsfeld auf den Zellflächen bereits die Divergenzbedingung einhält, das im Zellzentrum jedoch noch nicht.

1. Projektion

Aus dem Korrekturfluss (5.16) lässt sich die Korrekturvorschrift für das Geschwindigkeitsfeld auf den Zellflächen zum Halbzeitniveau $t^{n+1/2,**}$ ableiten. Weil der Korrekturfluss gerade der zeitlichen Änderung der Impulsdichte zwischen dem Zustand $t^{n+1/2,*}$ und $t^{n+1/2,**}$ entsprechen muss, lautet die diskrete Korrekturvorschrift

$$\begin{aligned} (\rho \vec{v})^{n+1/2,*} - (\rho \vec{v})^{n+1/2,**} &= -\frac{\Delta t}{2} \nabla p_2^{n+1/2} \\ \vec{v}^{n+1/2,*} &= \vec{v}^{n+1/2,**} - \frac{\Delta t}{2\rho^{n+1/2,**}} \nabla p_2^{n+1/2}, \\ \text{mit der Annahme} \quad (\rho \vec{v})^{n+1/2,*} &= (\rho^{**} \vec{v}^*)^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Anstelle mit \vec{v}^{**} hätte der konvektive Fluss im Prädiktor mit \vec{v}^* berechnet werden müssen. Wird nun der Korrekturansatz (5.19) in die Definition des korrekten konvektiven Flusses

$$\vec{F}_{i\pm 1/2}^{n+1/2,*}(\vec{n}) = \left[\begin{array}{c} (\rho \vec{v})^* \cdot \vec{n} \\ (\rho \vec{v})^* (\vec{v}^* \cdot \vec{n}) \\ [(\rho e)^* + p_0] \vec{v}^* \cdot \vec{n} \end{array} \right]_{i\pm 1/2}^{n+1/2} \quad (5.20)$$

eingesetzt, dessen Zellflächen-Geschwindigkeiten die Divergenzbedingung einhalten, ergibt sich mit (5.17) die Summe aus dem bereits bekannten Prädiktor- und dem gesuchten Korrekturfluss

$$\begin{aligned} \vec{F}_{i\pm 1/2}^{n+1/2,*}(\vec{n}) &= \underbrace{\left[\begin{array}{c} (\rho \vec{v})^{**} \cdot \vec{n} \\ (\rho \vec{v})^{**} (\vec{v}^{**} \cdot \vec{n}) \\ [(\rho e)^{**} + p_0] \vec{v}^{**} \cdot \vec{n} \end{array} \right]_{i\pm 1/2}^{n+1/2}}_{\vec{F}_{HLL E, \text{konv.}, i\pm 1/2}^{n+1/2,**}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \left[\begin{array}{c} \nabla p_2 \cdot \vec{n} \\ \vec{v}^{**} (\nabla p_2 \cdot \vec{n}) + \nabla p_2 (\vec{v}^{**} \cdot \vec{n}) - \frac{\Delta t}{2\rho^{**}} \nabla p_2 (\nabla p_2 \cdot \vec{n}) \\ \frac{(\rho e)^{**} + p_0}{\rho^{**}} \nabla p_2 \cdot \vec{n} \end{array} \right]_{i\pm 1/2}^{n+1/2}}_{\vec{F}_{Korr, i\pm 1/2}^{n+1/2,**}}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Für die angestrebte Verfahrensordnung wäre die Berücksichtigung des dyadischen Produkts der beiden Druckgradienten im Impulsfluss nicht notwendig. Für die in Kapitel 6.1.2 diskutierte Berücksichtigung der Gravitation kommt diesem Term jedoch eine besondere Bedeutung zu.

Für den zweidimensionalen Fall lautet die diskrete Berechnungsvorschrift des Korrekturflusses $\vec{F}_{Korr}^{n+1/2, **}$ an der Zellwand $A_{i-1/2, j}$

$$\vec{F}_{Korr, i-1/2, j}^{n+1/2, **} = -\frac{\Delta t}{2} \begin{bmatrix} \theta_x \\ \left(2u_{i-1/2, j}^{**} - \frac{\Delta t}{2\rho^{**}} \theta_x\right) \theta_x \\ \left(v_{i-1/2, j}^{**} + u_{i-1/2, j}^{**} \theta_y - \frac{\Delta t}{2\rho^{**}} \theta_y\right) \theta_x \\ h_{i-1/2, j}^{**} \theta_x \end{bmatrix}^{n+1/2} \quad (5.22)$$

$$\text{mit } h_{i+1/2, j}^{n+1/2, **} = \left(\frac{(\rho e)_{i-1/2, j}^{**} + p_0}{\rho_{i-1/2, j}^{**}} \right)^{n+1/2}, \theta_x = \frac{1}{\Delta x} (p_{2i, j} - p_{2i-1, j})$$

$$\text{und } \theta_y = \frac{1}{4\Delta y} ((p_{2i} + p_{2i-1})_{j+1} - (p_{2i} + p_{2i-1})_{j-1})$$

Mit (5.21) kann der Fehler durch die im Prädiktor benutzten nicht-divergenzfreien Zellflächen-Geschwindigkeiten korrigiert werden⁶

$$\vec{U}_i^{n+1, *} = \vec{U}_i^{n+1, **} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\vec{F}_{Korr, i+1/2}^{n+1/2, **} - \vec{F}_{Korr, i-1/2}^{n+1/2, **} \right). \quad (5.23)$$

Der Index * kennzeichnet den Umstand, dass zwar Dichte ρ und Energiedichte ρe nun richtig berechnet sind (vergl. (5.18)), das jedoch das zellzentrierte Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}^{n+1, *}$ die Divergenzbedingung noch nicht einhält.

Die für die Berechnung des Korrekturflusses $\vec{F}_{Korr}^{n+1/2, **}$ notwendigen Größen auf den Zellflächen werden wie folgt ermittelt:

- **Ermittlung von $h_{i-1/2, j}^{n+1/2, **}$**

Die Enthalpie auf der Zellfläche wird nach ([19], S. 43) durch Mittelung der an die Zellfläche angrenzenden zellzentrierten Werte berechnet

$$h_{i-1/2, j}^{n+1/2, **} = \frac{1}{2} \left(\frac{(\rho e)_{i, j}^{**} + p_0}{\rho_{i, j}^{**}} + \frac{(\rho e)_{i-1, j}^{**} + p_0}{\rho_{i-1, j}^{**}} \right)^{n+1/2}, \quad (5.24)$$

wobei sich der thermodynamische Hintergrundsdruck $p_0(t)$ zum Zeitniveau $t^{n+1/2}$ durch die Auswertung der Funktion $p_0(t)$ zum Zeitniveau $t^{n+1/2}$ oder eine zeitliche Mittelung ergibt

$$p_0^{n+1/2} = \frac{1}{2} (p_0^n + p_0^{n+1}). \quad (5.25)$$

⁶Dieser von Schneider ([19], S. 42f) angegebene Korrekturanatz reduziert den erforderlichen Speicherplatz erheblich, da die vom erweiterten GDT-Verfahren berechneten Flüsse nicht abgespeichert werden müssen, sondern der Einfluss der Korrekturflüsse direkt auf die Lösung vom GDT-Verfahren aufaddiert werden kann.

Mit einer zeitlichen Mittelung werden die Dichte ρ und Energiedichte ρe zum Halbzeitniveau $t^{n+1/2}$ bestimmt.

$$\phi^{n+1/2, **} = \frac{\phi^{n+1, **} + \phi^n}{2} \text{ mit } \phi = \{\rho e, \rho\}. \quad (5.26)$$

Hierzu müssen zwar die zellzentrierten Werte zum Zeitniveau t^n abgespeichert werden, dies ist jedoch erheblich günstiger, als die Speicherung der Zellflächenwerte im Prädiktorschritt.

• **Ermittlung von $\vec{v}_{i-1/2, j}^{n+1/2, **}$**

Ebenfalls um die Abspeicherung der Zellflächengeschwindigkeiten zum Zwischenzeitniveau $t^{n+1/2, **}$ im Prädiktorschritt zu vermeiden, werden aus den zellzentrierten Geschwindigkeiten

$$\vec{v}_{i, j}^{n+1, **} = \frac{(\rho \vec{v})_{i, j}^{n+1, **}}{\rho_{i, j}^{n+1, **}}$$

mit Hilfe eines steigungslimitierten Extrapolationsverfahrens die links- und rechtsseitigen Normalen-Geschwindigkeiten auf den Zellflächen berechnet. Für die Zellfläche $A_{i-1/2, j}$ lauten diese

$$\begin{aligned} u_l &= u_{i-1, j}^{n+1, **} + \frac{1}{2} \lim(u_{i, j} - u_{i-1, j}, u_{i-1, j} - u_{i-2, j})^{n+1, **} \\ u_r &= u_{i, j}^{n+1, **} - \frac{1}{2} \lim(u_{i+1, j} - u_{i, j}, u_{i, j} - u_{i-1, j})^{n+1, **}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

wobei $\lim(\cdot, \cdot)$ eine beliebige Limiter-Funktion ist (vergl. 8.3.1). Aus den links- und rechtsseitigen Geschwindigkeiten wird nun die den Signaltransport beschreibende „Upwind“-Geschwindigkeit ermittelt

$$u_{i-1/2, j}^{n+1, **} = \begin{cases} u_l, & u_l + u_r > 0 \quad \wedge \quad u_l \geq 0, \\ 0, & u_l + u_r = 0 \quad \vee \quad u_l < 0 \wedge u_r > 0, \\ u_r, & u_l + u_r < 0 \quad \wedge \quad u_r \leq 0. \end{cases} \quad (5.28)$$

Die tangential zur Fläche $A_{i-1/2, j}$ liegenden Komponenten des Geschwindigkeitsvektors werden dann mit einer „Upwind“-Steigungsextrapolation

$$\begin{aligned} v_l &= v_{i, j}^{n+1, **} - \frac{1}{2} \lim(v_{i+1, j} - v_{i, j}, v_{i, j} - v_{i-1, j})^{n+1, **} \\ v_r &= v_{i-1, j}^{n+1, **} + \frac{1}{2} \lim(v_{i, j} - v_{i-1, j}, v_{i-1, j} - v_{i-2, j})^{n+1, **} \end{aligned}$$

$$v_{i-1/2, j}^{n+1, **} = \begin{cases} v_l, & u_{i-1/2, j}^{n+1, **} < 0 \\ v_r, & u_{i-1/2, j}^{n+1, **} \geq 0 \end{cases} \quad (5.29)$$

bestimmt und als Näherungen erster Ordnung in der Zeit für die im Korrekturschritt erforderlichen Geschwindigkeit

$$\vec{v}_{i-1/2,j}^{n+1/2,\star\star} = \vec{v}_{i-1/2,j}^{n+1,\star\star} \quad (5.30)$$

verwendet. Diese Approximation genügt, damit die Lösung $\vec{U}^{n+1,\star}$ zweiter Ordnung in Raum und Zeit bleibt.

- **Ermittlung von p_2**

Der zellzentrierte Druck p_2 muss in einer Weise berechnet werden, dass nach dem Korrekturschritt das Geschwindigkeitsfeld \vec{v}^\star auf der Zellwand die Divergenzbedingung (4.11) erfüllt. Diese Divergenzbedingung stammt aus der Energiegleichung. Aufgrund der Energieerhaltung gilt für jedes Volumenelement V des Rechengitters

$$(\rho e)_V^{n+1,\star} - (\rho e)_V^n = -\frac{\Delta t}{|V|} \oint_A ([\rho e + \pi] \vec{v})^{n+1/2,\star} \cdot \vec{n} dA \quad (5.31)$$

mit $\pi = p_0$ für $M = 0$. Unter Berücksichtigung,

1. dass die unbekannte Geschwindigkeit \vec{v}^\star durch die Korrekturvorschrift (5.19) ersetzt werden kann

$$\vec{v}^{n+1/2,\star} = \vec{v}^{n+1/2,\star\star} - \frac{\Delta t}{2\rho^{n+1/2,\star\star}} \nabla p_2^{n+1/2},$$

2. dass der thermodynamische Druck p_0 wegen (4.10) nur eine Funktion der Zeit ist und sich daher p_0^{n+1} aus den Randbedingungen und dem Umsatz im Strömungsgebiet berechnen lässt. Weswegen mit der Definition der Energiedichte (5.5) für $\gamma = \text{const.}$ gilt

$$(\rho e)_V^{n+1} = (\rho e)_V^{n+1,\star} = \frac{p_0^{n+1}}{(\gamma - 1)},$$

3. der Energiebilanz des Prädiktorschrittes

$$(\rho e)_V^{n+1,\star\star} = (\rho e)_V^n - \frac{\Delta t}{|V|} \oint_A ([\rho e + p_0] \vec{v})^{n+1/2,\star\star} \cdot \vec{n} dA \quad (5.32)$$

4. sowie aufgrund der für $M = 0$ geltenden Definition der Energiedichte (5.5)

$$[\rho e + p_0]^{\star\star} = [\rho e + p_0]^\star = \left[\frac{\gamma p_0}{\gamma - 1} \right] \quad (5.33)$$

ergibt sich über

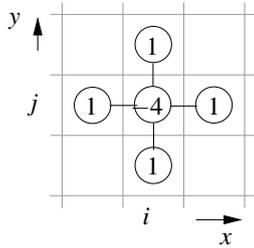
$$\frac{p_0^{n+1}}{\gamma-1} - (\rho e)^{n+1, **} = \frac{\Delta t}{|V|} \oint_A \left(\frac{\Delta t [\rho e + p_0]^{**}}{2\rho^{**}} \nabla p_2 \right)^{n+1/2} \cdot \vec{n} dA$$

und der schon zuvor erwähnten Definition für $h^{n+1/2, **}$ auf den Zellflächen eine Berechnungsvorschrift für den zellzentrierten Druck p_2

$$\frac{(\Delta t)^2}{2|V|} \oint_A (h^{**} \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} dA = \frac{p_0^{n+1}}{\gamma-1} - (\rho e)^{n+1, **}. \quad (5.34)$$

Da die Energiedichte nicht nach jedem Zeitschritt neu initialisiert wird, können sich über mehrere Zeitschritte numerische Rechenfehler in der Energiedichte ρe und damit in der rechten Seite von (5.34) akkumulieren. Dies wird mit folgender Erweiterung verhindert

$$\begin{aligned} \frac{p_0^{n+1}}{\gamma-1} - (\rho e)^{n+1, **} &= \left((\rho e)^{n+1, *} - (\rho e)^n \right) - \left((\rho e)^{n+1, **} - (\rho e)^n \right) \\ &= \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma-1} - \left((\rho e)^{n+1, **} - (\rho e)^n \right). \end{aligned}$$



Diskret repräsentiert (5.34) eine Poissongleichung mit variablen Koeffizienten, die im 2d-Fall einen 5 Punktstern und im 3d-Fall einen 7 Punktstern darstellt. Die Enthalpie auf den Zellflächen wird durch die bereits beschriebene Mittelung (5.24) berechnet

Abbildung 5.1:
5-Punktstern

$$\begin{aligned} &\frac{(\Delta t)^2}{2} \left[\frac{h_{i+1/2, j}^{n+1/2, **}}{(\Delta x)^2} p_{2i+1, j} + \frac{h_{i, j+1/2}^{n+1/2, **}}{(\Delta y)^2} p_{2i, j+1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{h_{i-1/2, j}^{n+1/2, **}}{(\Delta x)^2} p_{2i-1, j} + \frac{h_{i, j-1/2}^{n+1/2, **}}{(\Delta y)^2} p_{2i, j-1} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{h_{i+1/2, j}^{n+1/2, **}}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{i-1/2, j}^{n+1/2, **}}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{i, j+1/2}^{n+1/2, **}}{(\Delta y)^2} + \frac{h_{i, j-1/2}^{n+1/2, **}}{(\Delta y)^2} \right) p_{2i, j} \right] \\ &= \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma-1} - \left((\rho e)^{n+1, **} - (\rho e)^n \right). \end{aligned}$$

2. Projektion

Damit auch das zellzentrierte Geschwindigkeitsfeld die Divergenzbedingung einhält, muss die Impulsdichte mit dem Fluss aus dem bislang vernachlässigten Druckterm p_2 korrigiert werden⁷. Dann ergibt sich die vollständige Impulsbilanz (4.8)

$$\begin{array}{l} \text{Prädiktor} \\ + 1. \text{ Projektion} \end{array} \quad \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA = 0$$

$$2. \text{ Projektion} \quad \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A p_2 \vec{n} dA = \vec{0}$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p_2 \vec{n} dA = \vec{0}.$$

Daraus folgt die Korrekturvorschrift für die Impulsdichte

$$(\rho \vec{v})_V^{n+1} = (\rho \vec{v})_V^{n+1,*} - \Delta t \oint_A p_2^{n+1/2} \vec{n} dA, \quad (5.35)$$

für die der Druck p_2 auf den Zellflächen von V benötigt wird.

Die Berechnung dieses Druckes erfolgt, indem die Energiebilanz der Kontrollvolumen auf zwei versetzten Gittern betrachtet wird (Geratz [9]). Dies ist einmal das bereits bekannte zellzentrierte Gitter V . Hinzu kommt ein um die jeweils halbe Gitterweite in jede Raumrichtung versetztes Gitter \bar{V} , welches in der Abbildung 5.2 gestrichelt dargestellt ist. Geometrisch entsprechen die Knoten des versetzten Gitters \bar{V} gerade den Zellmittelpunkten des Gitters V .

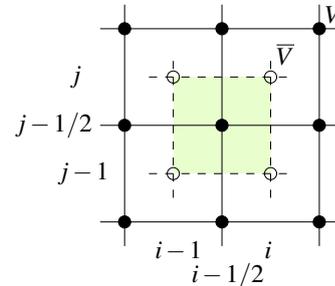


Abbildung 5.2: Duales Gitter

Aus dem Finite-Volumen Ansatz folgt, dass die zeitliche Änderung der Energiedichte gerade der Differenz der Energieflüsse auf den Zellwänden entsprechen muss

$$(\rho e)_{\bar{V}}^{n+1} - (\rho e)_{\bar{V}}^n = - \frac{\Delta t}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)^{n+1/2} \cdot \vec{n} d\bar{A}. \quad (5.36)$$

Die zeitliche Änderung der Energiedichte muss gleichfalls der Definition der Energiedichte (5.5) genügen, wobei $\gamma = const.$ als einschränkende Annahme

⁷Wird der bereits berechnete zellzentrierter Druck p_2 auf die Zellflächen extrapoliert, um so die zweite Projektion einzusparen, kann dies zu hochfrequenten Oszillationen aufgrund der Entkopplung von Druck und Geschwindigkeit führen.

und die räumliche Homogenität von p_0 zu beachten sind

$$(\rho e)_{\bar{V}}^{n+1} - (\rho e)_{\bar{V}}^n = \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma - 1}. \quad (5.37)$$

Analog zur 1. Projektion läßt sich das gesuchte Produkt aus Enthalpie und Impulsdichte aus der Differenz

$$(\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1/2} = (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1/2,*} - \frac{\Delta t}{2} (h \nabla p_2)^{n+1/2} \quad (5.38)$$

berechnen. Gleichsetzen von (5.36) und (5.37) liefert mit (5.38)

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta t)^2}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (h^* \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} d\bar{A} &= \frac{2\Delta t}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1/2,*} \cdot \vec{n} d\bar{A} \\ &+ 2 \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma - 1}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Mit der zeitlichen Mittelung

$$(\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1/2,*} = \frac{1}{2} ((\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^n + (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1,*}) \quad (5.40)$$

folgt die Berechnungsvorschrift für den nun knotenzentrierten Druck zu

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta t)^2}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (h^* \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} d\bar{A} &= \frac{\Delta t}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1,*} \cdot \vec{n} d\bar{A} \\ &+ \frac{\Delta t}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^n \cdot \vec{n} d\bar{A} \\ &+ 2 \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma - 1}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Aufgrund des für $M = 0$ räumlich konstanten Enthalpie-Dichte Produkts

$$\rho h = \rho e + p_0 = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_0$$

vereinfacht sich (5.41), da das Geschwindigkeitsfeld zum Zeitniveau t^n die Divergenzbedingung (4.11) erfüllt, so dass sich der zweite Term auf der rechten

Seite zu $-\Delta t/(\gamma-1)(\frac{dp_0}{dt})^n$ umschreiben läßt. Hierbei wird der Gradient des thermodynamischen Druckes zum Zeitniveau t^n von Außen aufgeprägt

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta t)^2}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (h^* \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} d\bar{A} &= \frac{\Delta t}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1,*} \cdot \vec{n} d\bar{A} \\ &+ 2 \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma - 1} - \frac{\Delta t}{\gamma - 1} \left(\frac{dp_0}{dt} \right)^n \end{aligned} \quad (5.42)$$

Diskret repräsentiert (5.42) wiederum eine Poissongleichung, mit der sich der gesuchte Druck p_2 auf den Zellflächen von V berechnen läßt, um das Oberflächenintegral der Korrekturvorschrift (5.35) auszuwerten.

Abweichend von den bisherigen Arbeiten [9, 13, 15, 20] wird für die Diskretisierung von (5.42) ein bi- bzw. trilinearer Interpolationsansatz zur Berechnung von ∇p_2 verwendet, der auch zu einem 9-Punkte Stern (2d) bzw. 27 Punkte Stern (3d) führt. Mit diesem Ansatz wird die Bildung von entkoppelten Teilgittern vermieden, so dass auch kurzwellige Druckoszillationen stets auf das Geschwindigkeitsfeld wirken. Er erlaubt ferner die Formulierung eines stabilen exakten Projektionsverfahrens und bietet weitere Entwicklungsmöglichkeiten, die von Vater in [25] diskutiert werden. Die einzelnen Terme von (5.42) werden nun getrennt diskretisiert:

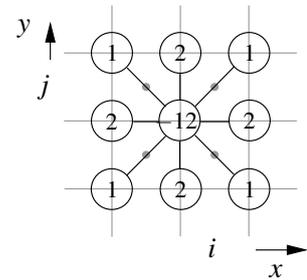


Abbildung 5.3: 9-Punktstern auf \bar{V}

Diskretisierung von $\frac{1}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (h^* \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} d\bar{A}$

Während die zu jeder Zellteilfläche \bar{A} gehörende Enthalpie h^* durch den nächstgelegenen Zellmittelwert approximiert wird, erfolgt die Diskretisierung des zellflächenzentrierten Gradienten ∇p_2 mit Hilfe eines bilinearen (2d) bzw. trilinearen (3d) Interpolationsansatzes, in dem der Druck p_2 knotenzentriert angenommen wird

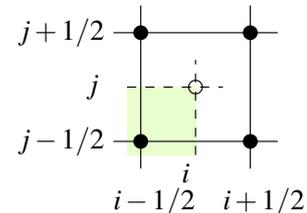


Abbildung 5.4: Teilvolumen \bar{V} um Punkt $i-1/2, j-1/2$

$$\begin{aligned} p_{2m,n} &= p_{2i-1/2,j-1/2} + \Delta x p_{2x} + \Delta y p_{2y} + \Delta x \Delta y p_{2xy} \\ \text{mit} \quad \Delta x &= x_m - x_{i-1/2} \text{ und } \Delta y = y_n - y_{j-1/2}. \end{aligned}$$

Die örtliche Ableitung liefert die gesuchte Approximation des Gradienten

$$\nabla p_2 = \begin{pmatrix} p_{2x} + \Delta y p_{2xy} \\ p_{2y} + \Delta x p_{2xy} \end{pmatrix}. \quad (5.43)$$

Für die Integration über die x -Fläche des in Abb. 5.4 dargestellten Teilvolumens des dualen Gitters \bar{V} um den Knoten $i - 1/2, j - 1/2$ folgt dann

$$\frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_0^{\frac{\Delta y}{2}} \left(h_{i,j}^* (p_{2x} + \Delta y p_{2xy}) \right)^{n+1/2} dy = \frac{h_{i,j}^*}{\Delta x \Delta y} \left[\frac{\Delta y}{2} p_{2x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta y}{2} \right)^2 p_{2xy} \right]$$

$$\text{mit } p_{2x} = \frac{p_{2i+1/2,j-1/2} - p_{2i-1/2,j-1/2}}{\Delta x}$$

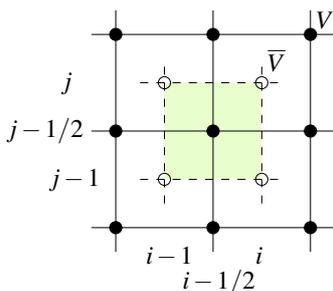
$$p_{2xy} = \frac{(p_{2i-1/2,j+1/2} - p_{2i-1/2,j-1/2}) - (p_{2i+1/2,j-1/2} - p_{2i-1/2,j-1/2})}{\Delta x \Delta y}.$$

Werden alle Oberflächen \bar{A} des dualen Volumens \bar{V} um den Knoten $i - 1/2, j - 1/2$ derart approximiert, ergibt sich für die x -Richtung die diskrete Formulierung

$$\frac{1}{8(\Delta x)^2} \left[\begin{array}{l} \left(h_{i,j}^* p_{2i+1/2} - (h_i^* + h_{i-1}^*) p_{2i-1/2} + h_{i-1,j}^* p_{2i-3/2} \right)_{j+1/2} \\ + 3 \left(\begin{array}{l} (h_j^* + h_{j-1}^*) p_{2i+1/2} \\ - (h_{i,j}^* + h_{i-1,j}^* + h_{i,j-1}^* + h_{i-1,j-1}^*) p_{2i-1/2} \\ + (h_j^* + h_{j-1}^*) p_{2i-3/2} \end{array} \right)_{j-1/2} \\ + \left(h_{i,j-1}^* p_{2i+1/2} - (h_i^* + h_{i-1}^*) p_{2i-1/2} + h_{i-1,j-1}^* p_{2i-3/2} \right)_{j-3/2} \end{array} \right].$$

Die Diskretisierung der y -Richtung erfolgt in analoger Weise.

Diskretisierung von $\frac{1}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1,*} \cdot \vec{n} d\bar{A}$



Die Berechnung des Oberflächenintegrals erfolgt derzeit noch mit Hilfe eines einfachen Mittelungsansatzes. Hierbei werden aus den zellzentrierten Werten $(\rho \vec{v} h)^{n+1,*}$ durch arithmetische Mittelung, bspw.

$$(\rho \vec{v} h)_{i,j-1/2}^{n+1,*} = \frac{((\rho \vec{v} h)_{i,j} + (\rho \vec{v} h)_{i,j-1})^{n+1,*}}{2},$$

Abbildung 5.5: Duales Gitter

die Werte auf den Zellflächenmittelpunkten von \bar{A} bestimmt. Dann ergibt sich unter Berücksichtigung des Normalenvektors

$$\frac{1}{|\bar{V}|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1,*} \cdot \vec{n} d\bar{A} \approx \frac{((\rho \vec{v} h)_i - (\rho \vec{v} h)_{i-1})_{j-1/2}^{n+1,*}}{\Delta x}$$

$$+ \frac{((\rho \vec{v} h)_{j-1} - (\rho \vec{v} h)_j)_{i-1/2}^{n+1,*}}{\Delta y}.$$

Im Gegensatz zum bi-/trilinearen Ansatz des Terms auf der linken Seite berücksichtigt diese Art der Diskretisierung der rechten Seite keine stückweise lineare Verteilung des Geschwindigkeitsfeldes. Aus diesem Grund führt der Ansatz nur zu einer approximativen 2. Projektion.

Wird hingegen die stückweise lineare Verteilung des Geschwindigkeitsfeldes bei der Berechnung des Oberflächenintegrals berücksichtigt, führt dies zu einer exakten Formulierung der 2. Projektion (vergl. [25]). Im Gegensatz zur approximativen kann mit der exakten Projektion die Einhaltung der Divergenzbedingung bis auf Maschinengenauigkeit garantiert werden⁸. Die hierfür notwendigen Ergänzungen sind für die nächste Programmversion von MOLOCH vorgesehen.

5.2 Lösungsverfahren

In jedem Zeitschritt wird in beiden Projektionen die Lösung eines linearen Gleichungssystems erforderlich, welches stets das gesamte Strömungsgebiet umfaßt. Um die Effizienz des vorgestellten Verfahrensansatzes zu steigern, ist daher der Einsatz moderner Lösungsverfahren notwendig. Wie *Schneider* in ([19], S.82f) zeigt, sind durch den Einsatz eines Mehrgitterverfahrens gegenüber einem einfachen iterativen Lösungsverfahren deutliche Effizienzsteigerung möglich.

Die Verwendung algebraischer Mehrgitterverfahren umgeht zudem die Diskretisierungsbeschränkungen der geometrischen Mehrgitterverfahren. Jedoch existiert nach Auffassung von Prof. Rolf Krause (Uni Bonn) für algebraische Mehrgitterverfahren für die hier zu lösenden Problemstellungen mit großen Unterschieden in den Koeffizienten, d.h. insbesondere hohe lokale Dichtedifferenzen, noch keine abschliessende Theorie. Somit kann eine Lösung jedes beliebigen Problems mit einem algebraischen Mehrgitterverfahren nicht garantiert werden. Bei der Anwendung des vorgestellten Verfahrens für Problemstellungen mit Dichteverhältnissen von bis zu 1:1000 konnte der Autor jedoch gute Ergebnisse erzielen. Dies bestärkt die Vermutung, dass die Ursache für die bislang fehlende Theorie die Komplexität der Thematik ist.

Für die Realisierung des algebraischen Mehrgitterverfahrens wird im Programm MOLOCH das Softwarepaketes HYPRE [5] verwendet. Das Paket wurde für die effiziente Lösung großer Gleichungssysteme entwickelt, ist frei verfügbar und stellt zahlreiche verschiedene lineare Gleichungslöser über unterschiedliche Schnittstellen zur Verfügung. Für die hier zu lösenden singulären linearen Gleichungssysteme, mit aufgrund von Dichteschwankungen lokal stark variierenden Koeffizienten, hat sich das algebraische Mehrgitterverfahren (BoomerAMG) mit vorkonditioniertem Gleichungslöser (BiCGStab) als brauchbar herausgestellt.

⁸Süli[23] zeigt für den 2d-Fall, dass Laplace-Diskretisierungen dieses Typs für beliebige Verhältnisse $\Delta x/\Delta y$ robust, konvergent und zweiter Ordnung genau sind. (aus [14])

5.3 Bestimmung der Referenz-Mach-Zahl M

Die Bestimmung der Referenz-Mach-Zahl M ist problemabhängig. Letztlich muss ein Referenzwert für die Strömungsgeschwindigkeit gefunden werden, der den Strömungszustand im gesamten Strömungsgebiet unter Berücksichtigung der zu untersuchenden Problematik ausreichend charakterisiert.

Mit dieser Information gibt die folgende Übersicht eine Zuordnung der berechneten Referenz-Mach-Zahl zu dem im Verfahren zu benutzenden Regime:

0	$\leq M < 0.1$	inkompressibles Regime $M = 0$
0.1	$\leq M < 0.3$	schwachkompressibles Regime $M \ll 1$
0.3	$\leq M$	kompressibles Regime $M = 1$

Das vorliegende Verfahren ist noch auf das inkompressible Regime $M = 0$ beschränkt und demnach im Bereich der Referenz-Mach-Zahl $0 \leq M < 0.1$ anwendbar.

5.4 Randbedingungen

Für die Abgrenzung und Unterteilung des Rechengebietes sind für das zuvor beschriebene Strömungsverfahren folgende Randbedingungen implementiert worden :

- Block-Rand
- Periodischer Rand
- Null-Gradient-Rand
- Feste Wand

Die Namensgebung orientiert sich an den strömungstechnischen Eigenschaften der Randbedingungen. Letztlich werden im Verfahren stets Flüsse über Zellgrenzen berechnet, so dass die vorgestellten Randbedingungen auf die Flußberechnung über die Rand-Zellfläche Einfluß nehmen, um einen definierten Fluß der Erhaltungsgrößen auf diesen Rand-Zellflächen zu erzwingen.

Für die Realisierung der Randbedingungen im Programm *MOLOCH* werden, je nach Bedarf, zwei unterschiedliche Strategien verwendet:

- a.) Randbehandlung im Lösungsalgorithmus
- b.) Hilfszellenkonzept

Details zur Strategien der Randbehandlung

a.) Randbehandlung im Lösungsalgorithmus

Die Randbehandlung erfolgt direkt im Lösungsalgorithmus. Dies hat in der Regel den Vorteil, dass die Programmierung dieser Randbedingungen weniger abstrakt erfolgen muss, als beim Hilfszellenkonzept. Nachteilig ist, dass sich der Algorithmus über Fallabfragen in verschiedene Programmäste zergliedert. Dies kann eine effiziente Abarbeitung des Algorithmuses in der CPU behindern, weil den Speicherladeroutinen in der CPU im Voraus nicht bekannt ist, welche Daten in den schnellen CPU nahen Cache geladen werden müssen. Die Berechnung in der CPU stoppt, bis die fehlenden Daten über mehrere CPU-Taktzyklen aus dem wesentlich langsameren Speicherbereichen der Rechnerarchitektur nachgeladen worden sind.

b.) Hilfszellenkonzept

Beim Hilfszellenkonzept wird über zusätzlichen Speicher sichergestellt, dass bei der Berechnung des Algorithmuses keine Verzweigungen aufgrund von Randbedingungen mehr notwendig sind. Der zusätzliche Speicher wird dazu benutzt die erforderlichen Daten im Vorfeld – im Sinne einer Arbeitsvorbereitung – zur Verfügung zu stellen.

Im Programm MOLOCH werden für das Hilfszellenkonzept zwei zusätzliche Gitterzellen notwendig, die um das eigentliche Strömungsgebiet herum angelegt werden. Weil das Verfahren auf einem kartesischen Gitter basiert, läßt sich das Rechengebiet stets in Form eines Quaders respektives Blockes darstellen. Für den dargestellten dreidimensionalen Block läßt sich jede Hilfszellen einer der 6 Flächen-, 8 Ecken- und 12 Kanten-Hilfszellenbereiche zuordnen. Je nach Lösungsalgorithmus und Raumdimension werden alle oder nur einzelne dieser Hilfszellenbereiche benötigt.

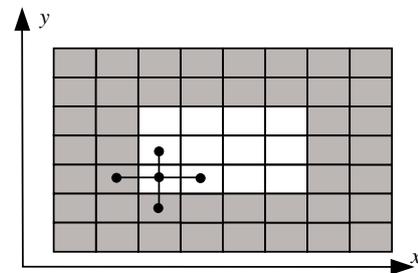


Abbildung 5.6:

Rechengitter mit Hilfszellen (grau) und 5-Punktstern

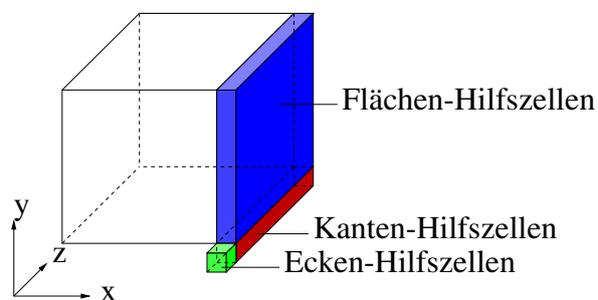


Abbildung 5.7: Notation der Hilfszellen (schattiert)

Die Setzung der Hilfszellen erfolgt vor dem Start des Algorithmuses und bestimmt sich aus der jeweiligen Randbedingung und dem verwendeten Lösungsalgorithmus. Bei

der Berechnung des Algorithmuses ergeben die Daten in den Hilfszellen dann die gewünschte Randbedingungseigenschaft. Die Programmierung der Hilfszellensetzungen kann kompliziert werden, weil im Vorfeld alle eventuelle auftretenden Möglichkeiten abzudecken sind.

Zuordnung der Randbedingungskonzepte

- **Prädiktor**
Der Gasdynamiklöser im Prädiktor verwendet ausschliesslich die Flächenhilfszellen des Hilfszellenkonzepts zur Realisierung der Randbehandlung. Um mit dem verwendeten Prädiktorschritt die zweite Verfahrensordnung im Raum zu erreichen, werden zwei Hilfszellen an jedem Rand benötigt.
- **Korrektor**
Die beiden Projektionen im Korrektor verwenden eine Mischung aus beiden Konzepten. Grundsätzlich erfolgt die Randbehandlung innerhalb der Algorithmen, wobei jedoch für die Berücksichtigung der Block-Randbedingung auf das Hilfszellenkonzept zurückgegriffen wird.

Für die Lösung der linearen Gleichungssysteme in den Projektionen werden ausser den Block- und periodischen Rändern alle Ränder als feste Wände behandelt. Dies hat den Vorteil, das beim Aufbau der Matrizen der Aufwand für die Randbehandlung begrenzt werden kann. Dann kann an der Wand der Gradient von p_2 normal zur Wand stets zu Null angenommen werden und der Matrixeintrag für diesen Gradienten entfällt. Für Randflächen, bei denen diese Annahme unzutreffend ist, erfolgt die Korrektur bei der Bildung der rechten Seite.

5.4.1 Block-Rand

Durch Gebietszerlegung wird das Rechengebiet in Teilgebiete (Blöcke) unterteilt, so dass bspw. die Geometrie des Strömungsgebietes besser dargestellt werden kann. Die Kopplung dieser Blöcke geschieht über die Block-Randbedingung, die für die Algorithmen transparent sein muss. Das heisst, dass das Rechenergebnis unabhängig von der Zerlegung des Rechengebietes sein muss⁹.

Die Einführung der Gebietszerlegung hat auf die Projektionsverfahren einen großen Einfluß. Während sich im Prädiktorschritt aufgrund des hyperbolischen Gleichungssystems I^* Informationen in einem Zeitschritt nur bis zur nächsten Zelle ausbreiten können, beeinflussen im Korrektorschritt aufgrund des elliptischen Charakters alle Zellen gemeinsam und gleichzeitig die Informationsausbreitung. Das bedeutet, dass die Teillösungen der linearen Gleichungssysteme

⁹Die Berechnung der Zeitschrittweite erfolgt im Programmcode MOLOCH unter Berücksichtigung aller Blöcke. Ferner ist garantiert, dass für alle Blöcke mit der gleichen Zeitschrittweite gerechnet wird.

der einzelnen Blöcke miteinander gekoppelt sind. Zur Lösung dieser Problematik stehen prinzipiell zwei Lösungsstrategien zur Verfügung.

1. Globaler Ansatz

Es wird ein globales, alle Blöcke umfassendes lineares Gleichungssystem aufgesetzt. Die durch die Gebietszerlegung entstandenen Randbedingungen sind im Aufbau des Gleichungssystems enthalten, so dass nur noch die Gebietsränder als Randbedingungen auftreten. Damit werden die mathematischen Probleme der Gebietszerlegung bei der Lösung elliptischer Systeme auf Kosten des erforderlichen Speicherplatzes bei der Erzeugung der globalen Matrizen umgangen.

2. Lokaler Blockansatz

Für jeden Block wird ein lineares Teil-Gleichungssystem aufgestellt und über zusätzliche Kopplungsbedingungen iterativ eine Lösung berechnet. Dieser Ansatz läßt sich gut parallelisieren, erfordert jedoch profunde Kenntnisse über die Lösung elliptischer Gleichungssysteme auf verteilten Prozessoren. Da bereits für das algebraische Mehrgitterverfahren im Kontext der hier betrachteten Problemstellung die Konvergenz des Verfahrens nicht garantiert werden kann, wird auf diesen anspruchsvolleren Lösungsansatz verzichtet.

Im Programmcode MOLOCH wird der globale Ansatz mit Hilfe des Softwarepaketes *Hypr* [5] realisiert. Durch den globalen Lösungsansatz liegt der Blockrand immer innerhalb des Strömungsgebietes und bezieht seine Randinformationen auch aus diesem. Hierfür ist das Hilfszellenkonzept gut geeignet.

Block-Rand im Prädiktor

Für die Berechnung des Flusses über die Zellflächen werden nur die Flächen-Hilfszellen benötigt. Ihre Belegung ergibt sich eindeutig durch die geometrische Überlappung mit dem Strömungsgebiet des benachbarten Blockes.

Block-Rand im Korrektor

Im Korrektorschritt benötigt die 1. Projektion aufgrund des verwendeten 5 bzw. 7-Punktsterns ebenfalls nur die Flächen-Hilfszellen. Hingegen erfordert der 9 bzw. 27 Punktstern der 2. Projektion auch die Kanten- und Ecken-Hilfszellen. Ihre Setzung ist unproblematisch, da diese Hilfszellen stets die benachbarten Strömungsgebiete überlappen. Eine besondere Behandlung erfordern jedoch die Knoten benachbarter Blockränder. Diese liegen geometrisch übereinander und müssen identische p_2 -Werte besitzen. Dies wird garantiert, indem die Knoten des jeweils rechten, oberen oder hinteren Blockrandes nicht in das Gleichungssystem aufgenommen werden. Stattdessen werden die berechneten p_2 -Werte in die ausgelassenen doppelten Knoten kopiert.

5.4.2 Periodischer Rand

Mit Hilfe periodischer Randbedingungen kann das Strömungsgebiet unendlich fortgesetzt dargestellt werden. Dies erfordert jedoch immer zwei sich gegenüberliegende Randflächen periodischen Typs, die ihre Daten gegenseitig austauschen. Grenzen periodische Randflächen über eine Kante oder Ecke aneinander, müssen die an die jeweiligen Kanten- bzw. Ecken angrenzenden Bereiche mit den diagonal gegenüberliegenden korrespondieren. Mit Ausnahme dieser stets auf die gegenüberliegende Seite verschobenen Datenquelle entsprechen die periodischen Ränder dem Vorgehen bei Block-Rändern.

Periodischer Rand im Prädiktor

Die Behandlung periodischer Ränder erfolgt analog zur Vorgehensweise beim Blockrand. Jedoch liegt die Datenquelle auf der gegenüberliegenden Seite.

Periodischer Rand im Korrektor

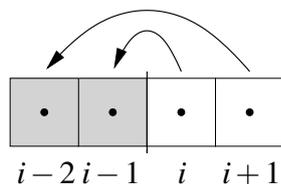
Die Behandlung periodischer Ränder erfolgt analog zur Vorgehensweise beim Blockrand. Jedoch liegt die Datenquelle auf der gegenüberliegenden Seite.

5.4.3 Null-Gradient Rand

Die Null-Gradienten-Randbedingung ist eine Spezialrandbedingung für den Prädiktor. Sie wird als Ersatz für die feste Wand-Randbedingung verwendet, damit im Prädiktor keine Druckwellen auftreten können (siehe auch 5.4.4). Hierzu soll der Gradient der Erhaltungsgrößen über einen Null-Gradienten-Rand stets Null sein.

Null-Gradient Rand im Prädiktor

Der Gradient der Erhaltungsgrößen über die Berandung ist Null, wenn in die Flächen-Hilfszellen die Werte der Erhaltungsgrößen $\vec{U} = [\rho, \rho\vec{v}, \rho e]^T$ aus den gegenüberliegenden Zellen des Strömungsgebietes kopiert werden.



$$\begin{aligned}\vec{U}_{i-1} &= \vec{U}_i \\ \vec{U}_{i-2} &= \vec{U}_{i+1}\end{aligned}$$

Abbildung 5.9:

Flächen-Hilfszellensetzung am Null-Gradienten Rand

Null-Gradient Rand im Korrektor

– entfällt –

5.4.4 Feste Wand

Die feste Wand wird hier nur im Zusammenhang mit der in diesem Kapitel vorgestellten Verfahrenskonstruktion für die Strömungsberechnung betrachtet.

Mit dem Begriff feste Wand wird die Vorstellung verbunden, dass es keinen advektiven Transport von Masse, Impuls oder Energie über diesen Rand gibt. In der Regel kann bei den angestrebten praktischen Problemen durch die gewählte Diskretisierung des Strömungsgebietes die Grenzschicht an der Wand nicht aufgelöst werden. Da auch kein Submodell für die Wandbehandlung berücksichtigt wird, ist es in diesem Fall sinnvoll eine „reibungsfreie Wand“ anzunehmen. Dies bedeutet, dass im Kontext des vorgestellten Verfahrens die Geschwindigkeiten tangential auf der Wand, wie die auf den Zellflächen im Strömungsgebiet berechnet werden¹⁰.

Feste Wand im Prädiktor

Im Regime $M = 1$:

Damit kein advektiver Fluss über die feste Wand fließt, muss die Normal-Geschwindigkeit auf der Wandoberfläche Null sein. Dies wird im Verfahren durch geeignete Setzung der Flächen-Hilfszellen erreicht.

In dem im Prädiktor eingesetzten HLLC-Verfahren erfolgt die Berechnung der Wandnormalengeschwindigkeit durch Rekonstruktion aus benachbarten Zellmittelwerten. Damit der im HLLC-Verfahren eingesetzte Algorithmus auf der festen Wand die Wandnormalengeschwindigkeit zu Null berechnet, werden die Flächen-Hilfszellen mit den Erhaltungsgrößen der gegenüberliegenden Strömungszellen belegt. Hierbei müssen für „reibungsfreie Wände“ die Vorzeichen der Geschwindigkeit normal zur Wandfläche gewechselt werden. Für „reibungsbefahrene Wände“ zusätzlich auch die der Tangentialgeschwindigkeiten.

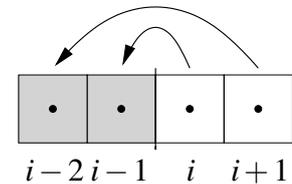


Abbildung 5.10:
Flächen-Hilfszellen-
setzung für die feste
Wand-Randbedingung

<i>reibungsfrei</i>	<i>reibungsbefahren</i>
$(\rho, \rho v, \rho w, \rho e)_{i-1} = (\rho, \rho v, \rho w, \rho e)_i$	$(\rho, \rho e)_{i-1} = (\rho, \rho v, \rho w, \rho e)_i$
$(\rho u)_{i-1} = -(\rho u)_i$	$(\rho u, \rho v, \rho w)_{i-1} = -(\rho u, \rho v, \rho w)_i$

Die Setzung der Hilfszelle $i - 2$ erfolgt analog aus $i + 1$.

Im Regime $M = 0$:

Im Regime $M = 0$ wird im Prädiktor jede feste Wand als Null-Gradient Rand uminterpretiert. Dies hat den Vorteil, dass im Prädiktor durch normal auf Wand-

¹⁰Wird durch die gewählte Diskretisierung auch die Wandgrenzschicht aufgelöst, muss aufgrund der nun „reibungsbefahrenen Wand“ auch die tangential Geschwindigkeit auf der Wand Null sein. Die Entscheidung obliegt dem Anwender.

flächen auftreffende Strömungen keine Druckwellen auftreten können¹¹. Der durch diese Uminterpretation auftretende Fehler ist mit einem falsch berechneten Fluss des Prädiktors vergleichbar. Diese falsch berechneten Flüsse werden durch die 1. Projektion wieder korrigiert, so dass dieses Prinzip auch für die festen Wände genutzt werden kann¹².

Feste Wand im Korrektor, 1. Projektion

Aus Gründen der Programmierung werden wesentliche Teile der Randbehandlung in den Aufbau der rechten Seite verschoben. So kann beim Matrixaufbau weiterhin angenommen werden, dass der Prädiktor keinen advektiven Transport über Wandflächen zugelassen hat. Hierzu wird das Oberflächen-Integral der Energieerhaltung für jedes Volumenelement V des Rechengitters (5.31)

$$(\rho e)_V^{n+1,*} - (\rho e)_V^n = -\frac{\Delta t}{|V|} \oint_A ([\rho e + \pi] \vec{v}^*)^{n+1/2} \cdot \vec{n} dA$$

an einer festen Wand in einen Flächenanteil „ A_{\perp} : feste Wand“ und einen Flächenanteil „ A_{\square} : Strömungsgebiet“ aufgeteilt. Unter Anwendung des Korrekturansatzes (5.19) und der Definition der Energiedichte (5.5) folgt dann aus (5.31) für $M = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{p_0^{n+1}}{\gamma-1} - (\rho e)_V^n &= -\frac{\Delta t}{|V|} \int_{A_{\perp}} ([\rho e + p_0] \vec{v})^{n+1/2,*} \cdot \vec{n} dA \\ &\quad - \frac{\Delta t}{|V|} \int_{A_{\square}} \left([\rho e + p_0] \left(\vec{v} - \frac{\Delta t}{2\rho^{n+1/2}} \nabla p_2 \right) \right)^{n+1/2,**} \cdot \vec{n} dA. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Durch Einsetzen der analog unterteilten Energiebilanz für den Prädiktorschritt

¹¹Vergl. mit Abschnitt 4.2, im Regime $M = 0$ ist der Druck p_0 räumlich konstant. Aufgrund von (4.5) gilt dies daher auch für die führende Ordnung der Energiedichte ρe .

¹²Mit Hilfe der Korrektur durch die exakte 1. Projektion wird die Einhaltung der Massen-, Impuls- und Energiebilanz bis auf Maschinengenauigkeit garantiert.

(vergl. (5.32)) folgt dann unter Berücksichtigung der gleichen Annahmen

$$\begin{aligned}
\frac{(\Delta t)^2}{2|V|} \int_{A_{\square}} (h^{**} \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} dA &= \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma - 1} & (5.45) \\
&- \left((\rho e)^{n+1, **} - (\rho e)^n \right) \\
&+ \frac{\Delta t}{|V|} \int_{A_1} ([\rho e + p_0] \vec{v})^{n+1/2, * \star} \cdot \vec{n} dA \xrightarrow{=0} \\
&- \frac{\Delta t}{|V|} \int_{A_1} ([\rho e + p_0] \vec{v})^{n+1/2, **} \cdot \vec{n} dA.
\end{aligned}$$

Der dritte Term der rechten Seite verschwindet, weil es über die feste Wand per Definition in dem vorgestellten Verfahren keinen advektiven Energiefluss geben kann. Der vierte Term enthält den fehlerhaften Energiefluss des Prädiktors. Mit dem durch das modifizierte Gleichungssystem (5.45) bestimmten p_2 -Feld erfolgt dann die Korrektur des Prädiktorflusses in (5.21).

Um die Erhaltungseigenschaften für alle Erhaltungsgrößen \vec{U} bis auf Maschinengenauigkeit einzuhalten, werden alle Prädiktorflüsse über feste Wände abgespeichert. Die approximative Flusskorrektur (5.21) läßt sich dann für die festen Wandflächen durch die exakte Flusskorrektur

$$\vec{F}_{i\pm 1/2}^{n+1/2, * \star}(\vec{n}) = \underbrace{\begin{bmatrix} (\rho \vec{v})^{**} \cdot \vec{n} \\ (\rho \vec{v})^{**} (\vec{v}^{**} \cdot \vec{n}) \\ [(\rho e)^{**} + p_0] \vec{v}^{**} \cdot \vec{n} \end{bmatrix}_{i\pm 1/2}}_{\vec{F}_{HLL E, \text{kov.}, i\pm 1/2}^{n+1/2, **}} - \underbrace{\begin{bmatrix} F_{HLL E, \rho} \\ p_0 \cdot \vec{n} - F_{HLL E, \rho \vec{v}} \\ F_{HLL E, \rho e} \end{bmatrix}_{i\pm 1/2}}_{\vec{F}_{Korr, i\pm 1/2}^{n+1/2, **}} \quad (5.46)$$

ersetzen.

Feste Wand im Korrektor, 2. Projektion

Durch die 1. Projektion ist die Wandbedingung für die Zellflächengeschwindigkeiten bereits erfüllt. Die 2. Projektion (5.42)

$$\begin{aligned}
\frac{(\Delta t)^2}{|V|} \oint_{\bar{A}} (h^* \nabla p_2)^{n+1/2} \cdot \vec{n} d\bar{A} &= \frac{\Delta t}{|V|} \oint_{\bar{A}} (\rho \vec{v} h)_{\bar{V}}^{n+1, * \star} \cdot \vec{n} d\bar{A} \\
&+ \frac{p_0^{n+1} - p_0^n}{\gamma - 1}
\end{aligned}$$

hat die Aufgabe die Divergenzbedingung für die zellzentrierten Geschwindigkeiten einzuhalten. Beim Matrixaufbau reduziert sich an den festen Wandflächen der Stern, weil ein Teil des dualen Volumens \bar{V} hinter der Wand ausserhalb des Strömungsgebietes liegt. Das Oberflächenintegral der rechten Seite wird nun nur noch über das im Strömungsgebiet liegende duale Volumen ausgewertet. Ein Teil der Oberfläche dieses reduzierten dualen Kontrollvolumens liegt damit auf der festen Wandfläche. Da über diese Wandfläche kein Strömungsaustausch möglich ist, liefern diese Wandabschnitte keinen Beitrag zum Oberflächenintegral. Die hier auszuwertenden Normalengeschwindigkeiten auf der Wandfläche sind Null.

Im Fall der „reibungsfreien Wand“ ist die Tangential-Geschwindigkeit auf dieser Wandfläche durch die Randbedingung allerdings nicht definiert. Es wird daher die Annahme getroffen, dass sich die Tangential-Geschwindigkeit vom nächstgelegenen Zellzentrum in Richtung der Wandfläche nicht verändert.

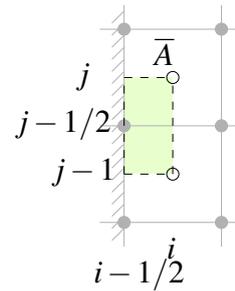


Abbildung 5.11:
Duales Kontrollvolumen an
fester Wand

6 Erweiterung des Projektionsverfahrens

Die Kapitel 4 und 5 erläutern die Asymptotik und Verfahrenskonstruktion des Projektionsverfahrens für reibungsfreie nicht-reaktive Strömungen (Eulergleichungen). Dieses Kapitel stellt die Berücksichtigung der Gravitation im vorgestellten Verfahrensansatz vor.

6.1 Gravitation

Die Berücksichtigung der Gravitation führt zu weiteren Termen auf der rechten Seite der Impuls- und Energiegleichung (siehe auch (3.4))

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A \frac{p}{M^2} \vec{n} dA &= \frac{1}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} dV \\
 \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= \frac{M^2}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} \cdot \vec{v} dV.
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Die dimensionslose Gravitationskonstante g wird im Gravitationsvektor $\vec{g} = [0, g, 0]^T$ berücksichtigt. Sie ist der y -Koordinatenachse zugeordnet, um auch 2d Rechnungen unter Gravitationseinfluss durchführen zu können. Die dimensionslose Froud-Zahl Fr wurde bereits im Abschnitt 3.2 erläutert.

Analog zur Herleitung der asymptotischen Gleichungssätze für die Eulergleichungen in Kapitel 4, lassen sich auch die Gravitationsterme nach der Ordnung der Mach-Zahl sortieren. Hierbei wird angenommen, dass alle weiteren Referenz-Kennzahlen, hier die Froude-Zahl Fr , konstant ungleich Null sind. Nähere Details zur Asymptotik finden sich im Anhang in Abschnitt 8.2.

6.1.1 Ergebnis der Asymptotischen Analyse

Der Gravitationsterm in der Impulsbilanz skaliert mit $M^{(0)}$, so dass er im Gleichungssatz der führenden Ordnung vertreten ist. Die Berücksichtigung der

Gravitation erweitert die rechte Seite der Impulsgleichung um den Term

$$\frac{1}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} dV. \quad (6.2)$$

Der Gravitationsterm in der Energiebilanz enthält das Verhältnis der dimensionslosen Kennzahlen $\frac{M^2}{Fr^2}$. Für $Fr = O(1)$ skaliert er mit M^2 , so dass er nicht in der führenden Ordnung vertreten ist und in der Energiebilanz unberücksichtigt bleibt. Ändert sich die Größenordnung der Froude-Zahl, so dass $\frac{M^2}{Fr^2} > 0.1$ wird, gilt dies nicht mehr. Die Beschränkung der Froude-Zahl hat somit praktische Konsequenzen. Unter Verwendung der Definitionen aus Abschnitt 3.2, ergibt sich bspw. für eine Referenzdichte von $\rho_{ref} = 1 \text{ kg/m}^3$, $g_{ref} = 10 \text{ m/s}^2$ und einem Referenzdruck von $p_{ref} = 1013 \text{ mbar}$

$$\frac{M^2}{Fr^2} = \frac{\rho_{ref} g_{ref} l_{ref}}{p_{ref}} = \frac{l_{ref}}{10130 \text{ m}}. \quad (6.3)$$

Damit in diesem Fall weiterhin $\frac{M^2}{Fr^2} > 0.1$ gilt, darf die Referenzlänge l_{ref} die Größenordnung von 1000 m nicht überschreiten.

6.1.2 Modifikation der Verfahrenskonstruktion ($M = 0$)

Die Berücksichtigung der Gravitation erfolgt im Prädiktor. Der Gravitationsoperator \mathcal{L}_{Fr} wird hierfür jeweils zu Beginn und am Ende der Kopplungskette (5.7) angeordnet¹

$$\vec{U}^{n+1, **} = \underbrace{\left[\mathcal{L}_{Fr}^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_x^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_y^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_z^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_z^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_y^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_x^{\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{L}_{Fr}^{\frac{\Delta t}{2}} \right]}_{\mathcal{L}_{Prä}^{\Delta t}} \vec{U}^n \quad (6.4)$$

mit $\mathcal{L}_{Fr}^{\Delta t} : \quad \rho \vec{v} + = \frac{1}{Fr^2} \rho \vec{g} \Delta t.$

Dieser Ansatz erfordert, dass vom Euler-Operator (\mathcal{L}_x usw.) jede Wand-Randbedingung als Null-Gradient Randbedingung interpretiert werden muss. Dies entspricht der bei den Randbedingungen vorgestellten Verfahrensweise für feste Wände (vergl. 5.4.4), die u.a. auch durch die Implementierung der Gravitation motiviert wurde. Zusätzliche Erweiterungen im Korrekturschritt sind nicht notwendig.

¹Da der numerische Aufwand für diese doppelte Operation gering ist, kann dieser Ansatz später im Zuge des All-Mach-Verfahrens auch für das Regime $M = 1$ übernommen werden.

Die Begründung für diese Art der Implementierung der Gravitation liegt in zahlreichen Detailpunkten, die nun diskutiert werden.

Uminterpretation der festen Wand

Bei Beibehaltung der festen Wand Randbedingung anstelle der Null-Gradienten Randbedingung würde es im Regime $M = 0$ an festen y -Wänden zu Dichteänderungen kommen. Da ein advektiver Strömungstransport durch eine Wand nicht möglich ist, muss die Normalengeschwindigkeit auf der y -Wand Null sein. Durch den Gravitationsoperator entsteht jedoch hier eine Normalengeschwindigkeit ungleich Null. Um dies auszugleichen würde der HLLE-Löser eine Druckwelle von der y -Wand in Richtung des Strömungsgebietes erzeugen. Weil im Regime $M = 0$ keine Druckwellen aufgelöst werden können, manifestiert sich diese Störung schliesslich in einer Dichteänderung. Könnte die Dichte bislang durch die 1. Projektion exakt mitkorrigiert werden, geht dies dann aufgrund des veränderten Verhältnisses zwischen Dichte- und Energiefluss nicht mehr. Eine sehr nützliche Eigenschaft des Verfahrens ginge verloren.

Kopplungsanordnung

Ein naheliegender Kopplungsansatz wäre die Implementierung des Gravitationsoperators in der Mitte des Prädiktors in der Form

$$\vec{U}^{n+1,**} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{L}_x^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_y^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_z^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_{Fr}^{\Delta t} & \mathcal{L}_z^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_y^{\frac{\Delta t}{2}} & \mathcal{L}_x^{\frac{\Delta t}{2}} \end{bmatrix}}_{\mathcal{L}_{Euler,Prä}^{\Delta t}} \vec{U}^n.$$

Dieser Ansatz führt aufgrund der eingesetzten Mittelungsprozeduren im ersten Iterationsschritt zu einem Mittelungsfehler. Dies soll an einem Gedankenexperiment diskutiert werden.

Ein vollständig in Ruhe befindliches Strömungsgebiet $\vec{v}^* = \vec{0}$ mit konstanten Zuständen \vec{U} ist allseitig von festen Wänden umgeben. Durch den Gravitationsoperator steigt im Prädiktor die Geschwindigkeit in y -Richtung um $g\Delta t$. Dann berechnet sich der Impulsfluss in diese Richtung aus der Mittelung der beiden Euler-Operatoren \mathcal{L}_y

$$F_{Hlle,pv} = \frac{1}{2} \left\{ (0 + p_0) + (\rho(g\Delta t)^2 + p_0) \right\} = \frac{\rho(g\Delta t)^2}{2} + p_0.$$

Der erste Euler-Operator hat den Gravitationseinfluss nicht mitbekommen, so dass hier der konvektive Anteil zu Null wird. Durch die Mittelung kommt es zu einem Fehler. Der Kopplungsansatz (6.4) vermeidet dies und führt zu der korrekten Mittelung

$$F_{Hlle,pv} = \frac{1}{2} \left\{ (\rho(g\Delta t)^2 + p_0) + (\rho(g\Delta t)^2 + p_0) \right\} = \frac{\rho(g\Delta t)^2}{4} + p_0.$$

Approximationsfehler

Im Korrekturansatz (5.21) wurde das dyadische Produkt der beiden Druckgradienten im Impulsfluss berücksichtigt, obwohl die angestrebte zweite Verfahrensordnung auch ohne diesen Term erreicht werden würde. Auch hier liefert die Einbindung der Gravitation die Motivation (vergl. 7.4).

Mit dem gleichen Gedankenexperiment, eines von festen Wänden umgebenen Strömungsgebietes in Ruhe, ergibt sich die vom Prädiktor berechnete y -Geschwindigkeit zu $v^{**} = g\Delta t$. Damit das Strömungsfeld in Ruhe bleibt ($v^* = 0$), muss mit Hilfe der Projektionen ein Druckfeld p_2 erzeugt werden, welches die durch den Prädiktor approximierte Geschwindigkeit gerade wieder zu Null korrigiert. Dies ist gleichbedeutend mit

$$v^{**} = \frac{\Delta t}{2\rho^{**}} \nabla_y p_2.$$

Die y -Komponente des Gesamtflusses in y -Richtung aus (5.21) muss sich dann zu Null ergeben:

$$\begin{aligned} F_{\rho v}^* = 0 &= (\rho v^2)^{**} - \frac{\Delta t}{2} \left(2v^{**} \nabla_y p_2 - \frac{\Delta t}{2\rho^{**}} (\nabla_y p_2)^2 \right) \\ &= \rho^{**} \left[v^{**,2} - 2v^{**} \frac{\Delta t}{2\rho^{**}} \nabla_y p_2 + \left(\frac{\Delta t}{2\rho^{**}} \nabla_y p_2 \right)^2 \right] \\ &= \rho^{**} \left[v^{**,2} - 2v^{**,2} + v^{**,2} \right] \end{aligned}$$

Diese Forderung $F_{\rho v}^* = 0$ kann offensichtlich nur dann erfüllt werden, wenn auch das dyadische Produkt der Druckgradienten bei der Flusskorrektur nach (5.21) berücksichtigt wird.

Gravitation im Korrektor

Eine weitere Variante wäre die Berücksichtigung der Gravitation im Korrektorschritt des Verfahrens. In der 1. Projektion müßte die Korrekturvorschrift (5.19) um den Gravitationsterm erweitert, vor der zweiten Projektion der Gravitationsterm auf die zellzentrierten Impulsdichte aufaddiert werden. Dieser Lösungsansatz kann bei starken Dichtegradienten zu Problemen führen, wenn der advective Transport durch die Gravitation in der 1. Projektion mit einer Zentralen- anstelle einer Upwind-Differenz behandelt wird. Bei der Berechnung der flächenzentrierten Korrekturflüsse in der ersten Projektion werden jedoch arithmetische Mittelwerte gebildet. Dies kann bei starken Dichtegradienten zwischen zwei benachbarten Zellen zu einem Transport in die falsche Richtung und somit zu unphysikalischen negativen Dichten führen.

Zeitschrittweite

Der Einfluss der Gravitation muss auch in der Berechnung der Zeitschrittweite Δt für den Prädiktor berücksichtigt werden, da sie sich unmittelbar im Prädiktor als advective Geschwindigkeit auswirkt. Für den angestrebten Anwendungsbereich wird ein Sicherheitsbeiwert analog zur CFL-Zahl von 0.5 gewählt:

$$\Delta t = \text{MIN}(\Delta t_{\text{Grav}}, \Delta t_{\text{Euler}}) \quad (6.5)$$

$$\text{mit } \Delta t_{\text{Grav}} = 0.5 \frac{\Delta x_{\text{MIN}}}{|u_{\text{MAX}}| + c + Fr^{-2}|g|\Delta t_{\text{Euler}}}.$$

7 Verfahrenstest

Um die Güte des im Programm *MOLOCH* implementierten Verfahrens zu dokumentieren, werden in diesem Kapitel die Ergebnisse ausgewählter 2 und 3d-Testrechnungen und Konvergenzstudien vorgestellt.

Anhand eines advektierten 2d-Wirbelfeldes wird die Konvergenz der Verfahrenskonstruktion gezeigt. Die Untersuchung demonstriert den Einfluß der Steigungslimitierung auf die Verfahrensordnung und die guten Erhaltungseigenschaften der Verfahrens für Dichte und Energiedichte. In einem weiteren Test wird durch Initialisierung mit Dichteamplituden von bis zu 1:1000 die Robustheit des Verfahrens gezeigt.

Weitere Testfälle betreffen die Güte der Einbindung der Gravitation. Zur Überprüfung der Erhaltungseigenschaften wird eine geschlossene Box mit stabil geschichteter Dichteverteilung untersucht. Eine weitere Konvergenzstudie untersucht die Advektion eines Wirbel unter Gravitationseinfluß. Die Fähigkeiten der implementierten Wand-Randbedingungen demonstriert ein 3d-Testfall, indem ein Tropfen mit einem Dichteverhältnis von 1:1000 direkt auf die untere Behälterwand fällt ohne Dichte- oder Druckstörungen zu produzieren.

Insgesamt zeigen die vorgestellten Testergebnisse zufriedenstellende Resultate und unterstützen die Weiterentwicklung der begonnenen Verfahrensentwicklung.

7.1 Konvergenzberechnung

Für die Berechnung der Konvergenz werden vom Programm die integralen Zellmittelwerte auf den 3 Gitterweiten l , f und e zur Zeit t berechnet. Mit der Berechnungsvorschrift für den lokalen Fehler der Größe ϕ zwischen der berechneten Lösung auf den Gittern l und e bzw. f und e

$$e_{le} = |\phi_{i,j}^n - \overline{\phi(x,y,t^n)}|$$

berechnen sich die L_2 - und L_∞ -Norm

$$L_2 = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i,j} e_{i,j}^2}, \quad L_\infty = \text{MAX}(e_{i,j}).$$

Mit den für die Gitter f und e berechneten Werten, berechnet sich dann die Ordnung des Verfahrens p zu

$$p = \frac{\log\left(\frac{e_{le}}{e_{fe}}\right)}{\log(2)}.$$

Die angestrebte zweite Verfahrensordnung gilt mit $p > 1$ als erreicht. Für ihren Nachweis ist zu beachten, dass für zeitabhängige Probleme mit zunehmender Anzahl von Iterationsschritten mit einer Verschlechterung der Verfahrensordnung zu rechnen ist. Ursache sind im Verfahren eingesetzte diskontinuierliche Lösungsverfahren, wie bspw. Limiter. Die maximal erreichbare Verfahrensordnung läßt sich daher nur im ersten Iterationsschritt zeigen.

7.2 Wirbelfeld mit konstanter Dichte

Minion [17] beschreibt ein reibungsfreies Testproblem auf dem Einheitsquadrat mit periodischen Rändern, mit dem die Konvergenzeigenschaften inkompressibler Projektionsverfahren überprüft werden können. Hierbei wird ein konstantes Dichtefeld durch Wirbel transportiert (vergl. [19], S.142 ff). Die Anfangsdaten für den Testfall mit konstanter Dichte ergeben sich aus der exakten Lösung zum Zeitpunkt $t = 0$:

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t) &= 1 \\ u(x, y, t) &= 1 - 2 \cos(2\pi(x - t)) \sin(2\pi(y - t)) \\ v(x, y, t) &= 1 + 2 \cos(2\pi(x - t)) \sin(2\pi(y - t)) \\ p(x, y, t) &= 1 \end{aligned}$$

Für die Berechnung der maximalen Verfahrensordnung erfolgt die Integration auf dem Einheitsquadrat im Zeitintervall $[0, 1.45e - 3]$ mit einer CFL-Zahl von 0.8. Der Zeitschritt entspricht gerade dem auf dem feinsten Gitter. Die Gitterweiten betragen $l = 32 \times 32$, $f = 64 \times 64$ und für die exakte Lösung $e = 128 \times 128$. Die Approximation der integralen Zellmittelwerte der exakten Lösung erfolgt über eine arithmetische Mittelung.

	L_2			L_∞		
	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p
ρ	$1.49e - 16$	$1.39e - 16$	—	$4.44e - 16$	$5.55e - 16$	—
ρu	$2.91e - 03$	$5.85e - 04$	2.31	$6.08e - 03$	$1.24e - 03$	2.28
ρv	$2.91e - 03$	$5.85e - 03$	2.31	$6.07e - 03$	$1.24e - 03$	2.28
ρe	$9.51e - 17$	$5.09e - 17$	—	$4.44e - 16$	$4.44e - 16$	—

Abbildung 7.1:

L_2 -, L_∞ -Norm und Ordnung mit Limiter Schulze-Rinne für $t = 1.45e - 3$.

Um den Einfluß des Limiters auf die Verfahrensordnung des zeitabhängigen Problems zu dokumentieren, wird jeweils eine Rechnung ohne und mit einer Steigungslimitierung durch den Schulze-Rinne Limiter im Prädiktor- und Korrektorschritt durchgeführt. Die Integration auf dem Einheitsquadrat erfolgt nun im Zeitintervall $[0, 1]$ mit einer CFL-Zahl von 0.8.

	L_2			L_∞		
	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p
ρ	$5.95e - 16$	$8.06e - 16$	—	$1.99e - 15$	$3.10e - 15$	—
ρu	$3.95e - 02$	$9.03e - 03$	2.13	$6.90e - 02$	$1.51e - 03$	2.19
ρv	$3.95e - 02$	$9.03e - 03$	2.13	$6.92e - 02$	$1.51e - 03$	2.19
ρe	$1.36e - 15$	$1.84e - 15$	—	$4.44e - 15$	$8.88e - 15$	—

Abbildung 7.2: L_2 -, L_∞ -Norm und Ordnung ohne Limiters für $t = 1$.

	L_2			L_∞		
	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p
ρ	$4.28e - 16$	$5.86e - 16$	—	$5.49e - 16$	$7.33e - 16$	—
ρu	$5.59e - 02$	$1.84e - 02$	1.60	$8.37e - 02$	$2.83e - 02$	1.56
ρv	$5.59e - 02$	$1.84e - 02$	1.60	$8.37e - 02$	$2.83e - 02$	1.56
ρe	$1.06e - 15$	$1.43e - 15$	—	$1.42e - 15$	$1.86e - 15$	—

Abbildung 7.3:

L_2 -, L_∞ -Norm und Ordnung mit Limiter Schulze-Rinne für $t = 1$.

Das im Programmcode *MOLOCH* implementierte Verfahren erreicht in allen Fällen die angestrebte zweite Verfahrensordnung, die jedoch durch den Einsatz einer Steigungslimitierung für das zeitabhängige Problem deutlich reduziert wird. Die Erhaltung von konstanter Dichte und konstantem Druck erfolgt fast auf Maschinengenauigkeit genau.

7.3 Wirbelfeld mit variabler Dichte

Da das vorgestellte Verfahren insbesondere für Probleme mit variabler Dichte konstruiert ist, wird der vorhergehende Testfall nun mit variabler Dichte aufgesetzt. Aufgrund der variablen Dichte kommt es zu einer lokalen Änderung der Wirbelstärke $\vec{\omega}$ durch den baroklinen Effekt

$$\frac{\partial \vec{\omega}}{\partial t} + \underbrace{(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{\omega}}_{\text{Advektion}} = \underbrace{(\vec{\omega} \cdot \nabla) \vec{v}}_{\text{Deformation}} - \underbrace{\vec{\omega} (\nabla \cdot \vec{v})}_{\text{Kompression}} + \underbrace{\nabla p_2 \times \nabla \frac{1}{\rho}}_{\text{barokliner Effekt}} .$$

Aus diesem Grund wird die „exakte“ Lösung durch eine berechnete Lösung mit der Gitterweite $e = 128 \times 128$ approximiert, die Gitterweiten $l = 32 \times 32$, $f = 64 \times 64$ bleiben unverändert. Die Anfangsdaten für den Testfall mit variabler Dichte lauten nun:

$$\begin{aligned}\rho(x, y) &= 1 + 1000 \cos^2(2\pi x) \cos^2(2\pi y) \\ u(x, y) &= 1 - 2 \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \\ v(x, y) &= 1 + 2 \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \\ p(x, y) &= 1.\end{aligned}$$

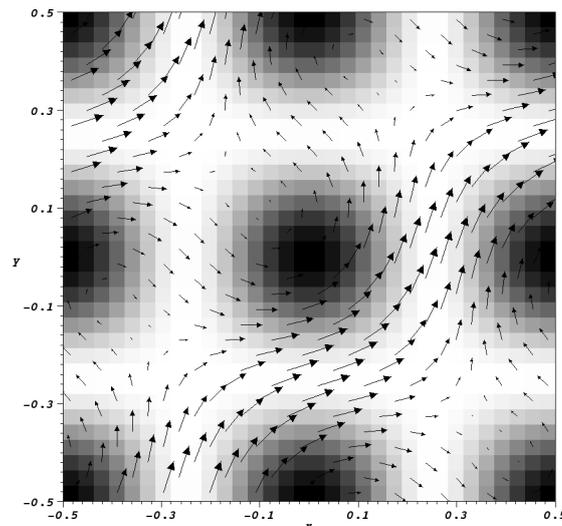


Abbildung 7.4: Initialdaten für Dichte und Geschwindigkeit

Die maximal erreichbare Verfahrensordnung wird durch die Integration auf dem Einheitsquadrat mit der auf dem feinsten Gitter vorgegebenen Zeitschrittweite gerechnet, so dass das Zeitintervall $[0, 3.7e - 4]$ beträgt. Die Integration erfolgt mit einer CFL-Zahl von 0.8, jeweils mit Einsatz der Steigungslimitierung durch den Schulze-Rinne Limiter im Prädiktor und Korrektor zur Ermittlung der Zellflächenwerte durch den Schulze-Rinne Limiter. Die Approximation der integralen Zellmittelwerte der exakten Lösung erfolgt über die arithmetische Mittelung.

	L_2			L_∞		
	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p
ρ	$2 - 04e - 00$	$4.17e - 01$	2.30	$5.86e - 00$	$1.20e - 00$	2.29
ρu	$3.90e - 00$	$7.94e - 01$	2.30	$1.43e + 01$	$2.90e - 00$	2.30
ρv	$3.90e - 00$	$7.94e - 01$	2.30	$1.43e + 01$	$2.90e - 00$	2.30
ρe	$4.05e - 16$	$5.00e - 16$	—	$2.22e - 15$	$3.55e - 15$	—

Abbildung 7.5:

L_2 -, L_∞ -Norm und Ordnung mit Schulze-Rinne Limiter bei $t = 3.7e - 4$

Die Konvergenzstudie zeigt, dass das Verfahren auch für Strömungen mit großen Dichteunterschieden geeignet ist und die geforderte zweite Verfahrensordnung erreicht. Durch den baroklinen Effekt wird das Wirbelfeld die Dichteunterschiede mit zunehmender Zeit vermischen. Da die Dichte im Nenner des Koeffizienten der für die Projektion aufzustellenden Matrizen auftritt, kommt es bei diesem Testbeispiel zu Änderungen der Koeffizienten über drei Größenordnungen. Dies verschlechtert die Kondition der Matrizen und stellt hohe Ansprüche an die Qualität des eingesetzten Gleichungslösers.

7.4 Gravitationsfeld mit ruhendem Medium

Um das im Abschnitt 6.1 beschriebene Verfahren zur Implementierung der Gravitation zu verifizieren, wird in einem Quader ein ruhendes Medium ($\vec{v} = 0$) mit einer stabilen Dichteschichtung in y -Richtung initialisiert

$$\rho(y) = 1.2055 - (y - y_0) \frac{1.2055 - 0.2}{\Delta h}. \quad (7.1)$$

Die Schichtung entspricht für das Medium Luft einem Temperaturbereich von 20 °C bis 1493 °C, wie er bzw. in Brandfällen auftreten kann. Aufgrund der Dichteschichtung ergibt sich die hydrostatische Druckverteilung zu

$$p = p_0 - \int_0^y \rho(y) g dz. \quad (7.2)$$

Mit dem Druckzerlegungsansatzes (4.7) $p = p_0 - M^2 p_2$ folgt, dass

$$M^2 p_2 = \int_0^y \rho(y) g dz \quad (7.3)$$

gerade die hydrostatische Druckverteilung ergeben muss. Ferner muss das ruhende Medium in Ruhe bleiben ($\vec{v} = 0$).

In x - und z -Richtung besitzt der Quader die Kantenlänge 0.5, in y -Richtung die Kantenlänge 1. Das Strömungsgebiet ist allseitig durch Wand-Randbedingungen begrenzt und wird mit einer äquidistanten Gitterweite von $\Delta h = 0.025$ diskretisiert. Die Rechnung erfolgt mit einer CFL-Zahl $CFL = 0.5$, einer Froude-Zahl $Fr = 1$ und $\vec{g} = [0, -9.81, 0]^T$ unter Einsatz des Schulze-Rinne Limiters im Zeitintervall $[0, 0.5]$.

Die beiden folgende Abbildungen zeigen eine Auswertung des Integrationsgebietes nach 104 Iterationen zum Zeitpunkt $t = 0.5$ am Ort $x = 0.25, z = 0.25$

über die Höhe y . Die numerisch berechnete hydrostatische Druckverteilung entspricht, von geringfügigen Abweichungen am oberen Rand abgesehen, dem analytisch berechneten Werten $M^2 p_2$ gemäß (7.3).

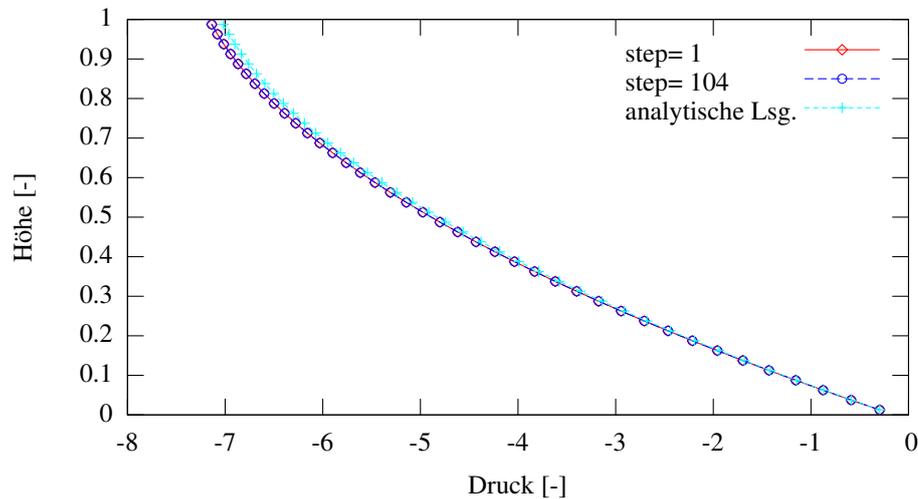


Abbildung 7.6:

Hydrostatischer Druck $M^2 p_2$ am Ort $x = 0.25$, $z = 0.25$ über der Höhe y

Die Maximalwerte der u und w -Komponenten der Strömungsgeschwindigkeit $\vec{v} = [u, v, w]^T$ bleiben mit 10^{-13} im gesamten Strömungsgebiet in der Nähe der Maschinengenauigkeit. Bei der parallel zum Gravitationsvektor wirkenden Geschwindigkeitskomponente v treten jedoch im ersten Zeitschritt am oberen Rand des Quaders Maximalwerte von 10^{-6} auf. Diese reduzieren sich bis zum 104 Zeitschritt auf 10^{-8} .

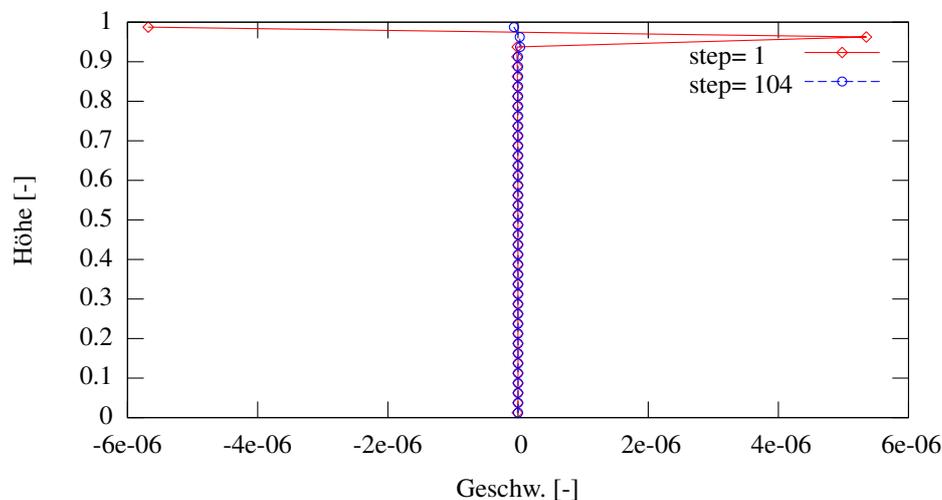


Abbildung 7.7: v -Geschwindigkeit am Ort $x = 0.25$, $z = 0.25$ über der Höhe y

Die Geschwindigkeitsabweichungen am oberen Rand entstehen durch die Randbehandlung im Prädiktor. Der Gravitationsoperator prägt dem Rechengebiet eine Strömungsgeschwindigkeit auf. Der HLLE-Löser würde nun an den Wänden eine Druckwelle produzieren, um die Einhaltung der Wandrandbedingung (keine Advektion über Wände) sicherzustellen. Diese Druckwelle kann durch die 1. Projektion jedoch nicht mehr behoben werden. Aus diesem Grund werden alle Wandrandbedingungen im Prädiktor als Neumann-Ränder uminterpretiert. In der Folge kommt es zu einem Fluss über die Wand, der jedoch durch die 1. Projektion wieder korrigiert wird. Bei diesem Fluss fließt am oberen Rand Dichte aus den Ghostzellen in das Strömungsgebiet. Entspricht diese Dichte nicht der vorgegebenen Dichteschichtung, kommt es zu Abweichungen der Dichteapproximation. Diese sind sowohl für die Fehler in der v -Komponente, als auch für die Abweichungen von $M^2 p_2$ am oberen Rand verantwortlich.

Das Ergebnis kann verbessert werden, wenn anstelle der NEUMANN Randbedingung eine Gradienten-Extrapolation der Dichte in die Ghostzellen stattfindet. Dieser Ansatz kann jedoch bei extremen Gradienten zu unphysikalischen Größen in der zweiten Ghostzelle führen, respektive die Strömungseigenschaften in der Nähe von Wänden stark beeinflussen. Da der auftretende Fehler lokal auf die obere Wandrandschicht begrenzt und die Fehlergröße jenseits der Verfahrensordnung liegt wird hierauf jedoch zunächst verzichtet. Eine grundsätzliche Verbesserung scheint durch eine Änderung der Verfahrenskonstruktion möglich, die jedoch derzeit noch in der Diskussion ist.

7.5 Im Gravitationsfeld advektierter Wirbel

Mit Hilfe eines 2d-Advektions-Testfalls (vergl. *Deiterding* [6, 7]), für den die exakte Lösung bekannt ist, wird die Implementierung des Gravitationsquellterms im Verfahren geprüft. Hierzu wird eine für $t = 0$ glatte Dichteverteilung durch Strömung und Gravitation advektiert, deren exakte Lösung sich nach

$$\begin{aligned}\rho &= \rho_r(r(x-t, y-1.25t+0.5gt^2)) \\ u &= 1 \\ v &= 1.25 - gt \\ p &= 1\end{aligned}$$

berechnet. Das Rechenggebiet $[0, 2]_x[0, 2]_y$ wird mit einer äquidistanten Gitterweite $\Delta h = 0.025$ und periodischen Rändern diskretisiert. Die Anfangswerte zum Zeitpunkt $t = 0$ berücksichtigen eine radialsymmetrische Dichteverteilung um den Punkt $C(0.75, 0.75)$ mit dem Radius $r = \sqrt{(x-0.75)^2 + (y-0.75)^2}$:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_r(r(x,y)) & \rho_r &= \begin{cases} 1 + 0.05 \left[\sin \frac{r}{R} \pi + \frac{\pi}{2} + 1 \right] & 0 \leq r < R \\ 1 & R \leq r \end{cases} \\ u &= 1 \\ v &= 1.25 & R &= 0.5. \\ p &= 1 \end{aligned}$$

Weiterhin gilt $Fr = 1$, $g = -1$ und eine CFL-Zahl von 0.58. Im Gegensatz zur Verfahrensweise in [6, 7] wird die Zeitschrittweite nicht festgesetzt, sondern mit der vorgegeben CFL-Zahl in jedem Zeitschritt neu berechnet. Zur Zeit $t = 0.5$ liegt der Mittelpunkt der Dichteverteilung C auf der Diagonale bei $x = 1.25$ und $y = 1.25$. Der Vergleich der Dichteverteilung entlang der Diagonalen von 0,0 nach 2,2 zeigt, dass der implementierte Verfahrensansatz das Dichtemaximum während der Advektion nicht erhalten kann, die Dichteverteilung aber korrekt wiedergibt.

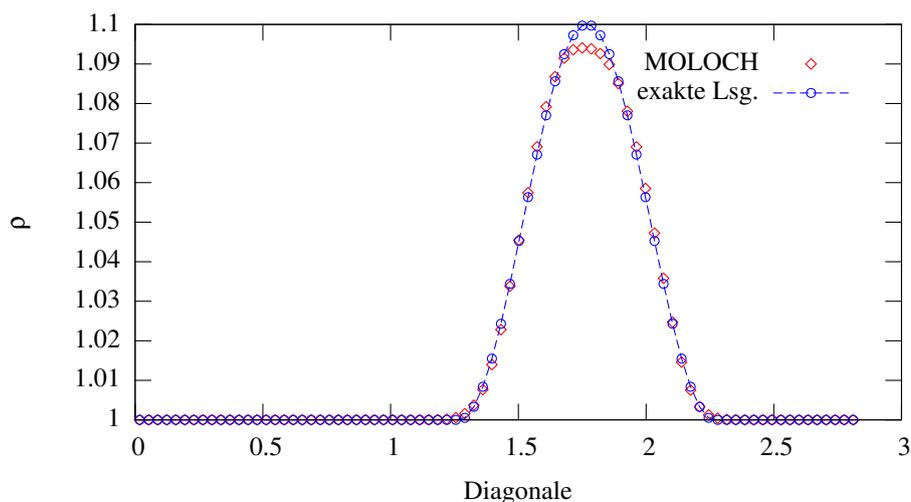


Abbildung 7.8: Dichteverteilung in der Diagonalen zur Zeit $t = 0.5$

7.6 Gravitation mit Scherströmung

Für eine Konvergenzstudie eines nicht-trivialen Testfalls über einen größeren Zeitintervall ist eine Initialisierung mit einem möglichst glatten Dichte- und Geschwindigkeitsverlauf erforderlich, da in diesem Fall die Limiter durch Mittelungsfunktionen ersetzt werden können.

Eine in x -Richtung periodische, aber instabile Dichteverteilung wird durch eine Scherströmung in x -Richtung, sowie durch die Wirkung der Gravitationskraft advektiert. Der beschriebene Testfall entstammt *Kadioglu et al.* [12] und

wurde durch ein glatteres u -Geschwindigkeitsprofil den Anforderungen angepaßt. Die Initialdaten zum Zeitpunkt $t = 0$ lauten:

$$\begin{aligned} \rho &= -c (y - 0.5)^3 + 0.5 \\ &+ \sum_{n=-10}^{10} \left\{ c_1 e^{-\left(\frac{x-0.5-n}{0.25}\right)^2 - \left(\frac{y-0.75}{0.25}\right)^2} - c_2 e^{-\left(\frac{x-0.5-n}{0.25}\right)^2 - \left(\frac{y-0.25}{0.25}\right)^2} \right\} \\ u &= 0.5 \tanh(6.0(y - 0.5)) \\ v &= 0 \\ p &= 1 \end{aligned}$$

mit $c = 0.0156$, $c_1 = 0.00156$ und $c_2 = 0.00156$.

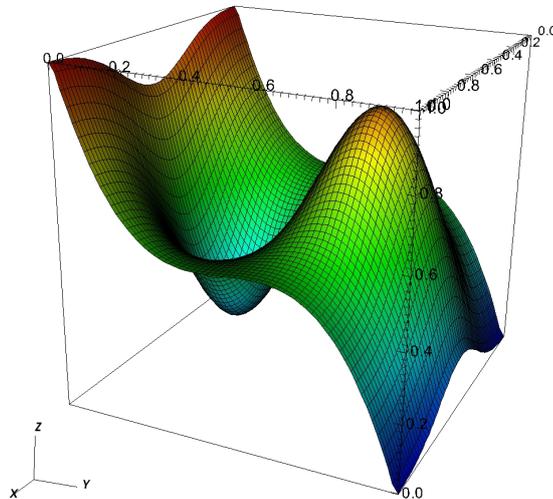


Abbildung 7.9: Periodische Dichteverteilung zur Zeit $t = 0$

Das Gebiet $[0,1] \times [0,1]$ mit periodischen Randbedingungen wird für die Konvergenzstudie mit den äquidistanten Gitterweiten $\Delta h_l = 1/64$, $\Delta h_f = 1/256$ und $\Delta h_e = 1/512$ diskretisiert. Hierbei wird die exakte Lösung des Problems durch die numerische Berechnung mit der Gitterweite Δh_e approximiert. Die Berechnung erfolgt mit $Fr = 1$, $g = -9.81$ und einer CFL-Zahl von 0.8 bis zum Zeitniveau $t = 2.5$.

	L_2			L_∞		
	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p	Fehler e_{le}	Fehler e_{fe}	p
ρ	$7.03e-05$	$5.85e-06$	1.79	$6.46e-04$	$7.24e-05$	1.58
ρu	$1.67e-02$	$1.50e-03$	1.73	$1.34e-01$	$1.84e-02$	1.43
ρv	$2.06e-02$	$1.75e-03$	1.77	$1.64e-01$	$2.32e-02$	1.41
ρe	$5.07e-15$	$1.14e-14$	—	$2.13e-14$	$6.03e-14$	—

Abbildung 7.10: L_2 -, L_∞ -Norm und Ordnung ohne Limiter bei $t = 2.5$

Die Konvergenzstudie zeigt, dass das implementierte Verfahren ohne Limiter die angestrebte zweite Verfahrensordnung fast erreicht. Mit Limitern würde das Verfahren aufgrund der dann auftretenden lokalen Fallunterscheidungen in den Limitern auf die erste Ordnung zurückfallen. Die Erhaltung des konstanten Druckes erfolgt fast auf Maschinengenauigkeit genau. Dichte und Wirbelstärke zum Zeitpunkt $t = 2.5$ zeigen die folgenden Abbildungen:

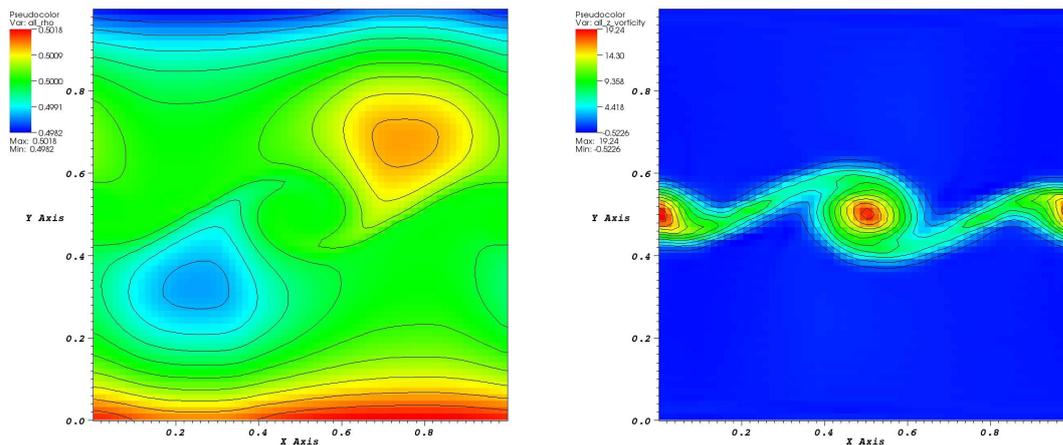


Abbildung 7.11: Dichte (links) und Wirbelstärke (rechts) zur Zeit $t = 2.5$

7.7 Fallender „Tropfen“

Bereits in [19] wurde mit Hilfe eines fallenden „Tropfens“ die Robustheit und Güte der Verfahrenskonstruktion gezeigt. Hierzu wird in einem rechteckigen Integrationsgebiet ein geschlossener Behälter dargestellt, der am unteren Ende mit einem Medium hoher Dichte gefüllt ist. Im Verlauf der Simulation fällt unter dem Einfluß der Schwerkraft ein Tropfen hoher Dichte durch ein Medium geringer Dichte in das am Behälterboden befindliche Medium hoher Dichte. Hierbei wird in [19] ein Dichteverhältnis von 1:1000 verwendet.

Die Wiedergabe der scharfen Trennfläche zwischen den zwei Medien unterschiedlicher Dichte erfolgt allein durch die Lösung der Erhaltungsgleichungen in dem Verfahren. Der in [19] aufgesetzte Testfall wird durch die Verfahrensimpementierung in MOLOCH ebenfalls zuverlässig berechnet und soll hier nicht weiter behandelt werden. Stattdessen wird ein modifizierter Testfall vorgestellt, bei dem auch die untere Behälterhälfte mit dem Fluid geringer Dichte gefüllt ist. Der „Tropfen“ fällt somit direkt auf die untere Behälterwand. Durch diese Änderung kann die Qualität der Randbedingungsimplementierung getestet werden, die sich durch die Uminterpretation fester Wände in Null-Gradienten Ränder und der anschließenden Korrektur im Korrektorschritt ergeben.

Die Anfangsdaten zum Zeitpunkt $t = 0$ lauten:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}) &= \begin{cases} 100 & r = \sqrt{(x-0.5)^2 + (y-1.75)^2} < 0.2 \\ 0.1 & r = \sqrt{(x-0.5)^2 + (y-1.75)^2} > 0.1 \end{cases} \\ \vec{v}(\vec{x}) &= \vec{0} \\ p(\vec{x}) &= 1. \end{aligned}$$

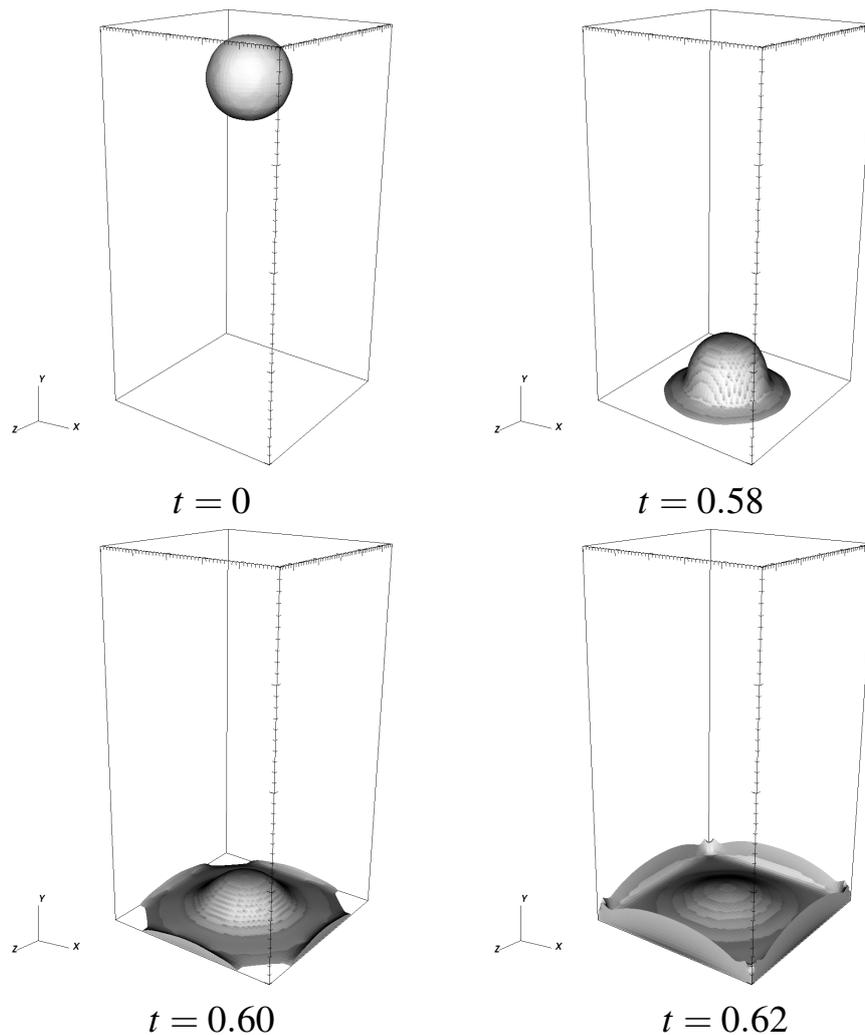


Abbildung 7.12:

Dichtekontour des fallenden „Tropfens“ zu verschiedenen Zeiten

Die numerische Überwachung der Massen- und Energieerhaltung während der Rechnung zeigt keinerlei Austausch von Masse oder Energie über die Behälterwände. Ferner treten keine Druckstörungen im Rechengebiet auf, so dass die Forderung $p_0 = const.$ eingehalten wird. Das Testbeispiel zeigt die prinzipielle Funktionstauglichkeit des neuen Randansatzes.

Nachfolgend die Schnittdarstellung der Kontourlinien bei $z = 0.5$.

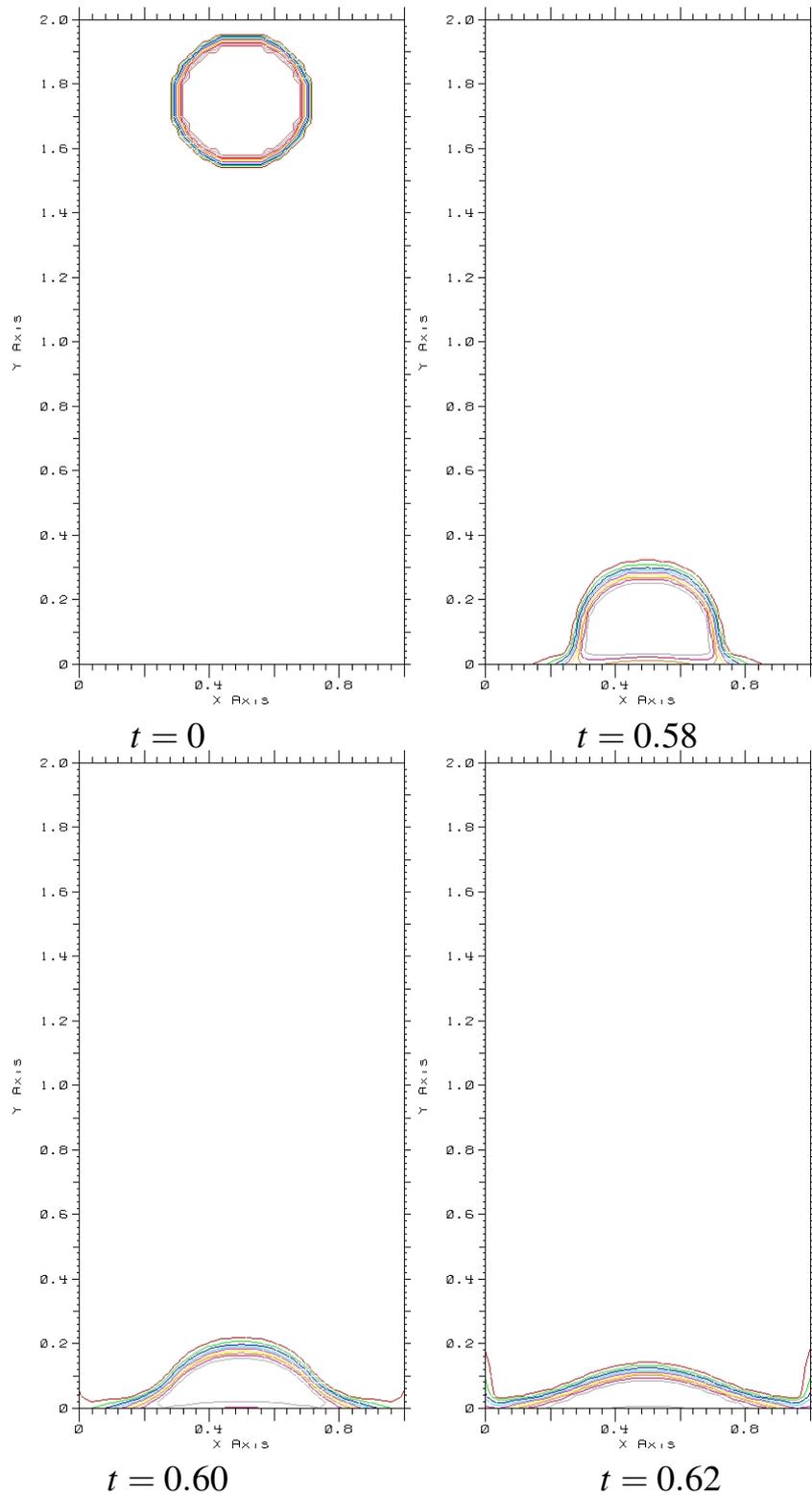


Abbildung 7.13:

Dichtekontour des fallenden „Tropfens“ zu verschiedenen Zeiten, Schnitt der z-Achse bei 0.5, Kontourlinien bei 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100.

8 Anhang

8.1 Details zur Dimensionsanalyse

8.1.1 Dimensionslose Massenbilanz

Nach Anwendung der Umwandlungsvorschrift (3.3) ergibt sich für die Massenbilanz aus Gleichung (2.2-1)

$$\frac{\rho_{ref} l_{ref}^3}{t_{ref}} \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \rho_{ref} v_{ref} l_{ref}^2 \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0.$$

Durch Division von $\rho_{ref} v_{ref} l_{ref}^2$ folgt

$$Sr \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0. \quad (8.1)$$

Für die auftretende Strouhal-Zahl gilt $Sr = 1$, weil die abgeleitete Referenzzeit t_{ref} gerade entsprechend der Advektionszeit definiert wurde. Somit ändert sich die Gleichung der Massenbilanz bei der Entdimensionierung nicht.

8.1.2 Dimensionslose Impulsbilanz

Die Umwandlung der Impulsbilanz nach Gleichung (2.2-2) ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{ref} v_{ref} l_{ref}^3}{t_{ref}} \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + l_{ref}^2 \oint_A (\rho_{ref} v_{ref}^2 \rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + l_{ref}^2 \oint_A p_{ref} p \vec{n} dA = \\ g_{ref} \rho_{ref} l_{ref}^3 \int_V \rho \vec{g} dV \end{aligned}$$

Um die Gravitationskonstante in der Froude-Zahl zu berücksichtigen, wird nur die Richtung von \vec{g} im Integral berücksichtigt. Der Betrag ist in der Froude-Zahl enthalten. Es folgt mit $g_{ref} = 9.81 \frac{m}{s^2}$ und $\vec{g} = [0, 1, 0]^T$.

$$Sr \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A \frac{p}{M^2} \vec{n} dA = \frac{1}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} dV \quad (8.2)$$

Das inverse Quadrat der Mach-Zahl resultiert aus $\frac{1}{M^2} = \frac{c_{ref}^2}{v_{ref}^2} = \frac{p_{ref}}{\rho_{ref} v_{ref}^2}$.

8.1.3 Dimensionslose Energiebilanz

Aus der Umwandlung der Energiebilanz (2.2-3) folgt

$$\begin{aligned} \frac{p_{ref} l_{ref}^3}{t_{ref}} \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + p_{ref} v_{ref} l_{ref}^2 \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA \\ = g_{ref} \rho_{ref} v_{ref} l_{ref}^3 \int_V \rho \vec{g} \cdot \vec{v} dV \end{aligned}$$

Die Division mit $p_{ref} v_{ref} l_{ref}^2$ ergibt unter Berücksichtigung der schon in der Impulsbilanz erläuterten Vorgehensweisen für die Froude-Zahl

$$Sr \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \frac{M^2}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} \cdot \vec{v} dV \quad (8.3)$$

8.1.4 Dimensionslose Druckzustandsgleichung

Aus der Umwandlung der Druck-Zustandsgleichung (2.3) folgt

$$p_{ref} p = (\gamma - 1) \left(p_{ref} \rho e - \rho_{ref} v_{ref}^2 \frac{\rho \vec{v} \cdot \vec{v}}{2} \right)$$

Der Isentropenexponent ist bereits dimensionslos. Unter Berücksichtigung von

$$\frac{1}{M^2} = \frac{c_{ref}^2}{v_{ref}^2} = \frac{p_{ref}}{\rho_{ref} v_{ref}^2},$$

folgt

$$p = (\gamma - 1) \left(\rho e - \frac{1}{M^2} \frac{\rho \vec{v} \cdot \vec{v}}{2} \right), \quad (8.4)$$

bzw. für die Definition der Energiedichte

$$\rho e = \frac{p}{(\gamma - 1)} + M^2 \frac{\rho \vec{v} \cdot \vec{v}}{2}. \quad (8.5)$$

8.2 Details zur Asymptotik

8.2.1 Herleitung der asymptotischen Gleichungssätze

Der verwendete asymptotische Ansatz zur Untersuchung des Gleichungssystems für verschwindende Mach-Zahlen, beruht auf einer Reihenentwicklung in der globalen Mach-Zahl M bis zur zweiten Ordnung, für die im zu untersuchenden Gleichungssystem enthaltenen Zustandsgrößen

$$\Phi = \Phi^{(0)} + M\Phi^{(1)} + M^2\Phi^{(2)} + O(M^3). \quad (8.6)$$

Aus den daraus resultierenden Gleichungen (3.4) lassen sich durch Sortierung nach der Ordnung der Mach-Zahl Gleichungssätze bilden. Die Analyse beruht auf der Annahme, dass sich die Terme gleicher Mach-Zahl Ordnung balancieren und so jeder Gleichungssatz die Ausgangsgleichung erfüllt. Daraus ergibt sich ein approximiertes Gleichungssystem, welches den Einfluß der verschwindenden Mach-Zahl beschreibt und aus dem Aussagen für darauf optimierte Verfahrensansätze abgeleitet werden können.

Massenbilanz

Aus der dimensionslosen Massenbilanz (3.4-1)

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \vec{v}) dV = 0$$

entsteht durch Einsetzen der Reihenentwicklung (8.6) folgende Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= M^0 \frac{d}{dt} \int_V \rho^{(0)} dV + M^0 \oint_A \rho^{(0)} \vec{v}^{(0)} \cdot \vec{n} dA \\ &+ M^1 \frac{d}{dt} \int_V \rho^{(1)} dV + M^1 \oint_A \left(\rho^{(0)} \vec{v}^{(1)} + \rho^{(1)} \vec{v}^{(0)} \right) \cdot \vec{n} dA \\ &+ M^2 \frac{d}{dt} \int_V \rho^{(2)} dV + M^2 \oint_A \left(\rho^{(0)} \vec{v}^{(2)} + \rho^{(1)} \vec{v}^{(1)} + \rho^{(2)} \vec{v}^{(0)} \right) \cdot \vec{n} dA \\ &+ M^3 \oint_A \left(\rho^{(1)} \vec{v}^{(2)} + \rho^{(2)} \vec{v}^{(1)} \right) \cdot \vec{n} dA \\ &+ M^4 \oint_A \rho^{(2)} \vec{v}^{(2)} \cdot \vec{n} dA. \end{aligned}$$

Mit der Annahme der Balancierung der verschiedenen Ordnungen der Mach-Zahl ergeben sich die nach Ordnung der Mach-Zahl sortierten Gleichungssätze:

$$\begin{aligned}
 M^0 & : \frac{d}{dt} \int_V \rho^{(0)} dV + \oint_A \rho^{(0)} \vec{v}^{(0)} \cdot \vec{n} dA = 0 \\
 M^1 & : \frac{d}{dt} \int_V \rho^{(1)} dV + \oint_A \left(\rho^{(0)} \vec{v}^{(1)} + \rho^{(1)} \vec{v}^{(0)} \right) \cdot \vec{n} dA = 0 \\
 M^2 & : \frac{d}{dt} \int_V \rho^{(2)} dV + \oint_A \left(\rho^{(0)} \vec{v}^{(2)} + \rho^{(1)} \vec{v}^{(1)} + \rho^{(2)} \gamma \vec{v}^{(0)} \right) \cdot \vec{n} dA = 0 \\
 M^3 & : \oint_A \left(\rho^{(1)} \vec{v}^{(2)} + \rho^{(2)} \vec{v}^{(1)} \right) \cdot \vec{n} dA = 0 \\
 M^4 & : \oint_A \rho^{(2)} \vec{v}^{(2)} \cdot \vec{n} dA = 0.
 \end{aligned}$$

Im Limit $\lim_{M \rightarrow 0}$ bleibt davon nur die führende Ordnung M^0

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho^{(0)} dV + \oint_A \rho^{(0)} \vec{v}^{(0)} \cdot \vec{n} dA = 0, \quad (8.7)$$

Änderungen in Struktur bzw. Form der Massenbilanz finden nicht statt. Da im Grenzübergang $\lim_{M \rightarrow 0}$ alle Terme M^n mit $n > 0$ verschwinden, werden nur noch die Terme M^n mit $n \leq 0$ betrachtet.

Impulsbilanz

Bei der dimensionslosen Impulsbilanz (3.4-3)

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A \rho \vec{v} \circ \vec{v} \cdot \vec{n} dA + \frac{1}{M^2} \oint_A p \vec{n} dA = \frac{1}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} dV$$

sind nun auch Terme mit einer Ordnung der Mach-Zahl kleiner als Null vorhanden. Daher ergeben sich nach Anwendung der Reihenentwicklung (8.6) die

folgenden Gleichungssätze:

$$M^{-2} : \oint_A p^{(0)} \vec{n} dA = \int_V \nabla p^{(0)} dV = 0$$

$$M^{-1} : \oint_A p^{(1)} \vec{n} dA = \int_V \nabla p^{(1)} dV = 0$$

$$M^0 : \frac{d}{dt} \int_V (\rho \vec{v})^{(0)} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v})^{(0)} \cdot \vec{n} dA + \oint_A p^{(2)} \vec{E} \cdot \vec{n} dA = \\ \frac{1}{Fr^2} \int_V \rho^{(0)} \vec{g} dV$$

Die Analyse der Impulsbilanz liefert neben der Impulsgleichung für $\lim_{M \rightarrow 0}$ zwei weitere Eigenschaften. Dies ist eine Bedingung an den Druck führender Ordnung $p^{(0)}$ und erster Ordnung $p^{(1)}$, die beim Integral über die Oberfläche des betrachteten Volumens erfüllt sein müssen.

$$\oint_A p^{(0)} \vec{n} dA = \int_V \nabla p^{(0)} dV = 0 \quad (8.8)$$

$$\oint_A p^{(1)} \vec{n} dA = \int_V \nabla p^{(1)} dV = 0. \quad (8.9)$$

Diese Bedingungen fordern, dass diese Drücke im gesamten Integrationsgebiet räumlich konstant sein müssen, folglich nur noch eine Funktion der Zeit t sein können.

Energiebilanz

In der dimensionslosen Energiebilanz (3.4-4)

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + \vec{E} p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \frac{M^2}{Fr^2} \int_V \rho \vec{g} \cdot \vec{v} dV$$

entfällt für $\lim_{M \rightarrow 0}$ der Gravitationsterm mit M^2 . Somit ergibt sich mit

$$\frac{d}{dt} \int_V (\rho e)^{(0)} dV + \oint_A [\rho e^{(0)} + \vec{E} p^{(0)}] \vec{v}^{(0)} \cdot \vec{n} dA = 0. \quad (8.10)$$

die Energiegleichung führender Ordnung im Regime $M = 0$, in der die Gravitation keinen Einfluss mehr hat.

Druckzustandsgleichung

Anstelle der Druckzustandsgleichung soll die Definition der dimensionslosen Energiedichte (8.5) betrachtet werden, die sich durch Auflösung nach ρe aus der Druckzustandsgleichung (3.5) ergibt.

$$\rho e = \frac{p}{(\gamma - 1)} + M^2 \frac{\rho \vec{v} \cdot \vec{v}}{2}$$

Wie schon in der Energiebilanz entfällt für $\lim_{M \rightarrow 0}$ der Term mit M^2 , so dass in der Energiedichte führender Ordnung

$$\rho e^{(0)} = \frac{p^{(0)}}{(\gamma - 1)} \quad (8.11)$$

der kinetische Energieanteil entfällt. Der Isentropenexponent γ wird als Konstante angenommen.

8.3 Details zur Verfahrenskonstruktion

8.3.1 Verfügbare Limiterfunktionen

Im Verfahren ist der Zustand in einer Zelle nur als Mittelwert im Zellmittelpunkt $\vec{U}_{i,j}$ verfügbar. Die Verteilung bzw. der örtliche Verlauf dieses Zustandes innerhalb der Zelle ist nicht bekannt.

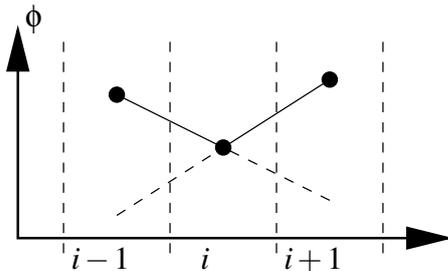


Abbildung 8.1:

Stückweise lineare Rekonstruktion der Verteilung von ϕ

Die Wahl einer der beiden Steigungen jedoch zu einer fehlerhaften Approximation an der gegenüberliegenden Seite führen. Dies motiviert den Einsatz von sogenannten Limiterfunktionen, die unter Berücksichtigung der gegebenen Verhältnisse aus den links- und rechtsseitigen Steigungen eine limitierte Steigung berechnen, so dass an keiner Seite „Überschiesser“ entstehen. Im Programmcode MOLOCH sind folgende Limiterfunktionen verfügbar:

An verschiedenen Stellen des Verfahrens werden jedoch Informationen über den Zustand ausserhalb des Zellmittelpunktes benötigt, bspw. an den Zellflächen. Dann wird aus den verfügbaren Zellmittelwerten mit Hilfe einer stückweisen linearen Rekonstruktion die Verteilung dieser Größen approximiert, in dem die links- und rechtsseitigen Steigungen berechnet werden. Wie in Abb. 8.1 gezeigt, könnte die wahllose Verwendung

- MINMOD

Der MINMOD-Limiter gehört zu den einfachsten Limiterfunktionen. Sobald die Steigungen unterschiedliche Vorzeichen besitzen verwendet er die Steigung Null, ansonsten die betragsmässig kleinere Steigung.

$$\lim(a,b) = \begin{cases} \min(a,b) & , \text{ wenn } ab > 0 \\ 0 & , \text{ wenn } ab < 0 \end{cases} \quad (8.12)$$

- VANLEER

$$\lim(a,b) = \begin{cases} \frac{2ab}{a+b} & , \text{ wenn } ab > 0 \\ 0 & , \text{ wenn } ab < 0 \end{cases} \quad (8.13)$$

- SUPERBEE

$$\lim(a,b) = \begin{cases} \max(\min(a,2b), \min(2a,b)) & , \text{ wenn } ab > 0 \\ 0 & , \text{ wenn } ab < 0 \end{cases} \quad (8.14)$$

- SWEBY_MUNZ

$$\lim(a, b) = \begin{cases} \text{MAX}(\text{MIN}(a, 2b), \text{MIN}(2a, b)) & , \text{ wenn } ab > 0 \\ 0 & , \text{ wenn } ab < 0 \end{cases} \quad (8.15)$$

- SCHULZE_RINNE

Der Limiter wurde bereits von *Schneider* ([19], S. 38) eingesetzt und aus [21] entnommen. Er verwendet intern den MINMOD-Limiter.

$$\begin{aligned} \lim(a, b) &= \text{minmod}(\phi, \nu) & (8.16) \\ \text{wobei } \phi &= \text{minmod}(a, b) \\ \nu &= 0.5(a + b) \end{aligned}$$

Eigenschaften und Details der verfügbaren Limiterfunktionen sind bspw. in [16, 24] beschrieben.

Literaturverzeichnis

- [1] **Almgren, A.; Bell, J.; Colella, P.; Howell, L.; Welcome, M.:** *A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier-Stokes Equations.* *J. Comp. Phys.*, Bd. 142:S. 1–46, 1998.
- [2] **Bell, J. B.; Marcus, D. L.:** *A Second-Order Projection Method for Variable-Density Flows.* *Journal of Computational Physics*, Bd. 101:S. 334–348, 1992.
- [3] **Buckingham, E.:** *On Physically Similar Systems: Illustrations of the Use of Dimensional Equations.* *Physical Review*, Bd. 4:S. 345–376, 1914.
- [4] **Buckingham, E.:** *Model Experiments and the Forms of Empirical Equations.* *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, Bd. 37:S. 263–296, 1915.
- [5] Center for Applied Scientific Computing, Lawrence Livermore National Laboratory, University of California: *hypra, high performance preconditioners, User's Manual*, software version 1.9.0b Aufl., 2005.
- [6] **Deiterding, R.:** *Testfälle im DFG-Schwerpunkt „Analysis und Numerik von Erhaltungsgleichungen“, Eulergleichungen mit Gravitation (2D).*
URL <http://www-ian.math.uni-magdeburg.de/anume/testcase/bader/eulgrav/eulgrav.html>
- [7] **Deiterding, R.:** *Conservation laws for one- and multi-component gases with and without source terms.* Technischer Bericht, Institute of Mathematics, Technical University Cottbus, Germany, April 2000.
- [8] **Einfeldt, B.:** *On Godunov type methods for gas dynamics.* Technischer Bericht, Inst. f. Geometrie und praktische Mathematik, RWTH-Aachen; Deutschland, Bericht Nr. 41, 1986.
- [9] **Geratz, K. J.:** *Erweiterung eines Godunov-Typ-Verfahrens für mehrdimensionale kompressible Strömungen auf die Fälle kleiner und verschwindender Machzahl.* Dissertation, Fakultät für Maschinenwesen der RWTH-Aachen, 1998.

- [10] **Harten, A.; Lax, P. D.; van Leer, B.:** *On Upstream -Differencing and Godunov-Type Scheme for Hyperbolic Conservation Laws.* *SIAM Review*, Bd. 25(1):S. 35–61, 1983.
- [11] **Issa, R.:** *Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting..* *Journal of Computational Physics*, Bd. 62(1):S. 40–65, 1986.
- [12] **Kadioglu, S. Y.; Klein, R.; Minion, M. L.:** *A Fourth-Order Auxiliary Variable Projection Method for Zero-Mach Number Gas Dynamics.* *Journal of Computational Physics*, submitted March 2007.
- [13] **Klein, R.:** *Semi-Implicit Extension of a Godunov-Type Scheme Based on Low Mach Number Asymptotics I: One-Dimensional Flow.* *Journal of Computational Physics*, Bd. 121:S. 213–237, 1995.
- [14] **Klein, R.:** *Technical Notes*, 2005. Private Kommunikation.
- [15] **Klein, R.; Botta, N.; Schneider, T.; Munz, C.-D.; Roller, S.; Meister, A.; Hoffmann, L.; Sonar, T.:** *Asymptotic adaptive methods for multi-scale problems in fluid mechanics.* *Journal of Engineering Mathematics*, Bd. 39:S. 261–343, 2001.
- [16] **Levque, R. J.:** *Numerical Methods for Conservation Laws.* Birkhäuser Verlag, Basel, 1992.
- [17] **Minion, M. L.:** *A Projection Method for Locally Refined Grids.* *Journal of Computational Physics*, Bd. 127:S. 158–178, 1996.
- [18] **Patankar, S.:** *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* Hemisphere Press, 1980.
- [19] **Schneider, T.:** *Verfolgung von Flammenfronten und Phasengrenzen in schwach-kompressiblen Strömungen.* Dissertation, Fakultät für Maschinenwesen RWTH-Aachen, 2000.
- [20] **Schneider, T.; Botta, N.; Geratz, K.; Klein, R.:** *Extension of Finite Volume Compressible Flow Solvers to Multi-dimensional, Variable Density Zero Mach Number Flow.* *Journal of Computational Physics*, Bd. 155:S. 248–286, 1999.
- [21] **Schulze-Rinne, C.:** *The Riemann problem for two-dimensional gasdynamics and new limiter for high order schemes.* Dissertation, ETH Zürich, Dissertation Nr. 10297, 1993.

-
- [22] **Strang, G.:** *On the Construction and Comparison of Difference Schemes.* *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Bd. 5(3):S. 506–517, 1968.
- [23] **Süli, E.:** *Convergence of Finite Volume Schemes for Poisson’s Equation on Nonuniform Meshes.* *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Bd. 28(5):S. 1419–1430, October 1991.
- [24] **Sweby, P. K.:** *High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws.* *SIAM J. Numer. Anal.*, Bd. 21(5):S. 995–1011, October 1984.
- [25] **Vater, S.:** *A numerical scheme in conservation form for the zero Froude number shallow water equations.* FB Mathematik & Informatik, Freie Universität Berlin, Diplomarbeit, 2005.
- [26] Verein Deutscher Ingenieure, VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC): *VDI-Wärmeatlas, Berechnungsblätter für den Wärmeübergang*, 9. Aufl., 2002.

PIK Report-Reference:

- No. 1 3. Deutsche Klimatagung, Potsdam 11.-14. April 1994
Tagungsband der Vorträge und Poster (April 1994)
- No. 2 Extremer Nordsommer '92
Meteorologische Ausprägung, Wirkungen auf naturnahe und vom Menschen beeinflusste Ökosysteme, gesellschaftliche Perzeption und situationsbezogene politisch-administrative bzw. individuelle Maßnahmen (Vol. 1 - Vol. 4)
H.-J. Schellnhuber, W. Enke, M. Flechsig (Mai 1994)
- No. 3 Using Plant Functional Types in a Global Vegetation Model
W. Cramer (September 1994)
- No. 4 Interannual variability of Central European climate parameters and their relation to the large-scale circulation
P. C. Werner (Oktober 1994)
- No. 5 Coupling Global Models of Vegetation Structure and Ecosystem Processes - An Example from Arctic and Boreal Ecosystems
M. Plöchl, W. Cramer (Oktober 1994)
- No. 6 The use of a European forest model in North America: A study of ecosystem response to climate gradients
H. Bugmann, A. Solomon (Mai 1995)
- No. 7 A comparison of forest gap models: Model structure and behaviour
H. Bugmann, Y. Xiaodong, M. T. Sykes, Ph. Martin, M. Lindner, P. V. Desanker, S. G. Cumming (Mai 1995)
- No. 8 Simulating forest dynamics in complex topography using gridded climatic data
H. Bugmann, A. Fischlin (Mai 1995)
- No. 9 Application of two forest succession models at sites in Northeast Germany
P. Lasch, M. Lindner (Juni 1995)
- No. 10 Application of a forest succession model to a continentality gradient through Central Europe
M. Lindner, P. Lasch, W. Cramer (Juni 1995)
- No. 11 Possible Impacts of global warming on tundra and boreal forest ecosystems - Comparison of some biogeochemical models
M. Plöchl, W. Cramer (Juni 1995)
- No. 12 Wirkung von Klimaveränderungen auf Waldökosysteme
P. Lasch, M. Lindner (August 1995)
- No. 13 MOSES - Modellierung und Simulation ökologischer Systeme - Eine Sprachbeschreibung mit Anwendungsbeispielen
V. Wenzel, M. Kücken, M. Flechsig (Dezember 1995)
- No. 14 TOYS - Materials to the Brandenburg biosphere model / GAIA
Part 1 - Simple models of the "Climate + Biosphere" system
Yu. Svirezhev (ed.), A. Block, W. v. Bloh, V. Brovkin, A. Ganopolski, V. Petoukhov, V. Razzhevaikin (Januar 1996)
- No. 15 Änderung von Hochwassercharakteristiken im Zusammenhang mit Klimaänderungen - Stand der Forschung
A. Bronstert (April 1996)
- No. 16 Entwicklung eines Instruments zur Unterstützung der klimapolitischen Entscheidungsfindung
M. Leimbach (Mai 1996)
- No. 17 Hochwasser in Deutschland unter Aspekten globaler Veränderungen - Bericht über das DFG-Rundgespräch am 9. Oktober 1995 in Potsdam
A. Bronstert (ed.) (Juni 1996)
- No. 18 Integrated modelling of hydrology and water quality in mesoscale watersheds
V. Krysanova, D.-I. Müller-Wohlfeil, A. Becker (Juli 1996)
- No. 19 Identification of vulnerable subregions in the Elbe drainage basin under global change impact
V. Krysanova, D.-I. Müller-Wohlfeil, W. Cramer, A. Becker (Juli 1996)
- No. 20 Simulation of soil moisture patterns using a topography-based model at different scales
D.-I. Müller-Wohlfeil, W. Lahmer, W. Cramer, V. Krysanova (Juli 1996)
- No. 21 International relations and global climate change
D. Sprinz, U. Luterbacher (1st ed. July, 2nd ed. December 1996)
- No. 22 Modelling the possible impact of climate change on broad-scale vegetation structure - examples from Northern Europe
W. Cramer (August 1996)

- No. 23 A method to estimate the statistical security for cluster separation
F.-W. Gerstengarbe, P.C. Werner (Oktober 1996)
- No. 24 Improving the behaviour of forest gap models along drought gradients
H. Bugmann, W. Cramer (Januar 1997)
- No. 25 The development of climate scenarios
P.C. Werner, F.-W. Gerstengarbe (Januar 1997)
- No. 26 On the Influence of Southern Hemisphere Winds on North Atlantic Deep Water Flow
S. Rahmstorf, M. H. England (Januar 1977)
- No. 27 Integrated systems analysis at PIK: A brief epistemology
A. Bronstert, V. Brovkin, M. Krol, M. Lüdeke, G. Petschel-Held, Yu. Svirezhev, V. Wenzel (März 1997)
- No. 28 Implementing carbon mitigation measures in the forestry sector - A review
M. Lindner (Mai 1997)
- No. 29 Implementation of a Parallel Version of a Regional Climate Model
M. Kücken, U. Schättler (Oktober 1997)
- No. 30 Comparing global models of terrestrial net primary productivity (NPP): Overview and key results
W. Cramer, D. W. Kicklighter, A. Bondeau, B. Moore III, G. Churkina, A. Ruimy, A. Schloss, participants of "Potsdam '95" (Oktober 1997)
- No. 31 Comparing global models of terrestrial net primary productivity (NPP): Analysis of the seasonal behaviour of NPP, LAI, FPAR along climatic gradients across ecotones
A. Bondeau, J. Kaduk, D. W. Kicklighter, participants of "Potsdam '95" (Oktober 1997)
- No. 32 Evaluation of the physiologically-based forest growth model FORSANA
R. Grote, M. Erhard, F. Suckow (November 1997)
- No. 33 Modelling the Global Carbon Cycle for the Past and Future Evolution of the Earth System
S. Franck, K. Kossacki, Ch. Bounama (Dezember 1997)
- No. 34 Simulation of the global bio-geophysical interactions during the Last Glacial Maximum
C. Kubatzki, M. Claussen (Januar 1998)
- No. 35 CLIMBER-2: A climate system model of intermediate complexity. Part I: Model description and performance for present climate
V. Petoukhov, A. Ganopolski, V. Brovkin, M. Claussen, A. Eliseev, C. Kubatzki, S. Rahmstorf (Februar 1998)
- No. 36 Geocybernetics: Controlling a rather complex dynamical system under uncertainty
H.-J. Schellnhuber, J. Kropp (Februar 1998)
- No. 37 Untersuchung der Auswirkungen erhöhter atmosphärischer CO₂-Konzentrationen auf Weizenbestände des Free-Air Carbondioxid Enrichment (FACE) - Experimentes Maricopa (USA)
T. Kartschall, S. Grossman, P. Michaelis, F. Wechsung, J. Gräfe, K. Waloszczyk, G. Wechsung, E. Blum, M. Blum (Februar 1998)
- No. 38 Die Berücksichtigung natürlicher Störungen in der Vegetationsdynamik verschiedener Klimagebiete
K. Thonicke (Februar 1998)
- No. 39 Decadal Variability of the Thermohaline Ocean Circulation
S. Rahmstorf (März 1998)
- No. 40 SANA-Project results and PIK contributions
K. Bellmann, M. Erhard, M. Flechsig, R. Grote, F. Suckow (März 1998)
- No. 41 Umwelt und Sicherheit: Die Rolle von Umweltschwellenwerten in der empirisch-quantitativen Modellierung
D. F. Sprinz (März 1998)
- No. 42 Reversing Course: Germany's Response to the Challenge of Transboundary Air Pollution
D. F. Sprinz, A. Wahl (März 1998)
- No. 43 Modellierung des Wasser- und Stofftransportes in großen Einzugsgebieten. Zusammenstellung der Beiträge des Workshops am 15. Dezember 1997 in Potsdam
A. Bronstert, V. Krysanova, A. Schröder, A. Becker, H.-R. Bork (eds.) (April 1998)
- No. 44 Capabilities and Limitations of Physically Based Hydrological Modelling on the Hillslope Scale
A. Bronstert (April 1998)
- No. 45 Sensitivity Analysis of a Forest Gap Model Concerning Current and Future Climate Variability
P. Lasch, F. Suckow, G. Bürger, M. Lindner (Juli 1998)
- No. 46 Wirkung von Klimaveränderungen in mitteleuropäischen Wirtschaftswäldern
M. Lindner (Juli 1998)
- No. 47 SPRINT-S: A Parallelization Tool for Experiments with Simulation Models
M. Flechsig (Juli 1998)

- No. 48 The Odra/Oder Flood in Summer 1997: Proceedings of the European Expert Meeting in Potsdam, 18 May 1998
A. Bronstert, A. Ghazi, J. Hladny, Z. Kundzewicz, L. Menzel (eds.) (September 1998)
- No. 49 Struktur, Aufbau und statistische Programmbibliothek der meteorologischen Datenbank am Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung
H. Österle, J. Glauer, M. Denhard (Januar 1999)
- No. 50 The complete non-hierarchical cluster analysis
F.-W. Gerstengarbe, P. C. Werner (Januar 1999)
- No. 51 Struktur der Amplitudengleichung des Klimas
A. Hauschild (April 1999)
- No. 52 Measuring the Effectiveness of International Environmental Regimes
C. Helm, D. F. Sprinz (Mai 1999)
- No. 53 Untersuchung der Auswirkungen erhöhter atmosphärischer CO₂-Konzentrationen innerhalb des Free-Air Carbon Dioxide Enrichment-Experimentes: Ableitung allgemeiner Modelllösungen
T. Kartschall, J. Gräfe, P. Michaelis, K. Waloszczyk, S. Grossman-Clarke (Juni 1999)
- No. 54 Flächenhafte Modellierung der Evapotranspiration mit TRAIN
L. Menzel (August 1999)
- No. 55 Dry atmosphere asymptotics
N. Botta, R. Klein, A. Almgren (September 1999)
- No. 56 Wachstum von Kiefern-Ökosystemen in Abhängigkeit von Klima und Stoffeintrag - Eine regionale Fallstudie auf Landschaftsebene
M. Erhard (Dezember 1999)
- No. 57 Response of a River Catchment to Climatic Change: Application of Expanded Downscaling to Northern Germany
D.-I. Müller-Wohlfel, G. Bürger, W. Lahmer (Januar 2000)
- No. 58 Der "Index of Sustainable Economic Welfare" und die Neuen Bundesländer in der Übergangsphase
V. Wenzel, N. Herrmann (Februar 2000)
- No. 59 Weather Impacts on Natural, Social and Economic Systems (WISE, ENV4-CT97-0448)
German report
M. Flechsig, K. Gerlinger, N. Herrmann, R. J. T. Klein, M. Schneider, H. Sterr, H.-J. Schellnhuber (Mai 2000)
- No. 60 The Need for De-Aliasing in a Chebyshev Pseudo-Spectral Method
M. Uhlmann (Juni 2000)
- No. 61 National and Regional Climate Change Impact Assessments in the Forestry Sector - Workshop Summary and Abstracts of Oral and Poster Presentations
M. Lindner (ed.) (Juli 2000)
- No. 62 Bewertung ausgewählter Waldfunktionen unter Klimaänderung in Brandenburg
A. Wenzel (August 2000)
- No. 63 Eine Methode zur Validierung von Klimamodellen für die Klimawirkungsforschung hinsichtlich der Wiedergabe extremer Ereignisse
U. Böhm (September 2000)
- No. 64 Die Wirkung von erhöhten atmosphärischen CO₂-Konzentrationen auf die Transpiration eines Weizenbestandes unter Berücksichtigung von Wasser- und Stickstofflimitierung
S. Grossman-Clarke (September 2000)
- No. 65 European Conference on Advances in Flood Research, Proceedings, (Vol. 1 - Vol. 2)
A. Bronstert, Ch. Bismuth, L. Menzel (eds.) (November 2000)
- No. 66 The Rising Tide of Green Unilateralism in World Trade Law - Options for Reconciling the Emerging North-South Conflict
F. Biermann (Dezember 2000)
- No. 67 Coupling Distributed Fortran Applications Using C++ Wrappers and the CORBA Sequence Type
T. Slawig (Dezember 2000)
- No. 68 A Parallel Algorithm for the Discrete Orthogonal Wavelet Transform
M. Uhlmann (Dezember 2000)
- No. 69 SWIM (Soil and Water Integrated Model), User Manual
V. Krysanova, F. Wechsung, J. Arnold, R. Srinivasan, J. Williams (Dezember 2000)
- No. 70 Stakeholder Successes in Global Environmental Management, Report of Workshop, Potsdam, 8 December 2000
M. Welp (ed.) (April 2001)

- No. 71 GIS-gestützte Analyse globaler Muster anthropogener Waldschädigung - Eine sektorale Anwendung des Syndromkonzepts
M. Cassel-Gintz (Juni 2001)
- No. 72 Wavelets Based on Legendre Polynomials
J. Fröhlich, M. Uhlmann (Juli 2001)
- No. 73 Der Einfluß der Landnutzung auf Verdunstung und Grundwasserneubildung - Modellierungen und Folgerungen für das Einzugsgebiet des Glan
D. Reichert (Juli 2001)
- No. 74 Weltumweltpolitik - Global Change als Herausforderung für die deutsche Politikwissenschaft
F. Biermann, K. Dingwerth (Dezember 2001)
- No. 75 Angewandte Statistik - PIK-Weiterbildungsseminar 2000/2001
F.-W. Gerstengarbe (Hrsg.) (März 2002)
- No. 76 Zur Klimatologie der Station Jena
B. Orłowsky (September 2002)
- No. 77 Large-Scale Hydrological Modelling in the Semi-Arid North-East of Brazil
A. Güntner (September 2002)
- No. 78 Phenology in Germany in the 20th Century: Methods, Analyses and Models
J. Schaber (November 2002)
- No. 79 Modelling of Global Vegetation Diversity Pattern
I. Venevskaia, S. Venevsky (Dezember 2002)
- No. 80 Proceedings of the 2001 Berlin Conference on the Human Dimensions of Global Environmental Change "Global Environmental Change and the Nation State"
F. Biermann, R. Brohm, K. Dingwerth (eds.) (Dezember 2002)
- No. 81 POTSDAM - A Set of Atmosphere Statistical-Dynamical Models: Theoretical Background
V. Petoukhov, A. Ganopolski, M. Claussen (März 2003)
- No. 82 Simulation der Siedlungsflächenentwicklung als Teil des Globalen Wandels und ihr Einfluß auf den Wasserhaushalt im Großraum Berlin
B. Ströbl, V. Wenzel, B. Pfützner (April 2003)
- No. 83 Studie zur klimatischen Entwicklung im Land Brandenburg bis 2055 und deren Auswirkungen auf den Wasserhaushalt, die Forst- und Landwirtschaft sowie die Ableitung erster Perspektiven
F.-W. Gerstengarbe, F. Badeck, F. Hattermann, V. Krysanova, W. Lahmer, P. Lasch, M. Stock, F. Suckow, F. Wechsung, P. C. Werner (Juni 2003)
- No. 84 Well Balanced Finite Volume Methods for Nearly Hydrostatic Flows
N. Botta, R. Klein, S. Langenberg, S. Lützenkirchen (August 2003)
- No. 85 Orts- und zeitdiskrete Ermittlung der Sickerwassermenge im Land Brandenburg auf der Basis flächendeckender Wasserhaushaltsberechnungen
W. Lahmer, B. Pfützner (September 2003)
- No. 86 A Note on Domains of Discourse - Logical Know-How for Integrated Environmental Modelling, Version of October 15, 2003
C. C. Jaeger (Oktober 2003)
- No. 87 Hochwasserrisiko im mittleren Neckarraum - Charakterisierung unter Berücksichtigung regionaler Klimaszenarien sowie dessen Wahrnehmung durch befragte Anwohner
M. Wolff (Dezember 2003)
- No. 88 Abflußentwicklung in Teileinzugsgebieten des Rheins - Simulationen für den Ist-Zustand und für Klimaszenarien
D. Schwandt (April 2004)
- No. 89 Regionale Integrierte Modellierung der Auswirkungen von Klimaänderungen am Beispiel des semi-ariden Nordostens von Brasilien
A. Jaeger (April 2004)
- No. 90 Lebensstile und globaler Energieverbrauch - Analyse und Strategieansätze zu einer nachhaltigen Energiestruktur
F. Reusswig, K. Gerlinger, O. Edenhofer (Juli 2004)
- No. 91 Conceptual Frameworks of Adaptation to Climate Change and their Applicability to Human Health
H.-M. Füssel, R. J. T. Klein (August 2004)
- No. 92 Double Impact - The Climate Blockbuster 'The Day After Tomorrow' and its Impact on the German Cinema Public
F. Reusswig, J. Schwarzkopf, P. Polenz (Oktober 2004)
- No. 93 How Much Warming are we Committed to and How Much Can be Avoided?
B. Hare, M. Meinshausen (Oktober 2004)

- No. 94 Urbanised Territories as a Specific Component of the Global Carbon Cycle
A. Svirejeva-Hopkins, H.-J. Schellnhuber (Januar 2005)
- No. 95 GLOWA-Elbe I - Integrierte Analyse der Auswirkungen des globalen Wandels auf Wasser, Umwelt und Gesellschaft im Elbegebiet
F. Wechsung, A. Becker, P. Gräfe (Hrsg.) (April 2005)
- No. 96 The Time Scales of the Climate-Economy Feedback and the Climatic Cost of Growth
S. Hallegatte (April 2005)
- No. 97 A New Projection Method for the Zero Froude Number Shallow Water Equations
S. Vater (Juni 2005)
- No. 98 Table of EMICs - Earth System Models of Intermediate Complexity
M. Claussen (ed.) (Juli 2005)
- No. 99 KLARA - Klimawandel - Auswirkungen, Risiken, Anpassung
M. Stock (Hrsg.) (Juli 2005)
- No. 100 Katalog der Großwetterlagen Europas (1881-2004) nach Paul Hess und Helmut Brezowsky
6., verbesserte und ergänzte Auflage
F.-W. Gerstengarbe, P. C. Werner (September 2005)
- No. 101 An Asymptotic, Nonlinear Model for Anisotropic, Large-Scale Flows in the Tropics
S. Dolaptchiev (September 2005)
- No. 102 A Long-Term Model of the German Economy: $lagom^{d_sim}$
C. C. Jaeger (Oktober 2005)
- No. 103 Structuring Distributed Relation-Based Computations with SCDRC
N. Botta, C. Ionescu, C. Linstead, R. Klein (Oktober 2006)
- No. 104 Development of Functional Irrigation Types for Improved Global Crop Modelling
J. Rohwer, D. Gerten, W. Lucht (März 2007)
- No. 105 Intra-Regional Migration in Formerly Industrialised Regions: Qualitative Modelling of Household Location Decisions as an Input to Policy and Plan Making in Leipzig/Germany and Wirral/Liverpool/UK
D. Reckien (April 2007)
- No. 106 Perspektiven der Klimaänderung bis 2050 für den Weinbau in Deutschland (Klima 2050) -
Schlußbericht zum FDW-Vorhaben: Klima 2050
M. Stock, F. Badeck, F.-W. Gerstengarbe, D. Hoppmann, T. Kartschall, H. Österle, P. C. Werner,
M. Wodinski (Juni 2007)
- No. 107 Climate Policy in the Coming Phases of the Kyoto Process: Targets, Instruments, and the Role
of Cap and Trade Schemes - Proceedings of the International Symposium, February 20-21,
2006, Brussels
M. Welp, L. Wicke, C. C. Jaeger (eds.) (Juli 2007)
- No. 108 Correlation Analysis of Climate Variables and Wheat Yield Data on Various Aggregation Levels
in Germany and the EU-15 Using GIS and Statistical Methods, with a Focus on Heat Wave
Years
T. Sterzel (Juli 2007)
- No. 109 MOLOCH - Ein Strömungsverfahren für inkompressible Strömungen - Technische Referenz 1.0
M. Münch (Januar 2008)

