

VT-Forschungsbericht 2024-01

Implementierung eines Verfahrens höherer Ordnung zur numerischen Simulation reaktiver Strömungen auf unstrukturierten Rechengittern

Florian Setzwein, M.Sc.

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
Institut für Verbrennungstechnik
Stuttgart



DLR

Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt



Herausgeber

Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt

**Institut für
Verbrennungstechnik**

Pfaffenwaldring 38-40
70569 Stuttgart

Telefon
Telefax

(0 7 11) 68 62 - 3 08
(0 7 11) 68 62 - 5 78

Als Manuskript gedruckt.
Abdruck oder sonstige Verwendung
nur nach Absprache mit dem Institut gestattet

D93, Stuttgart

Implementierung eines Verfahrens höherer Ordnung zur numerischen Simulation reaktiver Strömungen auf unstrukturierten Rechengittern

Von der Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Florian Setzwein, M.Sc.

geboren in Bad Dürkheim

Hauptberichter: Herr apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger
Mitberichter: Herr Prof. rer. nat. Claus-Dieter Munz
Tag der mündlichen Prüfung: 22. April 2024

Institut für Verbrennungstechnik der Luft- und Raumfahrt
Universität Stuttgart

2024

Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) am Institut für Verbrennungstechnik in der Abteilung Computersimulation und ich möchte die Gelegenheit nutzen, all jenen zu danken, die mich während dieser Zeit unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater, Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger. Er hat mir nicht nur ein spannendes Dissertationsthema angeboten, sondern mich auch stets mit Rat und Tat unterstützt und mir eine hohe Wertschätzung entgegengebracht. Ebenso möchte ich Herrn Dr. Peter Ess für seine außerordentlich kompetente Betreuung meiner Arbeit danken - sowohl fachlich als auch menschlich. Er hatte stets eine offene Tür und hat mich durch interessante Ideen und bereichernde Diskussionen enorm unterstützt. Seine hohe Wertschätzung meiner Arbeit war eine enorme Motivation für den erfolgreichen Abschluss meiner Dissertation. Ein besonderer Dank gilt auch Herrn Dr.-Ing. Andreas Fiolitakis für seine hilfreichen Denkanstöße und Diskussionen sowie seine beständige Hilfsbereitschaft. Prof. Dr. rer. nat. Claus-Dieter Munz danke ich für die Übernahme des Mitberichts meiner Arbeit.

Für die Durchführung der Arbeit am DLR Institut für Verbrennungstechnik möchte ich mich herzlich bei den Institutsleitern Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Huber und Herrn Prof. Dr.-Ing. Manfred Aigner sowie bei meinen Abteilungsleitern Herrn Dr. Peter Ess, Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger und Herrn Dr.-Ing. habil. Berthold Noll bedanken. Ihre Unterstützung und die exzellenten Arbeitsvoraussetzungen haben diese Arbeit möglich gemacht. Mein Dank gilt auch Herrn Dr.-Ing. Felix Grimm, der als Betreuer meiner Masterarbeit den Grundstein für meine weitere Zeit am DLR gelegt hat. Ein großer Dank geht auch an meine zahlreichen Kolleginnen und Kollegen am DLR. Durch ihre Unterstützung und das angenehme Arbeitsklima wurde meine Zeit als Doktorand zu einer wertvollen Erfahrung. Besonders erwähnen möchte ich hierbei Michael Pries, Timo Seitz, Martin Grader, Ansgar Lechtenberg, Florian Eigentler, Tobias Dittmann, Kazuma Kunihara, Jonas Steigerwald, Marian Janssen, Stephan Ruoff und Dominik Schäfer. Außerdem bedanke ich mich bei meinem Bürokollegen Thomas Mosbach für viele interessante Gespräche.

Abschließend möchte ich meiner Familie danken. Insbesondere meinen Eltern, die mich in all meinen Vorhaben unterstützt und an mich geglaubt haben. Außerdem meinem Bruder Andreas, auf den ich mich stets verlassen kann. Zuletzt danke ich meiner Frau Jacqueline, die mich auch in schwierigen Zeiten durch ihr Grundvertrauen und ihren Glauben an mich für diese Arbeit motiviert hat.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	ix
Tabellenverzeichnis	xiii
Nomenklatur	xv
Abkürzungen	xv
Lateinische Symbole	xvi
Griechische Symbole	xviii
Dimensionslose Kennzahlen	xx
Mathematische Operatoren	xx
Kurzfassung	xxiii
Abstract	xxv
1 Einleitung	1
1.1 Verfahren hoher Ordnung zur räumlichen Diskretisierung auf unstrukturierten Gittern	3
1.2 Zeitgenaue Lösungsmethoden der Transportgleichungen reaktiver Fluide	4
1.3 Approximation der numerischen Flüsse	5
1.4 Zielsetzung dieser Arbeit	6
2 Theoretische Grundlagen	8
2.1 Transportgleichungen reaktiver Strömungen im Regime niedriger Mach-Zahlen	8
2.1.1 Thermische und kalorische Zustandsgleichungen	9
2.1.2 Modellierung der diffusiven Flüsse	10
2.1.3 Quellterme	11
2.2 Turbulenzmodellierung	12
2.2.1 Die gefilterten Transportgleichungen	14
2.2.2 Modellierung der Feinstrukturen	15
2.2.3 Filterung der Quellterme	16
3 Methodik zur Finite-Volumen-	
 Diskretisierung hoher Ordnung	18
3.1 Die Diskretisierung des Rechengebiets	18

3.1.1	Geometrische Momente	19
3.1.2	Behandlung von Randelementen	20
3.2	Das k -exakte Multi-Korrekturverfahren	21
3.2.1	Die 1-exakte Rekonstruktion	25
3.2.2	Die 2-exakte Rekonstruktion	28
3.2.3	Primitive und konservative volumetrische Mittelwerte	33
3.2.4	Limitierung des Rekonstruktionspolynoms	33
3.3	Approximation der numerischen Flüsse	35
3.3.1	Berechnung der konvektiven Flüsse	36
3.3.2	Berechnung der diffusiven Flüsse	38
3.3.3	Flussberechnung an Rändern	42
3.3.4	Berechnung des Schubspannungstensors	44
3.4	Die Projektionsmethode zur Lösung der Transportgleichungen bei niedrigen Mach-Zahlen	46
3.4.1	Algorithmus zur zeitlichen Diskretisierung des Gleichungssystems	47
3.4.2	Räumliche Diskretisierung des Gleichungssystems	52
3.5	Adaptive numerische Dissipation	56
3.5.1	Fehleranalyse für den konvektiven Operator	57
3.5.2	Von-Neumann-Stabilitätsanalyse	61
3.5.3	Approximation von θ_0 mit neuronalen Netzwerkmodellen	67
3.5.4	Ergebnisse des Netzwerk-Trainings	72
4	Verifikation und Validierung	76
4.1	Kanonische Testfälle	77
4.1.1	Einfluss der k -exakten Gradientenkorrektur	78
4.1.2	Diffusiver Transport einer instantanen Punktquelle	80
4.1.3	Diffusiver Transport unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen	81
4.1.4	Konvektiver Transport einer skalaren Feldgröße	84
4.1.5	Konvektiver Transport eines pseudoisotropen Wirbels	85
4.1.6	Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr	90
4.2	Laminare Testfälle	94
4.2.1	Laminare Strömung in einer Kavität	94
4.2.2	Laminare Strömung um einen Zylinder	97
4.2.3	Wirbel-Zündkern-Interaktion in einem vorgemischten H_2 -Luft-Gemisch	100
4.2.4	Laminare Strömung um eine Kugel	107
4.3	Turbulente Testfälle	111
4.3.1	Turbulente Rohrströmung	112
4.3.2	Turbulenter Freistrahler	119
4.3.3	H3-Flamme	126

5 Zusammenfassung	137
A Asymptotisches Verhalten der kompressiblen Transportgleichungen bei niedrigen Mach-Zahlen	140
B Konstruktion des Dualgitters	143
B.1 Geometrische Volumenmomente	143
B.2 Geometrische Flächenmomente	145
B.3 Rotation geometrischer Momente	146
C Zeitlicher Diskretisierungsfehler der Projektionsmethode	148
D Flussberechnung mit konventionellen Diskretisierungsverfahren	150
E Herleitung zum Testfall des konvektiven Transports eines pseudoisotropen Wirbels	152
Literaturverzeichnis	154

Abbildungsverzeichnis

1.1	Beispiel für die Diskretisierung eines zweidimensionalen Rechengebiets.	2
2.1	Räumliche Filterung eines isotrop turbulenten Geschwindigkeitsfeldes	14
3.1	Primäre und median-duale Gitterrepräsentation	19
3.2	Median-duale Repräsentation der Berandungen eines Rechengebiets	21
3.3	Einfluss der Elementdeformation auf umliegende Nachbarelemente	27
3.4	Ablaufdiagramm zur Berechnung der k -exakten Rekonstruktion	33
3.5	Aufteilung der Flächennormalen zur diffusiven Flussberechnung	40
3.6	Ablaufdiagramm zur iterativen Projektionsmethode	48
3.7	Spektrale Fehleranalyse der drei k -exakten Diskretisierungsschemata.	60
3.8	Kontrollparameter θ_{stab} zur Steuerung der adaptiven Dissipation	66
3.9	Beschränkter Kontrollparameter θ_0 zur Steuerung der adaptiven Dissipation	67
3.10	Netzwerk-Ansatz zur Bestimmung des Kontrollparameters $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$	69
3.11	NRMSE und maximaler absoluter Fehler $E_{\text{abs}}^{\text{max}}$ zur Approximation von $\theta_0^{(NN)}$ für ausgewählte Netzwerk-Modelle in Abhängigkeit der Neuronenzahl N_n nach dem LM- Training.	73
3.12	Neuronenzahl N_n der Netzwerk-Modelle im Verbund zur adaptiven Berechnung des Kontrollparameters $\theta_0^{(NN)}$	74
3.13	Abweichung zwischen dem beschränkten analytischen Kontrollparameter θ_0 und dem durch die Netzwerkverbunde approximierten Wert $\theta_0^{(NN)}$ für beide k -exakten Sche- mata.	74
4.1	Feldfunktion und deren erste Ableitung zur Verifikation der k -exakten Gradienten- korrektur.	78
4.2	Ergebnisse der Gitterkonvergenz für den Testfall der k -exakten Gradientenkorrektur. . . .	79
4.3	Diffusiver Transport einer instantanen Punktquelle.	80
4.4	Gitterkonvergenz der L^2 -Fehlernorm für den diffusiven Transport einer instantanen Punktquelle.	81
4.5	Feldfunktion und deren erste Ableitung zur Verifikation des diffusiven Transports unter Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen.	82
4.6	Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den diffusiven Transport unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen auf kartesischen Rechengittern.	83

4.7	Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den diffusiven Transport unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen auf verzerrten Rechengittern.	83
4.8	Konvektiver Transport einer skalaren Feldgröße nach $T = 0,5$	84
4.9	Konvektiver Transport einer skalaren Feldgröße nach $T = 10,5$	85
4.10	Gittertypen für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels.	87
4.11	Feldlösung des pseudoisotropen Wirbels nach einer vollständigen Durchschreitung des kartesischen Gitters mit $N_K = 64^2$ Knotenpunkten.	87
4.12	Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels unter sukzessiver Verfeinerung des kartesischen Gitters.	88
4.13	Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels unter sukzessiver Verfeinerung des verzerrten Gitters.	88
4.14	Mittlere Iterationszeiten für den pseudoisotropen Wirbeltransport	89
4.15	L^2 -Fehlernorm der Enthalpie h für den pseudoisotropen Wirbeltransport unter dem Einfluss der k -exakten Limitierung.	90
4.16	Geschwindigkeitsfeld und Strömungsprofile für den Testfall der Hagen-Poiseuille-Strömung durch ein kreisrundes Rohr.	91
4.17	Konvergenzverläufe der Fehlernorm $E_{L^2}(\mathbf{u}_{ax})$ für die Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr.	93
4.18	Gitterkonvergenzstudie zum Testfall der Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr.	93
4.19	Gittertypen und Stromfunktion für den Testfall der laminaren Strömung in einer Kavität.	95
4.20	Geschwindigkeitsprofile der laminaren Strömung in einer Kavität mit 16^2 Knotenpunkten.	95
4.21	Konvergenz der Stromfunktion ψ im primären Wirbel der Kavität unter sukzessiver Verfeinerung des Rechengitters.	96
4.22	Rechengitter zur laminaren Umströmung eines Zylinders mit 2786 Knotenpunkten.	97
4.23	Feldlösung der laminaren Strömung um einen Zylinder in $2D$ während des Zustands der maximalen Auftriebskraft.	98
4.24	Einfluss der Diskretisierungsschemata auf den Testfall eines laminar umströmten Zylinders in $2D$	99
4.25	Schematischer Aufbau des Testfalls zur Wirbel-Zünderkern-Interaktion in einem vorgemischtem H_2 -Luft-Gemisch.	100
4.26	Volumetrisch gemittelte Wärmefreisetzungsrates $\overline{(HR)}_\alpha$ zu verschiedenen Zeitpunkten der Wirbel-Zünderkern-Interaktion.	103
4.27	Zeitlicher Verlauf der integralen Enstrophie und des Hydroperoxyl-Massenbruchs während der Wirbel-Zünderkern-Interaktion.	103
4.28	Parallele Beschleunigung für den Testfall der Wirbel-Zünderkern-Interaktion	105
4.29	Iso-Linien der Temperatur für die Wirbel-Zünderkern-Interaktion	105

4.30	Zeitlicher Verlauf der integralen Enstrophie für die Wirbel-Zündkern-Interaktion auf größeren Rechengittern.	106
4.31	Zeitlicher Verlauf des integralen Hydroperoxyl-Massenbruchs für die Wirbel-Zündkern-Interaktion auf größeren Rechengittern.	106
4.32	Rechengitter für die laminar umströmte Kugel	107
4.33	Zeitliche Koeffizientenverläufe der laminar umströmten Kugel	108
4.34	Wirbelstrukturen der laminar umströmten Kugel	109
4.35	Kenngößen und mittlere Iterationszeit der laminar umströmten Kugel in Abhängigkeit der Knotenpunktanzahl N_K	110
4.36	Rechengitter zur Simulation der turbulenten Rohrströmung.	112
4.37	Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ und instantenes axiales Geschwindigkeitsfeld der turbulenten Rohrströmung	113
4.38	Axiale Geschwindigkeitsprofile für den Testfall der turbulenten Rohrströmung.	114
4.39	Normierte Strömungsprofile für den Testfall der turbulenten Rohrströmung.	115
4.40	L^2 -Fehlernorm der Strömungsprofile der turbulenten Rohrströmung in Abhängigkeit der mittleren Iterationszeiten.	116
4.41	Eindimensionale Energiespektren der axialen Geschwindigkeit für den Testfall der turbulenten Rohrströmung.	117
4.42	Normierte Strömungsprofile für den Testfall der turbulenten Rohrströmung unter dem Einfluss der 2-exakten Limitierung.	118
4.43	Eindimensionale Energiespektren der axialen Geschwindigkeit für den Testfall der turbulenten Rohrströmung unter dem Einfluss der 2-exakten Limitierung.	118
4.44	Rechenetz für den Testfall des turbulenten Freistrahls und entsprechende Abmessungen des Rechengebiets.	120
4.45	Einfluss des Kontrollparameters θ auf die LES des turbulenten Freistrahls.	121
4.46	Profile der inversen Hauptachsgeschwindigkeit $\Delta U/u_c$ des turbulenten Freistrahls.	122
4.47	Profile der gemittelten axialen und radialen Geschwindigkeit des turbulenten Freistrahls.	123
4.48	Profile der Reynoldsspannungen des turbulenten Freistrahls.	124
4.49	L^2 -Fehlernorm zwischen den LES Ergebnissen und experimentellen Profilen des turbulenten Freistrahls.	125
4.50	Grobes Rechengitter mit einer Million Knotenpunkten für den Testfall der H3-Flamme.	127
4.51	Parallele Beschleunigung und parallele Effizienz für den Testfall der H3-Flamme.	128
4.52	Instantanes Temperaturfeld der H3-Flamme.	129
4.53	Zeitlich gemittelter Massenbruch des Hydroxyl-Radikals für den Testfall der H3-Flamme.	129
4.54	Zeitlich gemittelte Profile ausgewählter Feldgrößen entlang der Hauptachse der H3-Flamme.	130

4.55	Zeitlich gemittelte Fluktuationen ausgewählter Feldgrößen entlang der Hauptachse der H3-Flamme.	131
4.56	Zeitlich gemittelte radiale Strömungsprofile der H3-Flamme.	132
4.57	Aufgelöste turbulente kinetische Energie und instantanes axiales Geschwindigkeitsfeld der H3-Flamme.	134
4.58	Einfluss der 1-exakten Limitierung auf gemittelte Feldgrößen der H3-Flamme.	135
4.59	Einfluss der 1-exakten Limitierung auf zeitlich gemittelte axiale Profile der H3-Flamme.	136
5.1	Theoretische Ersparnis von Rechenzeit und Freiheitsgraden der k -exakten Verfahren.	139
B.1	Definition eines Oberflächen-Dreiecks \mathcal{T} zur Dualgitter-Konstruktion	144
C.1	Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für die Konvektion einer Feldgröße ϕ unter sukzessiver Verfeinerung des Zeitschritts.	148
C.2	Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den konvektiven Transport eines pseudoisentrophen Wirbels unter sukzessiver Verfeinerung des Zeitschritts.	149

Tabellenverzeichnis

3.1	Parameter zur Berechnung des konvektiven Flusses mit verschiedenen k -exakten Diskretisierungsschemata.	58
3.2	Implizite Diskretisierungskoeffizienten für die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse der 1- und 2-exakten Schemata.	63
3.3	Explizite Diskretisierungskoeffizienten für die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse des 1-exakten Schemas.	63
3.4	Explizite Diskretisierungskoeffizienten für die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse des 2-exakten Schemas.	63
3.5	Koeffizienten a_i , b_i and c_i in Gleichung (3.142) für das 1- und 2-exakte Diskretisierungsschema.	65
4.1	Eigenschaften der Rechengitter für die Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr.	92
4.2	Temperatur und Gaszusammensetzungen für den initialen Zustand des Testfalls zur Wirbel-Zündkern-Interaktion.	101
4.3	Eigenschaften der Rechengitter für den Testfall der turbulenten Rohrströmung.	113
4.4	Eigenschaften der Rechengitter für den Testfall des turbulenten Freistrahls.	121
D.1	Parameter für die Approximation von $\phi _{\mathbf{x}_r}$ in Gleichung (D.3) mit verschiedenen konventionellen Diskretisierungsschemata.	151

Nomenklatur

Abkürzungen

APDF	Assumed Probability Density Function
BICGSTAB	Biconjugate Gradient Stabilized
CDS	Central Discretization Scheme
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CPU	Central Processing Unit
DNS	Direkte Numerische Simulation
ENO	Essentially Non-Oscillatory
FGMRES	Flexible Generalized Minimal Residual
FRC	Finite-Raten-Chemie
LES	Large-Eddy Simulation
LM	Levenberg-Marquardt
LUDS	Linear Upwind Discretization Scheme
MOOD	Multi-Dimensional Optimal Order Detection
MPI	Message Parsing Interface
MUSCL	Monotone Upwind Schemes for Scalar Conservation Laws
NRMSE	Root Mean Square Error Normalized by the Standard Deviation
PDF	Probability Density Function
PISO	Primitive-Variable Implicit Split Operator
QUDS	Quadratic Upwind Discretization Scheme
QUICK	Quadratic Upwind Interpolation for Convection Kinematics
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SGD	Stochastic Gradient Descent
SGS	Subgrid-Scale
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
UDS	Upwind Discretization Scheme
WALE	Wall Adapting Local Eddy Viscosity

WENO

Weighted Essentially Non-Oscillatory

Lateinische Symbole

A, B, C		Koeffizienten der Stabilitätsgleichung
$A_{\alpha\beta}$		Oberfläche zwischen benachbarten Elementen Ω_α und Ω_β
A		Stoßfaktor einer chemischen Reaktion
a	m/s	Schallgeschwindigkeit
$a_u, a_d, b_u, b_d, c_u, c_d$		Diskretisierungsparameter zur konvektiven Flussberechnung
a_1, \dots, a_7		NASA Polynomkoeffizienten
$b_p^{(l)}$		Bias-Wert eines Netzwerk-Neurons p in Schicht l
C_D		Widerstandskoeffizient
C_L		Auftriebskoeffizient
C_S, C_W		Smagorinsky-, WALE-Konstante
c_p	J/(kg K)	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c	mol/m ³	Stoffmengenkonzentration
$\mathcal{D}(\Omega)$		Duale Gitterrepräsentation auf einem Rechengebiet Ω
D_t	m ² /s	Turbulenzbedingter Diffusionskoeffizient
D	m ² /s	Diffusionskoeffizient
E_{L^2}		L^2 -Fehlernorm
$E_{abs}^{(max)}$		Maximaler absoluter Fehler
E	J/mol	Aktivierungsenergie
$E(\kappa)$	J/kg	Turbulente kinetische Energie
\mathcal{E}	1/s ²	Enstrophie
E		Fehlerfunktion des Netzwerk-Trainings
$F_{C,HO}^{(\alpha\beta)}, F_{D,HO}^{(\alpha\beta)}$		Konvektive / diffusive Flusskorrektur durch eine Oberfläche $A_{\alpha\beta}$ zur Rekonstruktion mit einer höheren Ordnung
$F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}, F_{D,LO}^{(\alpha\beta)}$		0-exakte Rekonstruktion des konvektiven / diffusiven Flusses durch eine Oberfläche $A_{\alpha\beta}$
$F_C^{(\alpha\beta)}, F_D^{(\alpha\beta)}$		Konvektiver / diffusiver Fluss durch eine Oberfläche $A_{\alpha\beta}$
f	1/s	Frequenz
G		Verstärkungsfunktion
\mathbf{G}_α		Gradienten-Korrekturmatrix des Elements Ω_α
$G(x)$		Filterfunktion
g_{soft}		<i>Softsign</i> -Funktion
\mathbf{g}	m/s ²	Gravitationsbeschleunigung
$\mathbf{H}_{1,\alpha}, \mathbf{H}_{2,\alpha}$		Anteile der Hesse-Korrekturmatrix des Elements Ω_α
\mathbf{H}_α		Hesse-Korrekturmatrix des Elements Ω_α
$H(x)$		Heaviside-Funktion

h_{f_0}	J/kg	Standardbildungsenthalpie
h	m	Gitterschrittweite
h_{mol}	J/mol	Molare Enthalpie
h	J/kg	Spezifische Enthalpie
I_T		Temperatur-Intensität
I		Imaginäre Zahl
j	kg/(m ² s)	Diffusionsmassenfluss
K		Gleichgewichtskonstante
k_b		Geschwindigkeitskoeffizient einer Rückreaktion
k_f		Geschwindigkeitskoeffizient einer Hinreaktion
k_p		Konstante zur Fehlertermberechnung im Netzwerktraining
k_{SGS}	m ² /s ²	Feinstrukturanteil der turbulenten kinetischen Energie
k	m ² /s ²	Turbulente kinetische Energie
L	m	Länge eines Rechengebiets
l_0	m	Integrale Längenskale
$\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R}^{(\beta, \alpha)}$	m ^R	Volumenmoment des Elements Ω_β mit Rang R , zentriert um Punkt \mathbf{x}_α
M	g/mol	Molare Masse
$\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \alpha}$	m ^R	Volumenmoment des Elements Ω_α mit Rang R
$\mathbf{m}(\eta, \xi)$		Dreiecks-Parametrisierung
$\dot{m}_i^{(\alpha\beta, \Gamma)}, \dot{m}_{ij}^{(\alpha\beta, \Gamma)}$		Massenstrom-Tensoren zur Approximation konvektiver Flüsse mit einer höheren Ordnung
$\dot{m}^{(\alpha\beta, \Gamma)}$	kg/(sm ²)	Massenstrom durch Oberfläche $A_{\alpha\beta}$, approximiert am Punkt \mathbf{x}_Γ
N_K		Anzahl der Knotenpunkte eines Rechengitters
N_P		Anzahl der Proben eines Trainingsdatensatzes
N_r		Anzahl der Elementarreaktionen
N_s		Anzahl der chemischen Spezies
\mathcal{N}_α		Rekonstruktionsmolekül eines Elements Ω_α
n		Normalenvektor
n		Temperaturexponent einer chemischen Reaktion
O', O''		Reaktionsordnung Edukt / Produkt
$\mathcal{P}(\Omega)$		Primäre Gitterrepräsentation auf einem Rechengebiet Ω
$P_T(x), P_Y(x)$		Temperatur- / Spezies-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
p	Pa	Druck
p_0	Pa	thermodynamischer Druckanteil
p_d	Pa	dynamischer Druckanteil
p_{f_0}	Pa	Referenzdruck der Standardbildungsenthalpie
\dot{q}_{rad}	J/(m ³ s)	Strahlungsquellterm

Griechische Symbole

\mathbf{q}	W/m^2	Diffusiver Wärmefluss
$\mathbf{R}^{(\alpha\gamma)}$		Rotationsmatrix zur Spiegelung an der Oberfläche $A_{\alpha\gamma}$
R_u	$\text{J}/(\text{mol K})$	universelle Gaskonstante
R	m	Radius
\mathcal{R}		Chemische Spezies
\mathbf{r}	m	Radiale Koordinate
$S_m^{(IMP)}, S_m^{(EXP)}$		Implizite / explizite Stencil-Koeffizienten
$S_{i,j_1 j_2 \dots j_R}^{(\alpha\beta, \Gamma)}$	m^{R+2}	Oberflächenmoment der Fläche $A_{\alpha\beta}$ mit Rang R , zentriert um Punkt \mathbf{x}_Γ
\mathcal{S}	m^2	Oberflächennormale der Fläche $A_{\alpha\beta}$
\mathbf{S}	$1/\text{s}$	Deformationsratentensor
s_L	m/s	Laminare Flammgeschwindigkeit
\dot{s}	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$	Chemische Produktionsdichte
T_{f_0}	K	Referenztemperatur der Standardbildungsenthalpie
\mathcal{T}		Oberflächendreieck einer Primärgitterkante
T	K	Temperatur
t	s	Zeit
\mathbf{U}	m/s	Konstante Strömungsgeschwindigkeit
\mathbf{u}_n	m/s	Normaler Geschwindigkeitsanteil
\mathbf{u}_t	m/s	Tangentialer Geschwindigkeitsanteil
\mathbf{u}	m/s	Geschwindigkeit
$w_{pq}^{(l)}$		Netzwerk-Gewicht zwischen Neurons p in Schicht $l - 1$ und Neuron q in Schicht l
X_j		Substitution $X_j = \cos \omega_j$ der Wellenzahl ω_j
X		Molenbruch
\mathbf{x}_Γ	m	Punkte an inneren Oberflächen zur Flussberechnung
$\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta$	m	Primärgitter-Knotenpunkte
\mathbf{x}_δ	m	Punkte an verschobenen Rändern zur Flussberechnung
$\mathbf{x}_\kappa, \mathbf{x}_\lambda$	m	Punkte zur Dualgitter-Konstruktion
$\mathbf{x}_u, \mathbf{x}_d$	m	Knotenpunkte der stromaufwärts / stromabwärts gelegenen Seite
\mathbf{x}	m	Kartesische Koordinate
Y		Massenbruch
y^+		Dimensionsloser Wandabstand
y		Größe zur Limiter-Berechnung

Griechische Symbole

γ	Isentropenexponent
----------	--------------------

ΔG^0	J/mol	Gibbs-Energie
Δt	s	Simulationszeitschritt
$\Delta \mathbf{x}^{(\alpha\beta)}$	m	Abstandsvektor zwischen den Knotenpunkten \mathbf{x}_β und \mathbf{x}_α
Δ	m	Lokale Filterweite
$\Delta \phi_\alpha^{(k+1)}(\mathbf{x})$		Anteil des Rekonstruktionspolynoms von Element Ω_α zur k -exakten Rekonstruktion
δ_F	m	Flammdicke
δ_ν	m	Wand-Längenskale
δp	Pa	Pseudo-Druckfeld
δ_{ij}		Kronecker-Delta Funktion
ε		Numerischer Fehler
ϵ	1/m	Strahlungskoeffizient
ϵ_∞		Skalierungsvariable zur Untersuchung des asymptotischen Verhaltens der kompressiblen Erhaltungsgleichungen
$\varepsilon^{(\alpha\beta)}$	1/m	Orthogonalitätsfaktor zur diffusiven Flussberechnung
η, ξ		Koordinaten zur Dreiecksparametrisierung
κ_c	1/m	Grenzwellenzahl
κ		Faktor zur Skalierung der Wirbelstärke
κ	1/m	Wellenzahl
$\lambda_{j,D}$		Dämpfungsterm der j -ten Fourier-Mode
λ_t	W/(m K)	Turbulenzbedingte Wärmeleitfähigkeit
λ	W/(m K)	Wärmeleitfähigkeit
μ_t	Pa s	Wirbelviskosität
μ	Pa s	Dynamische Viskosität
ν_K	m	Kolmogorov-Längenskale
ν', ν''		Stöchiometrischer Koeffizient Edukt/Produkt
ν	m ² /s	Kinematische Viskosität
Φ		Thermochemischer Zustandsvektor
Ψ	m ² /s	Stromfunktion
$\bar{\phi}_{\min}, \bar{\phi}_{\max}$		Lokale Extrema zur Gradientenlimitierung
$\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha)$		k -exakte Rekonstruktionsfunktion, entwickelt um den Primärgitter-Knotenpunkt \mathbf{x}_α
ϕ		Skalare Feldgröße
ψ_α		Limitervariable des Elements Ω_α
ρ	kg/m ³	Dichte
σ		Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Zahl
σ	m	Größenskale für die laminare Wirbel-Zündkern-Interaktion
σ_T		Tetraeder, gebildet mit Oberflächendreieck \mathcal{T}
σ_T	K	Temperaturvarianz

σ_Y		Turbulente skalare Energie
σ_S	$W/(m^2 K^4)$	Stefan-Boltzmann-Konstante
τ_{it}	s	Mittlere Iterationszeit
τ_w	Pa	Wandschubspannung
$\boldsymbol{\tau}$	$kg/(m s^2)$	Spannungstensor
θ_0		Begrenztes Kontrollparameter-Maximum
θ_{\max}		Kontrollparameter-Maximum
θ		Kontrollparameter zur Steuerung der numerischen Dissipation
Ω_α		Median-duales Volumen des Gitterelements α
Ω		Rechengebiet
ω	1/s	Wirbelstärke
$\omega_{j,c}$		Grenzfrequenz der j -ten Fourier-Mode
ω_j		Wellenzahl der j -ten Fourier-Mode
$\omega_{j,mod}$		Effektive Wellenzahl der j -ten Fourier-Mode
ω_j		Skalierte Wellenzahl

Dimensionslose Kennzahlen

Fr	Froude-Zahl $Fr = U/(Lg)$
Le	Lewis-Zahl $Le = Sc/Pr$
Ma	Mach-Zahl $Ma = \sqrt{U^2/(\gamma RT)}$
Pe	Peclet-Zahl $Pe = Re Sc$
Pr	Prandtl-Zahl $Pr = c_p \mu / \lambda$
Re	Reynolds-Zahl $Re = \rho U L / \mu$
Sc	Schmidt-Zahl $Sc = \mu / (\rho D)$
St	Strouhal-Zahl $St = D f / U$

Mathematische Operatoren

$\langle \phi \rangle$	Zeitlicher Mittelwert von ϕ
ϕ'	Zeitlich fluktuierender Anteil von ϕ nach der Reynolds-Zerlegung
$\bar{\phi}$	Gefilterte Variable
$\bar{\phi}_\alpha$	Volumetrischer Mittelwert eines Elements Ω_α
$\tilde{\phi}$	Favre-gefilterte Variable
ϕ''	Feinstrukturanteil von ϕ der Favre-Zerlegung
$\hat{\phi}_j$	j -te Fourier-Mode von ϕ

$ \phi $	Betrag einer Größe / Entität
ϕ^+	Dimensionslose Größe
ϕ^m	Feldgröße ϕ in Subiteration m
ϕ^n	Feldgröße ϕ zum Zeitpunkt t_n
ϕ^{ex}	Exakte Lösung
ϕ_∞	Feldgröße bei Umgebungsbedingungen
$\phi \Big _{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)}$	Approximation des Punktwertes von ϕ an der Stelle \mathbf{x}_α mit der räumlichen Genauigkeit $\mathcal{O}(h^k)$
$\nabla\phi$	Gradient von ϕ
$\partial\phi/\partial x$	Partielle Ableitung nach x
$\widehat{\partial^2\phi} \Big _{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)}$	Vektorisierte Hesse-Matrix mit der räumlichen Genauigkeit $\mathcal{O}(h^k)$
$\mathcal{O}(\phi)$	Führende Größenordnung von ϕ
$\{\Gamma_\alpha\}$	Menge der an ein Element Ω_α grenzenden Punkte zur Flussberechnung
$\{\gamma_\alpha\}$	Menge der an ein Element Ω_α grenzenden imaginären Randelemente
$\{\beta_\alpha^{(k)}\}$	k -te innere Nachbarschaft eines Elements Ω_α
$\{\delta_\alpha\}$	Menge der an ein Element Ω_α grenzenden Randpunkte

Kurzfassung

Diskretisierungsverfahren hoher Ordnung, die sich auf unstrukturierten Rechengittern einsetzen lassen, bieten ein großes Potential zur Reduzierung der Rechenzeiten von detaillierten Grobstruktursimulationen. Gleichzeitig lässt sich gegenüber strukturierten Diskretisierungsansätzen eine hohe geometrische Flexibilität für die Generierung der Rechengitter realisieren. Viele Verfahren, die eine höhere Rekonstruktionsordnung auf unstrukturierten Gittern ermöglichen, beruhen auf der Einführung von zusätzlichen Freiheitsgraden innerhalb der Berechnungselemente. Ihre Implementierung in etablierte Finite-Volumen Strömungslöser ist jedoch aufgrund großer Unterschiede in den Datenstrukturen mit einem hohen Aufwand verbunden. Doch auch unstrukturierte Finite-Volumen Verfahren, welche eine höhere räumliche Fehlerordnung durch eine nicht-kompakte Rekonstruktion ermöglichen, verlangen einen hohen Implementierungsaufwand, um eine parallele Skalierbarkeit zu realisieren. Ein vielversprechender Ansatz zur Erhöhung der räumlichen Genauigkeit von etablierten unstrukturierten Finite-Volumen-Lösern stellt das k -exakte Multi-Korrekturverfahren dar. Der Schlüssel der Methode ist eine sukzessive Korrektur von approximativen Green-Gauss-Ableitungen, die eine Rekonstruktion hoher Ordnung mit guten Parallelisierungseigenschaften und einem moderatem Implementierungsaufwand ermöglicht. In dieser Arbeit wird der k -exakte Multi-Korrekturansatz, welcher ursprünglich für kompressible Strömungsprobleme und für zellzentrierte Rechengitter entwickelt wurde, für die Anwendung auf einer knotenzentrierten Gitterrepräsentation erweitert und für die Exaktheiten $k = 1$ und $k = 2$ in den DLR Strömungslöser ThetaCOM implementiert. Des Weiteren wird die Methode mit einem Druckkorrektur-Verfahren für die zeitgenaue Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen reaktiver Fluide bei niedrigen Mach-Zahlen kombiniert. Hierfür werden entsprechende Korrekturterme hergeleitet. Des Weiteren wird die in ThetaCOM implementierte Approximation der konvektiven und diffusiven Flüsse mit dem k -exakten Rekonstruktionsansatz vereint. Für die Berechnung der konvektiven Flüsse wird außerdem ein Ansatz vorgestellt, mit dem sich die Bestimmung der numerischen Dissipation zur Stabilisierung des Verfahrens auf ein Minimum reduzieren lässt. Dieser beruht auf der Herleitung einer Stabilitätsgleichung, welche aus einer Von-Neumann-Stabilitätsanalyse für eine lineare Advektions-Diffusion-Gleichung hervorgeht und deren Lösung zur Beschleunigung des Verfahrens indirekt in einem Verbund aus kompakten neuronalen Netzwerk-Modellen tabelliert wird. Dieser Ansatz wird mit einem Verfahren zur Gradientenlimitierung gekoppelt, um mit dem Diskretisierungsverfahren eine akkurate Auflösung von steilen Lösungsgradienten zu ermöglichen, welche in Verbrennungssimulationen in unmittelbarer Nähe zur Flammenfront auftreten.

Für das implementierte Multi-Korrekturverfahren wird die räumliche Genauigkeit der verschiedenen numerischen Operatoren durch zahlreiche kanonische Testfälle verifiziert. Es wird gezeigt, dass

sich die räumlichen Gradienten der Feldgrößen infolge der k -exakten Korrekturen mit einer wesentlich höheren Genauigkeit approximieren lassen. Des Weiteren lässt sich der diffusive Transport durch beide Schemata mit einer zweiten räumlichen Fehlerordnung und der konvektive Transport für $k = 1$ und $k = 2$ mit jeweils einer zweiten beziehungsweise dritten Fehlerordnung approximieren. Durch die Simulation zahlreicher laminarer und turbulenter Strömungsprobleme werden die beiden k -exakten Diskretisierungsverfahren mit experimentellen und numerischen Referenzdaten aus der Literatur validiert. Dabei wird der Einfluss der höheren Ordnung auf die räumliche Genauigkeit im Vergleich zu einem konventionellen Diskretisierungsverfahren beleuchtet. Hierbei wird insbesondere das Potential der beiden k -exakten Verfahren hinsichtlich der Einsparung von Rechenzeit und Freiheitsgraden dargestellt, sowie deren Fähigkeit zur Erhaltung der parallelen Skalierungseigenschaften von ThetaCOM. Ein weiterer Fokus liegt auf dem neuen Ansatz zur adaptiven Bestimmung der numerischen Dissipation und dessen Kopplung mit der implementierten Methode zur Gradientenlimitierung. Im Vergleich zur Rekonstruktion hoher Ordnung mit einer konstanten numerischen Dissipation liefert die vorgestellte adaptive Methode konsistente und genaue Ergebnisse, unabhängig vom Strömungsproblem und ohne eine Feinjustierung von empirischen Parametern. Abschließend wird für den Testfall einer turbulenten Wasserstoff-Luft-Diffusionsflamme demonstriert, dass sich beide Verfahren zur Simulation von turbulenten, reaktiven Strömungen auf vollständig unstrukturierten Rechengittern einsetzen lassen und eine deutliche Verbesserung des Simulationsergebnisses im Vergleich zu einem konventionellen Diskretisierungsansatz bewirken.

Abstract

High-order discretization methods that are applicable to unstructured grids offer a great potential for reducing the computation time of detailed large-eddy simulations. Furthermore, they enable a higher geometric flexibility in the meshing process, compared to structured discretization approaches. Many methods that allow a higher reconstruction order on unstructured grids rely on the introduction of additional degrees of freedom within computational elements. Their implementation into already established finite-volume flow solvers is thus associated with a high effort for the validation and verification due to the different data structures. Unstructured finite-volume methods, which allow a higher spatial error order by a non-compact reconstruction, also require a large implementation effort to realize parallel scalability. A promising approach to increase the spatial accuracy for established unstructured finite-volume solvers is the k -exact multiple-correction method. The key of this method is a successive correction of approximate Green-Gauss derivatives, which allows a high-order reconstruction with good parallelization properties and a moderate implementation effort. This work extends the k -exact multiple-correction approach, which was originally developed for compressible flow problems and for cell-centered grids, for the application to a vertex-centered grid representation. It is implemented into DLR's in-house code ThetaCOM, where the exactness levels $k = 1$ and $k = 2$ are considered. Furthermore, the method is combined with a pressure correction method for a time-accurate discretization of the conservation equations of reactive fluids at low Mach numbers. For this purpose, corresponding correction terms are derived and the approximation of convective and diffusive fluxes implemented in ThetaCOM is brought into accordance with the k -exact reconstruction approach. Additionally, an approach for the convective flux calculation is presented that minimizes the required numerical dissipation to stabilize the discretization scheme. It is based on the derivation of a stability equation resulting from a Von Neumann stability analysis for a linear advection-diffusion equation, whose solution is indirectly tabulated in a composite of compact neural network models to accelerate the calculation procedure. This approach is coupled with a gradient limitation procedure for an accurate resolution of steep gradients that occur in combustion simulations in proximity to the flame front.

For the implemented multiple-correction method, the spatial accuracy of the different numerical operators is verified by numerous canonical test cases. It is shown that the spatial gradients of the solution can be approximated with a much higher accuracy due to the k -exact corrections. Furthermore, both schemes enable a second order accurate approximation of the diffusive operator and a second and third order accurate convective transport for $k = 1$ and $k = 2$, respectively. By means of a wide range of laminar and turbulent flow problems, both k -exact discretization schemes are validated against experimental and numerical reference data from the literature. Besides that,

the spatial accuracy of both schemes is compared to a conventional discretization approach. In particular, the potential of both k -exact methods in terms of savings in computation time and degrees of freedom is demonstrated, as well as their ability to preserve the parallel scaling properties of ThetaCOM. An additional emphasis is put on the new approach for the adaptive determination of the numerical dissipation and its coupling with the implemented gradient limitation method. Compared to a high-order accurate reconstruction with a constant numerical dissipation, the presented adaptive method provides consistent and accurate results, independent of the flow problem and without a tedious fine-tuning of empirical parameters. Finally, it is demonstrated for the test case of a turbulent hydrogen-air diffusion flame that both k -exact schemes are suitable for the simulation of turbulent reactive flows on fully unstructured grids and that they offer a significant improvement in terms of accuracy compared to a conventional discretization approach.

1 Einleitung

Die Simulation von technischen Verbrennungsvorgängen verlangt eine akkurate Abbildung zahlreicher nichtlinearer Prozesse, welche über ein weites Spektrum von Zeit- und Größenskalen in Erscheinung treten. Für die Auslegung konventioneller Triebwerksbrennkammern wird beispielsweise eine Vorhersage von Stickoxidemissionen im Millionstelbereich [27] gefordert. Hierfür gilt es eine Vielzahl chemischer Elementarreaktionen zu berücksichtigen, deren Reaktionsgeschwindigkeiten sich um einen Faktor von bis zu $\mathcal{O}(10^6)$ unterscheiden [46]. Die Flammenfront, in der ein maßgeblicher Anteil dieser Reaktionen abläuft, ist dabei bis um das Tausendfache dünner, als die turbulenten Strukturen, die in ihrer unmittelbaren Nähe Brennstoff und Oxidator vermischen [88]. Doch auch die kleinsten und größten Skalen des turbulenten Transports, welcher maßgeblich für die Durchmischung der verschiedenen chemischen Komponenten verantwortlich ist, überspannen ein weites Spektrum. Deren Verhältnis skaliert mit der Reynoldszahl der Strömung zu $\mathcal{O}(Re^{3/4})$, welche sich wiederum für reaktive Strömungen in Luftfahrtanwendungen auf Werte von bis zu $\mathcal{O}(10^8)$ erstreckt [88, 198]. Diese massive Disparität der Skalen hat zur Folge, dass eine direkte Lösung der unterliegenden Transportgleichungen ohne jegliche Modellierung nur für Strömungen mit moderaten Reynoldszahlen und für vergleichsweise einfache Geometrien möglich ist [212, 213]. Strömungsprobleme mit höheren Reynoldszahlen werden daher häufig mit dem *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) Ansatz simuliert, durch den sich zeitlich gemittelte Strömungsgrößen unter einem realistischen Rechenaufwand bestimmen lassen. Die Güte der Lösung wird dabei maßgeblich durch Turbulenzmodelle beeinflusst, welche den Einfluss der turbulenten Fluktuationen auf das zeitlich gemittelte Strömungsfeld abbilden [213]. Der RANS-Ansatz eignet sich jedoch nur bedingt zur Simulation von technischen Verbrennungsprozessen, welche eine genaue Vorhersage der turbulenten Mischungsprozesse von Brennstoff und Oxidator erfordern [88, 119, 193]. Grobstruktursimulationen - im Englischen als *Large-Eddy Simulation* (LES) bezeichnet - lösen im Gegensatz dazu großskalige Wirbel der Strömung direkt auf, wodurch es lediglich den Einfluss der kleinstskaligen, sich universell verhaltenden Strukturen auf die Hauptströmung zu modellieren gilt [213]. Diese räumliche Separation der Skalen hat zur Folge, dass sich skalare Mischungsvorgänge und Dissipationsraten in komplexen reaktiven Strömungen durch LES-Methoden deutlich genauer berechnen lassen als mit dem RANS-Ansatz [193].

Für ein genaues Simulationsergebnis spielt neben dem Modellierungsansatz auch das numerische Diskretisierungsverfahren eine bedeutende Rolle. LES-Berechnungsverfahren sollten beispielsweise eine geringe numerische Dissipation aufweisen, um den Transport von Masse, Impuls und der kinetischen Energie akkurat vorherzusagen [207]. Aus diesem Grund werden typischerweise Diskretisierungsmethoden hoher Ordnung eingesetzt, welche üblicherweise über geringere Abbruchfehler und ein verbessertes Auflösungsvermögen verfügen. Der wesentliche Unterschied im Vergleich zu

konventionellen Lösungsmethoden besteht in der Rekonstruktion der Lösung durch polynomiale Ansatzfunktionen höheren Grades. Dadurch lassen sich akkurate Simulationen mit bedeutend weniger Freiheitsgraden durchführen, wodurch sich der Rechenaufwand im Vergleich zu konventionellen Lösungsmethoden deutlich reduzieren lässt [69, 255]. Diese Methodik kann sowohl für die zeitliche als auch für die räumliche Diskretisierung der unterliegenden Transportgleichungen angewendet werden. Eine gängige Definition für ein Verfahren hoher Ordnung ist typischerweise ein Polynomgrad von mindestens zwei, was mit einem Abbruchfehler dritter Ordnung einhergeht [255].

Insbesondere zum Erreichen einer höheren räumlichen Ordnung sind im Vergleich zu konventionellen Verfahren signifikante algorithmische Änderungen notwendig, welche sich in der Komplexität und in der Parallellisierbarkeit der Berechnungsmethoden niederschlagen. Verfahren hoher Ordnung wurden daher ursprünglich in Verbindung mit strukturierten Rechengittern entwickelt [181]. Hierbei wird das Rechengebiet durch eine Menge aus Elementen oder Knotenpunkten definiert, deren räumliche Position sich eindeutig durch drei Indizes identifizieren lässt. Die Feldgrößen der Simulation werden in gleicher struktureller Form abgespeichert, womit schnelle Zugriffszeiten und eine einfache Adressierung über mehrere Nachbarelemente realisiert werden. Eine strukturierte Vernetzung komplexer Geometrien verlangt jedoch ein hohes Maß an Aufwand und Erfahrung und ist oft nur unter Vernachlässigung gewisser geometrischer Merkmale möglich. Auch eine lokale Verfeinerung des Rechengebietes lässt sich nur bedingt durchführen [22, 69]. Diese Nachteile entfallen bei der Verwendung von unstrukturierten Rechengittern, bei welchen das Rechengebiet in beliebige polyedrische Elemente zerlegt wird. Diese bieten eine höhere geometrische Flexibilität, wodurch sich der Vernetzungsprozess unter geringerem Aufwand durchführen und automatisieren lässt [22, 69]. Unstrukturierte Gitter weisen allerdings komplexere Strukturen für die Repräsentation der Felddaten auf und verlangen, aufgrund der erforderlichen indirekten Adressierung, gewisse Effizienz-Einbußen in der Rechenzeit [22]. Die wesentlichen Unterschiede zwischen strukturierten und unstrukturierten Gittern sind in Abbildung 1.1 für ein zweidimensionales Rechengebiets dargestellt.

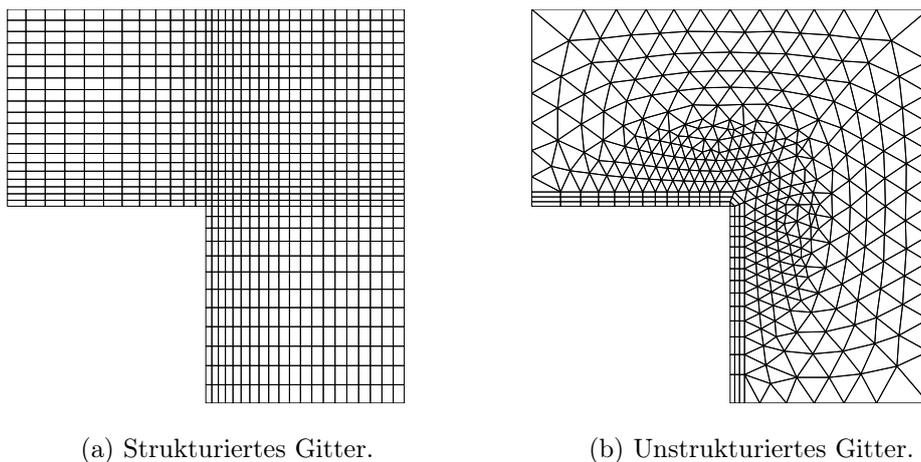


Abbildung 1.1: Beispiel für die Diskretisierung eines zweidimensionalen Rechengebiets mit einem strukturierten und einem unstrukturierten Gitter.

1.1 Verfahren hoher Ordnung zur räumlichen Diskretisierung auf unstrukturierten Gittern

Etablierte Strömungslöser, welche die geometrische Flexibilität unstrukturierter Gitter ausnutzen, basieren häufig auf Varianten der Finite-Volumen-Methode aus den 1980er und 1990er Jahren, welche für die Diskretisierung der RANS-Gleichungen entwickelt wurden und die Lösung mit einer niedrigen Genauigkeitsordnung rekonstruieren [116, 207, 255]. Diese lassen sich nur bedingt für LES anwenden, da durch ihre numerischen Eigenschaften sehr viele Elemente zur Berechnung valider Ergebnisse eingesetzt werden müssen, was sich in hohen Rechenzeiten niederschlägt. In den letzten Jahrzehnten wurden daher mehr und mehr Methoden entwickelt, die sowohl eine Rekonstruktion mit einer höheren Ordnung, als auch eine hohe Vernetzungsfreiheit durch unstrukturierte Gitter unterstützen. Vielversprechende Ansätze sind beispielsweise *Discontinuous Galerkin*-Verfahren [38, 39, 40, 41] oder die Spektrale-Volumen-Methode [254, 256, 257, 259]. Diese Verfahren beruhen auf der Einführung zusätzlicher Freiheitsgrade innerhalb der Diskretisierungselemente, um somit die Ordnung der räumlichen Rekonstruktion zu erhöhen. Dieser Ansatz hat neben besseren numerischen Eigenschaften auch den Vorteil, dass er sich sehr effizient parallelisieren lässt. Solch kompakte Diskretisierungsansätze unterscheiden sich jedoch grundlegend in der Datenstruktur und der Implementierung von konventionellen, unstrukturierten Finite-Volumen-Schemata. Folglich erfordert deren nachträgliche Integration in etablierte Strömungslöser, welche meist eine große Anzahl komplexer Modelle umfassen, einen erheblichen Implementierungs-, Verifizierungs- und Validierungsaufwand [105, 197].

Eine Alternative stellen räumliche Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung dar, welche sich im Rahmen der Finite-Volumen-Methode in einer nicht-kompakten Weise auf unstrukturierten Gittern anwenden lassen. Hierzu zählt mitunter die k -exakte Rekonstruktion, welche ihre Ursprünge in der Arbeit von Barth und Frederickson hat [9] und bis heute in zahlreichen Arbeiten und in verschiedenen Variationen weiterentwickelt wurde [1, 5, 57, 58, 80, 167, 180, 181, 182, 236, 239, 240]. Die Lösung wird dabei in jedem Diskretisierungselement durch ein Polynom mit Grad k rekonstruiert, dessen Koeffizienten aus den volumetrischen Mittelwerten der umliegenden Elemente zu bestimmen sind. In der Theorie lässt sich damit eine beliebige räumliche Genauigkeitsordnung erzielen [69]. Die k -exakte Rekonstruktion wird häufig auch in die Kategorie der *Monotone Upwind Schemes for Scalar Conservation Laws* (MUSCL) eingeordnet [105, 106]. Dabei handelt es sich um einen verbreiteten Diskretisierungsansatz von Van Leer [243], dessen zentrale Komponente ebenfalls die Rekonstruktion der Lösung aus den volumetrischen Mittelwerten darstellt [176]. Ihre mangelnde Kompaktheit ist allerdings der bedeutendste Nachteil der k -exakten Methodik, wodurch sich unter Zunahme von k die Anzahl der notwendigen Elemente zur Rekonstruktion massiv erhöht. Infolgedessen erfordert die k -exakte Rekonstruktion auf unstrukturierten Gittern komplexe und speicherintensive Algorithmen für die Suche und Identifizierung von passenden Nachbarelementen [2, 69, 253]. Die mangelnde Lokalität der Daten im Arbeitsspeicher kann außerdem zu Cache-Verfehlungen und somit zu einer Minderung der Rechenleistung führen [251]. In konventionellen, unstrukturierten Strömungslösern wird die Rekonstruktion daher häufig auf eine zweite räumliche Ordnungen begrenzt [69, 255]. Einen weiteren

Nachteil stellt die ineffiziente parallele Skalierbarkeit dar, wenn sich die Elemente zur Rekonstruktion in verschiedenen Partitionen des Rechengebiets befinden und dadurch ein hoher Datenaustausch zwischen verschiedenen Prozessoren erfolgen muss [108, 253].

In den letzten Jahren wurden daher neuartige k -exakte Diskretisierungsverfahren entwickelt, mit denen sich insbesondere die Problematik der mangelnden Parallelisierbarkeit überwinden lässt. In den Arbeiten von Haider et al. [105, 106, 107, 108] wird die k -exakte Rekonstruktion der Feldgrößen beispielsweise durch eine rekursive Korrektur ihrer approximativen Ableitungen durchgeführt, welche als Polynomkoeffizienten agieren. Die Berechnung dieser Ableitungen erfolgt über eine Methode der kleinsten Quadrate aus den volumetrischen Mittelwerten der direkt benachbarten Elemente. In der *Compact Least-Squares* Finite-Volumen-Methode von Wang et al. [251, 252, 253] wird eine ähnliche Strategie verfolgt. Hierbei wird gefordert, dass die volumetrischen Zellmittelwerte der Rekonstruktionselemente durch das unterliegende Polynom, sowie dessen höheren Ableitungen mit entsprechenden Genauigkeiten approximiert werden. Aus diesen Bedingungen lässt sich für jedes Element ein lineares Gleichungssystem aufstellen, welches es iterativ zu lösen gilt. In der Arbeit von Zhang et al. [270] wird ein ähnlicher Ansatz verfolgt, wobei die höheren Ableitungen rekursiv durch mehrere kleinste-Quadrate-Beziehungen zu den direkten Nachbarelementen approximiert werden. Im Gegensatz zur *Compact Least-Squares* Methode von Wang et al. resultiert dadurch ein expliziter Rekonstruktionsalgorithmus, welcher sich sehr gut für explizite zeitliche Diskretisierungsschemata eignet. Eine ähnliche Herangehensweise wird auch in dem Multi-Korrekturverfahren von Pont et al. [196, 197] und Menasria et al. [157] vorgestellt, wobei die erforderlichen Ableitungsoperatoren durch einen Green-Gauss-Formalismus approximiert werden. Dies hat zur Folge, dass das Diskretisierungsverfahren im Vergleich zu den kleinste-Quadrate-Methoden deutlich robuster auf stark verzerrte Rechengitter reagiert. Die Green-Gauss-Ableitungen werden hierbei ebenfalls sukzessive auf höhere Genauigkeitsniveaus approximiert, was durch geometrische Korrekturmatrizen erfolgt, die vom Rechengitter abhängig sind. Es sei zu erwähnen, dass alle genannten Verfahren auf einer zellzentrierten Repräsentation des Rechengitters basieren, bei der die zu bestimmenden Feldgrößen den geometrischen Mittelpunkten der entsprechenden Gitterelemente zugeordnet werden. Eine alternative Formulierung stellen knotenzentrierte Verfahren dar, bei denen die Feldgrößen mit den Knotenpunkten des Rechengitters verknüpft werden [22].

1.2 Zeitgenaue Lösungsmethoden der Transportgleichungen reaktiver Fluide

Auch die zeitliche Integration stellt einen zentralen Aspekt für eine akkurate Vorhersage reaktiver Fluide mittels LES dar. Für Strömungsprobleme mit moderater Steifigkeit werden häufig explizite Zeitschrittverfahren eingesetzt, welche sich in effizienter Weise mit räumlichen Diskretisierungsverfahren hoher Ordnung vereinen lassen [69]. Für Verbrennungsprobleme sind explizite Zeitschrittverfahren jedoch nur bedingt zielführend, da das Verbrennungsgleichungssystem üblicherweise numerisch sehr steif ist und die Zeitschrittgröße zudem durch die Schallgeschwindigkeit auf sehr kleine

Werte limitiert ist. In LES mit niedrigen hydrodynamischen Geschwindigkeiten resultieren dadurch hohe Rechenzeiten, da eine große Anzahl an Zeitschritten zur Berechnung der statistisch stationären Mittelwerte gelöst werden muss [88].

Diese Probleme lassen sich umgehen, wenn die Transportgleichungen reaktiver Fluide stattdessen direkt im Grenzfall niedriger Mach-Zahlen gelöst werden. Der Einfluss der akustischen Skalen auf die Strömung wird dabei vernachlässigt, wodurch sich deutlich größere Zeitschritte verwenden lassen [88]. Diese Vernachlässigung hat jedoch eine Entkopplung von Druck und Dichte zur Folge, weshalb häufig sogenannte Druckkorrektur-Verfahren zur Lösung der Transportgleichungen eingesetzt werden müssen [73, 263]. Diese Lösungsverfahren umfassen die implizite Lösung einer Poisson-Gleichung, für welche in der Regel Mehrgitter-Techniken zur Konvergenzbeschleunigung eingesetzt werden [263]. Sie weisen daher im Vergleich zu expliziten Zeitschrittverfahren eine höhere Komplexität auf. Zudem ist die zeitliche Integration mit einer höheren Ordnung aufgrund der impliziten Druck-Geschwindigkeits-Kopplung und den damit verbundenen Aufteilungsfehlern mit einem größeren Aufwand verbunden, da eine mehrfache Lösung der Poisson-Gleichung nötig ist [124]. Räumliche Diskretisierungsmethoden höherer Ordnung, wie die genannten k -exakten Rekonstruktionsverfahren, werden daher in der Literatur überwiegend zur Lösung von kompressiblen Strömungsproblemen und in Verbindung mit expliziten Zeitschrittverfahren eingesetzt.

1.3 Approximation der numerischen Flüsse

Die Approximation der Flussfunktionen zur Beschreibung des konvektiven und diffusiven Transports stellt neben der Rekonstruktionsordnung einen wichtigen Freiheitsgrad für die räumliche Genauigkeit eines Diskretisierungsschemas dar. Für LES sollte die Berechnung der konvektiven Flüsse mit einer geringen numerischen Dissipation erfolgen, um den Transport der turbulenten kinetischen Energie der aufgelösten Wirbelstrukturen akkurat abzubilden [213]. Häufig werden dafür zentrale Verfahren eingesetzt, in denen die Flüsse auf den Oberflächen der Rechenelemente durch arithmetische Mittelwerte der Feldgrößen berechnet werden, welche aus den Rekonstruktionsspolynomen der beiden angrenzenden Elemente resultieren [22, 213]. Dieser Ansatz wird aufgrund seiner Einfachheit und seiner hohen Effizienz oft zur Simulation inkompressibler Strömungen eingesetzt, in denen keine Diskontinuitäten, wie beispielsweise Stoßwellen, auftreten. Zentrale Verfahren neigen jedoch zu einer Entkopplung der unterliegenden Transportgleichungen, wodurch sich zwei unabhängige diskrete Lösungen im Rechengebiet manifestieren können [22]. Zudem können Fehlerartefakte, welche beispielsweise aus unzureichenden diskreten Erhaltungseigenschaften resultieren, durch die dispersiven Fehlereigenschaften im Bereich der kleinsten Gitterskalen und der mangelnden numerischen Dissipation angefangen werden [134]. Zur Unterbindung dieser Probleme wird den konvektiven Flüssen oft ein künstlicher Dämpfungsterm aufgeprägt, welcher sich ähnlich zur physikalischen Dissipation verhält und dadurch das Verfahren stabilisiert [22, 118, 136]. Der Einsatz der numerischen Dissipation setzt jedoch in der Regel die Anpassung von empirischen Parametern voraus, welche es zum Erreichen einer stabilen Lösung zu bestimmen gilt. In sogenannten *Upwind* Verfahren wird die notwendige

Dissipation hingegen automatisch auf Basis von Charakteristiken des unterliegenden hyperbolischen Gleichungssystems bestimmt, wodurch sich Diskontinuitäten im Vergleich zu zentralen Verfahren deutlich besser auflösen lassen [22]. *Upwind* Verfahren werden daher in der Regel für kompressible Strömungsprobleme eingesetzt, in denen sich Stoßfronten ausbilden können. Ihre Nachteile sind eine höhere Komplexität gegenüber zentralen Schemata [231] und eine geringere Genauigkeit im Grenzfall niedriger Mach-Zahlen [100, 101].

Ein Problem bei der konvektiven Flussberechnung mit einer höheren Ordnung sind parasitäre Fehlermoden, welche sich in der Nähe von steilen Lösungsgradienten aufgrund des Gibbs-Phänomens ausbilden [69, 93]. Methoden zur Vermeidung des Gibbs-Phänomens basieren auf dem Theorem von Godunov [90], welches besagt, dass ein lineares Diskretisierungsschema genau erster Ordnung sein muss, um die Erzeugung neuer Extrema zu verhindern. Dies lässt sich beispielsweise mit einer Gradientenlimitierung [243] realisieren, bei welcher die Lösungsgradienten für die Rekonstruktion der Feldgrößen entsprechend ihrer Extrema aus den umliegenden Elementen begrenzt werden, sodass ein diskretes Maximumsprinzip erfüllt wird [11, 178, 263]. Die k -exakte Finite-Volumen-Methode wird, neben anderen Limitierungsmethoden wie beispielsweise den *Essentially Non-Oscillatory* (ENO) und *Weighted Essentially Non-Oscillatory* (WENO) Verfahren [1, 57, 58, 80, 122, 143] oder der *Multi-Dimensional Optimal Order Detection* (MOOD) [5, 37], häufig zusammen mit einer Gradientenlimitierung eingesetzt [6, 10, 158, 197]. In jüngsten Veröffentlichungen wurde gezeigt, dass sich auch Methoden aus dem Bereich des maschinellen Lernens einsetzen lassen, um das Gibbs-Phänomen zu unterbinden. In der Arbeit von Ray und Hesthaven [204] wurden beispielsweise neuronale Netzwerkmodelle verwendet, um die numerische Dissipation eines *Discontinuous Galerkin*-Verfahrens zu regulieren. Die Netzwerkmodelle wurden dabei mit Simulationsergebnissen von klassischen Limiter-Methoden bestimmt. Ähnliche Ansätze wurden auch in den Arbeiten von Ray und Hesthaven [204], Yu et al. [268], Discacciati et al. [54], Schwander et al. [218] und Bruno et al. [30] verwendet. In der Arbeit von Beck et al. [15] wurde ein Stoßindikator vorgestellt, welcher auf gefalteten neuronalen Netzwerkmodellen zur Bild- und Kantenerkennung basiert. Dieser lässt sich als eine Art *Black-Box* zur Detektion von Diskontinuitäten verwenden, welche dann durch verschiedene Stabilisierungsverfahren behandelt werden können. Stevens und Colonius [230] und Kossaczka et al. [132] verwendeten maschinelles Lernen hingegen um die Rekonstruktionskoeffizienten eines *WENO5-JS* Finite-Volumen-Verfahrens zu optimieren.

1.4 Zielsetzung dieser Arbeit

Diese Arbeit befasst sich mit der Implementierung eines räumlichen Diskretisierungsverfahrens hoher Ordnung in den DLR Strömungslöser **ThetaCOM** (**T**urbulent **H**eat Release Extension for **TAU** in its **C**ombustion Version). Es handelt sich dabei um eine Erweiterung des etablierten DLR Strömungslösers TAU [217] zur Simulation von reaktiven Strömungen bei niedrigen Mach-Zahlen [135]. **ThetaCOM** zeichnet sich durch eine Reihe umfassend validierter Modelle aus, beispielsweise zur detaillierten Vorhersage von Ruß-Emissionen [21, 53, 62, 68, 95], zur Berechnung von turbulentem Ver-

brennungslärm [96, 97, 98], zur Untersuchung von Turbulenz-Chemie-Interaktionen [55, 70, 76, 77], zur Abbildung von Mehrphasen-Strömungen [64, 65, 71, 208] und zur Modellierung von konjugiertem Wärmetransport [203]. Der Strömungslöser basiert auf einem Finite-Volumen-Ansatz und einer unstrukturierten, knotenzentrierten Repräsentation des Rechengebietes, für dessen Elemente sich Tetraeder, Hexaeder, Prismen und Pyramiden einsetzen lassen. Er bietet somit die Möglichkeit zur Simulation von technischen Verbrennungsproblemen in komplexen Geometrien, wobei sich sowohl RANS Simulationen [219], als auch LES [63, 94, 115, 145, 220] durchführen lassen. **ThetaCOM** bietet zudem eine hohe Effizienz für die Durchführung paralleler Simulationen, welche auf einer räumlichen Zerlegung des Rechengebiets und dem *Message Parsing Interface* (MPI) basiert. Es zeichnet sich durch einen speichereffizienten, matrixfreien Krylov-Löser für die linearisierten Transportgleichungen aus und bietet die Möglichkeit zur Konvergenzbeschleunigung mit einer Mehrgitter-Verfahren.

Für die Erweiterung des Strömungslösers soll die wesentliche Programmstruktur beibehalten werden, um eine erneute Validierung der bestehenden Modelle zu vermeiden. Da **ThetaCOM** auf einer Finite-Volumen-Diskretisierung basiert, erweist sich die k -exakte Rekonstruktion als ein zielführender Ansatz, der sich mit vertretbarem Implementierungsaufwand umsetzen lässt. Insbesondere das k -exakte Multi-Korrekturverfahren von Pont et al. [197] stellt eine vielversprechende Methode dar, um die räumliche Genauigkeit zu verbessern und die parallelen Eigenschaften von **ThetaCOM** beizubehalten. Es soll daher im Rahmen dieser Arbeit für die Anwendung auf knotenzentrierten Rechengittern für $k = 1$ und $k = 2$ erweitert und mit einem Druckkorrektur-Verfahren vereint werden, um die zeitgenaue Lösung der reaktiven Transportgleichungen im Bereich niedriger Mach-Zahlen mit einer hohen räumlichen Genauigkeit zu ermöglichen. Dies schließt auch die Herleitung von entsprechenden k -exakten Korrekturtermen zur Berechnung der konvektiven und diffusiven Flüsse sowie einem Ansatz zur Gradientenlimitierung mit ein. Daraus hervorgegangen ist eine neue Methode zur Bestimmung der numerischen Dissipation für das implementierte zentrale Verfahren zur konvektiven Flussberechnung. Diese basiert auf einem Kriterium aus einer Von-Neumann-Stabilitätsanalyse, mit welchem sich die erforderliche numerische Dissipation in Abhängigkeit der lokalen Strömungsbedingungen auf ein Minimum reduzieren lässt. Die zugrundeliegende Stabilitätsgleichung wird dabei indirekt in einem Verbund aus kompakten neuronalen Netzwerkmodellen tabelliert, sodass die numerische Dissipation mit einem geringem Rechenaufwand bestimmt werden kann. Im Gegensatz zu den oben genannten Arbeiten, welche sich ebenfalls dem Einsatz von neuronalen Netzwerkmodellen bedienen, ist der Ansatz nicht direkt auf die Erfassung von Diskontinuitäten ausgerichtet. Er dient vielmehr dazu, die optimale numerische Dissipation für das zentrale Diskretisierungsverfahren der konvektiven Flüsse zu bestimmen, um das Anfachen von dispersiven Fehlern im Bereich kleinster Gitterskalen zu unterbinden. Auf diese Weise kann eine stabile und dennoch genaue Lösung erzielt werden, ohne dass der Anwender Zeit für die Bestimmung von empirischen Parametern aufwenden muss. Die genannten Methoden werden im Rahmen dieser Arbeit durch zahlreiche Testfälle verifiziert und validiert und mit einem konventionellen Diskretisierungsverfahren hinsichtlich der Genauigkeit und der Einsparung von Rechenzeit verglichen.

2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Transportgleichungen vorgestellt, welche es für die Simulation reaktiver Strömungen zu lösen gilt. Im Anschluss daran wird die Methodik der Grobstruktur-Filterung beleuchtet, welche essentiell für die durchgeführten Simulationen dieser Arbeit ist. Weiterhin wird auf die Modellierung der ungeschlossenen Terme in den gefilterten Transportgleichungen eingegangen.

2.1 Transportgleichungen reaktiver Strömungen im Regime niedriger Mach-Zahlen

Ziel dieser Arbeit ist die Diskretisierung der Transportgleichungen reaktiver Strömungen im Bereich niedriger Mach-Zahlen, welche definiert sind durch:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0, \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p_d}{\partial x_i} + \rho g_i, \quad (2.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_s) = -\frac{\partial \dot{j}_{i,s}}{\partial x_i} + \dot{s}_s, \quad (2.1c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{q}_{\text{rad}}. \quad (2.1d)$$

Dieses Gleichungssystem lässt sich aus den Transportgleichungen reaktiver Strömungen in kompressibler Formulierung durch eine asymptotische Untersuchung im Regime kleiner Mach-Zahlen identifizieren, was im Detail in Anhang A dargestellt ist. Es gilt das System nach den Geschwindigkeitskomponenten u_i , dem dynamischen Druckanteil p_d , der Enthalpie h und den $N_s - 1$ Massenbrüchen Y_s zu lösen. Die letzte betrachtete Spezies wird typischerweise über das Gesetz von Dalton bestimmt

$$\sum_{s=1}^{N_s} Y_s = 1. \quad (2.2)$$

Der räumlich veränderliche hydrodynamische Druckanteil p_d geht zusammen mit dem räumlich konstanten thermodynamischen Druckanteil p_0 im Grenzfall geringer Mach-Zahlen aus dem Gesamtdruck p hervor. Durch die Volumenkraft g_i in Gleichung (2.1b) wird der Einfluss der Gravitationskraft auf das Fluid berücksichtigt. Die chemische Produktionsdichte \dot{s}_s bilanziert die Bildung und den Abbau einer Spezies s infolge von chemischer Reaktion. Energieverluste durch Strahlungswärme lassen sich über den Quellterm \dot{q}_{rad} modellieren. Der diffusive Transport des Impulses, der Energie

und der chemischen Spezies wird durch die Terme τ_{ij} , q_i und $j_{i,s}$ modelliert, worauf im folgenden Abschnitt im Detail eingegangen wird. Es sei anzumerken, dass zur Darstellung der Erhaltungsgleichungen (2.1) die Indexnotation für Tensoren verwendet wird [59]. Hierbei wird eine Summation über die wiederholt auftretenden Indices i und j impliziert, durch welche die drei Raumrichtungen gekennzeichnet sind. In dieser Arbeit wird stets die Indexnotation für lateinische Indices vorausgesetzt, wenn diese eine Raumrichtung kennzeichnen. Für eine Summation über griechische Indices wird dahingegen explizit das Summationszeichen eingesetzt.

2.1.1 Thermische und kalorische Zustandsgleichungen

Das reaktive Fluid wird als thermisch perfektes Gas behandelt. Damit lässt sich die Temperatur T und die Dichte ρ über das ideale Gasgesetz in Relation zum thermodynamischen Druckanteil p_0 bringen:

$$p_0 = R_u \frac{\rho T}{M} \quad \text{mit} \quad M = \left(\sum_{s=1}^{N_s} \frac{Y_s}{M_s} \right)^{-1}, \quad (2.3)$$

mit dem Molekulargewicht M des Gasgemisches sowie der allgemeinen Gaskonstante R_u . Die spezifische Enthalpie des Gemisches h wird für ideale Gase über die Mischungsregel aus den spezifischen Enthalpien h_s der jeweiligen Reinstoffe bestimmt:

$$h = \sum_{s=1}^{N_s} h_s Y_s. \quad (2.4)$$

Durch die Annahme eines perfekten Gases kann die Enthalpie h_s als eine Funktion der Temperatur und unabhängig vom Druck berechnet werden. Sie setzt sich aus der konstanten Standardbildungsenthalpie $h_{f_0,s}$ und einem temperaturabhängigen Term zusammen, welcher als sensible Enthalpie bezeichnet wird. Die Standardbildungsenthalpie wird für einen Referenzzustand bei $T_{f_0} = 298,15\text{K}$ und $p_{f_0} = 1\text{bar}$ bestimmt [242]

$$h_s = h_{f_0,s} + \int_{T_{f_0}}^T c_{p,s}(\hat{T}) d\hat{T}. \quad (2.5)$$

Eine effiziente Möglichkeit zur Berechnung der spezifischen Enthalpie stellen die NASA Polynome von Gordon und McBride [92] dar

$$\frac{h_{\text{mol},s}(T)}{R_u} = T \left(a_{1,s} + T \left(\frac{a_{2,s}}{2} + T \left(\frac{a_{3,s}}{3} + T \left(\frac{a_{4,s}}{4} + \frac{a_{5,s}}{5} T \right) \right) \right) \right) + a_{6,s}. \quad (2.6)$$

Hiermit lässt sich die Enthalpie über die Koeffizienten $a_{i,s}$ effizient in Abhängigkeit der Temperatur berechnen. Die molaren Größen lassen sich über das Molekulargewicht M_s einer Spezies s in spezifische Größen umrechnen. Durch die Anwendung eines Newton-Raphson-Verfahrens auf Gleichung (2.6) ist es möglich, die Temperatur T in Abhängigkeit der Enthalpie iterativ zu bestimmen.

2.1.2 Modellierung der diffusiven Flüsse

Der Schubspannungstensor τ_{ij} beschreibt den diffusiven Impulstransport infolge von Reibungseffekten. Für Newtonsche Fluide kann er über das Stokesche Reibungsgesetz als eine Funktion der lokalen Deformationsrate S_{ij} eines Fluidpartikels sowie der dynamischen Viskosität des Fluids μ modelliert werden [198, 247]

$$\tau_{ij} = \mu \left(2S_{ij} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad \text{mit} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.7)$$

Hierbei stellt δ_{ij} die Kronecker-Delta Funktion dar. Der diffusive Wärmefluss q_i resultiert einerseits durch diffusive Massenflüsse, sowie durch Fouriersche Wärmeleitung infolge von Temperaturänderungen

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{s=1}^{N_s} h_s j_{i,s}, \quad (2.8)$$

wobei λ die Wärmeleitfähigkeit des Gemisches darstellt. Der Temperaturgradient lässt sich über das totale Differential in Abhängigkeit der Enthalpie h und der Spezies-Massenbrüche Y_s ausdrücken

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{1}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} - \sum_{s=1}^{N_s} \frac{h_s}{c_p} \frac{\partial Y_s}{\partial x_i}. \quad (2.9)$$

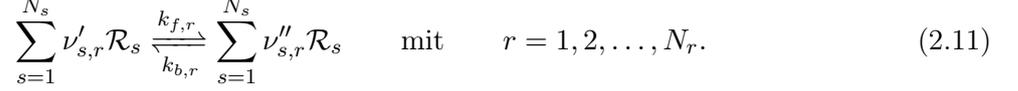
Für Gemische, bei denen die Lewis-Zahl $Le = Sc/Pr$ den Wert eins annimmt, gleichen sich die diffusiven Massenflüsse in Gleichung (2.8) und Gleichung (2.9) aus, sodass der Wärmestrom lediglich vom Temperatur- beziehungsweise Enthalpiegradienten abhängig ist. Der diffusive Fluss $j_{i,s}$ einer chemischen Komponente s wird berechnet durch

$$j_{i,s} = -\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i} + \rho Y_s \sum_{t=1}^{N_s} D_t \frac{\partial Y_t}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

Hierbei wird der Einfluss von Druck-, Thermo- und Massenkraftdiffusion vernachlässigt [86]. Der zweite Term in Gleichung (2.10) stellt eine Korrektur nach Coffee und Heimerl [42] dar, durch welche die Erhaltung der diffusiven Massenflüsse infolge variierender Spezies-Diffusionskoeffizienten D_s gewährleistet wird. Auch dieser Term ist für den Fall $Le = 1$ vernachlässigbar und wird für die Testfälle in dieser Arbeit nicht berücksichtigt. Die Modellierung des diffusiven Transports erfordert die Berechnung der dynamischen Viskosität μ , der thermischen Wärmeleitfähigkeit λ sowie der Diffusivität D_s einer Spezies s . Die Werte von μ , λ , c_p und D_s des Gaskemisches lassen sich als gewichtete Mittelwerte aus den jeweiligen Stoffdaten der reinen Gaskomponenten und den jeweiligen Spezies-Molenbrüchen $X_s = (Y_s/M_s)/(\sum_{t=1}^{N_s} Y_t/M_t)$ bestimmen. Für eine ausführliche Beschreibung zur implementierten Berechnung dieser Größen in **ThetaCOM** wird auf die Arbeit von Di Domenico [52] verwiesen.

2.1.3 Quellterme

Für die Modellierung des Verbrennungsprozesses wird in dieser Arbeit der Ansatz der Finite-Raten-Chemie (FRC) verwendet. Die Umwandlung von Reaktanten in Produkte wird hierbei durch eine Vielzahl von Elementarreaktionen gesteuert, deren Verbund als Reaktionsmechanismus bezeichnet wird [86]. Der Umsatz aller beteiligten chemischen Spezies \mathcal{R}_s infolge einer reversiblen Reaktion r lässt sich durch folgende verallgemeinerte Reaktionsgleichung ausdrücken



Dabei bezeichnet N_s die Anzahl der berücksichtigten chemischen Spezies und N_r die Zahl aller Elementarreaktionen im Reaktionsmechanismus. Die Größen $k_{f,r}$ und $k_{b,r}$ stellen die Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion dar. Die stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktanten und Produkte sind entsprechend mit $\nu'_{s,r}$ und $\nu''_{s,r}$ gekennzeichnet. Über das Massenwirkungsgesetz lassen sich die Umsatzraten der Hin- und Rückrichtung einer Elementarreaktion r proportional zu den Spezies-Konzentration $c_s = \rho Y_s / M_s$ bestimmen [261]. Eine Bilanz dieser Umsatzraten über alle in Betracht gezogenen Reaktionen führt schließlich auf die momentane Umsatzrate \dot{s}_s einer Spezies s , welche als chemischer Quellterm in der Erhaltungsgleichung (2.1c) agiert [86]

$$\dot{s}_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} (\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[k_{f,r} \prod_{t=1}^{N_s+1} c_t^{O'_{t,r}} - k_{b,r} \prod_{t=1}^{N_s+1} c_t^{O''_{t,r}} \right]. \quad (2.12)$$

Bestimmte Reaktionstypen setzen inerte Stoßpartner voraus, deren Stoßenergie zur Überwindung der Aktivierungsenergie der Reaktion aufgewendet wird. Dies ist insbesondere für eine akkurate Modellierung druckabhängiger Reaktionen notwendig [20]. Die inerten Stoßpartner werden durch die zusätzliche fiktive Komponente $N_s + 1$ in Gleichung (2.12) berücksichtigt, für deren Konzentrationsberechnung auf die Literatur [20, 52, 75, 86] verwiesen wird. Die Exponenten $O'_{t,r}$ und $O''_{t,r}$ stellen die Reaktionsordnung der Komponente t in der Reaktion r dar. Für Elementarreaktionen sind diese identisch mit den stöchiometrischen Koeffizienten $\nu'_{s,r}$ und $\nu''_{s,r}$ [20]. Zur Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten k_r einer Elementarreaktion r wird der erweiterte Arrhenius-Ansatz eingesetzt,

$$k_r(T) = A_r T^{n_r} \exp\left(-\frac{E_r}{R_u T}\right), \quad (2.13)$$

mit dem Stoßfaktor A_r , dem Temperaturexponenten n_r und der Aktivierungsenergie E_r . Typischerweise werden die Geschwindigkeitskoeffizienten der Rückreaktion über das Massenwirkungsgesetz durch die Gleichgewichtskonstante $K_{r,c}$ bestimmt

$$K_{r,c} = \frac{k_{r,f}}{k_{r,b}} = \left(\frac{p_{th}}{R_u T}\right)^{\Delta O_r} \exp\left(\frac{\Delta G^0}{R_u T}\right), \quad (2.14)$$

mit $\Delta O_r = \sum_{s=1}^{N_s} O'_{s,r} - O''_{s,r}$ und der Gibbs-Energie ΔG^0 . Letztere lässt sich über einen NASA Polynomansatz nach Gleichung (2.6) berechnen. In **ThetaCOM** wird die Berechnung der Gleichgewichtsbedingung vermieden, indem die Geschwindigkeitskoeffizienten der Rückreaktionen bereits vor einer Simulation berechnet und durch eine Methode der kleinsten Quadrate in Arrheniusform gebracht wird. Für eine detaillierte Beschreibung dieses Ansatzes sei auf die Arbeiten von Blacha [20] und DiDomenico [52] verwiesen.

Der Transfer von Strahlungswärme wird über den Quellterm \dot{q}_{rad} in Gleichung (2.1d) abgebildet. In dieser Arbeit wird die Annahme eines optisch dünnen Gases getroffen, sodass lediglich ein Energietransfer zwischen dem reaktiven Fluid und der kalten Umgebung stattfindet [8]. Dadurch agiert \dot{q}_{rad} lediglich als Wärmesenke und kann berechnet werden durch [8, 154, 163, 235]

$$\dot{q}_{\text{rad}} = -4 \sigma_S T^4 \epsilon(T). \quad (2.15)$$

Hierbei stellt $\sigma_S = 5,670 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ die Stefan-Boltzmann-Konstante dar. Für die Berechnung des Plankschen Strahlungskoeffizienten $\epsilon(T)$ wird vernachlässigt, dass sich die Absorptionsbanden der Gasspezies teilweise überdecken [20]

$$\epsilon(T) = \rho \sum_{s=1}^{N_s} Y_s \epsilon_s(T). \quad (2.16)$$

Die Produkte H_2O und CO_2 gelten als dominante Wärmestrahler und werden neben Ruß typischerweise für die Berechnung von $\epsilon(T)$ herangezogen [20, 61]. In dieser Arbeit wird der Strahlungsquellterm für die Simulation von Wasserstoffflammen verwendet, weshalb lediglich H_2O als Wärmestrahler berücksichtigt wird. Für die Berechnung des Emissionskoeffizienten wird die folgende Formulierung aus der Arbeit von Mauss [154] verwendet

$$\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}(T) = T \left(\frac{22,6 \frac{1}{\text{m}} R_u}{p_{\text{th}} M_{\text{H}_2\text{O}}} \right) \exp(-0,001546 T). \quad (2.17)$$

Wie in der Arbeit von Eberle [61] gezeigt wird, weist diese Formulierung für $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}(T)$ einen ähnlichen Verlauf zu den Koeffizienten aus dem RADCAL-Strahlungsmodell von Grosshandler [99] auf, welches ebenfalls häufig in Verbrennungssimulationen eingesetzt wird [8, 155, 247].

2.2 Turbulenzmodellierung

Eine direkte, zeitgenaue Simulation der Transportgleichungen (2.1), welche auch als Direkte Numerische Simulation (DNS) bezeichnet wird, ist auch auf modernen Höchstleistungsrechnern nur für Strömungsprobleme mit moderaten Reynoldszahlen möglich. Dies ist darin begründet, dass die Anzahl der notwendigen Gitterpunkte zur Auflösung der kleinsten Skalen in der Strömung mit $\mathcal{O}(\text{Re}^{9/4})$ und die daraus folgende Rechenzeit mit $\mathcal{O}(\text{Re}^3)$ skaliert [22, 81, 86, 198, 212]. Der RANS-Ansatz ermöglicht die Überwindung dieses Skalenproblems durch das Lösen nach zeitlichen gemittelten

Feldgrößen. Dies lässt sich im Vergleich zu DNS auf deutlich größeren Rechengittern und unter Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften der Strömungsgeometrie realisieren, was den Rechenaufwand stark reduziert [81]. Durch die Mittelung resultieren im Gleichungssystem jedoch ungeschlossene höhere Momente der Strömungsgrößen, die in Abhängigkeit der Mittelwerte modelliert werden müssen [22, 86, 205]. Dies erfolgt häufig durch den sogenannten linearen Boussinesq-Ansatz [26], bei dem der Einfluss des gesamten turbulenten Spektrums auf die gemittelten Feldgrößen in Form einer turbulenten Wirbelviskosität μ_t abgebildet wird [81]. Aufgrund der großen Skalendisparität und den dadurch verbundenen Unterschieden der turbulenten Strukturen müssen RANS Modelle jedoch oft an das entsprechende Strömungsproblem angepasst werden, was ein hohes Maß an Erfahrung zur Minimierung von Modellunsicherheiten benötigt [247, 81].

Grobstruktursimulationen, welche im Englischen als LES bezeichnet werden, stellen einen Mittelweg zwischen der aufwändigen, allgemeingültigen DNS und der effizienten, modellabhängigen RANS-Methode dar. Deren Grundlage ist eine räumliche Tiefenpassfilterung des Strömungsfeldes, was sich als Faltung einer Feldgröße $\phi(t; \mathbf{x})$ mit einer Filterfunktion G darstellen lässt

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \iiint G(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \Delta(\mathbf{x})) \phi(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (2.18)$$

Hierbei entspricht Δ einer lokalen Filterweite. Analog zur Reynolds-Zerlegung lässt sich diese Filteroperation auf das Gleichungssystem (2.1) anwenden, was eine Separation des Strömungsfeldes in große und kleine Skalen bewirkt. Diese Separation ist schematisch in Abbildung 2.1 anhand eines isotrop turbulenten Geschwindigkeitsfeldes $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ gezeigt.¹ Der untere Teil der Abbildung zeigt für die beiden Geschwindigkeitsfelder schematische Spektren der turbulenten kinetischen Energie $E(\kappa)$ [81, 198] über der Wellenzahl κ , welche ein inverses Maß für die turbulenten Längenskalen darstellt. Die Spektren lassen sich in den Energiebereich, den Inertialbereich und den Dissipationsbereich unterteilen. Der Energiebereich enthält den maßgeblichen Anteil der turbulenten kinetischen Energie und ist großen, anisotropen Wirbeln der Strömung zuzuordnen, welche es in LES direkt aufzulösen gilt. Dem Inertialbereich wird der chaotische Wirbelzerfall mit einer konstanten Dissipationsrate zugeordnet, was sich durch den linearen Abfall von $E(\kappa)$ mit der Steigung von $-5/3$ in einer doppelt-logarithmischen Darstellung äußert. Im Dissipationsbereich dominieren viskose Kräfte gegenüber dem Impuls der kleinsten Skalen, was in der Dissipation turbulenter kinetischer Energie resultiert [31, 198]. Aufgrund der Filterung fällt das Spektrum des Strömungsfeldes $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ in Abbildung 2.1 im Bereich der Grenzwellenzahl $\kappa_c = \pi/\Delta$ rapide ab. Ähnlich zu diesem Beispiel sollte in LES die Filterweite Δ so gewählt werden, dass κ_c innerhalb des Inertialbereichs liegt [81]. Der Einfluss der unaufgelösten Skalen unterhalb dieser Grenzwellenzahl auf die Hauptströmung muss dann durch sogenannte Feinstrukturmodelle abgebildet werden, welche im Englischen als *Subgrid-Scale* (SGS) Modelle bezeichnet werden. Diese beruhen meist, analog zur RANS-Methode, auf der Einführung einer Wirbelviskosität μ_t . Da sich die unaufgelösten Skalen jedoch insbesondere im Dis-

¹Die Felddaten wurden mit dem Turbulenzgenerator von Saad et al. [206, 209, 210] auf einem Rechengitter mit 362^3 Knotenpunkten und auf Basis turbulenter Spektren von Comte und Bellot [44] erzeugt.

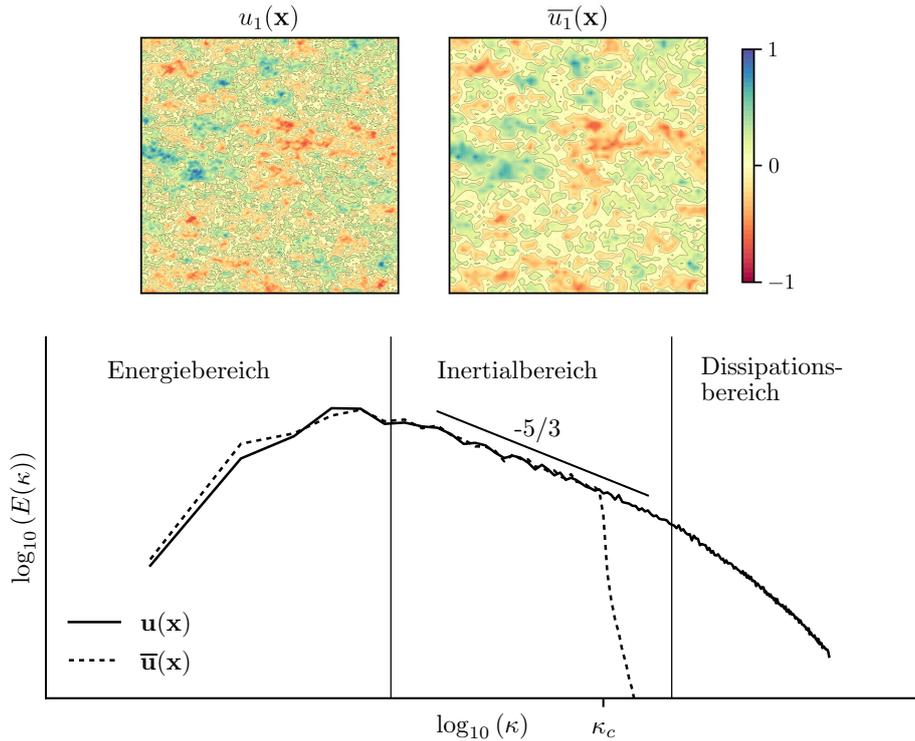


Abbildung 2.1: Ein isotrop turbulentes Geschwindigkeitsfeld vor und nach der räumlichen Filterung (oben), sowie ein schematisches Energiespektrum $E(\kappa)$ der jeweiligen Geschwindigkeitsfelder (unten).

sipationsbereich isotrop verhalten, ist der Modellierungsfehler bedeutend geringer als beim RANS Ansatz [81].

Die direkte Auflösung der großen Skalen stellt hohe Anforderungen an das zugrunde liegende numerische Diskretisierungsverfahren bei einer Feinstruktursimulation. Dies hat zur Folge, dass konventionelle Diskretisierungsmethoden, die ursprünglich für RANS-Simulationen entwickelt wurden, im Rahmen von LES nur unter sehr hohem Rechenaufwand eingesetzt werden können, da ihre inhärent hohen dissipativen Eigenschaften durch eine sehr feine Gitterauflösung kompensiert werden müssen. Aus diesem Grund werden typischerweise Methoden höherer Ordnung verwendet, die eine deutlich geringere numerische Dissipation aufweisen und dementsprechend die Anzahl der Freiheitsgrade und den damit verbundenen Rechenaufwand reduzieren können [69, 255]. In den folgenden Abschnitten werden die gefilterten Transportgleichungen im Detail erläutert. Zudem wird auf die SGS Modelle eingegangen, welche für die Simulationen in dieser Arbeit Verwendung finden.

2.2.1 Die gefilterten Transportgleichungen

Für die Filterung von reaktiven Strömungen mit variabler Dichte und starken Temperaturänderungen ist es hilfreich einen Teil der Feldgrößen mit einer dichtegewichteten Filterung zu behandeln [86]. Diese wird auch als Favre-Zerlegung bezeichnet, bei welcher eine Feldgröße $\phi = \tilde{\phi} + \phi''$ in den aufge-

lösten, gefilterten Anteil $\tilde{\phi}$ und den Feinstrukturanteil ϕ'' aufgeteilt wird. Das Favre-Mittel $\bar{\phi}$ steht hierbei folgendermaßen zur gefilterten Feldgröße $\tilde{\phi}$ in Relation [72]

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}. \quad (2.19)$$

Für die Filterung der Transportgleichungen wird der Filteroperator aus Gleichung (2.18) auf das Gleichungssystem (2.1) angewandt und die Definition des Favre-Mittels $\tilde{\phi}\bar{\rho} = \overline{\rho\phi}$ ausgenutzt

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0, \quad (2.20a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)] = \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}_d}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i, \quad (2.20b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Y}_s - \tilde{u}_i \tilde{Y}_s)] = -\frac{\partial \bar{j}_{i,s}}{\partial x_i} + \bar{s}_s, \quad (2.20c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{h} - \tilde{u}_i \tilde{h})] = -\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{p}_0}{\partial t} + \bar{q}_{\text{rad}}. \quad (2.20d)$$

Die gefilterten diffusiven Flüsse basieren hierbei auf Favre-gemittelten Größen. Des Weiteren wird für deren Berechnung der Einfluss turbulenter Fluktuationen auf die Größen μ , λ und D_s sowie Feinskalenanteile der Gradienten von u_i , Y_s und h nicht berücksichtigt [86]

$$\bar{\tau}_{ij} \approx 2\mu \tilde{S}_{ij} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \quad \text{mit} \quad \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.21a)$$

$$\bar{j}_{i,s} \approx -\bar{\rho} D_s \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{Y}_s \sum_{t=1}^{N_s} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_t}{\partial x_i}, \quad (2.21b)$$

$$\bar{q}_i \approx -\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} - \bar{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} D_s \tilde{h}_s \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_k}. \quad (2.21c)$$

2.2.2 Modellierung der Feinstrukturen

Die gefilterten Impulsgleichungen enthalten die Feinstrukturspannungen $\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$, welche durch die Filterung des konvektiven Operators resultieren. Diese Terme gilt es so zu modellieren, dass die Dissipation turbulenter kinetischer Energie durch die nicht aufgelösten Skalen der Strömung und daraus resultierende Rückkopplungseffekte auf die aufgelösten Skalen korrekt abgebildet werden [81]. Häufig wird dies durch eine Unterteilung der Feinstrukturspannungen in einen anisotropen und einen isotropen Anteil realisiert. Der anisotrope Anteil kann dann über eine Boussinesq-Approximation mit einem linearen Wirbelviskositätsmodell modelliert werden, wohingegen der isotrope Anteil mit der turbulenten kinetischen Energie der Feinstrukturen k_{SGS} in Relation gesetzt wird

$$\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \approx \underbrace{-2\mu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right)}_{\text{anisotroper Anteil}} + \underbrace{\delta_{ij} \frac{2}{3} \bar{\rho} k_{\text{SGS}}}_{\text{isotroper Anteil}}. \quad (2.22)$$

Hierbei stellt μ_t die turbulente Wirbelviskosität dar, deren Modellierung im folgenden Abschnitt im Detail beleuchtet wird. Der isotrope Feinstrukturanteil wird dem gefilterten dynamischen Druck \bar{p}_d zugeordnet [198]. Daraus resultiert die Definition eines dynamischen Pseudo-Drucks $\bar{p}_d^* = \bar{p}_d + \frac{2}{3}\bar{\rho}k_{SGS}$, dessen Gradient in den gefilterten Impulsgleichungen (2.20b) als Quellterm agiert [61]. Im folgenden Verlauf der Arbeit soll jedoch zur besseren Übersicht auf die Kennzeichnung des Pseudo-Drucks durch den hochgestellten Stern verzichtet werden. Die nicht aufgelösten skalaren Flüsse der Komponenten-Massenbrüche $\bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_s} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_s})$ sowie der Enthalpie $\bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \widetilde{u_i} \widetilde{h})$ lassen sich in Abhängigkeit der aufgelösten Gradienten modellieren, was auch als Gradienten-Diffusionsansatz bezeichnet wird

$$\bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_s} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_s}) \approx -\bar{\rho} D_{s,t} \frac{\partial \widetilde{Y_s}}{\partial x_i}, \quad (2.23a)$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \widetilde{u_i} \widetilde{h}) \approx -\left(\frac{\lambda}{c_p}\right)_t \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_i}. \quad (2.23b)$$

Unter Einführung der Turbulenz-Prandtl-Zahl Pr_t und der Turbulenz-Schmidt-Zahl Sc_t können die turbulenzbedingte Temperaturleitfähigkeit $(\lambda/c_p)_t = \mu_t/Pr_t$ sowie die turbulenzbedingten Diffusionskoeffizienten $\bar{\rho} D_{s,t} = \mu_t/Sc_{s,t}$ in Abhängigkeit der Wirbelviskosität μ_t berechnet werden. Für beide Kennzahlen wird in dieser Arbeit jeweils der Wert 0,7 verwendet.

Die ungeschlossenen Terme $\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j})$, $\bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_s} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_s})$ und $\bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \widetilde{u_i} \widetilde{h})$ lassen sich damit in Relation zur Wirbelviskosität μ_t setzen, für deren Berechnung *Wall Adapting Local Eddy Viscosity* (WALE) Modell von Ducros und Nicoud [56] eingesetzt wird. Dabei handelt es sich um eine algebraisches Feinstrukturmodell, das auf dem weit verbreiteten Smagorinsky-Modell beruht [228]. Die Wirbelviskosität wird hierbei berechnet durch

$$\mu_t = \bar{\rho} (C_W \Delta)^2 \frac{(\widetilde{G}_{ij} \widetilde{G}_{ij})^{3/2}}{(\widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij})^{5/2} + (\widetilde{G}_{ij} \widetilde{G}_{ij})^{5/4}}, \quad (2.24)$$

mit $\widetilde{G}_{ij} = (\widetilde{g}_{ik} \widetilde{g}_{kj} + \widetilde{g}_{jk} \widetilde{g}_{ki})/2 - \delta_{ij} \widetilde{g}_{kk}/3$ und $\widetilde{g}_{ij} = \partial \widetilde{u}_i / \partial x_j$. Gegenüber dem Smagorinsky-Modell verfügt das WALE Modell in Wandnähe ein korrektes Verhalten zwischen der Wirbelviskosität $\mu_t \propto (y^+)^3$ und dem dimensionslosem Abstand zu Wand y^+ [81]. Bei C_W handelt es sich um eine Modellkonstante, welche analog zur ursprünglichen Arbeit von Ducros und Nicoud zu einem Wert von $C_W = 0,5$ gesetzt wird [56]. Die Filterweite $\Delta = |\Omega_\alpha|^{1/3}$ wird über das Volumen der Gitterelemente $|\Omega_\alpha|$ berechnet, mit welchen die Diskretisierung der Transportgleichungen durchgeführt wird.

2.2.3 Filterung der Quellterme

Zur Filterung der chemischen Produktionsdichte \dot{s}_s und des Strahlungsquellterms \dot{q}_{rad} wird in dieser Arbeit das *Assumed Probability Density Function* (APDF) Verfahren verwendet [85, 89]. Dabei werden statistische Verbund-Wahrscheinlichkeiten der Temperatur und der Spezies-Massenbrüche an

genommen, aus denen die gefilterten Quellterme als Erwartungswerte hervorgehen. Eine detaillierte Beschreibung des APDF-Ansatzes ist in der Arbeit von Gerlinger [86] zu finden. Für die Temperatur wird eine Gaußsche *Probability Density Function* (PDF) $P_T(\hat{T})$ und für die Spezies-Massenbrüche eine multivariate β -PDF $P_Y(\hat{\mathbf{Y}})$ [85, 89] verwendet. Es wird eine statistische Unabhängigkeit zwischen Temperatur und Gaszusammensetzung angenommen und die Dichte wird als konstant auf ihrem gefilterten Wert gehalten [85]. Damit lassen sich die gefilterten Quellterme ausdrücken durch

$$\bar{s}_s = M_s \sum_{r=1}^{N_r} (\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[\overline{k_{f,r}} \prod_{t=1}^{N_s+1} c_t^{O'_{t,r}} - \overline{k_{b,r}} \prod_{t=1}^{N_s+1} c_t^{O''_{t,r}} \right], \quad (2.25a)$$

$$\bar{q}_{\text{rad}} = -4\sigma_S \bar{\rho} \tilde{T} \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{Y}_s \overline{\epsilon_s(T) T^3}, \quad (2.25b)$$

wobei die gefilterten Terme definiert sind durch:

$$\overline{\prod_{t=1}^{N_s+1} c_t^{O'_{t,r}}} = \int_{\hat{\mathbf{Y}}} \left(\prod_{t=1}^{N_s+1} c_t^{O'_{t,r}} \right) P_Y(\hat{\mathbf{Y}}) d\hat{\mathbf{Y}}, \quad (2.26a)$$

$$\overline{k_r} = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} k_r(\hat{T}) P_T(\hat{T}) d\hat{T}, \quad (2.26b)$$

$$\overline{\epsilon_s(T) T^3} = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \hat{T}^3 \epsilon_s(\hat{T}) P_T(\hat{T}) d\hat{T}. \quad (2.26c)$$

Die Wahl der β -PDF bietet den Vorteil, dass die Struktur von $P_Y(\hat{\mathbf{Y}})$ vollständig durch die gefilterten Spezies-Massenbrüche \tilde{Y}_s und durch die Summe der Varianzen der Spezies-Massenbrüche $\sigma_Y = \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{Y}_s'^2$ definiert ist. Letztere wird durch das Lösen einer zusätzlichen Transportgleichung bestimmt, die sich aus den Spezies-Transportgleichungen ableiten lässt [85, 89]. Die gefilterten Produkte der Spezies-Konzentrationen (2.26a) können dann analytisch zur Laufzeit der Simulation berechnet werden. Im Gegensatz dazu müssen die Terme (2.26b) und (2.26c) numerisch integriert werden. Zur Rechenzeiterparnis erfolgt dies im Vorfeld zur Simulation, wobei die entsprechenden Ergebnisse in Abhängigkeit der gefilterten Temperatur \tilde{T} und der Intensität der Temperaturfluktuation $I_T = \sigma_T/\tilde{T}$ tabelliert werden. Für die Bestimmung der Temperaturvarianz $\sigma_T = \tilde{T}'^2$ wird analog zu σ_Y eine zusätzliche Transportgleichung gelöst. Für weitere Details bezüglich der Implementierung des APDF-Ansatzes in **ThetaCOM** sei auf die Arbeiten von DiDomenico [52] und Blacha [20] verwiesen.

3 Methodik zur Finite-Volumen-Diskretisierung hoher Ordnung

In diesem Kapitel werden zunächst die grundlegenden Definitionen für die Diskretisierung eines Rechengebietes erläutert und die Grundlagen der k -exakten Rekonstruktion vorgestellt. Anschließend wird im Detail die Herleitung des k -exakten Multi-Korrektur-Verfahrens und die Approximation der numerischen Flüsse beleuchtet. Danach wird gezeigt, wie sich das Diskretisierungsverfahren mit der Projektionsmethode für die zeitgenaue Lösung der Erhaltungsgleichungen reaktiver Strömungen bei niedrigen Mach-Zahlen vereinen lässt. Abschließend wird ein Ansatz vorgestellt, mit dem sich die numerische Dissipation des zentralen Diskretisierungsverfahrens zu Approximation der konvektiven Flüsse adaptiv steuern lässt.

3.1 Die Diskretisierung des Rechengebiets

Für die folgenden Herleitungen in diesem Kapitel gilt es zunächst, die grundlegenden Entitäten zur Repräsentation des Rechengebietes $\Omega \in \mathbb{R}^3$ zu definieren. Dieses Rechengebiet sei durch lineare Elemente diskretisiert, deren Gesamtheit im Folgenden als Primärgitter $\mathcal{P}(\Omega)$ bezeichnet wird. Insbesondere seien die Primärgitter-Elemente durch Tetraeder, Prismen, Pyramiden oder Hexaeder gegeben. Die Oberfläche von $\mathcal{P}(\Omega)$ setzt sich dementsprechend aus Dreiecken und Vierecken zusammen. Das gesamte Primärgitter umfasst N_K Knotenpunkte, die sich an den Positionen \mathbf{x}_α befinden. Für die median-duale Repräsentation $\mathcal{D}(\Omega)$ wird um jeden dieser Knotenpunkte \mathbf{x}_α ein polyedrisches Element Ω_α konstruiert. Dessen Oberflächendreiecke werden durch die Mittelpunkte der an \mathbf{x}_α angrenzenden Kanten, Flächen und Elemente definiert [22]. Zwei Elemente Ω_α und Ω_β werden als benachbart bezeichnet, wenn sie eine gemeinsame Oberfläche $A_{\alpha\beta}$ teilen. Alle Elemente die an eine Zelle Ω_α angrenzen werden als dessen erste Nachbarschaft $\{\beta_\alpha^{(1)}\}$ bezeichnet. Die n -te Nachbarschaft von Ω_α lässt sich rekursiv durch die entsprechenden Nachbarschaften ihrer anliegenden Elemente definieren:

$$\{\beta_\alpha^{(n)}\} := \bigcup_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(n-1)}\}} \{\beta_\beta^{(1)}\}. \quad (3.1)$$

In Abbildung 3.1 ist eine zweidimensionales Primärgitter und die entsprechende median-duale Repräsentation sowie die erste und zweite Nachbarschaft eines Elementes Ω_α dargestellt.

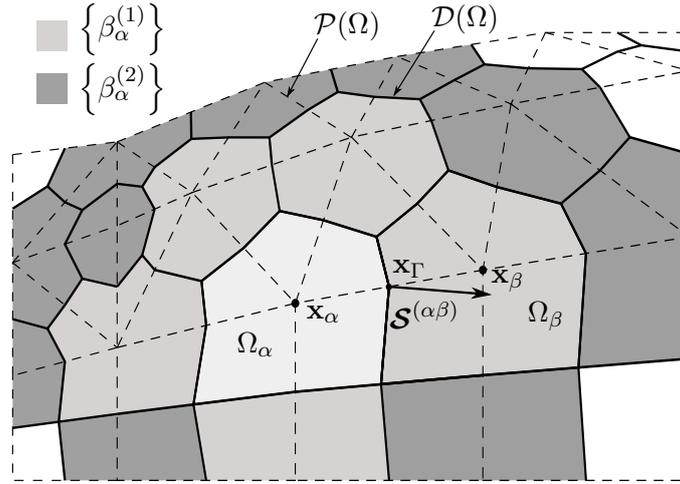


Abbildung 3.1: Ein unstrukturiertes Primärgitter $\mathcal{P}(\Omega)$ und die entsprechende median-duale Repräsentation $\mathcal{D}(\Omega)$.

3.1.1 Geometrische Momente

Die geometrischen Eigenschaften der median-dualen Elemente lassen sich in einer allgemeinen Form durch ihre geometrische Volumenmomente darstellen. Hierbei handelt es sich um Tensoren, welche die Größe und Form der Elemente in einer effizienten Form abbilden und welche essentiell für das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren hoher Ordnung sind. In der allgemeinsten Form kann das geometrische Volumenmoment mit dem Rang R eines polyedrischen Elements Ω_α definiert werden durch

$$\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \alpha} = \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \iiint_{\Omega_\alpha} (x_{i_1} - x_{i_1, \alpha}) (x_{i_2} - x_{i_2, \alpha}) \dots (x_{i_R} - x_{i_R, \alpha}) dV. \quad (3.2)$$

Das Volumenmoment \mathcal{M}_α mit Rang null ergibt sich aufgrund der Entdimensionierung mit dem Betrag des Elementvolumens $|\Omega_\alpha|$ zu einem Wert von eins. Das erste Volumenmoment $\mathcal{M}_{i, \alpha}$ drückt die Distanz zwischen dem Knotenpunkt \mathbf{x}_α und dem geometrischen Mittelpunkt des Kontrollvolumens Ω_α aus. Das Volumenmoment $\mathcal{M}_{ij, \alpha}$ stellt einen symmetrischen Tensor zweiten Ranges dar, dessen Eigenwerte das Trägheitsmoment von Ω_α gegenüber dem Punkt \mathbf{x}_α beschreiben und dessen Einträge in der Regel ungleich null sind [17]. Neben den zentralen Volumenmomenten $\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \alpha}$ wird in dieser Arbeit eine weitere Momenten-Definition zwischen zwei aneinander angrenzenden Kontrollvolumen Ω_α und Ω_β verwendet. Diese ist definiert durch

$$\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R}^{(\beta, \alpha)} = \frac{1}{|\Omega_\beta|} \iiint_{\Omega_\beta} (x_{i_1} - x_{i_1, \alpha}) (x_{i_2} - x_{i_2, \alpha}) \dots (x_{i_R} - x_{i_R, \alpha}) dV, \quad (3.3)$$

wobei das erste Superskript β das Element Ω_β kennzeichnet, über welches die Volumenintegration durchgeführt wird. Das zweite Superskript α bezeichnet den Knotenpunkt, welcher für die Zentrierung des Moments verwendet wird. Superskripte in Klammern (wie beispielsweise bei $\mathcal{M}_i^{(\beta, \alpha)}$) sollen in dieser Arbeit stets zur Bezeichnung von Größen dienen, die an den Oberflächen der median-dualen Gitterelemente berechnet oder abgespeichert werden. Im Gegensatz dazu werden Größen mit griechi-

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

schen Indices (wie beispielsweise bei $\mathcal{M}_{i,\alpha}$) an Element-Knotenpunkten definiert. Es ist ausreichend nur zentrale Momente $\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_p, \alpha}$ eines jeden Elements Ω_α abzuspeichern, da sich die Integration über Nachbarelemente mit einer binomialen Entwicklung ableiten lässt [33, 181]

$$\mathcal{M}_i^{(\beta, \alpha)} = \mathcal{M}_{i, \beta} + \Delta x_i^{(\alpha \beta)}, \quad (3.4a)$$

$$\mathcal{M}_{ij}^{(\beta, \alpha)} = \mathcal{M}_{ij, \beta} + \Delta x_i^{(\alpha \beta)} \mathcal{M}_{j, \beta} + \Delta x_j^{(\alpha \beta)} \mathcal{M}_{i, \beta} + \Delta x_i^{(\alpha \beta)} \Delta x_j^{(\alpha \beta)}. \quad (3.4b)$$

Hierbei stellt $\Delta \mathbf{x}^{(\alpha \beta)} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha$ den Distanzvektor zwischen den Knotenpunkten \mathbf{x}_α und \mathbf{x}_β dar.

Analog zu den volumetrischen Momenten lassen sich Momente für die Oberflächen $A_{\alpha\beta}$ der polyhedralen Elemente definieren. Das geometrische Flächenmoment einer Fläche $A_{\alpha\beta}$ mit Rang R ist in dieser Arbeit definiert durch

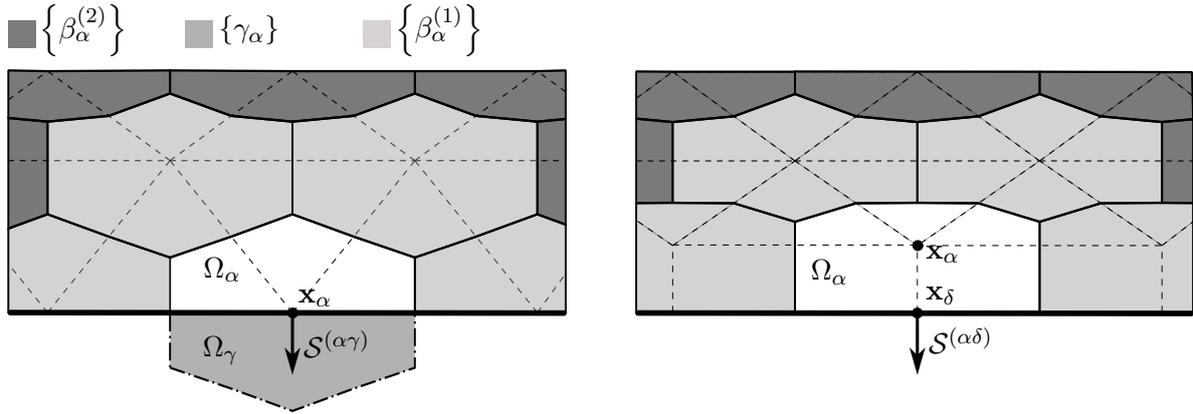
$$\mathcal{S}_{i, j_1 j_2 \dots j_R}^{(\alpha \beta, \Gamma)} = \iint_{A_{\alpha\beta}} n_i (x_{j_1} - x_{j_1, \Gamma}) (x_{j_2} - x_{j_2, \Gamma}) \dots (x_{j_R} - x_{j_R, \Gamma}) dA. \quad (3.5)$$

Das Komma zwischen den Indices i und j_k dient zur Unterscheidung zwischen dem Anteil des Normalenvektors n_i und dem Anteil der Abstandsvektoren $(x_{j_k} - x_{j_k, \Gamma})$. Im Gegensatz zum geometrischen Volumenmoment erfolgt für das Flächenmoment keine Normierung mit der Gesamtfläche $|A_{\alpha\beta}|$. Die Superskripte $(\alpha \beta, \Gamma)$ kennzeichnen die Fläche $A_{\alpha\beta}$, welche die benachbarten Elemente Ω_α und Ω_β trennt und den Punkt $\mathbf{x}_\Gamma = (\mathbf{x}_\alpha + \mathbf{x}_\beta)/2$, um welchen das Flächenmoment zentriert wird. Dieser stellt den Mittelpunkt der Primärgitterkante zwischen den benachbarten Knotenpunkten \mathbf{x}_α und \mathbf{x}_β dar und befindet sich auf der Fläche $A_{\alpha\beta}$. Das nullte Flächenmoment $\mathcal{S}_i^{(\alpha \beta)}$ kennzeichnet die gemeinsame Flächennormale aller Oberflächendreiecke, aus denen sich $A_{\alpha\beta}$ zusammensetzt. Aufgrund der Unabhängigkeit vom Punkt \mathbf{x}_Γ wird für dieses Moment zur Übersichtlichkeit auf das Superskript Γ verzichtet. Eine detaillierte Beschreibung zur Berechnung der geometrischen Momente auf einem median-dualen Gitter ist in Anhang B aufgeführt.

3.1.2 Behandlung von Randelementen

Knotenpunkte auf den Rändern des Primärgitters haben die Eigenschaft, dass sie sich ebenfalls auf den Oberflächen ihrer zugehörigen median-dualen Elemente befinden. Dies kann die Robustheit des Diskretisierungsverfahrens erheblich mindern, insbesondere wenn das Rechengebiet scharfe Kanten oder Wand-Randbedingungen beinhaltet [22]. Eine Möglichkeit zur Stabilisierung stellt eine gesonderte Konstruktion dieser Elemente dar. Die Randknotenpunkte werden dabei zunächst ins Innere des Rechengebiets sowie normal zur Berandung verschoben, bevor die polyhedralen Elemente erzeugt werden. Diese Verschiebung ist im Detail in Abbildung 3.2b dargestellt, in welcher der Knotenpunkt \mathbf{x}_α gegenüber Abbildung 3.2a ins Innere verschoben ist. Es sei darauf hingewiesen, dass diese Verschiebung sowohl die Form der Randelemente Ω_α , als auch deren erste Nachbarschaft $\{\beta_\alpha^{(1)}\}$ beeinflusst. In **ThetaCOM** werden lediglich Knotenpunkte verschoben, die sich auf Einlass-, Auslass oder Wand-Randbedingungen befinden, wohingegen Knotenpunkte an periodischen oder symmetrischen Randbedingungen nicht verschoben werden. Aus diesem Grund erfolgt

eine differenzierte Betrachtung dieser beiden Randtypen, welche im folgenden als verschobene und unverschobene Berandungen bezeichnet werden. Eine unverschobene Berandung umfasst hierbei die imaginären Randelemente Ω_γ , welche sich an den Oberflächen $A_{\alpha\gamma}$ gespiegelt zu ihren Pendants Ω_α auf der Randinnenseite befinden. Alle imaginären Randelemente, die an ein Element Ω_α angrenzen werden in der Menge $\{\gamma_\alpha\}$ zusammengefasst. Für verschobene Berandungen werden hingegen die Randpunkte \mathbf{x}_δ definiert, die sich auf den entsprechenden Oberflächen $A_{\alpha\delta}$ der Randelemente Ω_α befinden. Die Randpunkte \mathbf{x}_δ , welche an ein einzelnes Element Ω_α angrenzen, werden in der Menge $\{\delta_\alpha\}$ zusammengefasst und die Normalenvektoren der angrenzenden Randflächen werden mit $\mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)}$ bezeichnet.



(a) Unverschobene Berandung.

(b) Verschobene Berandung.

Abbildung 3.2: Median-duale Repräsentation der Berandungen eines Rechengebiets. Die gestrichelten Linien kennzeichnen das Primärgitter, wohingegen dünne, durchgezogene Linien die median-duale Form darstellen. Die dicke, durchgezogene Linie stellt die Berandung des Rechengebiets dar und die durch eine Strichpunktlinie gekennzeichnete Fläche zeigt ein imaginäres Randelement Ω_γ .

3.2 Das k -exakte Multi-Korrekturverfahren

Das knotenzentrierte, k -exakte Multi-Korrekturverfahren basiert auf der Finite-Volumen-Methode, welche anhand der folgenden Transportgleichung einer Feldgröße ϕ beleuchtet wird

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \phi) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) = 0. \quad (3.6)$$

Diese Gleichung beschreibt den Transport von ϕ in einem Strömungsfeld mit der Dichte ρ , der Geschwindigkeit \mathbf{u} und der Diffusivität D und soll auf dem diskretisierten Rechengebiet $\mathcal{D}(\Omega)$ gelöst werden. Für das Finite-Volumen-Verfahren ist das volumetrische Mittel $\bar{\phi}_\alpha$ über ein Element Ω_α von essentieller Bedeutung:

$$\bar{\phi}_\alpha = \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \iiint_{\Omega_\alpha} \phi(\mathbf{x}) \, dV. \quad (3.7)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Diese volumetrische Mittelung wird auf die Transportgleichung (3.6) über jedes Dualgitter-Element angewandt, wodurch N_K Gleichungen der Form

$$\frac{\partial \overline{(\rho\phi)}_\alpha}{\partial t} + \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \left[\iint_{A_{\alpha\beta}} (\rho u_i \phi) n_i \, dA - \iint_{A_{\alpha\beta}} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) n_i \, dA \right] = 0 \quad (3.8)$$

resultieren. Der Übersicht wegen sind lediglich die Flüsse über innere Oberflächen dargestellt. Es sei anzumerken, dass die Variablen ρ und ϕ in der zeitlichen Ableitung in Gleichung (3.8) in einem konservativen volumetrischen Mittelwert $\overline{(\rho\phi)}_\alpha$ zusammengefasst sind. Das verwendete Rekonstruktionsverfahren beruht jedoch auf primitiven Variablen, weshalb es $\overline{(\rho\phi)}_\alpha$ in die Anteile $\overline{\phi}_\alpha$ und $\overline{\rho}_\alpha$ aufzuteilen gilt. Danach müssen die Oberflächenintegrale in Gleichung (3.8), welche als Flüsse bezeichnet werden, in Abhängigkeit der primitiven volumetrischen Mittelwerte $\overline{\phi}_\alpha$, $\overline{\rho}_\alpha$ und $\overline{u}_{i,\alpha}$ aller umliegenden Elemente approximiert werden. Dadurch lässt sich das Problem in Form eines Gleichungssystems darstellen, für welches die primitiven volumetrischen Mittelwerte $\overline{\phi}_\alpha$ die Freiheitsgrade darstellen. Die Lösung der zeitabhängigen Transportgleichung kann schließlich in die folgenden drei Teilschritte unterteilt werden:

1. Rekonstruktion der primitiven Feldgrößen an einem Zeitschritt t_n aus den bekannten volumetrischen Mittelwerten in der unmittelbaren Umgebung von Ω_α
2. Approximation der Flüsse an den Oberflächen von Ω_α anhand der rekonstruierten Feldgrößen
3. Zeitliche Entwicklung der Transportgleichung zur Bestimmung der volumetrischen Mittelwerte $\overline{\phi}_\alpha$ an einen neuen Zeitpunkt t_{n+1}

Für die Rekonstruktion der Feldgrößen wird für jedes Element eine polynomiale Ansatzfunktion gewählt, welche mit $\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha)$ gekennzeichnet wird. Die Rekonstruktion wird als k -exakt bezeichnet, wenn eine zugrunde liegende, glatte Lösung ϕ in der Umgebung eines Elements Ω_α durch eine Ansatzfunktion mit dem Polynomgrad k exakt aus den volumetrischen Mittelwerten $\overline{\phi}_\alpha$ der umliegenden Elemente bestimmt werden kann. Dies wird als k -exakte Bedingung definiert und kann ausgedrückt werden durch [12]

$$\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) = \phi(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(h^{k+1}). \quad (3.9)$$

Hierbei stellt h eine lokale Gitter-Schrittweite des Elements Ω_α dar. Die hochgestellte Zahl $(k+1)$ kennzeichnet die Fehlerpotenz für die Approximation der Lösung ϕ durch das Rekonstruktionspolynom. Der Verbund aus Elementen, welche zur Rekonstruktion verwendet werden, wird durch \mathcal{N}_α bezeichnet. Um die Polynomkoeffizienten berechnen zu können werden mindestens $\binom{k+d}{k}$ volumetrische Mittelwerte $\overline{\phi}$ in \mathcal{N}_α benötigt [108]. Typischerweise wird jedoch eine höhere Anzahl an Stützstellen als die geforderte Mindestanzahl gewählt, um den Rekonstruktionsprozess zu stabilisieren [255]. Weiterhin wird gefordert, dass sich alle Elemente in \mathcal{N}_α in unmittelbarer Nähe zum Rekonstruktionselement Ω_α befinden [105]. Somit lässt sich \mathcal{N}_α beispielsweise in Abhängigkeit des

Rekonstruktionsgrades k durch die Elemente aus der k -ten Nachbarschaft definieren. Eine weitere Anforderung für die k -exakte Rekonstruktion von ϕ stellt die Erhaltung des Mittelwertes dar. Diese bezweckt, dass das Rekonstruktionspolynom die volumetrischen Mittelwerte aller Elemente in \mathcal{N}_α mit einer Fehlerordnung $\mathcal{O}(h^{k+1})$ approximieren muss [108]

$$\frac{1}{|\Omega_\alpha|} \iiint_{\Omega_\alpha} \phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) dV = \bar{\phi}_\alpha + \mathcal{O}(h^{k+1}), \quad (3.10a)$$

$$\frac{1}{|\Omega_\beta|} \iiint_{\Omega_\beta} \phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) dV = \bar{\phi}_\beta + \mathcal{O}(h^{k+1}), \quad \forall \beta \in \mathcal{N}_\alpha. \quad (3.10b)$$

Die Rekonstruktionsfunktion innerhalb eines Elements Ω_α wird in dieser Arbeit durch ein Taylor-Polynom des Grades k definiert:

$$\begin{aligned} \phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) &= \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k+1)} + \frac{\partial \phi}{\partial x_{i_1}} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)} (x_{i_1} - x_{i_1, \alpha}) + \dots \\ &+ \frac{1}{k!} \frac{\partial^k \phi}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_k}} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} (x_{i_1} - x_{i_1, \alpha}) \dots (x_{i_k} - x_{i_k, \alpha}). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Der Wert $\phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k+1)}$ und dessen Ableitungen am Punkt \mathbf{x}_α stellen die unbekanntenen Polynomkoeffizienten dar. Diese gilt es mit den entsprechenden Genauigkeitsanforderungen zu approximieren. Für die k -exakte Rekonstruktion ist die Unterscheidung zwischen Punktwerten und volumetrischen Mittelwerten von essentieller Bedeutung. Daher werden in dieser Arbeit stets vertikale Linien für die Bezeichnung von Punktwerten verwendet, wie es in Gleichung (3.11) dargestellt ist. Die Superskripte in Klammern dienen dazu, die Genauigkeitsordnung der jeweiligen rekonstruierten Punktwerte zu bezeichnen. Im Gegensatz dazu kennzeichnen Punktwerte ohne Superskript die analytische Lösung von ϕ .

Durch die Volumenintegration von Gleichung (3.11) über Ω_α lässt sich eine Relation zwischen dem volumetrischen Mittel $\bar{\phi}_\alpha$ und den rekonstruierten Punktwerten von ϕ am Knotenpunkt \mathbf{x}_α herstellen

$$\bar{\phi}_\alpha = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k+1)} + \frac{\partial \phi}{\partial x_{i_1}} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)} \mathcal{M}_{i_1, \alpha} + \dots + \frac{1}{k!} \frac{\partial^k \phi}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_k}} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \mathcal{M}_{i_1 \dots i_k, \alpha} + \mathcal{O}(h^{k+1}). \quad (3.12)$$

Das Ziel der k -exakten Rekonstruktion ist es, die unbekanntenen Polynomkoeffizienten so zu bestimmen, dass die volumetrischen Mittelwerte aller Elemente im Elementverbund \mathcal{N}_α mit der Fehlerordnung $\mathcal{O}(h^{k+1})$ approximiert werden. Häufig wird hierfür ein Gleichungssystem mit der Form von Gleichung (3.12) über die Elemente in \mathcal{N}_α durch die Methode der kleinsten Quadrate gelöst [9, 33, 182]

$$\begin{bmatrix}
 1 & \mathcal{M}_{i_1, \alpha} & \mathcal{M}_{i_2, \alpha} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 i_2, \alpha} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 \dots i_k, \alpha} \\
 1 & \mathcal{M}_{i_1}^{(\beta_1, \alpha)} & \mathcal{M}_{i_2}^{(\beta_1, \alpha)} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 i_2}^{(\beta_1, \alpha)} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 \dots i_k}^{(\beta_1, \alpha)} \\
 1 & \mathcal{M}_{i_1}^{(\beta_2, \alpha)} & \mathcal{M}_{i_2}^{(\beta_2, \alpha)} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 i_2}^{(\beta_2, \alpha)} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 \dots i_k}^{(\beta_2, \alpha)} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 1 & \mathcal{M}_{i_1}^{(\beta_{N_\alpha}, \alpha)} & \mathcal{M}_{i_2}^{(\beta_{N_\alpha}, \alpha)} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 i_2}^{(\beta_{N_\alpha}, \alpha)} & \dots & \mathcal{M}_{i_1 \dots i_k}^{(\beta_{N_\alpha}, \alpha)}
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \phi|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k+1)} \\
 \partial\phi/\partial x_{i_1}|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)} \\
 \partial\phi/\partial x_{i_2}|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)} \\
 \vdots \\
 \frac{1}{2}\partial^2\phi/(\partial x_{i_1}\partial x_{i_2})|_{x_\alpha}^{(k-1)} \\
 \vdots \\
 \frac{1}{k!}\partial^k\phi/\partial x_{i_1}\dots\partial x_{i_k}|_\alpha^{(1)}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \bar{\phi}_\alpha \\
 \bar{\phi}_{\beta_1} \\
 \bar{\phi}_{\beta_2} \\
 \vdots \\
 \bar{\phi}_{\beta_{N_\alpha}}
 \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Dieses Vorgehen hat den Nachteil, dass für dreidimensionale Berechnungen eine große Elementzahl N_α im Verbund \mathcal{N}_α benötigt wird, um eine stabile Rekonstruktion der Lösung zu garantieren. Dadurch wächst das Gleichungssystem (3.13) an und die entsprechende Rechenzeit für dessen Lösung nimmt stark zu. Ein weiteres Problem ist, dass die Elemente in \mathcal{N}_α nicht unmittelbar an das zentrale Element der Rekonstruktion Ω_α angrenzen, weshalb komplexe Datenstrukturen für den Datenaustausch erforderlich sind. Die daraus resultierende indirekte Adressierung der Daten kann aufgrund entstehender Cache-Fehlschläge im Speicher zu Performance-Einbußen führen [108, 251]. Für eine parallele Simulation ist es ferner notwendig das Rechengebiet geometrisch zu unterteilen. Gewisse Elementverbunde müssen dann gegebenenfalls auf mehrere Prozessoren aufgeteilt werden, was einen zusätzlichen Austausch von Datenpaketen mit variierender Größe erfordert und sich in einer ineffizienteren Parallelisierung des Simulationsprogramms niederschlagen kann [108, 253]. Eine effiziente Parallelisierung dieses Ansatzes wäre nur unter einem sehr hohen Implementierungs-Aufwand in einen bestehenden Strömungslöser wie **ThetaCOM** zu realisieren.

In dieser Arbeit wird daher ein alternativer Ansatz für die Bestimmung der Polynomkoeffizienten verwendet, mit welchem sich die Problematik einer effizienten Parallelisierung deutlich vereinfachen lässt. Bei dem sogenannten k -exakten Multi-Korrekturverfahren werden die unbekanntes Ableitungen im Rekonstruktionspolynom (3.11) durch den Green-Gauss Algorithmus berechnet, bei welchem lediglich Information zwischen benachbarten Elementen ausgetauscht wird. Bezüglich der Parallelisierung kann daher auf die bestehende Datenstruktur des Strömungslösers zurückgegriffen werden. Mit den daraus berechneten Ableitungen genügt das Rekonstruktionspolynom jedoch nicht den geforderten k -exakten Bedingungen in Gleichung (3.10). Um dies zu realisieren, müssen die Ableitungen durch geometrische Matrizen korrigiert werden, auf deren Herleitung im folgenden Abschnitt im Detail eingegangen wird. Das Multi-Korrekturverfahren wurde in den Arbeiten von Pont et al. [197] und Menasria et al. [157] für zellzentrierte Rechengitter und für ein kompressibles Lösungsverfahren hergeleitet. Im folgenden Abschnitt wird eine Herleitung der Methode für knotenzentrierte, medianduale Rechengitter dargestellt. Dabei wird zunächst der einfache Fall einer 1-exakten Rekonstruktion beleuchtet, um davon ausgehend die Methode auf eine 2-exakte Rekonstruktion zu erweitern.

3.2.1 Die 1-exakte Rekonstruktion

Als Ausgangspunkt der Rekonstruktion wird der Gradient von ϕ am Knotenpunkt \mathbf{x}_α aus den bekannten volumetrischen Mitteln der benachbarten Elemente von Ω_α berechnet. Hierfür wird der Green-Gauss-Ansatz eingesetzt, welcher häufig in knotenzentrierten Strömungslösern Anwendung findet [234]. Unter Berücksichtigung der möglichen Randtypen wird dieser definiert durch

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} := \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\underbrace{\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} (\bar{\phi}_\alpha + \bar{\phi}_\beta) \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)}}_{\text{innere Oberflächen}} + \underbrace{\sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} \frac{1}{2} (\bar{\phi}_\alpha + \bar{\phi}_\gamma) \mathcal{S}_i^{(\alpha\gamma)}}_{\text{unverschobene Ränder}} + \underbrace{\sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} \phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)}}_{\text{verschobene Ränder}} \right]. \quad (3.14)$$

Durch diesen Ansatz wird der Gradient von ϕ mit einem Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ approximiert, was durch das Superskript auf der linken Seite von Gleichung (3.14) hervorgehoben wird. Dieser Fehler hängt maßgeblich von der Verzerrung des Rechengitters $\mathcal{D}(\Omega)$ ab. Im weiteren Verlauf der Herleitung wird sich jedoch zeigen, dass der Fehler des Green-Gauss Operators in eine erste Ordnung $\mathcal{O}(h)$ übergeht, wenn die Knotenpunkte \mathbf{x}_α mit den geometrischen Mittelpunkten der Elemente Ω_α zusammenfallen. Um jedoch einen 1-exakten Gradientenoperator herzuleiten, welcher unabhängig von der Gitterstruktur eine erste Fehlerordnung erfüllt, wird die Lösung von $\phi(\mathbf{x})$ zunächst durch eine Taylorpolynom ersten Grades approximiert

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} (x_i - x_{i,\alpha}) + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.15)$$

Wie bereits erwähnt wurde, beziehen sich die Punktwerte ohne Superskripte auf die analytische Lösung von ϕ und deren Ableitungen. Durch eine volumetrische Mittelung der Taylorreihe in Gleichung (3.15) über das Element Ω_α sowie alle Elemente in dessen ersten Nachbarschaft $\{\beta_\alpha^{(1)}\}$ lassen sich die bekannten Mittelwerte $\bar{\phi}_\alpha$ in Relation zu den analytischen Punktwerten bringen:

$$\bar{\phi}_\alpha = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_{i,\alpha} + \mathcal{O}(h^2), \quad (3.16a)$$

$$\bar{\phi}_\beta = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_i^{(\beta,\alpha)} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.16b)$$

Diese Eigenschaft muss auch für alle imaginären Randelemente von Ω_α erfüllt sein. Grenzt das Element an verschobene Ränder an, so gilt es den Randwert $\phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta}$ mit Gleichung (3.15) zu approximieren

$$\bar{\phi}_\gamma = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_i^{(\gamma,\alpha)} + \mathcal{O}(h^2), \quad (3.17a)$$

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta} = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.17b)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Dabei ist $\Delta \mathbf{x}^{(\alpha\delta)} = \mathbf{x}_\delta - \mathbf{x}_\alpha$ der Distanzvektor zwischen den Knotenpunkten \mathbf{x}_δ und \mathbf{x}_α . Gleichungen (3.16) und (3.17) werden im nächsten Schritt in den 0-exakten Green-Gauss Operator (3.14) eingesetzt. Unter Berücksichtigung der geometrischen Erhaltungseigenschaft

$$\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} + \sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} \mathcal{S}_i^{(\alpha\gamma)} + \sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)} = 0, \quad (3.18)$$

lässt sich eine Beziehung zwischen dem 0-exakten Gradientenoperator und der analytischen Ableitung von ϕ am Punkt \mathbf{x}_α durch die Matrix \mathbf{G}_α herstellen:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} = G_{ij,\alpha}^{-1} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} + \mathcal{O}(h). \quad (3.19)$$

Diese Matrix-Korrektur stellt eine lineare Transformation des 0-exakten Green-Gauss Gradienten (3.14) dar. Wird der korrigierte Gradient im unterliegenden Rekonstruktionspolynom eingesetzt, erfüllt dieses die Erhaltungseigenschaften (3.10) mit einer Genauigkeit von $\mathcal{O}(h^2)$. Für knotenzentrierte Gitter ergibt sich, dass die Einträge der Matrix \mathbf{G}_α die Green-Gauss Gradienten des ersten geometrischen Volumenmoments von Ω_α enthalten:

$$G_{ij,\alpha}^{-1} := \left. \frac{\partial \mathcal{M}_j}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)}, \quad (3.20)$$

welcher definiert ist durch

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \mathcal{M}_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} &:= \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left(\mathcal{M}_i^{(\beta,\alpha)} + \mathcal{M}_{i,\alpha} \right) \mathcal{S}_j^{(\alpha\beta)} \right] \\ &+ \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} \frac{1}{2} \left(\mathcal{M}_i^{(\gamma,\alpha)} + \mathcal{M}_{i,\alpha} \right) \mathcal{S}_j^{(\alpha\gamma)} + \sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Die Korrekturmatri \mathbf{G}_α kann also durch eine einfache Anwendung des Green-Gauss Operators (3.14) auf die Einträge des ersten geometrischen Volumenmoments berechnet werden. Es sei anzumerken, dass hierfür Gleichung (3.4a) berücksichtigt werden muss, wofür auch die geometrischen Momente $\mathcal{M}_{i,\gamma}$ der imaginären Elemente an unverschobenen Rändern bekannt sein müssen. Da dieser Randtyp für Periodizitäts- und Symmetrie-Randbedingungen verwendet wird, lassen sich die Momente $\mathcal{M}_{i,\gamma}$ durch eine Spiegelung von $\mathcal{M}_{i,\alpha}$ an der Randfläche $A_{\alpha\gamma}$ ausdrücken

$$\mathcal{M}_{i,\gamma} = R_{ij}^{(\alpha\gamma)} \mathcal{M}_{j,\alpha} \quad \text{mit} \quad R_{ij}^{(\alpha\gamma)} = \delta_{ij} - 2 \frac{\mathcal{S}_i^{(\alpha\gamma)} \mathcal{S}_j^{(\alpha\gamma)}}{\mathcal{S}_k^{(\alpha\gamma)} \mathcal{S}_k^{(\alpha\gamma)}}, \quad (3.22)$$

wobei $R_{ij}^{(\alpha\gamma)}$ die entsprechende Rotationsmatrix darstellt.

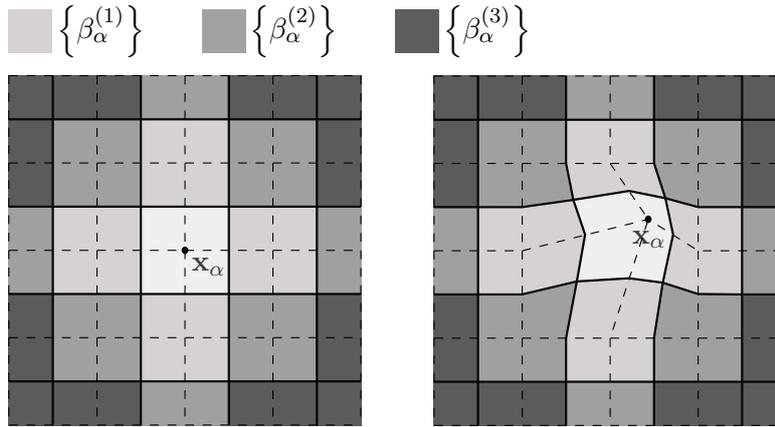


Abbildung 3.3: Einfluss der Deformation eines Elements Ω_α (dargestellt in weiß) auf die umliegenden Nachbarelemente. Gestrichelte Linien kennzeichnen das Primärgitter, wohingegen durchgezogene Linien die median-duale Repräsentation darstellen.

Die Korrekturmatri \mathbf{G}_α gibt Aufschluss über die Entstehung des Fehlers erster Ordnung bei der Gradientenberechnung mit dem Green-Gauss-Ansatz auf dem median-dualen Rechengitter. Wie zuvor erwähnt stellt das erste geometrische Volumenmoment eines Dualgitter-Elements den Abstandsvektor zwischen dem Primärgitter-Knotenpunkt \mathbf{x}_α und dem geometrischen Mittelpunkt des Volumens Ω_α dar. Auf einem regulären Primärgitter $\mathcal{P}(\Omega)$ stimmen diese beiden Punkte überein, wodurch ein Nullvektor für $\mathcal{M}_{i,\alpha}$ resultiert. Dies ist beispielhaft in Abbildung 3.3 (links) dargestellt. Anhand Gleichung (3.20) lässt sich erkennen, dass die Korrekturmatri \mathbf{G}_α für diesen Fall in eine Einheitsmatri \mathbf{G}_α übergeht und der 1-exakte Green-Gauss Operator inhärent mit dem 0-exakten Operator aus Gleichung (3.14) übereinstimmt. Eine Verzerrung des Rechengitters, wie in Abbildung 3.3 (rechts) dargestellt, resultiert hingegen in einem lokalen Gradienten des ersten geometrischen Volumenmoments. Bei steigender Verzerrung weicht \mathbf{G}_α immer mehr von einer Identitätsmatri \mathbf{G}_α ab, was sich in Gleichung (3.19) durch einen konstanten Fehler manifestiert. Im Umkehrschluss dient die Matri \mathbf{G}_α dazu, den 0-exakten Green-Gauss Gradienten so zu transformieren, dass dieser konstante Fehler unabhängig von der Gitterverzerrung verschwindet. In einer vorangegangenen Arbeit wurde außerdem gezeigt, dass sich die Eigenwerte der Matri \mathbf{G}_α verwenden lassen, um den Grad der Gitterverzerrung zu charakterisieren [224]. Der 1-exakte Gradientenoperator wird somit definiert zu

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} := G_{ij,\alpha} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \quad \text{wobei} \quad \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} + \mathcal{O}(h). \quad (3.23)$$

Durch Umstellen der Gleichung (3.12) lässt sich der resultierende Gradient für die Approximation des Punktwertes von ϕ an der Stelle \mathbf{x}_α mit einem Fehler von $\mathcal{O}(h^2)$ verwenden

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} = \bar{\phi}_\alpha - \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \mathcal{M}_{i,\alpha}. \quad (3.24)$$

Damit eignen sich diese Punktwerte als Koeffizient für ein 1-exaktes Rekonstruktionspolynom, mit welchem sich die Lösung im Element Ω_α unabhängig von dessen Form durch einen Fehler zweiter Ordnung approximieren lässt:

$$\phi^{(2)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} (x_i - x_{i,\alpha}). \quad (3.25)$$

3.2.2 Die 2-exakte Rekonstruktion

Für eine 2-exakte Rekonstruktion erfordert das Rekonstruktionspolynom weitere Koeffizienten, welche die Einträge der Hesse-Matrix von ϕ an der Stelle \mathbf{x}_α darstellen. Diese Einträge gilt es mit einem Approximationsfehler erster Ordnung zu bestimmen. Durch die Anwendung des Green-Gauss-Verfahrens auf den 1-exakten Gradientenoperator lassen sich die Einträge der Hesse-Matrix von ϕ jedoch nur mit einem konstanten Fehler $\mathcal{O}(1)$ berechnen [221]

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} &:= \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} \right) \mathcal{S}_j^{(\alpha\beta)} \right] \\ &+ \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\gamma}^{(1)} \right) \mathcal{S}_j^{(\alpha\gamma)} + \sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Zur Behandlung der Symmetrie-Randbedingungen an unverschobenen Rändern kann der Gradient $\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\gamma}^{(1)}$ analog zum Volumenmoment in Gleichung (3.22) durch eine Rotation aus dem inneren des Rechengebiets berechnet werden. Für Dirichlet-Randbedingungen an verschobenen Rändern stellt die Vorgabe des Gradienten am Punkt \mathbf{x}_δ jedoch einen Freiheitsgrad für die Konstruktion des Diskretisierungsschemas dar. In dieser Arbeit wird hierfür der Gradient $\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)}$ des Elements Ω_α eingesetzt. Es zeigt sich, dass dies zu einem robusteren Verfahren führt, als beispielsweise mit der Methode aus einer vorangegangenen Arbeit [222], in welcher $\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\delta}^{(1)}$ mit den Gradienten aus der ersten Nachbarschaft $\{\beta_\alpha^{(1)}\}$ berechnet wurde.

Analog zum 1-exakten Gradienten lässt sich eine Korrektur für die Hesse-Matrix in Gleichung (3.26) herleiten, sodass diese unabhängig von der Gitterverzerrung einen Fehler erster Ordnung aufweist. Hierfür wird die Lösung ϕ durch eine Taylorreihe zweiten Grades am Punkt \mathbf{x}_α entwickelt

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} (x_i - x_{i,\alpha}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} (x_i - x_{i,\alpha})(x_j - x_{j,\alpha}) + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.27)$$

Auch hier lassen sich die Werte $\bar{\phi}_\alpha$ und $\bar{\phi}_\beta$ durch eine volumetrische Mittelung in Relation zur Taylorreihe (3.27) bringen:

$$\bar{\phi}_\alpha = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_{i,\alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_{ij,\alpha} + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.28a)$$

$$\bar{\phi}_\beta = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_i^{(\beta,\alpha)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_{ij}^{(\beta,\alpha)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.28b)$$

Des Weiteren lassen sich die Mittelwerte der imaginären Nachbarerlemente $\bar{\phi}_\gamma$ sowie die Punktwerte $\phi|_{\mathbf{x}_\delta}$ auf verschobenen Rändern mit einer 2-exakten Rekonstruktion approximieren durch

$$\bar{\phi}_\gamma = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_i^{(\gamma,\alpha)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \mathcal{M}_{ij}^{(\gamma,\alpha)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.29a)$$

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\gamma} = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.29b)$$

Auch hier werden die geometrische Momente der imaginären Randerlemente durch eine Spiegelung bestimmt, wobei das zweite geometrische Volumenmoment berechnet wird durch

$$\mathcal{M}_{ij,\gamma} = R_{ik}^{(\alpha\gamma)} R_{jl}^{(\alpha\gamma)} \mathcal{M}_{kl,\alpha}. \quad (3.30)$$

Durch Einsetzen der Relationen (3.28) und (3.29) in den 1-exakten Gradientenoperator in Gleichung (3.23) lässt sich die folgende Beziehung herleiten:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} = \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \underbrace{\left(G_{ij,\alpha} \frac{\partial \mathcal{M}_k}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \right)}_{=\delta_{ik}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_l} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \frac{\partial \mathcal{M}_{kl}}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)}}_{\propto \mathcal{O}(h)} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.31)$$

Hierbei wurde ebenfalls die geometrische Erhaltungseigenschaft (3.18) ausgenutzt. Für den ersten Term ergibt sich die dargestellte Identität mit der Einheitsmatrix δ_{ik} aufgrund der Definition der inversen Korrekturmatrix aus Gleichung (3.20) und der entsprechenden Multiplikation mit $G_{ij,\alpha}$. Für den zweiten Term wird der 1-exakte Gradientenoperator des zweiten geometrischen Volumenmoments $\partial \mathcal{M}_{kl} / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)}$ eingeführt, welcher mit der Größenordnung des Gitterelements $\mathcal{O}(h)$ skaliert

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} &:= \frac{G_{kl,\alpha}}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left(\mathcal{M}_{ij}^{(\beta,\alpha)} + \mathcal{M}_{ij,\alpha} \right) \mathcal{S}_l^{(\alpha\beta)} \right] \\ &+ \frac{G_{kl,\alpha}}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} \frac{1}{2} \left(\mathcal{M}_{ij}^{(\gamma,\alpha)} + \mathcal{M}_{ij,\alpha} \right) \mathcal{S}_l^{(\alpha\gamma)} + \sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} \mathcal{S}_l^{(\alpha\delta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Der führende Fehlerterm des 1-exakten Gradientenoperators lässt sich somit als das Frobenius-Skalarprodukt zwischen der Hesse-Matrix von ϕ und dem 1-exakten Gradientenoperator des zweiten geometrischen Volumenmoments identifizieren. Gleichung (3.31) verdeutlicht, dass sich der Fehler des 1-exakten Gradientenoperators auf eine zweite Ordnung reduzieren lässt, wenn die Hesse-Matrix von ϕ mit einem Fehler von mindestens erster Ordnung bekannt ist. Durch diese sukzessive Korrektur der Ableitungen lässt sich eine höhere Genauigkeit der Rekonstruktion realisieren, wobei nur Information zwischen benachbarten Elementen ausgetauscht werden muss. Diese Methodik stellt den Schlüssel für die parallele Effizienz des Multi-Korrekturverfahrens dar und lässt sich in der Theorie für beliebig hohe Ableitungen erweitern. Es bleibt allerdings noch die Bestimmung der Hesse-Matrix-Einträge mit der geforderten Genauigkeit. Für die Herleitung eines Korrekturansatzes muss der 1-exakte Gradient an der Stelle \mathbf{x}_β analog zu Gleichung (3.31) ausgedrückt werden

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k} \right|_{\mathbf{x}_\beta} \left. \frac{\partial \mathcal{M}_{jk}}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.33)$$

Danach gilt es die analytischen Punktwerte an der Stelle \mathbf{x}_β auf der rechten Seite von Gleichung (3.33) durch das Rekonstruktionspolynom (3.27) und dessen erste Ableitung auszudrücken

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} + \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_j^{(\alpha\beta)} + \mathcal{O}(h^2), \quad (3.34a)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\beta} = \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} + \mathcal{O}(h). \quad (3.34b)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (3.34) in Gleichung (3.33) lässt sich der 1-exakte Gradient an der Stelle \mathbf{x}_β schließlich ausdrücken durch

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} + \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_j^{(\alpha\beta)} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \left. \frac{\partial \mathcal{M}_{jk}}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.35)$$

Diese Beziehung lässt sich ebenfalls auf die imaginären Randlelemente Ω_γ an unverschobenen Rändern anwenden. Die Ausdrücke der Gradienten (3.31) und (3.35) werden nun in den 0-exakten Operator der Hesse-Matrix (3.26) eingesetzt, wodurch sich folgende Relation ergibt:

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} = \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_k} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \left. \frac{\partial x_k}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_l} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{kl}}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} + \mathcal{O}(h). \quad (3.36)$$

Hierbei werden die beiden 0-exakten Green-Gauss Operatoren der Größen x_k und \mathcal{M}_{kl} definiert

$$\left. \frac{\partial x_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} := \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} (x_{i,\beta} + x_{i,\alpha}) \mathcal{S}_j^{(\alpha\beta)} + \sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} x_{i,\alpha} \mathcal{S}_j^{(\alpha\gamma)} + \sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} x_{i,\delta} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} \right], \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k \partial x_l} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} &:= \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} + \frac{\partial \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \right) \mathcal{S}_l^{(\alpha\beta)} \right] \\
 &+ \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\gamma \in \{\gamma_\alpha\}} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\gamma}^{(1)} + \frac{\partial \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \right) \mathcal{S}_l^{(\alpha\gamma)} \right] \\
 &+ \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \left[\sum_{\delta \in \{\delta_\alpha\}} \frac{\partial \mathcal{M}_{ij}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \mathcal{S}_l^{(\alpha\delta)} \right],
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

um eine lineare Abbildung zwischen dem 0-exakten Operator der Hesse-Matrix und der analytischen Hesse-Matrix am Punkt \mathbf{x}_α zu erhalten. Aufgrund des höheren Tensorrangs der Hesse-Matrix ist eine Invertierung des resultierenden Gleichungssystems im Vergleich zum Gradienten in Gleichung (3.19) nicht trivial. Gleichung (3.36) kann jedoch in ein übliches, lineares Gleichungssystem überführt werden, wenn die Hesse-Matrix $\partial^2 \phi / (\partial x_i \partial x_j) |_{\mathbf{x}_\alpha}$ in eine vektorielle Form mit dem Tensorrang eins gebracht wird. Diese vektorisierte Hesse-Matrix wird mit $\widehat{\partial_i^2 \phi} |_{\mathbf{x}_\alpha}$ bezeichnet und die entsprechenden Einträge werden in der Form arrangiert, wie es beispielhaft für den 0-exakten Hesse-Operator gezeigt ist:

$$\widehat{\partial^2 \phi} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1 \partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1 \partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1 \partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2 \partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2 \partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_3 \partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \end{bmatrix}^T. \tag{3.39}$$

Durch diese Vektorisierung und unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften der Hesse-Matrix lässt sich der approximative Hesse-Matrix Operator $\widehat{\partial_i^2 \phi} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)}$ und das analytische Pendant $\widehat{\partial_i^2 \phi} |_{\mathbf{x}_\alpha}$ durch eine weitere Korrekturmatri \mathbf{H}_α in Relation zueinander bringen

$$\widehat{\partial_i^2 \phi} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} = H_{ij,\alpha}^{-1} \widehat{\partial_j^2 \phi} |_{\mathbf{x}_\alpha} + \mathcal{O}(h). \tag{3.40}$$

Die Korrekturmatri von $\mathbf{H}_\alpha^{-1} = (\mathbf{H}_{1,\alpha} + \mathbf{H}_{2,\alpha})/2$ setzt sich aus den zwei Anteilen $\mathbf{H}_{1,\alpha}$ und $\mathbf{H}_{2,\alpha}$ zusammen, welche sich berechnen lassen durch:

$$\mathbf{H}_{1,\alpha} = \begin{bmatrix} 2 \frac{\partial x_1}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \frac{\partial x_2}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \frac{\partial x_3}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial x_1}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_1}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} + \frac{\partial x_2}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_3}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_2}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_3}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 0 \\ \frac{\partial x_1}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_2}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_1}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} + \frac{\partial x_3}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 0 & \frac{\partial x_2}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_3}{\partial x_1} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \\ 0 & 2 \frac{\partial x_1}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 0 & 2 \frac{\partial x_2}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \frac{\partial x_3}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 0 \\ 0 & \frac{\partial x_1}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_2}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_2}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_2}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} + \frac{\partial x_3}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \frac{\partial x_3}{\partial x_2} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \\ 0 & 0 & 2 \frac{\partial x_1}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 0 & 2 \frac{\partial x_2}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \frac{\partial x_3}{\partial x_3} |_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \end{bmatrix} \tag{3.41}$$

$$\mathbf{H}_{2,\alpha} = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{11}}{\partial x_1 \partial x_1} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{12}}{\partial x_1 \partial x_1} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{13}}{\partial x_1 \partial x_1} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{22}}{\partial x_1 \partial x_1} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{23}}{\partial x_1 \partial x_1} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{33}}{\partial x_1 \partial x_1} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \\ \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{11}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{12}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{13}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{22}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{23}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{33}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{11}}{\partial x_3 \partial x_3} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{12}}{\partial x_3 \partial x_3} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{13}}{\partial x_3 \partial x_3} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{22}}{\partial x_3 \partial x_3} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & 2 \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{23}}{\partial x_3 \partial x_3} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} & \left. \frac{\partial^2 \mathcal{M}_{33}}{\partial x_3 \partial x_3} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

Ähnlich zur Korrekturmaterix \mathbf{G}_α hängt \mathbf{H}_α lediglich vom median-dualen Rechengitter ab. Die Berechnung und Invertierung kann somit im Vorhinein zur Simulation erfolgen. Für ein kartesisches Rechengitter reduziert sich \mathbf{H}_α zudem ebenfalls zu einer Einheitsmatrix. Die korrigierte Hesse-Matrix wird im folgenden als 2-exakter Hesse-Operator bezeichnet und ist definiert durch

$$\widehat{\partial_i^2 \phi} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} := H_{ij,\alpha} \widehat{\partial_j^2 \phi} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(0)}. \quad (3.43)$$

Dieses Matrix-Vektor-Produkt muss während der Laufzeit der Simulation berechnet werden, um den approximativen Hesse-Operator aus Gleichung (3.26) in eine 2-exakte Form zu überführen. Die daraus resultierenden Einträge von $\widehat{\partial_i^2 \phi} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)}$ weisen eine Fehlerordnung von $\mathcal{O}(h)$ auf und sind damit durch die Beziehung in Gleichung (3.31) geeignet für die Korrektur des 1-exakten Gradienten. Dies führt zu der Einführung eines 2-exakten Gradienten-Operators, welcher definiert ist durch

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} := \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \frac{\partial \mathcal{M}_{jk}}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)}. \quad (3.44)$$

Neben den Korrekturmaterixen \mathbf{H}_α und \mathbf{G}_α ist es also auch notwendig, den 1-exakten Gradienten des zweiten geometrischen Volumenmoments für jedes Element Ω_α zu berechnen. Für den Fall, dass die Form des Rechengitters während der Simulation bestehen bleibt, kann diese Berechnung vor Beginn der Simulation erfolgen. Der Ablauf für die Berechnung der 2-exakten Ableitungen von ϕ ist zur besseren Übersicht durch ein Ablaufdiagramm in Abbildung 3.4 dargestellt. Da nun die Ableitungen von ϕ am Knotenpunkt \mathbf{x}_α mit den geforderten Genauigkeiten vorhanden sind, kann das Rekonstruktionspolynom des Elements Ω_α definiert werden durch

$$\phi^{(3)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(3)} + \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} (x_i - x_{i,\alpha}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} (x_i - x_{i,\alpha}) (x_j - x_{j,\alpha}), \quad (3.45)$$

wobei sich der Punktwert von ϕ am Knotenpunkt analog zur 1-exakten Rekonstruktion über die Relation (3.12) aus dem volumetrischen Mittelwert rückrechnen lässt

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(3)} = \bar{\phi}_\alpha - \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} \mathcal{M}_{i,\alpha} - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \mathcal{M}_{ij,\alpha}. \quad (3.46)$$

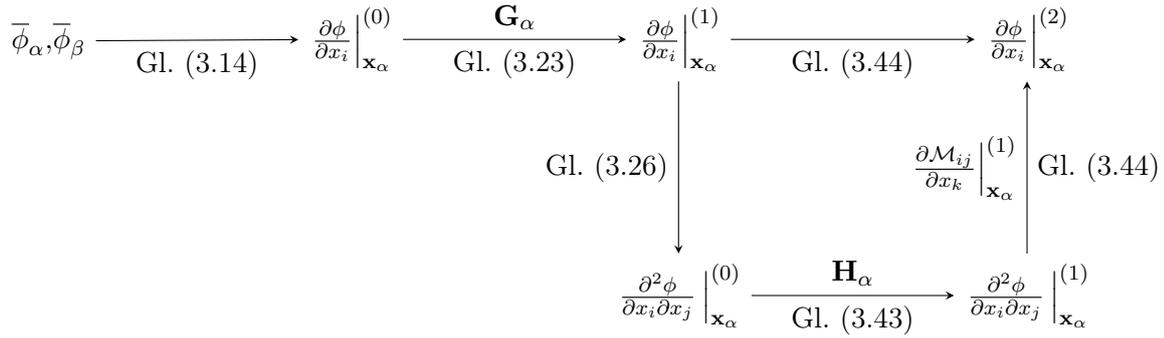


Abbildung 3.4: Ablaufdiagramm für die Berechnung der k -exakten Rekonstruktion von ϕ mit dem knotenzentrierten Multi-Korrekturverfahren. Gezeigt sind die Schritte für eine 2-exakte Berechnung des Gradienten und der Hesse-Matrix.

3.2.3 Primitive und konservative volumetrische Mittelwerte

Zu Beginn dieses Abschnitts wurde bereits darauf hingewiesen, dass es für die Diskretisierung der gemittelten Transportgleichung (3.8) notwendig ist, konservative Mittelwerte, wie beispielsweise $\overline{(\rho\phi)}_\alpha$, in die entsprechenden primitiven Mittelwerten $\bar{\rho}_\alpha$ und $\bar{\phi}_\alpha$ zu überführen. Eine solche Beziehung lässt sich herleiten, indem ρ und ϕ analog zu Gleichung (3.11) durch Taylor-Polynome approximiert werden, die es dann miteinander zu verrechnen und über das Element Ω_α volumetrisch zu mitteln gilt. Durch den Vergleich mit den volumetrischen Mittelwerten der separaten Taylor-Polynome von ρ und ϕ lässt sich damit die Abweichung zwischen $\overline{(\rho\phi)}_\alpha$ und $\bar{\rho}_\alpha \bar{\phi}_\alpha$ extrahieren

$$\overline{(\rho\phi)}_\alpha = \bar{\rho}_\alpha \bar{\phi}_\alpha - \left. \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha} \underbrace{(\mathcal{M}_{i,\alpha} \mathcal{M}_{j,\alpha} - \mathcal{M}_{ij,\alpha})}_{\propto \mathcal{O}(h^2)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.47)$$

Diese Analyse zeigt, dass ein räumlicher Fehler zweiter Ordnung entsteht, wenn zwei konservativ gemittelte Variablen $\overline{(\rho\phi)}_\alpha$ mit dem Produkt ihrer primitiven Mittelwerte $\bar{\rho}_\alpha \bar{\phi}_\alpha$ ersetzt werden. Soll das Verfahren hingegen die 2-exakte Lösung erhalten, so muss für die Umrechnung der Korrekturterm aus Gleichung (3.47) verwendet werden, der die geometrischen Momente enthält. Entsprechend dazu müssen außerdem die Gradienten am Punkt \mathbf{x}_α mit mindestens einer räumlichen Ordnung von $\mathcal{O}(h)$ approximiert sein.

3.2.4 Limitierung des Rekonstruktionspolynoms

Bei einer Rekonstruktion mit hoher Ordnung bilden sich in der Nähe von Diskontinuitäten parasitäre Fehlermoden aus, welche auf das Gibbs-Phänomen zurückzuführen sind [69, 93]. Im späteren Verlauf dieser Arbeit wird sich zeigen, dass diese Fehler insbesondere in den reaktiven Testfällen bei der Lösung der chemischen Komponentengleichungen zu vermeiden sind, um akkurate Simulationsergebnisse zu erzielen. Es wird daher der Ansatz zur Gradientenlimitierung nach Barth und Jespersen [10]

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

verwendet, welcher häufig auf unstrukturierten Gittern eingesetzt wird [159, 178, 238]. Hierbei wird das Rekonstruktionspolynom durch die Einführung der Limitervariable ψ_α ausgedrückt durch

$$\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha) = \bar{\phi}_\alpha + \psi_\alpha \Delta\phi_\alpha^{(k+1)}(\mathbf{x}). \quad (3.48)$$

Der Term $\Delta\phi_\alpha^{(k+1)}(\mathbf{x})$ beinhaltet die Ableitungen und den Beitrag der geometrischen Volumenmomente, welche aus der Umrechnung des Punktwertes $\phi|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k+1)}$ in den volumetrischen Mittelwert $\bar{\phi}_\alpha$ resultieren. Für die in dieser Arbeit verwendete 1- und 2-exakte Rekonstruktion ergibt er sich zu

$$\Delta\phi_\alpha^{(2)}(\mathbf{x}) = \left. \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} (x_i - x_{i,\alpha} - \mathcal{M}_{i,\alpha}), \quad (3.49a)$$

$$\Delta\phi_\alpha^{(3)}(\mathbf{x}) = \left. \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} (x_i - x_{i,\alpha} - \mathcal{M}_{i,\alpha}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} [(x_i - x_{i,\alpha})(x_j - x_{j,\alpha}) - \mathcal{M}_{ij,\alpha}]. \quad (3.49b)$$

Die Limitervariable ψ_α wird dabei nach Barth und Jespersen [10] berechnet durch

$$\psi_\alpha = \min_{\Gamma \in \{\Gamma_\alpha\}} \begin{cases} \min(1, y) & \text{für } \Delta\phi_\alpha^{(2)}(\mathbf{x}_\Gamma) \neq 0, \\ 1 & \text{für } \Delta\phi_\alpha^{(2)}(\mathbf{x}_\Gamma) = 0. \end{cases} \quad (3.50)$$

Die Menge $\{\Gamma_\alpha\}$ umfasst die Punkte \mathbf{x}_Γ an denen ebenfalls die Flüsse eines Elements Ω_α berechnet werden. Die in der Funktion $\min(1, y)$ enthaltene Größe y wird an diesen Punkten berechnet durch [10, 178]:

$$y = \max \left[\frac{(\bar{\phi}_{\min} - \epsilon_\alpha) - \bar{\phi}_\alpha}{\Delta\phi_\alpha^{(k)}(\mathbf{x}_\Gamma)}, \frac{(\bar{\phi}_{\max} + \epsilon_\alpha) - \bar{\phi}_\alpha}{\Delta\phi_\alpha^{(k)}(\mathbf{x}_\Gamma)} \right]. \quad (3.51)$$

Die Werte $\bar{\phi}_{\min}$ und $\bar{\phi}_{\max}$ kennzeichnen den kleinsten negativen beziehungsweise größten positiven volumetrischen Mittelwert von ϕ in der ersten Nachbarschaft $\{\beta_\alpha^{(1)}\}$ um Ω_α . Die Größe ϵ_α stellt einen für das Element Ω_α spezifischen Schwellwert dar, mit dem sich das Intervall $[\bar{\phi}_{\min}, \bar{\phi}_{\max}]$ künstlich erweitern lässt. Die Funktion $\min(1, y)$ in Gleichung (3.50) gewährleistet, dass das Rekonstruktionspolynom $\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha)$ niemals die Schranken $(\bar{\phi}_{\min} - \epsilon_\alpha)$ und $(\bar{\phi}_{\max} + \epsilon_\alpha)$ unter- beziehungsweise überschreitet, wenn es mit ψ_α limitiert wird [10, 178]. Dies führt wiederum dazu, dass auch die Lösung im darauffolgenden Zeitschritt auf dieses Intervall begrenzt wird und somit die Entstehung neuer Minima und Maxima unterbunden wird [11, 178]. Der Schwellwert ϵ_α stellt eine Modifizierung des Limitierungsverfahrens nach Moe et al. [160] dar, mit dem sich eine ungewollte Aktivierung des Limiters in kontinuierlichen Regionen verhindern lässt. Ähnliche Ansätze zur Deaktivierung der Limitierung in glatten Regionen wurden in den Arbeiten von Michalak und Ollivier-Gooch [158], Nishikawa [178] und Venkatakrishnan [245] durch eine Anpassung der $\min(1, y)$ -Funktion verwendet. In der Arbeit von Moe et al. wurde gezeigt, dass ϵ_α mit dem Faktor $\mathcal{O}(h^r)$ und $r \leq 2$ skalieren muss, um eine höhere räumliche Fehlerordnung in der Nähe von glatten Extrema der Lösung zu erhalten.

Ausgehend davon wird der Schwellwert in dieser Arbeit durch $\epsilon = K\sqrt{|\Omega_\alpha|}$ berechnet, sodass dieser mit $\mathcal{O}(h^{3/2})$ skaliert. Da ϵ_α die gleiche Einheit wie die transportierte Feldgröße ϕ aufweist, sollte die Stellgröße K idealerweise in Abhängigkeit von ϕ berechnet werden, um eine Limitierung von glatten Lösungsextrema zu vermeiden [178]. Ein solcher Ansatz wurde beispielsweise in der Arbeit von Wang [260] vorgestellt, welcher auf den globalen Extrema der Feldgröße ϕ basiert und somit eine globale Kommunikation dieser Werte bei parallelen Rechnungen voraussetzt. Für die gegenwärtige Arbeit wird K jedoch für alle Feldgrößen zu einem konstanten Wert von 1,0 gesetzt, was sich für die betrachteten Testfälle als eine ausreichende Limitierungsmethode bewiesen hat.

In der Arbeit von Tsoutsanis [238] wurde gezeigt, dass die Verwendung der ersten Nachbarschaft zur Bestimmung der Werte $\bar{\phi}_{\min}$ und $\bar{\phi}_{\max}$ im Barth-Jespersen-Verfahren für $k > 1$ mit einer verminderten Genauigkeitsordnung einhergehen kann. Dies ist auf eine Aktivierung der Limitervariable bei schlechter Gitterqualität zurückzuführen. Tsoutsanis zeigte jedoch, dass sich dieser Fehler reduzieren lässt, indem die Extrema $\bar{\phi}_{\min}$ und $\bar{\phi}_{\max}$ in der gesamten Nachbarschaft $\{\beta_\alpha^{(k)}\}$ gesucht werden, welche für die k -exakte Rekonstruktion verwendet wird. Diese Verbesserung konnte im Rahmen numerischer Experimente ebenfalls für das knotenzentrierte k -exakte Multi-Korrekturverfahren festgestellt werden und wird daher auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit für das 2-exakte Verfahren verwendet.

3.3 Approximation der numerischen Flüsse

Die rekonstruierte Lösung des Multi-Korrekturverfahrens wird im nächsten Schritt für die Approximation der Oberflächen-Integrale in Gleichung (3.8) verwendet. Um dabei die Fehlerordnung der numerischen Integration zu erhalten, wird häufig ein Quadraturansatz gewählt, bei welchem die Flussfunktion an mehreren Quadraturpunkten einer Oberfläche approximiert werden muss [33, 34, 141, 181, 252]. Diese Methode bringt den Nachteil mit sich, dass die Zahl der Quadraturpunkte aufgrund der komplexen Elementoberflächen in einer median-dualen Repräsentation hoch ist. Zudem wäre die Implementierung dieses Ansatzes in einen bestehenden Strömungslöser, wie **ThetaCOM**, mit einem erheblichen Aufwand verbunden. In dieser Arbeit wird daher ein alternativer Ansatz vorgestellt, mit dem sich die Oberflächenintegration an einem einzelnen Punkt realisieren lässt. Die Methode basiert auf einer Taylorreihen-Entwicklung um den Punkt \mathbf{x}_Γ auf der Oberfläche $A_{\alpha\beta}$. Durch den Einsatz der geometrischen Oberflächenmomente, welche bereits in Abschnitt 3.1 in Gleichung (3.5) eingeführt wurden, lässt sich eine beliebige Flussfunktion f_i durch die Rekonstruktion ihres Punktwertes an der Stelle \mathbf{x}_Γ sowie durch Ableitungen von f_i an diesem Punkt approximieren

$$\iint_{A_{\alpha\beta}} f_i n_i dA = f_i \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} + \frac{\partial f_i}{\partial x_{j_1}} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{S}_{i,j_1}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + \dots + \frac{1}{k!} \frac{\partial^k f_i}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_k}} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{S}_{i,j_1 \dots j_k}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + \mathcal{O}(h^{k+1}). \quad (3.52)$$

Der Ansatz geht zurück auf die Arbeiten von Brenner et al. [28] und wurde ebenfalls für das zellzentrierte, kompressible Multi-Korrekturverfahren von Pont et al. [157, 197] eingesetzt. Eine ähnliche Methode wurde zuletzt auch in der Arbeit von Nishikawa [177] vorgestellt, um eine Fluss-Korrektur

für knoten- und zellzentrierte Gitter mit einer zweiten räumlichen Ordnung herzuleiten. In dieser Arbeit wird Gleichung (3.52) verwendet, um konvektive Flüsse $f_i = (\rho u_i \phi)$ mit einer dritten räumlichen Ordnung und diffusive Flüsse $f_i = \rho D \partial \phi / \partial x_i$ mit einer zweiten räumlichen Ordnung zu approximieren. Zur Herleitung werden die entsprechenden konvektiven und diffusiven Flussintegrale im weiteren Verlauf der Arbeit gekennzeichnet durch:

$$F_C^{(\alpha\beta)} := \iint_{A_{\alpha\beta}} (\rho u_i \phi) n_i \, dA, \quad \text{und} \quad F_D^{(\alpha\beta)} := \iint_{A_{\alpha\beta}} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) n_i \, dA. \quad (3.53)$$

3.3.1 Berechnung der konvektiven Flüsse

Für eine k -exakte Approximation der konvektiven Flüsse wird die Flussfunktion $f_i = (\rho u_i \phi)$ zunächst durch eine Rekonstruktion des Impulses (ρu_i) sowie durch eine Rekonstruktion der transportierten Feldgröße ϕ substituiert. Das resultierende Produkt dieser beiden Funktionen kann dann am Punkt \mathbf{x}_Γ berechnet werden. Gleichermaßen lassen sich auch die Ableitungen von f_i an der Stelle \mathbf{x}_Γ approximieren. Unter Einführung der integrierten Massenströme \dot{m}

$$\dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} = (\rho u_i) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} \mathcal{S}_{i,j}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} (\rho u_i) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} \mathcal{S}_{i,jk}^{(\alpha\beta,\Gamma)}, \quad (3.54a)$$

$$\dot{m}_i^{(\alpha\beta,\Gamma)} = (\rho u_j) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \mathcal{S}_{j,i}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_j) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} \mathcal{S}_{j,ki}^{(\alpha\beta,\Gamma)}, \quad (3.54b)$$

$$\dot{m}_{ij}^{(\alpha\beta,\Gamma)} = (\rho u_k) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \mathcal{S}_{k,ij}^{(\alpha\beta,\Gamma)}, \quad (3.54c)$$

und durch die Anwendung der Produktregel auf das Produkt der Rekonstruktionsfunktionen von (ρu_i) und ϕ lässt sich das konvektive Flussintegral umformulieren, was im Folgenden für eine 2-exakte Rekonstruktion dargestellt wird

$$F_C^{(\alpha,\beta)} = \dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} + \dot{m}_i^{(\alpha\beta,\Gamma)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} + \frac{1}{2} \dot{m}_{ij}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h^3). \quad (3.55)$$

Es sei zu erwähnen, dass alle diese Terme mit $|A_{\alpha\beta}|$ skalieren, was der Definition der geometrischen Flächenmomente geschuldet ist. Die Massenstrom-Tensoren in den Gleichungen (3.54b) und (3.54c) skalieren außerdem mit $\mathcal{O}(h^2)$ und $\mathcal{O}(h)$, wodurch insgesamt eine Fehlerordnung von $\mathcal{O}(h^3)$ bei der Flussberechnung in Gleichung (3.55) erhalten bleibt. Die Berechnung des Impulses (ρu_i) am Punkt \mathbf{x}_Γ erfolgt aus den rekonstruierten Werten von ρ und u_i über die folgenden Relationen, welche sich

ebenfalls durch die Anwendung der Produktregel ergeben

$$(\rho u_i) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} = \rho \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} u_i \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)}, \quad (3.56a)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} = \rho \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} + u_i \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)}, \quad (3.56b)$$

$$\frac{\partial^2(\rho u_i)}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} = \rho \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} + u_i \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} + \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} + \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)}. \quad (3.56c)$$

Es verbleibt zu definieren, wie die Feldgrößen ρ , u_i und ϕ am Punkt \mathbf{x}_Γ über die Rekonstruktionsfunktionen $\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\alpha)$ und $\phi^{(k+1)}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_\beta)$ der beiden angrenzenden Elemente Ω_α und Ω_β zu berechnen sind. Für die transportierte Feldgröße ϕ wird ein Ansatz gewählt, welcher ebenfalls in den Arbeiten von Mary und Sagaut [152] sowie Pont et al. [197] Anwendung findet und definiert ist durch

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} = \frac{1}{2} \left[\phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) + \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) \right] - \frac{\theta}{2} \left[\phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) - \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) \right], \quad (3.57)$$

wobei der Index u das von $A_{\alpha\beta}$ stromaufwärts gelegene Element und d das stromabwärts gelegene Element bezeichnet. Diese Formulierung steht in Analogie zu dem zentralen Diskretisierungsschema von Nessyahu und Tadmor [168], was auch als generalisierter Lax-Friedrichs-Fluss [136] bezeichnet wird. Der vordere Term in Gleichung (3.57) stellt eine rein zentrale Approximation von $\phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)}$ dar. Der hintere Term steuert das Maß mit dem die Lösung von der stromaufwärts gelegenen Seite bevorzugt und somit numerische Dissipation eingebracht wird. Er beeinflusst dadurch aber nicht die formale Verfahrensordnung. Dieser Term wird über den Parameter $\theta \in [0,1]$ aktiviert, dessen Berechnung und Einfluss auf den numerischen Fehler in Abschnitt 3.5 im Detail beleuchtet wird. Die Rekonstruktion von Ableitungen am Punkt \mathbf{x}_Γ erfolgt analog zu Gleichung (3.57) über

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) + \frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) \right] \\ &\quad - \frac{\theta}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) - \frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) \right], \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) \right] \\ &\quad - \frac{\theta}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) - \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) \right]. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Unter Berücksichtigung der in Abschnitt 3.2.4 dargestellten Methode zur Limitierung des Rekonstruktionspolynoms lassen sich die konvektiven Flüsse damit durch die folgenden zwei Terme darstellen

$$F_C^{(\alpha\beta)} = F_{C,LO}^{(\alpha\beta)} + F_{C,HO}^{(\alpha\beta)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h^3). \quad (3.60)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Der Term $F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}$ beinhaltet die Beiträge einer 0-exakten Rekonstruktion und wird berechnet durch

$$F_{C,LO}^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} \dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} (\bar{\phi}_u + \bar{\phi}_d) - \frac{\theta}{2} \dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} (\bar{\phi}_d - \bar{\phi}_u). \quad (3.61)$$

Für $\theta = 1$ geht dieser Term in ein reines Aufwindverfahren über, was notwendig ist, um im Sinne von Godunovs Theorem die Entstehung neuer Extrema zu unterbinden. Der Term $F_{C,HO}^{(\alpha\beta)}$ beinhaltet die Beiträge zur Rekonstruktion mit $k > 0$ und ist definiert durch

$$\begin{aligned} F_{C,HO}^{(\alpha\beta)} = & \dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \left[\psi_u \left(\frac{1+\theta}{2} \right) \Delta\phi_u^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma) + \psi_d \left(\frac{1-\theta}{2} \right) \Delta\phi_d^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma) \right] \\ & + \dot{m}_i^{(\alpha\beta,\Gamma)} \left[\psi_u \left(\frac{1+\theta}{2} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(2)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) + \psi_d \left(\frac{1-\theta}{2} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(2)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) \right] \\ & + \frac{1}{2} \dot{m}_{ij}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \left[\psi_u \left(\frac{1+\theta}{2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(1)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_u) + \psi_d \left(\frac{1-\theta}{2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(1)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_d) \right]. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Er lässt sich über die Limitervariablen ψ_u und ψ_d deaktivieren, welche durch Gleichung (3.48) in Abhängigkeit der transportierten Feldgröße ϕ berechnet werden. Die Aufteilung des konvektiven Flusses in zwei Terme wird auch bei der Lösung des gesamten Gleichungssystems berücksichtigt. Da $F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}$ lediglich die Information der benachbarten Elemente enthält, führt eine implizite Behandlung dieses Terms zu einem kompakten Elementmolekül in der Systemmatrix. Im Gegensatz dazu enthält der Term $F_{C,HO}^{(\alpha\beta)}$ auch Ableitungen von ϕ und somit indirekt die Information von weiter entfernten Elementen. Eine implizite Berechnung des Terms würde somit ein großes Elementmolekül in der Systemmatrix verursachen und eine ständige Aktualisierung der Ableitungen in den Subiterationen des Lösungsalgorithmus verlangen. Um Rechenzeit einzusparen, wird daher lediglich der Term $F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}$ implizit behandelt, wohingegen der Term $F_{C,HO}^{(\alpha\beta)}$ stets explizit behandelt wird. Dieser Ansatz wird auch als verzögerten Korrektur (*Deferred-Correction*) bezeichnet [73], welcher auf die Arbeit von Khosla und Rubin [125] zurückgeht und in Kapitel 3.4 im Detail beschrieben wird. Abschließend sei zu erwähnen, dass für die Variablen ρ und u_i in Gleichung (3.56) zur Berechnung der integrierten Massenströme \dot{m} gegebenenfalls auch eine Limitierung erfolgt. Im Gegensatz zur transportierten Feldgröße ϕ werden sie jedoch stets zentral mit $\theta = 0$ berechnet.

3.3.2 Berechnung der diffusiven Flüsse

Die Berechnung der diffusiven Flüsse erfolgt durch Einsetzen der Flussfunktion $f_i = \rho D (\partial\phi/\partial x_i)$ in Gleichung (3.52)

$$F_D^{(\alpha\beta)} = (\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} + (\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{S}_{i,j}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h^2). \quad (3.63)$$

Hierbei werden räumliche Änderungen des Produktes ρD vernachlässigt und der Wert $(\rho D)|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ an den Elementoberflächen wird durch eine arithmetische Mittelung approximiert

$$(\rho D)|_{\mathbf{x}_\Gamma} \approx \frac{1}{2} (\bar{\rho}_\alpha \bar{D}_\alpha + \bar{\rho}_\beta \bar{D}_\beta). \quad (3.64)$$

Diese Vereinfachung wird für die Testfälle dieser Arbeit als gerechtfertigt betrachtet. Sie bietet jedoch einen Ansatz für weitere Verbesserung in zukünftigen Arbeiten. Im Gegensatz zu den konvektiven Flüssen kann das Oberflächenintegral in Gleichung (3.63) mit einem k -exakten Rekonstruktionspolynom nur mit k -ter Fehlerordnung approximiert werden. Für die Approximation des Oberflächenintegrals mit $\mathcal{O}(h^{k+1})$ wäre eine höhere Ableitung nötig, als es der Grad des Rekonstruktionspolynoms zulässt. Die räumliche Genauigkeit der diffusiven Flüsse ist somit inhärent auf einer geringeren Ordnung begrenzt, als es für die konvektiven Flüsse der Fall ist.

Zur Schließung des Gleichungssystems gilt es zunächst den Gradienten $\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ an den Elementoberflächen durch die Rekonstruktionspolynome der anliegenden Zellen auszudrücken. Naheliegender wäre eine zentrale Mittelung der benachbarten Gradienten von ϕ^1 . Dieser Ansatz neigt jedoch dazu, die Lösung zwischen benachbarten Elementen zu entkoppeln, was sich in der Entstehung von parasitären Moden bemerkbar macht. Eine stärkere Kopplung des diskreten Gleichungssystems wird erreicht, wenn der Gradient $\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ in Abhängigkeit der anliegenden volumetrischen Mittelwerte $\bar{\phi}_\alpha$ und $\bar{\phi}_\beta$ berechnet wird. Dies ist die Grundlage der Berechnungsmethode von Mathur und Murthy [153], welche in dieser Arbeit für die Diskretisierung der diffusiven Flüsse verwendet und im Sinne der k -exakte Rekonstruktion erweitert wird. Das Mathur-Murthy-Schema wird auch als *Face-Tangent-Scheme* [173, 174, 234] bezeichnet und häufig für die Berechnung diffusiver Flüsse in unstrukturierten Strömungslösern eingesetzt [49]. Das Verfahren ist einzureihen in die Arbeiten von Muzaferija und Gosman [165] sowie Demirdžić und Muzaferija [50], welche ebenfalls häufig für die Diskretisierung der diffusiven Flüsse auf unstrukturierten Gittern verwendet werden. All diese Verfahren beruhen auf der Aufteilung des Skalarprodukts zwischen Gradient und Oberflächennormale $(\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\Gamma})\mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)}$ in einen orthogonalen und einen nicht-orthogonalen Anteil [120]

$$\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\bigg|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} = \underbrace{\varepsilon^{(\alpha\beta)} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\bigg|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta x_i^{(\alpha\beta)}}_{\text{orthogonal}} + \underbrace{\varepsilon^{(\alpha\beta)} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\bigg|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\beta)}}_{\text{nicht-orthogonal}}, \quad (3.65)$$

wofür der Distanzvektor $\Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\beta)} = \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} / \varepsilon^{(\alpha\beta)} - \Delta x_i^{(\alpha\beta)}$ eingeführt wird. Der Faktor $\varepsilon^{(\alpha\beta)}$ stellt einen Freiheitsgrad dar, durch welchen sich die verschiedenen Diskretisierungsschemata von Muzaferija und Gosman [165], Demirdžić und Muzaferija [50] und Mathur und Murthy [153] darstellen lassen. Eine Übersicht zu den verschiedenen Ansätzen ist beispielsweise in der Arbeit von Jasak [120] zu finden. Für die gegenwärtige Arbeit wird der Faktor in Anlehnung an das Mathur-Murthy-Schema berechnet

¹Ähnlich wie in Gleichung (3.58) für die Berechnung der konvektiven Flüsse für $\theta = 0$.

durch

$$\varepsilon^{(\alpha\beta)} = \frac{\mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)}}{\Delta x_j^{(\alpha\beta)} \mathcal{S}_j^{(\alpha\beta)}}. \quad (3.66)$$

Diese Formulierung wird in der Arbeit von Jasak [120] auch als überrelaxierter Ansatz bezeichnet und führt zu einer stärkeren Gewichtung des nicht-orthogonalen Anteils in Gleichung (3.65), wenn die Oberflächennormale $\mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)}$ und der Distanzvektor $\Delta x_i^{(\alpha\beta)}$ nicht aneinander ausgerichtet liegen. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 3.5 dargestellt.

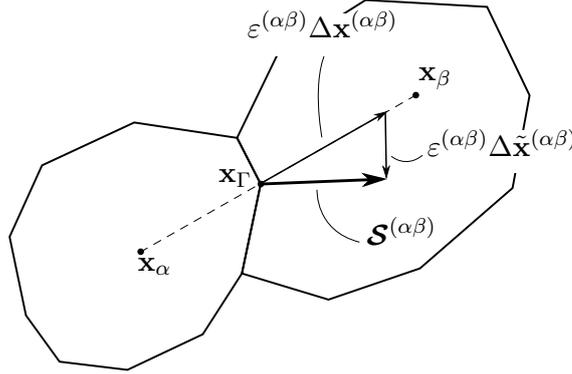


Abbildung 3.5: Aufteilung der Flächennormale $\mathcal{S}^{\alpha\beta}$ in den auf $\Delta \mathbf{x}^{(\alpha\beta)}$ projizierten Anteil $\varepsilon^{(\alpha\beta)} \Delta \mathbf{x}^{(\alpha\beta)}$ sowie den dazu orthogonalen Anteil $\varepsilon^{(\alpha\beta)} \Delta \tilde{\mathbf{x}}^{(\alpha\beta)}$.

Ziel ist es nun, die Skalarprodukte $(\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\Gamma})\Delta x_i^{(\alpha\beta)}$ und $(\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\Gamma})\Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\beta)}$ über die rekonstruierten Lösungen der anliegenden Elemente Ω_α und Ω_β zu approximieren, wobei gleichzeitig die k -exakten Kriterien (3.9) und (3.10) erhalten bleiben sollen. Für die Herleitung einer solchen Formulierung wird eine Taylorreihen-Entwicklung der Lösung um den Punkt \mathbf{x}_Γ auf der Oberfläche $A_{\alpha\beta}$ unternommen. Für den Fall einer 2-exakten Rekonstruktion ergibt sich

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi|_{\mathbf{x}_\Gamma} + \frac{\partial\phi}{\partial x_i}|_{\mathbf{x}_\Gamma} (x_i - x_{i,\Gamma}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}|_{\mathbf{x}_\Gamma} (x_i - x_{i,\Gamma})(x_j - x_{j,\Gamma}) + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.67)$$

Diese Gleichung wird über die benachbarten Elemente Ω_α und Ω_β volumengemittelt, wodurch sich die folgenden Relationen ergeben

$$\bar{\phi}_\alpha = \phi|_{\mathbf{x}_\Gamma} + \frac{\partial\phi}{\partial x_i}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{M}_i^{(\alpha,\Gamma)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{M}_{ij}^{(\alpha,\Gamma)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.68a)$$

$$\bar{\phi}_\beta = \phi|_{\mathbf{x}_\Gamma} + \frac{\partial\phi}{\partial x_i}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{M}_i^{(\beta,\Gamma)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \mathcal{M}_{ij}^{(\beta,\Gamma)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.68b)$$

Werden diese Gleichungen voneinander subtrahiert, lässt sich die Projektion des Gradienten auf den Distanzvektor $\Delta \mathbf{x}^{(\alpha\beta)}$ ausdrücken durch

$$\frac{\partial\phi}{\partial x_i}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta x_i^{(\alpha\beta)} = (\bar{\phi}_\beta - \bar{\phi}_\alpha) - \frac{\partial\phi}{\partial x_i}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta \mathcal{M}_i^{(\alpha\beta)} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta \mathcal{M}_{ij}^{(\alpha\beta)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.69)$$

wobei die folgenden Korrekturterme unter Berücksichtigung von Gleichung (3.4) eingeführt werden

$$\Delta \mathcal{M}_i^{(\alpha\beta)} := \mathcal{M}_{i,\beta} - \mathcal{M}_{i,\alpha} \quad (3.70a)$$

$$\Delta \mathcal{M}_{ij}^{(\alpha\beta)} := \underbrace{\mathcal{M}_{ij,\beta} - \mathcal{M}_{ij,\alpha} + \frac{1}{2} \Delta x_i^{(\alpha\beta)} (\mathcal{M}_{j,\beta} + \mathcal{M}_{j,\alpha}) + \frac{1}{2} \Delta x_j^{(\alpha\beta)} (\mathcal{M}_{i,\beta} + \mathcal{M}_{i,\alpha})}_{=\mathcal{M}_{ij}^{(\beta,\Gamma)} - \mathcal{M}_{ij}^{(\alpha,\Gamma)}}. \quad (3.70b)$$

Zur Herleitung der Projektion des Gradienten auf den orthogonalen Distanzvektor $\Delta \tilde{\mathbf{x}}^{(\alpha\beta)}$ wird das Taylorpolynom (3.67) am Punkt $\tilde{\mathbf{x}}_\Gamma = \mathbf{x}_\Gamma + \Delta \tilde{\mathbf{x}}^{(\alpha\beta)}$ ausgewertet, worüber sich die folgende Beziehung ergibt

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\beta)} = \left(\phi(\tilde{\mathbf{x}}_\Gamma) - \phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \right) - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\Gamma} \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\beta)} \Delta \tilde{x}_j^{(\alpha\beta)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.71)$$

Die unbekanntenen Punktwerte werden nun über eine arithmetische Mittelwertbildung der benachbarten Rekonstruktionspolynome approximiert

$$\phi(\tilde{\mathbf{x}}_\Gamma) = \frac{1}{2} \left(\phi^{(3)}(\tilde{\mathbf{x}}_\Gamma; \mathbf{x}_\alpha) + \phi^{(3)}(\tilde{\mathbf{x}}_\Gamma; \mathbf{x}_\beta) \right) + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.72a)$$

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} = \frac{1}{2} \left(\phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_\alpha) + \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_\beta) \right) + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.72b)$$

Ebenso werden auch die Ableitungen am Punkt \mathbf{x}_Γ zentral approximiert

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\Gamma} = \frac{1}{2} \left(\left. \frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_\alpha) + \left. \frac{\partial}{\partial x_i} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_\beta) \right) \right) + \mathcal{O}(h^2), \quad (3.73a)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\Gamma} = \frac{1}{2} \left(\left. \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_\alpha) + \left. \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \phi^{(3)}(\mathbf{x}_\Gamma; \mathbf{x}_\beta) \right) \right) + \mathcal{O}(h). \quad (3.73b)$$

Die daraus gewonnenen Punktwerte können nun in die Gleichungen (3.69) und (3.71) eingesetzt werden. Über Gleichung (3.74) lässt sich dann für eine 2-exakte Rekonstruktion der diffusive Fluss $F_C^{(\alpha\beta)}$ ausdrücken durch

$$F_D^{(\alpha\beta)} = F_{D,LO}^{(\alpha\beta)} + F_{D,STAB}^{(\alpha\beta)} + F_{D,HO}^{(\alpha\beta)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h^2). \quad (3.74)$$

Die Terme $F_{D,LO}^{(\alpha\beta)}$ und $F_{D,STAB}^{(\alpha\beta)}$ sind definiert durch

$$F_{D,LO}^{(\alpha\beta)} = (\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \varepsilon^{(\alpha\beta)} (\bar{\phi}_\beta - \bar{\phi}_\alpha), \quad (3.75a)$$

$$F_{D,STAB}^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} (\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \varepsilon^{(\alpha\beta)} \left(\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} + \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\beta}^{(2)} \right) \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\beta)}, \quad (3.75b)$$

und sind ebenfalls im konventionellen Mathur-Murthy-Schema zu finden [153]. Analog zu den konvektiven Flüssen erfolgt die Berechnung dieses Terms mit dem *Deferred-Correction*-Ansatz [125]. Dabei wird der vordere Term für die Lösung des gesamten Gleichungssystems implizit und der hintere Teil

explizit behandelt [49, 165], was sich durch eine höhere Diagonaldominanz der Systemmatrix und somit in einem robusteren Lösungsverfahren äußert [120]. Der Term $F_{D,HO}^{(\alpha\beta)}$ stellt einen Korrekturterm dar, durch welchen das Schema den k -exakten Kriterien (3.9) und (3.10) genügt. Er ist definiert durch

$$\begin{aligned}
F_{D,HO}^{(\alpha\beta)} = & -\frac{1}{2}(\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \varepsilon^{(\alpha\beta)} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} + \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(2)} \right) \Delta\mathcal{M}_i^{(\alpha\beta)} \\
& - \frac{1}{4}(\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \varepsilon^{(\alpha\beta)} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} + \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} \right) \left(\Delta\mathcal{M}_{ij}^{(\alpha\beta)} - \frac{2}{\varepsilon^{(\alpha\beta)}} \mathcal{S}_{i,j}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \right) \\
& + \frac{1}{8}(\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \varepsilon^{(\alpha\beta)} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} - \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \right) \left[\Delta x_i^{(\alpha\beta)} \left(\Delta\mathcal{M}_j^{(\alpha\beta)} - \Delta\tilde{x}_j^{(\alpha\beta)} \right) \right] \\
& + \frac{1}{8}(\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \varepsilon^{(\alpha\beta)} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(1)} - \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \right) \left[\Delta x_j^{(\alpha\beta)} \left(\Delta\mathcal{M}_i^{(\alpha\beta)} - \Delta\tilde{x}_i^{(\alpha\beta)} \right) \right].
\end{aligned} \tag{3.76}$$

In diesem Ausdruck ist auch der Term enthalten, welcher aus dem Frobenius-Skalarprodukt zwischen der Hesse-Matrix $\partial^2\phi/(\partial x_i\partial x_j)|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ und dem ersten Flächenmoment $\mathcal{S}_{i,j}^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ hervorgeht, um das Oberflächenintegral in Gleichung (3.63) mit einer höheren Ordnung zu approximieren.

3.3.3 Flussberechnung an Rändern

Grundsätzlich lassen sich die in **ThetaCOM** implementierten Randbedingungen in Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen unterteilen. Bei Dirichlet-Randbedingung werden die Werte der Feldgrößen auf der Berandung des Rechengebiets direkt vorgegeben. Bei Neumann-Randbedingungen erfolgt im Gegensatz dazu die Vorgabe von Ableitungen der Feldgrößen. Die Berechnung konvektiver Flüsse an Dirichlet-Randbedingung sowie diffusiver Flüsse an Neumann-Randbedingungen ist somit trivial, da die vorgegebenen Werte direkt in die jeweilige Flussfunktion eingesetzt werden können. Die Berechnung diffusiver Flüsse an Dirichlet-Rändern erfordert jedoch eine gesonderte Behandlung, um die k -exakten Kriterien (3.9) und (3.10) zu erhalten, was im Folgenden genauer untersucht wird. Wie in Abschnitt 3.1.2 bereits erläutert wurde, sind Elemente auf der Berandung des Rechengebiets je nach aufgeprägter Randbedingung unterschiedlich konstruiert, wobei für Dirichlet-Randbedingungen stets verschobene Randelemente vorliegen. Der diffusive Fluss einer Feldgröße an der Randfläche $A_{\alpha\delta}$ eines solchen Elements Ω_α wird diskretisiert durch

$$F_D^{(\alpha\delta)} = (\rho D) \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)} + |A_{\alpha\delta}| \mathcal{O}(h). \tag{3.77}$$

Im Gegensatz zu den inneren Flüssen wird auf das zweite Flächenmoment $\mathcal{S}_{i,j}^{(\alpha\delta,\delta)}$ für die Oberflächenintegration verzichtet, da diese auf den Oberflächen der Randelemente vergleichsweise kleine Werte annehmen. Das Produkt aus Dichte und Diffusionskoeffizient an der Oberfläche $A_{\alpha\delta}$ wird aus den Werten des Randelements approximiert zu $(\rho D)|_{\mathbf{x}_\delta} \approx \bar{\rho}_\alpha \bar{D}_\alpha$. Es erfolgt eine Aufteilung des Skalarprodukts $(\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\Gamma})\mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)}$ in einen orthogonalen und einen nicht-orthogonalen Anteil, analog

zu den inneren Flüssen in Gleichung (3.65)

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)} = \varepsilon^{(\alpha\delta)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} + \varepsilon^{(\alpha\delta)} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)}, \quad (3.78)$$

mit den Distanzvektoren $\Delta x_i^{(\alpha\delta)} = x_{i,\delta} - x_{i,\alpha}$ und $\Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)} = \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)} / \varepsilon^{(\alpha\delta)} - \Delta x_i^{(\alpha\delta)}$. Die Berechnung des Faktors $\varepsilon^{(\alpha\delta)}$ erfolgt analog zu den inneren Flüssen durch Gleichung (3.66). Zur Bestimmung des orthogonalen Anteils muss das Produkt $\partial \phi / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_i^{(\alpha\delta)}$ approximiert werden, wofür ein Taylorpolynom zweiten Grades um den Punkt $x_{i,\delta}$ auf der Randfläche $A_{\alpha\delta}$ entwickelt wird:

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta} - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.79a)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} = \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^2), \quad (3.79b)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (3.79b) in (3.79a) lässt sich das Produkt $\partial \phi / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_i^{(\alpha\delta)}$ ausdrücken durch

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} = 2 \left(\phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta} - \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \right) - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.80)$$

Hierbei ist zu erwähnen, dass der Punktwert $\phi|_{\mathbf{x}_\delta}$ durch die Randbedingung vorgegeben wird und somit bekannt ist. Die übrigen Werte am Punkt \mathbf{x}_α können theoretisch durch das Rekonstruktionspolynom des Elements Ω_α bestimmt werden, was jedoch nicht zu einem stabilen Verfahren führt. Stattdessen ist es notwendig, das Produkt $(\partial \phi / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\alpha}) \Delta x_i^{(\alpha\delta)}$ durch die Punktwerte $\phi|_{\mathbf{x}_\delta}$ und $\phi|_{\mathbf{x}_\alpha}$ auszudrücken, was in einer stärkeren Kopplung des diskreten Gleichungssystems resultiert. Hierfür wird eine weitere Taylorreihe um den Punkt \mathbf{x}_α entwickelt:

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta} = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (3.81)$$

was nach einer Umstellung zur folgenden Formulierung für das Produkt $(\partial \phi / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\alpha}) \Delta x_i^{(\alpha\delta)}$ führt:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\delta} - \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.82)$$

Dieser Ausdruck wird in Gleichung (3.80) eingesetzt. Zur Berechnung des nicht-orthogonalen Anteils $(\partial \phi / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\delta}) \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)}$ in Gleichung (3.78) wird der Gradient an der Randfläche aus dem inneren des Elements Ω_α extrapoliert und mit dem Distanzvektor $\Delta \tilde{\mathbf{x}}^{(\alpha\delta)}$ multipliziert

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\delta} \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} \right) \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)} + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.83)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Durch einsetzen der Gleichungen (3.80) und (3.83) in Gleichung (3.78) und unter Verwendung der k -exakten Punktwerte und Ableitungen von ϕ lässt sich das Skalarprodukt $(\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\delta})\mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)}$ schließlich ausdrücken durch

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\Big|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)} &= \varepsilon^{(\alpha\delta)} \left(\phi\Big|_{\mathbf{x}_\delta} - \phi\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(3)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \Delta x_i^{(\alpha\delta)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} \right) \\ &+ \varepsilon^{(\alpha\delta)} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} + \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \Delta x_j^{(\alpha\delta)} \right) \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h^2). \end{aligned} \quad (3.84)$$

Für die k -exakte Flussberechnung wird der Punktwert von $\phi|_{\mathbf{x}_\alpha}$ und die entsprechenden Ableitungen am Punkt \mathbf{x}_α durch das Rekonstruktionspolynom des Elements Ω_α approximiert. Damit lässt sich die Berechnung des Flusses durch die folgenden drei Terme darstellen

$$F_D^{(\alpha\delta)} = F_{D,LO}^{(\alpha\delta)} + F_{D,STAB}^{(\alpha\delta)} + F_{D,HO}^{(\alpha\delta)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h). \quad (3.85)$$

Die ersten beiden Terme $F_{D,LO}^{(\alpha\delta)}$ und $F_{D,STAB}^{(\alpha\delta)}$ sind das Pendant zum inneren Fluss, der sich mit dem konventionellen Schema von Mathur und Murthy [153] ergibt. Sie sind definiert durch

$$F_{D,LO}^{(\alpha\delta)} = (\rho D)\Big|_{\mathbf{x}_\delta} \varepsilon^{(\alpha\delta)} \left(\phi\Big|_{\mathbf{x}_\delta} - \bar{\phi}_\alpha \right) \quad (3.86a)$$

$$F_{D,STAB}^{(\alpha\delta)} = (\rho D)\Big|_{\mathbf{x}_\delta} \varepsilon^{(\alpha\delta)} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)} \Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)}. \quad (3.86b)$$

Der Term $F_{D,HO}^{(\alpha\delta)}$ stellt einen Korrekturterm für die k -exakte Diskretisierung dar und ist für eine 2-exakte Rekonstruktion definiert durch

$$\begin{aligned} F_{D,HO}^{(\alpha\delta)} &= (\rho D)\Big|_{\mathbf{x}_\delta} \varepsilon^{(\alpha\delta)} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(2)} \mathcal{M}_{i,\alpha} \\ &+ \frac{1}{2} (\rho D)\Big|_{\mathbf{x}_\delta} \varepsilon^{(\alpha\delta)} \frac{\partial^2\phi}{\partial x_i\partial x_j}\Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)} \left[\mathcal{M}_{ij,\alpha} + \left(\Delta x_i^{(\alpha\delta)} + 2\Delta \tilde{x}_i^{(\alpha\delta)} \right) \Delta x_j^{(\alpha\delta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.87)$$

3.3.4 Berechnung des Schubspannungstensors

Die gezeigte Diskretisierung der diffusiven Flüsse lässt sich direkt auf die Transportgleichungen der Spezies-Massenbrüche und der Enthalpie anwenden. Für die Erhaltungsgleichungen des Impulses ist aufgrund der Definition des Schubspannungstensors τ_{ij} in Gleichung (2.7) jedoch eine gesonderte Betrachtung erforderlich. Zunächst wird die Berechnung an den Oberflächen $A_{\alpha\beta}$ im inneren des Rechengebiets betrachtet. Das Einsetzen von τ_{ij} als Flussfunktion in das Oberflächenintegral in

Gleichung (3.52) führt zu dem folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned} \iint_{A_{\alpha\beta}} \tau_{ij} n_j \, dA &= \iint_{A_{\alpha\beta}} \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] n_j \, dA \\ &= \underbrace{\iint_{A_{\alpha\beta}} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) n_j \, dA}_{\text{Gleichung (3.63)}} + \iint_{A_{\alpha\beta}} \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) n_j \, dA \end{aligned} \quad (3.88)$$

Es zeigt sich, dass sich der Fluss des Schubspannungstensors über Flächen im inneren des Rechengebietes in zwei Terme aufteilen lässt. Für den vorderen Term lässt sich die zuvor vorgestellte Diskretisierung der diffusiven Flüsse aus Gleichung (3.63) anwenden. Die beiden hinteren Terme verschwinden für inkompressible Fluide mit konstanter Dichte vollständig. Der Term mit $\partial u_k / \partial x_k$ reduziert sich aufgrund der Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes und der übrige Term mit $\partial u_j / \partial x_i$ verschwindet bei einer Bilanzierung über alle Oberflächen des Elements Ω_α . Für Fluide mit variabler Dichte und niedrigen Mach-Zahlen gilt es beide Term jedoch zu berücksichtigen, was mit den entsprechend k -exakt rekonstruierten Gradienten über die folgende Approximation erfolgt

$$\iint_{A_{\alpha\beta}} \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) n_j \, dA \approx \mu \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(k)} - \delta_{ij} \frac{2}{6} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_l} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)} + \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \Big|_{\mathbf{x}_\beta}^{(k)} \right) \right] \mathcal{S}_j^{(\alpha\beta)}. \quad (3.89)$$

Für den Schubspannungstensor an Wand-Randbedingungen erfolgt eine gesonderte Berechnung. Dieser lässt sich für eine Randfläche $A_{\alpha\delta}$ an einer Wand zunächst ausdrücken durch

$$\iint_{A_{\alpha\delta}} \tau_{ij} n_j \, dA = \iint_{A_{\alpha\delta}} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} n_j \, dA + \underbrace{\iint_{A_{\alpha\delta}} \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} n_j \, dA}_{=0} - \underbrace{\iint_{A_{\alpha\delta}} \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} n_j \, dA}_{=0}. \quad (3.90)$$

An Wänden wird eine Dirichlet-Randbedingung mit $\mathbf{u}|_{\mathbf{x}_\Gamma} = \mathbf{0}$ aufgeprägt. Außerdem wird das Geschwindigkeitsfeld als divergenzfrei behandelt, wodurch sich der dritte Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.90) zu null ergibt. Zusätzlich wird gefordert, dass Anteile des Schubspannungstensors normal zur Wand verschwinden, was sich aus der Kontinuitätsgleichung ableiten lässt und häufig als zusätzliche Randbedingung an Wänden aufgeprägt wird [73]. Um diese Bedingung für eine beliebig orientierte Randfläche $A_{\alpha\delta}$ auszudrücken, wird der Geschwindigkeitsvektor $u_i = u_{i,n} + u_{i,t}$ in die Anteile $u_{i,n}$ und $u_{i,t}$ aufgeteilt, welche jeweils normal und tangential zu $A_{\alpha\delta}$ ausgerichtet sind. Der normale Anteil lässt sich mit der Oberflächennormalen $\mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)}$ berechnen durch

$$u_{i,n} = \frac{u_j \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)}}{\mathcal{S}_k^{(\alpha\delta)} \mathcal{S}_k^{(\alpha\delta)}} \mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)}. \quad (3.91)$$

Durch Einsetzen des normalen und tangentialen Geschwindigkeitsanteils in den Ausdruck $(\partial u_j / \partial x_i) n_j$ und unter Approximation des Oberflächenintegrals reduziert sich der zweite Term auf der rechten

Seite von Gleichung (3.90) ebenfalls zu null

$$\mu \left|_{\mathbf{x}_\delta} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} = \mu \left|_{\mathbf{x}_\delta} \underbrace{\frac{\partial u_{j,n}}{\partial x_i}}_{=0} \right|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} + \mu \left|_{\mathbf{x}_\delta} \underbrace{\frac{\partial u_{j,t}}{\partial x_i}}_{=0} \right|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} = 0. \quad (3.92)$$

Der hintere Term entfällt, da der tangentielle Geschwindigkeitsanteil $u_{j,t}$ stets senkrecht zum Normalenvektor der Oberfläche ausgerichtet ist. Der vordere Term entfällt infolge dem geforderten Verschwinden der normalen Anteile des Schubspannungstensors. Letzteres führt auch dazu, dass sich schließlich das verbleibende Integral aus Gleichung (3.90) approximieren lässt zu

$$\begin{aligned} \iint_{A_{\alpha\delta}} \tau_{ij} n_j \, dA &= \mu \left|_{\mathbf{x}_\delta} \frac{\partial u_{i,t}}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h) \\ &= \mu \left|_{\mathbf{x}_\delta} \underbrace{\left(\delta_{ik} - \frac{\mathcal{S}_i^{(\alpha\delta)} \mathcal{S}_k^{(\alpha\delta)}}{\mathcal{S}_l^{(\alpha\delta)} \mathcal{S}_l^{(\alpha\delta)}} \right)}_{:=W_{ik}} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}_\delta} \mathcal{S}_j^{(\alpha\delta)} + |A_{\alpha\beta}| \mathcal{O}(h). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Somit lässt sich der diffusive Impulstransport an Wänden über Gleichung (3.85) und durch eine Transformation mit der Matrix W_{ik} berechnen, um der zusätzlichen Randbedingung von verschwindenden normalen Schubspannungsanteilen zu genügen.

3.4 Die Projektionsmethode zur Lösung der Transportgleichungen bei niedrigen Mach-Zahlen

Kompressible Strömungsprobleme werden oft mit dichtebasierten Berechnungsmethoden simuliert, welche den hyperbolischen Charakter² des zugrunde liegenden Gleichungssystems ausnutzen, um die Entstehung von Schockwellen und anderen Diskontinuitäten akkurat abzubilden [4, 73]. Dazu wird das Gleichungssystem üblicherweise vollständig gekoppelt gelöst, die Dichte als unabhängige Lösungsvariable behandelt und der Druck über die Zustandsgleichung des Gases berechnet [73]. Diese Methodik lässt sich jedoch nicht unmittelbar auf die Transportgleichungen niedriger Mach-Zahlen übertragen, da die Dichte nach der Vernachlässigung von Kompressibilitätseffekten lediglich mit dem räumlich konstanten Druckanteil p_0 über die Zustandsgleichung (2.3) in Relation steht. Zudem induziert der dynamische Druckanteil p_d in den Impulserhaltungsgleichungen (2.1b) einen elliptischen Charakter in das Gleichungssystem [4]. Zur Lösung haben sich daher sogenannte Druckkorrekturverfahren etabliert, welche ihre Ursprünge in der Simulation inkompressibler Fluide haben [73]. Diesen Verfahren liegt eine entkoppelte, sequentielle Behandlung der Transportgleichungen zugrunde, was zu einer effizienten Linearisierung des Gleichungssystems führt [4]. Aufgrund der Entkopplung sind jedoch zusätzliche Korrekturschritte notwendig, um die unabhängigen Lösungsvariablen mit ihren jeweiligen Transportgleichungen in Einklang zu bringen. Für den dynamischen Druck gilt es

²Die Ausbreitung von Information entlang charakteristischen Wellen in beliebige Richtungen [263]

beispielsweise eine elliptische Gleichung zu lösen, deren Ergebnis als Korrektur für das Geschwindigkeitsfeld agiert, welches danach die Kontinuitätsbedingung erfüllt [4]. Zu den häufig verwendeten Druckkorrektur-Verfahren zählt der *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations* (SIMPLE) Algorithmus [32] oder der *Primitive-Variable Implicit Split Operator* (PISO) Algorithmus [114]. Ein weiteres Druckkorrektur-Verfahren stellt die Projektionsmethode dar, welche in ihrer ursprünglichen Form von Chorin und Temam [36, 233] für die Simulation inkompressibler Fluide entwickelt wurde.

Die Projektionsmethode wurde in zahlreichen Arbeiten zur Lösung der Transportgleichungen reaktiver Fluide bei niedrigen Mach-Zahlen weiterentwickelt, wofür es neben der Kontinuitäts- und der Impulserhaltung auch den thermochemischen Transport zu berücksichtigen gilt. Damit gehen auch stärkere Abhängigkeiten zwischen den unabhängigen Variablen einher, weshalb die sequentielle Lösung der Transportgleichungen mit einer höheren Komplexität verbunden ist. Zur Erhöhung der Stabilität wird häufig eine zeitlich versetzte Anordnung der Feldgrößen verwendet, was im Englischen als *temporal staggering* bezeichnet wird [3, 16, 129, 147, 189, 190, 214, 226]. Oft werden die thermochemischen Transportgleichungen in einer nicht-konservativen Form gelöst, wodurch sich eine geringere Abhängigkeit von der Dichte realisieren lässt [129, 139, 166, 170, 246, 269]. Einige Arbeiten variieren hingegen die Herleitung der Druckkorrektur, sodass eine Poisson-Gleichung mit variablen Koeffizienten resultiert [129, 162, 170, 269]. Deren Lösung verlangt im Vergleich zu Poisson-Gleichungen mit konstanten Koeffizienten einen höheren numerischen Aufwand, jedoch lässt sich die Berechnung hoher Dichtegradienten realisieren. Häufig erfolgt die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems durch iterative Ansätze [129, 190, 214, 226] oder Prädiktor-Korrektor-Methoden [129, 139, 166, 246], um die Stabilität für hohe Dichtegradienten zu erhöhen. Dies hat jedoch eine mehrmalige Berechnung der aufwändigen Poisson-Gleichung pro Zeitschritt zur Folge. In Anlehnung an die Arbeit von Pierce und Moin [190, 191] wird im Folgenden ein Projektionsschritt zur iterativen Lösung der reaktiven Transportgleichungen in konservativer Form vorgestellt. Die ursprüngliche Methodik von Pierce und Moin wurde für eine strukturierte Gitterrepräsentation und mit einer zeitlichen und räumlichen Versetzung der Feldgrößen dargestellt. In der Arbeit von Shunn et al. [227] wurde die Methode außerdem in einem unstrukturierten Strömungslöser angewandt. Im Rahmen dieser Arbeit wird der Ansatz entsprechend angepasst, um die Implementierung in **ThetaCOM** ohne ein versetztes Arrangement der Feldgröße zu realisieren.

3.4.1 Algorithmus zur zeitlichen Diskretisierung des Gleichungssystems

Für die folgende Beschreibung des Lösungsalgorithmus bezeichnet ϕ^n die bekannte Lösung des aktuellen Zeitpunktes t_n , ϕ^m die Lösung einer m -ten Subiteration des Projektionsschrittes und ϕ^{n+1} die zu bestimmende Lösung des neuen Zeitpunktes t_{n+1} . Eine Übersicht des gesamten Lösungsalgorithmus ist zur Verdeutlichung in Abbildung 3.6 dargestellt. Zu Beginn eines neuen Zeitschrittes werden alle abhängigen Feldgrößen mit der aktuellen Lösung synchronisiert. Hierzu zählt neben den Größen μ^n , λ^n , c_p^n , D^n auch die Jacobi-Matrix der chemischen Produktionsdichte, welche für deren implizite Berechnung benötigt wird. Anschließend werden die expliziten Flüsse und Quellterme aller

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

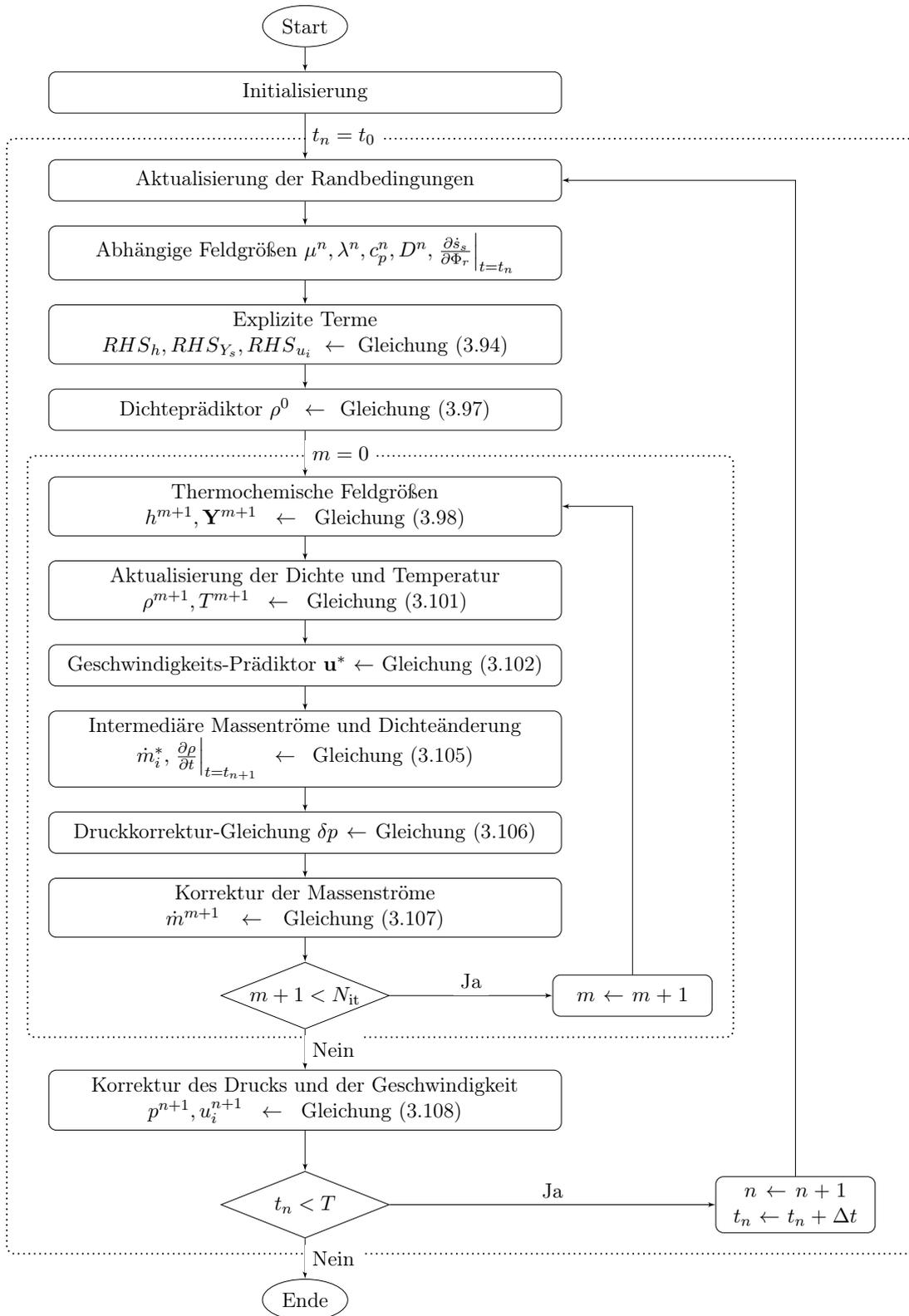


Abbildung 3.6: Ablaufdiagramm zur iterativen Projektionsmethode.

zu lösenden Transportgleichungen berechnet, welche im Folgenden mit RHS bezeichnet werden:

$$RHS_h = \frac{\rho^n h^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (\dot{m}_i^n h^n - q_i^n) + \dot{q}_{\text{rad}}^n, \quad (3.94a)$$

$$RHS_{Y_s} = \frac{\rho^n Y_s^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (\dot{m}_i^n Y_s^n - j_{i,s}^n) + \frac{1}{2} \dot{s}_s^n, \quad (3.94b)$$

$$RHS_{u_i} = \frac{\rho^n u_i^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\dot{m}_j^n u_i^n - \tau_{ij}^n) - \frac{\partial p_d^n}{\partial x_i} + g_i \rho^n. \quad (3.94c)$$

Die zeitliche Integration der konvektiven und diffusiven Flüsse, sowie des chemischen Quellterms erfolgt durch ein Crank-Nicolson Schema [47]. Der Strahlungsquellterm, die Volumenkraft infolge von Gravitation und der dynamische Druckgradient werden hingegen rein explizit behandelt.

Als nächstes erfolgt ein Prädiktorschritt zur initialen Approximation des neuen Dichtefeldes. Hierfür wird die Kontinuitätsgleichung (2.1a) explizit in der Zeit diskretisiert

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} &= \rho^n - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) dt \\ &= \rho^n - \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \Big|_{t=t_n} - \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2}{\partial t \partial x_i} (\rho u_i) \Big|_{t=t_n} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (3.95)$$

Unter Einführung der Massenflüsse $\dot{m}_i^n = \rho^n u_i^n$ erfolgt die Berechnung der beiden Ableitungsterme durch

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \Big|_{t=t_n} = \frac{\partial \dot{m}_i^n}{\partial x_i}, \quad (3.96a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t \partial x_i} (\rho u_i) \Big|_{t=t_n} = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \dot{m}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \dot{m}_i^{n-1}}{\partial x_i} \right) + \mathcal{O}(\Delta t). \quad (3.96b)$$

Die initiale Approximation des neuen Dichtefeldes $\rho^0 \approx \rho^{n+1}$ lässt sich somit berechnen mit

$$\rho^0 = \rho^n - \frac{3}{2} \Delta t \frac{\partial \dot{m}_i^n}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial \dot{m}_i^{n-1}}{\partial x_i}. \quad (3.97)$$

Neben dem Dichtefeld ρ^0 erfolgt auch die Initialisierung der Massenflüsse $\dot{m}_i^0 = \dot{m}_i^n$ mit der Lösung des vorangegangenen Zeitschrittes. Es sei zu erwähnen, dass der Dichte-Prädiktor in den Arbeiten von Pierce [190] und Shunn et al. [227] lediglich über eine Extrapolation der Dichte mit $\rho^0 = 2\rho^n - \rho^{n-1}$ berechnet wird und sich somit von der gegenwärtigen Arbeit unterscheidet. Numerische Voruntersuchungen zeigten jedoch, dass die Berechnung über Gleichung (3.97) eine höhere Stabilität für die kollokierte Anordnung der Feldgrößen und ein besseres Konvergenzverhalten bei größeren Zeitschritten bewirkt.

Als Nächstes wird eine vorgegebene Anzahl von N_{it} Subiterationen durchgeführt, um die Lösung des gesamten Transportgleichungssystems am neuen Zeitpunkt t_{n+1} zu bestimmen. Beginnend mit $m = 0$ erfolgt zunächst die vollständig gekoppelte Lösung der Spezies- und Enthalpie-

Transportgleichungen nach den Feldgrößen h^{m+1} und Y_s^{m+1} :

$$\left(\frac{\rho^m}{\Delta t}\right) h^{m+1} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (\dot{m}_i^m h^{m+1} - q_i^{m+1}) = RHS_h, \quad (3.98a)$$

$$\left(\frac{\rho^m}{\Delta t}\right) Y_s^{m+1} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} (\dot{m}_i^m Y_s^{m+1} - j_{i,s}^{m+1}) - \frac{1}{2} \dot{s}_s^{m+1} = RHS_{Y_s}. \quad (3.98b)$$

Die implizite Berechnung der chemischen Produktionsdichte \dot{s}_s^{n+1} erfolgt durch eine Linearisierung mit ihrer analytischen Jacobi-Matrix $\partial \dot{s}_s / \partial \Phi_r$ über

$$\dot{s}_s^{m+1} \approx \dot{s}_s^n + \left. \frac{\partial \dot{s}_s}{\partial \Phi_r} \right|_{t=t_n} (\Phi_r^{m+1} - \Phi_r^n), \quad (3.99)$$

wobei $\Phi = [h, Y_1, \dots, Y_{N_s-1}]^T$ den thermochemischen Zustandsvektor bezeichnet. Für detaillierte Informationen zur Berechnung der Jacobi-Matrix in **ThetaCOM** sei auf die Arbeiten von Blacha [20] und DiDomenico [52] verwiesen. Die impliziten diffusiven Flüsse q_i und $j_{i,s}$ werden berechnet durch

$$q_i^{m+1} = - \left(\frac{\lambda^n}{c_p^n}\right) \frac{\partial h^{m+1}}{\partial x_i} \quad \text{und} \quad j_{i,s}^{m+1} = - (\rho^n D_s^n) \frac{\partial Y_s^{m+1}}{\partial x_i}. \quad (3.100)$$

Nach der Bestimmung der neuen Zustände h^{m+1} und Y_s^{m+1} werden die Temperatur T^{m+1} und die Dichte ρ^{m+1} mit Hilfe der kalorischen und thermischen Zustandsgleichungen aktualisiert

$$T^{m+1} \leftarrow \left(h^{m+1} = \sum_{s=1}^{N_s} h_s(T^{m+1}) Y_s^{m+1} \right), \quad (3.101a)$$

$$\rho^{m+1} = \frac{p_0 M^{m+1}}{R_u T^{m+1}} \quad \text{mit} \quad M^{m+1} = \left(\sum_{s=1}^{N_s} \frac{Y_s^{m+1}}{M_s} \right)^{-1}, \quad (3.101b)$$

wobei die Temperatur aus den NASA Polynomen (2.6) durch ein Newton-Raphson-Verfahren hervorgeht.

Mit der aktualisierten Dichte wird nun ein approximatives Geschwindigkeitsfeld berechnet, wofür die Impulserhaltungsgleichungen (2.1b) mit dem dynamischen Druckgradienten $\partial p_d^n / \partial x_i$ des vorangegangenen Zeitschrittes gelöst werden

$$\left(\frac{\rho^{m+1}}{\Delta t}\right) u_i^* + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\dot{m}_j^m u_i^* - \tau_{ij}^*) = RHS_{u_i}. \quad (3.102)$$

Es sei hervorzuheben, dass die Linearisierung der konvektiven Flüsse in Gleichung (3.102) zur Rechenzeiterparnis mit den Massenflüssen \dot{m}_i^m der vorangegangenen Subiteration erfolgt, da eine erneute Berechnung der Massenströme mit der aktualisierten Dichte ρ^{m+1} in den durchgeführten Testfällen keinen merklichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse oder die Konvergenz des Verfahrens hatten. Da in Gleichung (3.102) lediglich der Druckgradient des vorangegangenen Zeitpunkts t_n eingeht, genügt u_i^* nicht der Massenerhaltung am neuen Zeitpunkt t_{n+1} . Um dies zu gewährleisten

ist eine Korrektur von u_i^* mit einem Pseudo-Druckfeld δp notwendig:

$$\rho^{n+1}u_i^{n+1} = \rho^{n+1}u_i^* - \Delta t \frac{\partial \delta p}{\partial x_i}. \quad (3.103)$$

Der Pseudo-Druck wird hierbei über $\delta p = p^{n+1} - p^n$ definiert, sodass durch Einsetzen von Gleichung (3.102) in (3.103) und im Fall einer konvergierten Lösung mit $\rho^{m+1} \approx \rho^{n+1}$ und $\dot{m}^m \approx \dot{m}^{n+1}$ folgendes Gleichungssystem für die Impulserhaltung resultiert:

$$\frac{\rho^{n+1}u_i^{n+1} - \rho^n u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\dot{m}_j^{n+1} u_i^* - \tau_{ij}^*) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\dot{m}_j^n u_i^n - \tau_{ij}^n) = -\frac{\partial p_d^{n+1}}{\partial x_i} + g_i \rho^n. \quad (3.104)$$

Im Vergleich zu einer idealen Diskretisierung der Impulserhaltungsgleichung weist Gleichung 3.104 einen Fehler aufgrund der Fluss-Einträge u_i^* und τ_{ij}^* auf. Dieser geht jedoch mit einer zweiten zeitlichen Fehlerordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ einher [73] und kann somit in Kauf genommen werden.

Eine Gleichung zur Berechnung von δp lässt sich herleiten, indem die Divergenz von Gleichung (3.103) gebildet wird. Der resultierende Term $\partial(\rho^{n+1}u_i^{n+1})/\partial x_i$ kann über die Kontinuitätsgleichung (2.1a) durch die zeitliche Dichteableitung ersetzt werden, welche approximiert wird durch

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^{n+1}u_i^{n+1}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} = -\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{3}{2}\rho^{m+1} - 2\rho^n + \frac{1}{2}\rho^{n-1} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.105)$$

Diese Substitution wird häufig in Projektionsmethoden mit variabler Dichte angewandt, allerdings gilt sie auch als ein potentieller Ursprung für Instabilitäten bei hohen Dichtegradienten [45, 139]. Der Term $\partial(\rho^{n+1}u_i^*)/\partial x_i$ wird über die Massenströme $\dot{m}_i^* = \rho^{m+1}u_i^*$ approximiert, sodass sich folgende Poisson-Gleichung für das Pseudo-Druckfeld δp ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} + \frac{\partial \dot{m}_i^*}{\partial x_i} \right). \quad (3.106)$$

Diese wird auch als Druckkorrektur-Gleichung bezeichnet und wird in jeder Subiteration gelöst. Anschließend werden die Massenströme \dot{m}^{m+1} zur Linearisierung der Transportgleichungen in der folgenden Iteration gemäß der Korrekturgleichung (3.103) berechnet

$$\dot{m}_i^{m+1} = \dot{m}_i^* - \Delta t \frac{\partial \delta p}{\partial x_i}. \quad (3.107)$$

Nach der Durchführung von N_{it} Subiterationen wird schließlich auch das intermediäre Geschwindigkeitsfeld u_i^* und der Druck p^n mit dem aktuellen Pseudo-Druckfeld δp korrigiert:

$$p^{n+1} = p^n + \delta p, \quad (3.108a)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^* - \frac{\Delta t}{\rho^{m+1}} \frac{\partial \delta p}{\partial x_i}. \quad (3.108b)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Aus der Arbeit von Pierce [190] geht hervor, dass zwei Subiterationen benötigt werden, um mit der dargestellten Projektionsmethode eine zweite zeitliche Fehlerordnung zu realisieren. Weitere Iterationen erhöhen zwar die Verfahrensstabilität bei hohen Dichteverhältnissen, führen jedoch nicht zu einer weiteren Verringerung des zeitlichen Fehlers. Dieses Verhalten ergibt sich ebenfalls für die gegenwärtige Methode, was im Detail in Anhang C dargestellt ist. Zur Rechenzeitersparnis wird daher für alle Testfälle die Anzahl der Subiterationen auf $N_{it} = 2$ festgelegt.

3.4.2 Räumliche Diskretisierung des Gleichungssystems

Im Folgenden wird das k -exakte Multi-Korrekturverfahren zur räumlichen Diskretisierung der Gleichungen der Projektionsmethode angewendet, um eine höhere räumliche Genauigkeitsordnung zu realisieren. Die dargestellten Gleichungen werden dazu analog zur Transportgleichung (3.8) volumetrisch über ein diskretisiertes Rechengebiet gemittelt.

3.4.2.1 Thermochemische Transportgleichungen

Zu Beginn eines neuen Projektionsschrittes erfolgt die Approximation der Dichte am neuen Zeitschritt über Gleichung (3.97). Deren volumetrische Mittelung führt zu

$$\bar{\rho}_\alpha^0 = \bar{\rho}_\alpha^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{|\Omega_\alpha|} \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \left[3(\dot{m}^n)^{(\alpha\beta, \Gamma)} - (\dot{m}^{n-1})^{(\alpha\beta, \Gamma)} \right], \quad (3.109)$$

wobei die Massenströme $\dot{m}^{(\alpha\beta, \Gamma)}$ an den Elementoberflächen über Gleichung (3.54a) berechnet werden. Anschließend gilt es die thermochemischen Transportgleichungen als gekoppeltes Gleichungssystem zu lösen, welche sich nach einer volumetrischen Mittelung in folgender Form darstellen lassen:

$$\left(\frac{|\Omega_\alpha| \bar{\rho}_\alpha^m}{\Delta t} \right) \bar{h}_\alpha^{m+1} + \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left[F_C^{(\alpha\beta)} (h^{m+1}) + F_D^{(\alpha\beta)} (h^{m+1}) \right] = \overline{(RHS_h)}_\alpha, \quad (3.110a)$$

$$\left(\frac{|\Omega_\alpha| \bar{\rho}_\alpha^m}{\Delta t} \right) \bar{Y}_{s,\alpha}^{m+1} + \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left[F_C^{(\alpha\beta)} (Y_s^{m+1}) + F_D^{(\alpha\beta)} (Y_s^{m+1}) \right] + \frac{1}{2} \bar{s}_{s,\alpha}^{m+1} = \overline{(RHS_{Y_s})}_\alpha. \quad (3.110b)$$

Die gemittelten expliziten Flüsse und Quellterme werden berechnet durch

$$\overline{(RHS_h)}_\alpha = \frac{|\Omega_\alpha| \bar{\rho}_\alpha^n \bar{h}_\alpha^n}{\Delta t} - \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left[F_C^{(\alpha\beta)} (h^n) + F_D^{(\alpha\beta)} (h^n) \right] + \bar{q}_{\text{rad},\alpha}^n, \quad (3.111a)$$

$$\overline{(RHS_{Y_s})}_\alpha = \frac{|\Omega_\alpha| \bar{\rho}_\alpha^n \bar{Y}_{s,\alpha}^n}{\Delta t} - \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left[F_C^{(\alpha\beta)} (Y_s^n) + F_D^{(\alpha\beta)} (Y_s^n) \right] + \frac{1}{2} \bar{s}_{s,\alpha}^n. \quad (3.111b)$$

Die Flüsse über verschobene und unverschobene Randflächen sind zur besseren Übersicht nicht dargestellt. Die Gleichungen (3.110) lassen sich in Form eines linearen Gleichungssystems $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ überführen, welches sich dann mittels numerischer Lösungsverfahren iterativ berechnen lässt. Hierbei stellt \mathbf{x} den zu bestimmenden Lösungsvektor dar, dessen Einträge \bar{h}_α^{n+1} und $\bar{Y}_{s,\alpha}^{n+1}$ als Freiheitsgrade des Gleichungssystems agieren. Die Einträge der dünn-besetzten Matrix \mathbf{A} resultieren aus den impliziten Flüssen und Quelltermen, wohingegen der Vektor der rechten Seite \mathbf{b} sich durch die expliziten Anteile berechnet. Die Lösung des linearen Gleichungssystems erfolgt mit der *Biconjugate Gradient Stabilized* (BICGSTAB) Methode [250], die ein Krylov-Unterraum-Verfahren darstellt und für deren Details auf die Literatur verwiesen wird [102, 263].

Es sei darauf hinzuweisen, dass die volumetrische Mittelung der zeitlichen Ableitungen $\partial\phi/\partial t$ einer beliebigen Feldgröße ϕ einen räumlichen Fehler zweiter Ordnung verursacht. Dieser Fehler wurde bereits in Abschnitt 3.2.3 hergeleitet und entsteht, wenn gemittelte konservative Größen durch ihre primitiven Pendanten approximiert werden

$$\overline{(\rho^n \phi^n)}_\alpha = \bar{\rho}_\alpha^n \bar{\phi}_\alpha^n + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.112)$$

Ähnliche Fehlerterme entstehen auch bei der volumetrischen Mittelung der chemischen Produktdichte $\bar{s}_{s,\alpha}$. Für den Fall einer 2-exakten Rekonstruktion wird dieser Fehler in Kauf genommen, da alternativ eine Korrektur gemäß Gleichung (3.47) erfolgen müsste. Dies würde eine implizite Berechnung der Gradienten verlangen und einen massiven Anstieg der Rechenzeit bewirken. Da die Berechnung der impliziten konvektiven und diffusiven Flüsse $F_C^{(\alpha\beta)}(\phi^{n+1})$ und $F_D^{(\alpha\beta)}(\phi^{n+1})$ ebenfalls eine implizite Berechnung der Gradienten voraussetzt, wird zur Rechenzeitersparnis der Ansatz der verzögerten Korrektur eingesetzt [73, 125]. Hierbei wird ein Fluss $F^{(\alpha\beta)}(\phi^{n+1})$ in zwei Anteile $\tilde{F}^{(\alpha\beta)}$ und $\hat{F}^{(\alpha\beta)}$ aufgeteilt. Der Anteil $\tilde{F}^{(\alpha\beta)}$ entspricht einer Flussformulierung mit einer geringen Genauigkeitsordnung, welche jedoch nur Information von unmittelbaren Nachbarelementen verlangt. Im Gegensatz dazu lässt sich mit $\hat{F}^{(\alpha\beta)}$ eine höhere Genauigkeitsordnung realisieren. Die Berechnung eines beliebigen impliziten Flusses $F^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1})$ lässt sich damit effizient durch die folgende Anordnung von $\tilde{F}^{(\alpha\beta)}$ und $\hat{F}^{(\alpha\beta)}$ realisieren [73, 125]:

$$F^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1}) = \tilde{F}^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1}) + \left[\hat{F}^{(\alpha\beta)}(\phi^n) - \tilde{F}^{(\alpha\beta)}(\phi^n) \right]. \quad (3.113)$$

Der aufwändigere Flussanteil $\hat{F}^{(\alpha\beta)}$ muss dadurch lediglich explizit berechnet werden, was deutlich die Rechenzeit der Flussberechnung reduziert. In dieser Arbeit werden die Anteile $\tilde{F}^{(\alpha\beta)}$ und $\hat{F}^{(\alpha\beta)}$ so gewählt, dass sich folgende Formulierung für die impliziten Flüsse ergibt:

$$F_C^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1}) = F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1}) + F_{C,HO}^{(\alpha\beta)}(\phi^n), \quad (3.114a)$$

$$F_D^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1}) = F_{D,LO}^{(\alpha\beta)}(\phi^{m+1}) + F_{D,STAB}^{(\alpha\beta)}(\phi^n) + F_{D,HO}^{(\alpha\beta)}(\phi^n). \quad (3.114b)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Nach der Lösung des Gleichungssystems (3.110) werden die aktualisierte Dichte $\bar{\rho}_\alpha^{m+1}$ und Temperatur \bar{T}^{m+1} über Gleichung (3.101) berechnet. Analog zur zeitlichen Ableitungen tritt auch hier ein räumlicher Fehler zweiter Ordnung in Erscheinung. Dieser Fehler wird zugunsten der Komplexität des Verfahrens in Kauf genommen.

3.4.2.2 Geschwindigkeitsprädiktor

Die volumetrische Mittelung von Gleichung (3.102) zur Berechnung des intermediären Geschwindigkeitsfeldes $\bar{\mathbf{u}}^*$ führt zur folgenden diskretisierten Transportgleichung:

$$\left(\frac{|\Omega_\alpha| \bar{\rho}_\alpha^{m+1}}{\Delta t} \right) \bar{u}_{i,\alpha}^* + \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left[F_C^{(\alpha\beta)}(u_i^*) + F_D^{(\alpha\beta)}(u_i^*) \right] = \overline{RHS}_{u_{i,\alpha}}, \quad (3.115)$$

wobei sich die expliziten Anteile berechnen lassen durch

$$\overline{RHS}_{u_{i,\alpha}} = \frac{|\Omega_\alpha| \bar{\rho}_\alpha^n \bar{u}_{i,\alpha}^n}{\Delta t} + \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \frac{1}{2} \left[F_C^{(\alpha\beta)}(u_i^n) + F_D^{(\alpha\beta)}(u_i^n) \right] + |\Omega_\alpha| \left(\frac{\partial p_d}{\partial x_i} \right)_\alpha^n + |\Omega_\alpha| g_i \bar{\rho}^{m+1}. \quad (3.116)$$

Für die impliziten Flüsse $F_C^{(\alpha\beta)}(u_i^*)$ und $F_D^{(\alpha\beta)}(u_i^*)$ wird analog zu den thermochemischen Transportgleichungen der Ansatz der verzögerten Korrektur verwendet. In einer vorangegangenen Arbeit [222] wurde gezeigt, dass die Berechnung des gemittelten Druckgradienten $\left(\frac{\partial p_d}{\partial x_i} \right)_\alpha^n$ einen maßgeblichen Einfluss die räumliche Genauigkeit der Projektionsmethode hat. Wird hierfür lediglich der Punktwert $\partial p_d^n / \partial x_i|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(k)}$ eingesetzt, manifestiert sich ein räumlicher Fehler zweiter Ordnung. Dies lässt sich vermeiden, indem $\left(\frac{\partial p_d}{\partial x_i} \right)_\alpha^n$ ähnlich zum konvektiven Operator durch die Summe von k -exakten Flüssen von p_d^n über die Elementoberflächen berechnet wird. Eine 2-exakte Rekonstruktion führt beispielsweise zur folgenden Approximation

$$\left(\frac{\partial p_d}{\partial x_i} \right)_\alpha^n = \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \left(p_d^n|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(3)} \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)} + \frac{\partial p_d^n}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(2)} \mathcal{S}_{i,j}^{(\alpha\beta)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p_d^n}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}^{(1)} \mathcal{S}_{i,jk}^{(\alpha\beta)} \right) + \mathcal{O}(h^3). \quad (3.117)$$

Die Druckwerte am Punkt \mathbf{x}_Γ werden hierbei zentral aus den Rekonstruktionpolynomen der angrenzenden Elemente berechnet.

3.4.2.3 Druckkorrektur

Aus der Lösung der diskretisierten Transportgleichung (3.115) geht das Geschwindigkeitsfeld $\bar{\mathbf{u}}_\alpha^*$ hervor, welches im nächsten Schritt zur Berechnung des Pseudo-Drucks $\delta \bar{p} = \bar{p}_\alpha^{n+1} - \bar{p}_\alpha^n$ verwendet wird. Zur Bestimmung von $\delta \bar{p}$ erfolgt eine volumetrische Mittelung der Druckkorrektur-Gleichung (3.106), wodurch die nachstehende diskrete Poisson-Gleichung resultiert

$$\sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} F_D^{(\alpha\beta)}(\delta p) = \frac{1}{2\Delta t^2} (3\bar{\rho}_\alpha^{m+1} - 2\bar{\rho}_\alpha^n + \bar{\rho}_\alpha^{n-1}) + \frac{1}{\Delta t} \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} (\dot{m}^*)^{(\alpha\beta,\Gamma)}. \quad (3.118)$$

Im Gegensatz zu den vorangegangenen Gleichungssystemen wird für die numerische Lösung von Gleichung (3.118) die *Flexible Generalized Minimal Residual* (FGMRES) Methode [211] mit einer Mehrgitter-Präkonditionierung eingesetzt. Der Grund hierfür ist der elliptische Charakter der zugrunde liegenden Gleichung, welche ohne den Einsatz von Mehrgitterverfahren deutlich mehr Iterationen zur Konvergenz verlangt. Für eine ausführliche Beschreibung von Mehrgittertechniken zur Beschleunigung der Konvergenz sei auf die Literatur verwiesen [22, 73, 86, 263]. Die Berechnung des Flusses $F_D^{(\alpha\beta)}(\delta p)$ wird im Gegensatz zu den anderen Transportgleichungen vollständig implizit realisiert, weshalb die Lösung der Druckkorrektur-Gleichung deutlich mehr Rechenzeit beansprucht. Für den Fall einer 2-exakten Rekonstruktion muss in jeder Krylov-Subiteration die Hesse-Matrix von δp berechnet werden. In einer vorangegangenen Arbeit [222] wurde gezeigt, dass dies massive Rechenzeiteinbuße mit sich bringt, ohne die Genauigkeit der Lösung maßgeblich zu beeinflussen. Aus diesem Grund wird Gleichung (3.118) lediglich mit der 1-exakten Formulierung von $F_D^{(\alpha\beta)}(\delta p)$ berechnet.

3.4.2.4 Geschwindigkeitskorrektur

Nach der Durchführung aller Subiterationen erfolgt die Korrektur des approximativen Geschwindigkeitsfeldes $\bar{u}_{i,\alpha}^*$, wofür Gleichung (3.103) volumetrisch gemittelt wird:

$$\overline{(\rho^{n+1}u_i^{n+1})}_\alpha = \overline{(\rho^{n+1}u_i^*)}_\alpha - \Delta t \overline{\left(\frac{\partial \delta p}{\partial x_i}\right)}_\alpha. \quad (3.119)$$

Analog zu den zeitlichen Ableitungen der Transportgleichungen treten in Gleichung (3.119) die gemittelten konservativen Größen $\overline{(\rho u_i)}_\alpha$ auf. Aus numerischen Experimenten geht jedoch hervor, dass diese Terme nicht ohne Einbuße in der räumlichen Fehlerordnung durch ihre primitiven Pendanten $\bar{\rho}_\alpha \bar{u}_{i,\alpha}$ ersetzt werden können. Um dem entgegenzuwirken wird im Folgenden ein entsprechender Korrekturterm hergeleitet. Hierfür wird die Relation aus Gleichung (3.47) angewandt, durch welche sich für eine 2-exakte Rekonstruktion ein räumlicher Fehler von $\mathcal{O}(h^3)$ ergibt:

$$\begin{aligned} \bar{u}_{i,\alpha}^{n+1} &= \bar{u}_{i,\alpha}^* - \frac{\Delta t}{\bar{\rho}_\alpha^{n+1}} \overline{\left(\frac{\partial \delta p}{\partial x_i}\right)}_\alpha \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho}_\alpha^{n+1}} \frac{\partial \rho^{n+1}}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \left(\frac{\partial u_i^{n+1}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} - \frac{\partial u_i^*}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \right) (\mathcal{M}_{j,\alpha} \mathcal{M}_{k,\alpha} - \mathcal{M}_{jk,\alpha}) + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned} \quad (3.120)$$

Hierzu wird allerdings der Gradient des finalen Geschwindigkeitsfeldes $\partial u_i^{n+1} / \partial x_i \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}$ benötigt. Zur Bestimmung dieser Größe wird gefordert, dass die Korrekturgleichung (3.103) auch an den Knotenpunkten \mathbf{x}_α erfüllt sein muss

$$\rho^{n+1} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} u_i^{n+1} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} = \rho^{n+1} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} u_i^* \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} - \Delta t \frac{\partial \delta p}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}. \quad (3.121)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Durch eine räumliche Ableitung dieser Bedingung ist es möglich, die Differenz der Geschwindigkeitsgradienten in Gleichung (3.120) auszudrücken durch

$$\left(\frac{\partial u_i^{n+1}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} - \frac{\partial u_i^*}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \right) = \frac{\Delta t}{\rho^{n+1} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}} \left(\frac{1}{\rho^{n+1} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}} \frac{\partial \rho^{n+1}}{\partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \frac{\partial \delta p}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} - \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x_i \partial x_k} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha} \right). \quad (3.122)$$

Dieser Ausdruck lässt sich mit den k -exakten Approximationen der entsprechenden Punktwerte auswerten und kann somit in Gleichung (3.120) zur Berechnung des neuen Geschwindigkeitsfelds $\bar{u}_{i,\alpha}^{n+1}$ eingesetzt werden. Abschließend ist es notwendig, die Massenströme $(\dot{m}^{n+1})^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ des neuen Zeitschritts zu berechnen. Dies erfolgt unter der Ausnutzung der Korrekturgleichung (3.107)

$$\underbrace{\iint_{A_{\alpha\beta}} (\rho^{n+1} u_i^{n+1}) n_i \, dA}_{(\dot{m}^{n+1})^{(\alpha\beta,\Gamma)}} = \underbrace{\iint_{A_{\alpha\beta}} (\rho^{n+1} u_i^*) n_i \, dA}_{(\dot{m}^*)^{(\alpha\beta,\Gamma)}} - \Delta t \underbrace{\iint_{A_{\alpha\beta}} \left(\frac{\partial \delta p}{\partial x_i} \right) n_i \, dA}_{F_D^{(\alpha\beta)}(\delta p)}. \quad (3.123)$$

Hieraus resultiert, dass die korrigierten Massenströme sich durch eine Subtraktion der Laplace-Flüsse des Pseudo-Drucks bestimmen lassen, welche in Abschnitt 3.3.2 eingeführt wurden. Für das 1- und 2-exakte Schema ergeben sich die korrigierten Massenströme damit zu

$$(\dot{m}^{n+1})^{(\alpha\beta,\Gamma)} = (\dot{m}^*)^{(\alpha\beta,\Gamma)} - \Delta t F_D^{(\alpha\beta)}(\delta p), \quad (3.124)$$

Für das 2-exakte Schema entsteht durch diesen Korrekturansatz formal ein Fehler zweiter Ordnung $\mathcal{O}(h^2)$. Dieser Fehler ließe sich umgehen, wenn $(\dot{m}^{n+1})^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ erneut über Gleichung (3.54a) berechnet werden würde, was beispielsweise in einer vorangegangenen Arbeit [222] für inkompressible Strömungsprobleme angewendet wurde. Bei Strömungen mit variabler Dichte wird hierdurch jedoch die Entstehung von parasitären Fehlermoden begünstigt, da die Kontinuitätsgleichung nicht über die gesamte Elementoberfläche erfüllt ist. Dies ist nicht der Fall, wenn stattdessen Gleichung (3.123) herangezogen wird, was zu einer deutlichen Stabilisierung der Projektionsmethode bei variabler Dichte führt. Die Berechnung der höheren Massenstrom-Tensoren $(\dot{m}_i^{n+1})^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ und $(\dot{m}_{ij}^{n+1})^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ erfolgt hingegen über die Gleichungen (3.54b) und (3.54c).

3.5 Adaptive numerische Dissipation

In Gleichung (3.57) wurde der Kontrollparameter θ für die Berechnung der konvektiven Flüsse eingeführt. In diesem Abschnitt wird im Detail darauf eingegangen, welchen Einfluss dieser Parameter auf die numerische Dissipation des Diskretisierungsschemas hat und wie er sich für die Kontrolle der numerischen Stabilität einsetzen lässt. Hierfür wird eine Von-Neumann-Stabilitätsanalyse auf der Grundlage einer linearen Advektions-Diffusions-Gleichung durchgeführt. Diese Gleichung stellt eine Vereinfachung der Transportgleichung (3.6) dar, aus der sich zwar kein hinreichendes, aber dennoch notwendiges Stabilitätskriterium für die Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichungen herleiten lässt. Im weiteren Verlauf des folgenden Abschnitts wird außerdem eine Methodik vorgestellt, mit

welcher sich der Parameter θ in Abhängigkeit der lokalen Strömungsbedingungen steuern lässt. Dadurch wird das hergeleitete Stabilitätskriterium eingehalten, während die numerische Dissipation sich auf ein Minimum reduzieren lässt.

3.5.1 Fehleranalyse für den konvektiven Operator

Für die folgende Analyse wird die eindimensionale, lineare Advektions-Diffusions-Gleichung für eine skalare Feldgröße ϕ herangezogen:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0. \quad (3.125)$$

Diese Gleichung stellt eine Vereinfachung der allgemeinen Transportgleichung (3.6) für den Fall konstanter Dichte ρ und Viskosität $\nu = \mu/\rho$ sowie einer konstanten Geschwindigkeit U dar. Weiterhin wird sie auf einem eindimensionalen, periodischen Rechengebiet $x \in [0, L]$ untersucht, welches durch ein äquidistantes Rechengitter mit Elementen Ω_α der Größe h diskretisiert wird. Um den Zusammenhang zwischen dem Kontrollparameters θ und dem numerischen Fehler des Diskretisierungsschemas zu beleuchten, soll zunächst der volumengemittelte konvektive Operator $\overline{(\partial \phi / \partial x)}_\alpha$ betrachtet werden. Dieser wird zunächst nach Gleichung (3.7) volumetrisch gemittelt, was sich ausdrücken lässt durch

$$\begin{aligned} \overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)}_\alpha &= \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \int_{\Omega_\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial x} dV \\ &= \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \sum_{\beta \in \{\beta_\alpha^{(1)}\}} \left(\phi \Big|_{x_\Gamma} \mathcal{S}_1^{(\alpha\beta)} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x_\Gamma} \mathcal{S}_{1,1}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x_\Gamma} \mathcal{S}_{1,11}^{(\alpha\beta,\Gamma)} + \dots \right) \\ &= \frac{1}{h} \left(\phi \Big|_{x_{\alpha+1/2}} - \phi \Big|_{x_{\alpha-1/2}} \right). \end{aligned} \quad (3.126)$$

Es lässt sich zeigen, dass sich geometrische Flächenmomente mit Rang größer null im eindimensionalen Fall zu null reduzieren. Daher gilt es lediglich die Punktwerte von ϕ an den Elementrändern $x_{\alpha+1/2}$ und $x_{\alpha-1/2}$ mittels Gleichung (3.57) zu rekonstruieren. Wird der Limitierungsansatz aus dem vorangegangenen Abschnitt 3.2.4 berücksichtigt, lässt sich der Wert am Punkt $x_{\alpha+1/2}$ über ein 0-, 1- oder 2-exaktes Rekonstruktionspolynom des Elements Ω_α folgendermaßen ausdrücken:

$$\phi^{(1)}(x_{\alpha+1/2}; x_\alpha) = \bar{\phi}_\alpha, \quad (3.127a)$$

$$\phi^{(2)}(x_{\alpha+1/2}; x_\alpha) = \bar{\phi}_\alpha + \frac{1}{2} \psi_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x_\alpha}^{(1)} h, \quad (3.127b)$$

$$\phi^{(3)}(x_{\alpha+1/2}; x_\alpha) = \bar{\phi}_\alpha + \frac{1}{2} \psi_\alpha \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x_\alpha}^{(2)} h + \frac{1}{6} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x_\alpha}^{(1)} h^2 \right). \quad (3.127c)$$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Tabelle 3.1: Parameter zur Berechnung des konvektiven Flusses mit verschiedenen k -exakten Diskretisierungsschemata.

Schema	a_u	a_d	b_u	b_d	c_u	c_d
$k = 0$	$(1 + \theta)/2$	$(1 - \theta)/2$	0	0	0	0
$k = 1$	$(1 + \theta)/2$	$(1 - \theta)/2$	$\psi_u(1 + \theta)/4$	$-\psi_d(1 - \theta)/4$	0	0
$k = 2$	$(1 + \theta)/2$	$(1 - \theta)/2$	$\psi_u(1 + \theta)/4$	$-\psi_d(1 - \theta)/4$	$\psi_u(1 + \theta)/24$	$\psi_d(1 - \theta)/24$

Hierbei sei anzumerken, dass in Gleichung (3.127c) die Umrechnung von Punktwerten zu volumetrischen Mittelwerten enthalten ist, welche bereits in Gleichung (3.49) verwendet wird. Hierfür wird berücksichtigt, dass sich die geometrischen Volumenmomente mit Rang R für ein eindimensionales, äquidistantes Gitter berechnen lassen durch

$$\mathcal{M}_{i_1 \dots i_R, \alpha} = \frac{h^R}{(R+1)2^{R+1}} \left[1 - (-1)^{R+1} \right]. \quad (3.128)$$

Die finalen Oberflächenwerte werden über Gleichung (3.57) berechnet, wobei sich das Element Ω_α auf der stromaufwärts gelegenen Seite befindet. Daraus resultiert die folgende Definition für den rekonstruierten Wert von ϕ an der stromabwärts gelegenen Oberfläche von Ω_α

$$\phi \Big|_{x_{\alpha+1/2}}^{(k+1)} = a_u \bar{\phi}_\alpha + a_d \bar{\phi}_{\alpha+1} + \left(b_u \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x_\alpha}^{(k)} + b_d \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x_{\alpha+1}}^{(k)} \right) h + \left(c_u \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x_\alpha}^{(k-1)} + c_d \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x_{\alpha+1}}^{(k-1)} \right) h^2. \quad (3.129)$$

Die Koeffizienten a_u, a_d, b_u, b_d, c_u and c_d sind in Tabelle 3.1 gegeben. Neben dem Kontrollparameter θ beinhalten diese auch die Limitierungsfaktoren ψ_u und ψ_d der anliegenden Elemente. Die Ableitungen können durch Anwendung der Gleichungen (3.23), (3.43) und (3.44) bestimmt werden und vereinfachen sich für das betrachtete eindimensionale, äquidistante Gitter zu

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x_\alpha}^{(k)} = \frac{\bar{\phi}_{\alpha+1} - \bar{\phi}_{\alpha-1}}{2h}, \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x_\alpha}^{(k-1)} = \frac{\bar{\phi}_{\alpha+2} - 2\bar{\phi}_\alpha + \bar{\phi}_{\alpha-2}}{4h^2}. \quad (3.130)$$

Beide Ableitungsoperatoren weisen eine zweite Fehlerordnung $\mathcal{O}(h^2)$ auf, da sich die Korrekturmatrizen \mathbf{G}_α und \mathbf{H}_α auf dem äquidistanten Gitter zu Einheitsmatrizen reduzieren. Die erhaltenen Formulierungen für die Werte von ϕ an den Elementrändern lassen sich nun in den volumengemittelten konvektiven Operator (3.126) einsetzen. Davon ausgehend kann dann der Abbruchfehler der k -exakten Schemata in Abhängigkeit des Kontrollparameters θ ausgedrückt werden. Zur Übersicht wird dies nur für den unlimitierten Fall mit $\psi_\alpha = 1$ dargestellt

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \left(\phi \Big|_{x_{\alpha+1/2}}^{(1)} - \phi \Big|_{x_{\alpha-1/2}}^{(1)} \right) &= \frac{1}{2h} (\bar{\phi}_{\alpha+1} - \bar{\phi}_{\alpha-1}) - \frac{\theta}{2h} (\bar{\phi}_{\alpha+1} - 2\bar{\phi}_\alpha + \bar{\phi}_{\alpha-1}) \\ &= \overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)}_\alpha - \frac{1}{2} \theta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x_\alpha} h + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_{x_\alpha} h^2 + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned} \quad (3.131)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{h} \left(\phi \Big|_{x_{\alpha+1/2}}^{(2)} - \phi \Big|_{x_{\alpha-1/2}}^{(2)} \right) &= \frac{1}{8h} (-\bar{\phi}_{\alpha+2} + 6\bar{\phi}_{\alpha+1} - 6\bar{\phi}_{\alpha-1} + \bar{\phi}_{\alpha-2}) \\
 &\quad - \frac{\theta}{8h} (-\bar{\phi}_{\alpha+2} + 4\bar{\phi}_{\alpha+1} - 6\bar{\phi}_{\alpha} + 4\bar{\phi}_{\alpha-1} - \bar{\phi}_{\alpha-2}) \\
 &= \overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)}_{\alpha} - \frac{1}{12} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_{x_{\alpha}} h^2 + \frac{1}{8} \theta \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \Big|_{x_{\alpha}} h^3 + \mathcal{O}(h^4),
 \end{aligned} \tag{3.132}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{h} \left(\phi \Big|_{x_{\alpha+1/2}}^{(3)} - \phi \Big|_{x_{\alpha-1/2}}^{(3)} \right) &= \frac{1}{96h} (\bar{\phi}_{\alpha+3} - 12\bar{\phi}_{\alpha+2} + 69\bar{\phi}_{\alpha+1} - 69\bar{\phi}_{\alpha-1} + 12\bar{\phi}_{\alpha-2} - \bar{\phi}_{\alpha-3}) \\
 &\quad - \frac{\theta}{96h} (\bar{\phi}_{\alpha+3} - 14\bar{\phi}_{\alpha+2} + 47\bar{\phi}_{\alpha+1} - 68\bar{\phi}_{\alpha} + 47\bar{\phi}_{\alpha-1} - 14\bar{\phi}_{\alpha-2} + \bar{\phi}_{\alpha-3}) \\
 &= \overline{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)}_{\alpha} + \frac{1}{12} \theta \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \Big|_{x_{\alpha}} h^3 - \frac{1}{80} \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} \Big|_{x_{\alpha}} h^4 + \mathcal{O}(h^5).
 \end{aligned} \tag{3.133}$$

Hierbei ist es essentiell, den Unterschied zwischen dem Punktwert $\partial\phi/\partial x_i|_{\mathbf{x}_{\alpha}}$ und dem Volumemittel $\overline{(\partial\phi/\partial x_i)}_{\alpha}$ des konvektiven Operators zu beachten. Eine ähnliche Analyse wurde bereits in der Arbeit von Pont et al. [197] durchgeführt, allerdings im Bezug auf den Punktwert-bezogenen konvektiven Operator. Die Gleichungen (3.131)-(3.133) verdeutlichen, dass durch den Kontrollparameter θ ein Elementmolekül aktiviert wird, welches den Effekt einer diskreten Ableitungen mit geradem Rang widerspiegelt. Das Aufprägen gerader Ableitungen wird als künstliche Dissipation (*artificial dissipation*) bezeichnet [22] und kann, wie beispielsweise in den Arbeiten von Jameson et al. [117, 118], zur Stabilisierung zentraler Diskretisierungsschemata eingesetzt werden. Eine rein zentrale Diskretisierung mit $\theta = 0$ führt zum Verschwinden dieser Terme. Das 0-exakte Schema geht dann mit einem Fehler zweiter Ordnung und das 2-exakte Schema mit einem Fehler vierter Ordnung einher. Im Gegensatz dazu weist das 1-exakte Schema unabhängig von θ einen räumlichen Fehler zweiter Ordnung auf. Diese Fehlerordnungen sind allerdings nur auf einem äquidistanten Gittern gültig, da für anisotrope Elementgrößen h die Korrekturmatrizen \mathbf{G}_{α} und \mathbf{H}_{α} keine Einheitsmatrizen darstellen, was sich in der Fehlerordnung der diskreten Ableitungsoperatoren in Gleichung (3.130) niederschlägt. In höheren geometrischen Dimensionen werden außerdem weitere numerische Fehler durch die Integration der Oberflächenintegrale eingebracht, da sich die geometrischen Flächenmomente nicht mehr zu null reduzieren.

Die spektralen Eigenschaften der Schemata lassen sich über eine Fourier-Analyse [81, 111, 137, 248] untersuchen, wofür die skalare Feldgröße $\bar{\phi}_{\alpha}$ in ihre Fourier-Moden $\hat{\phi}_j(t) \exp(I2\pi j x_{\alpha}/L)$ zerlegt wird. Hierfür wird die skalierte Wellenzahl $\omega_j = 2\pi j h/L$ eingeführt, welche im Bereich $[0, \pi]$ definiert ist [137] und für wofür die Relationen $x_{\alpha} = \alpha h$ und $I = \sqrt{-1}$ herangezogen werden. Es sei darauf hingewiesen, dass der Index j keine Raumrichtung, sondern die j -te Mode von $\bar{\phi}_{\alpha}$ kennzeichnet. Durch das Einsetzen der Fourier-Moden in die Gleichungen (3.131)-(3.133) lassen sich Informationen über den numerischen Fehler ableiten. Hierfür werden die Fourier-Koeffizienten der approximativen ersten Ableitung $\partial\hat{\phi}_j^{(k)}/\partial x = (\lambda_{j,D} + I\omega_{j,mod})\hat{\phi}_j$ mit ihrem analytischen Pendant $\partial\hat{\phi}_j/\partial x = I\omega_j\hat{\phi}_j$ verglichen. Je besser die effektive Wellenzahl $\omega_{j,mod}$ eines numerischen Schemas mit der exakten

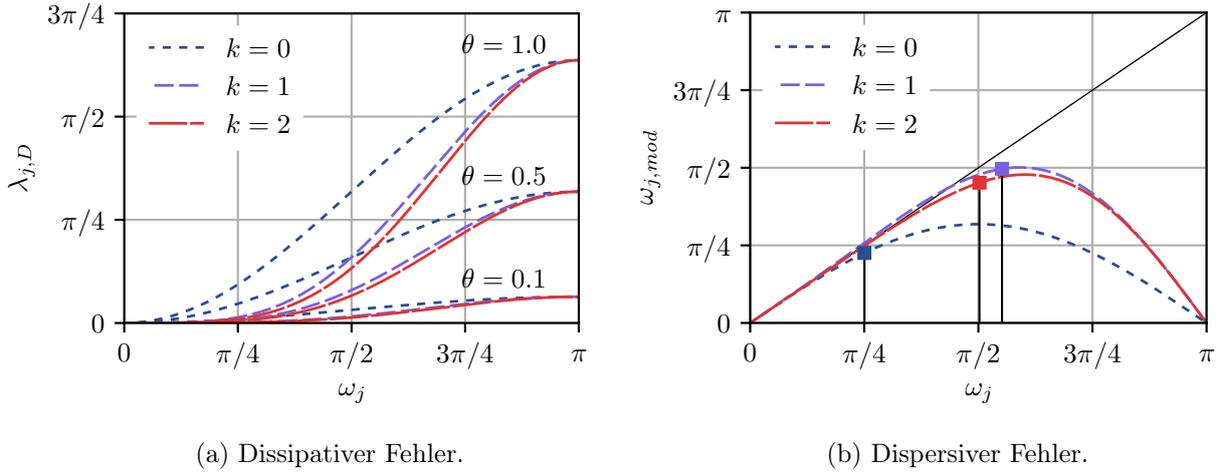


Abbildung 3.7: Spektrale Fehleranalyse der drei k -exakten Diskretisierungsschemata. Der Dämpfungsterm $\lambda_{j,D}$ auf der linken Seite kann mit der numerischen Dissipation der Schemata in Relation gebracht werden. Die modifizierte Wellenzahl $\omega_{j,mod}$ auf der rechten Seite gibt Aufschluss über die dispersiven Eigenschaften des diskreten konvektiven Operators. Diese sind unbeeinflusst von dem Kontrollparameter θ . Die viereckigen Symbole stellen die Grenzfrequenzen $\omega_{j,c}$ der jeweiligen Schemata dar, bei welchen der Unterschied zwischen $\omega_{j,mod}$ und ω_j 10% beträgt.

Wellenzahl ω_j übereinstimmt, desto besser werden die physikalischen Eigenschaften des zu approximierenden Operators abgebildet [81, 111, 137]

$$\begin{aligned}
 (\lambda_{j,D} + I\omega_{j,mod})_{k=0} &= \theta [1 - \cos(\omega_j)] + I \sin(\omega_j), \\
 (\lambda_{j,D} + I\omega_{j,mod})_{k=1} &= \frac{1}{4}\theta [3 - 4 \cos(\omega_j) + \cos(2\omega_j)] + I \frac{1}{4} [6 \sin(\omega_j) - \sin(2\omega_j)], \\
 (\lambda_{j,D} + I\omega_{j,mod})_{k=2} &= \frac{1}{48}\theta [34 - 47 \cos(\omega_j) + 14 \cos(2\omega_j) - \cos(3\omega_j)] \\
 &\quad + I \frac{1}{48} [69 \sin(\omega_j) - 12 \sin(2\omega_j) + \sin(3\omega_j)].
 \end{aligned} \tag{3.134}$$

In allen drei Diskretisierungsschemata stellt der Parameter θ eine Möglichkeit dar, um den realen Dämpfungsterm $\lambda_{j,D}$ zu steuern. Dieser Term lässt sich mit einer numerischen Dissipation in Relation setzen, welche durch den approximativen Operator aufgeprägt wird und eine Dämpfung der entsprechenden Wellenanteile induziert [81]. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 3.7a dargestellt. Im Gegensatz dazu stellt die Abweichung der effektiven Wellenzahl $\omega_{j,mod}$ von der exakten Wellenzahl ω_j einen dispersiven Fehler dar [81]. Dieser äußert sich durch einen Phasenversatz, wenn ein Signal durch den numerischen Operator $\partial \hat{\phi}_j^{(k)} / \partial x$ übertragen wird. Abbildung 3.7b zeigt diesen dispersiven Fehler anhand der Abweichung zwischen den gestrichelten Kurven und der durchgezogenen Geraden. Für alle drei Schemata ist der dispersive Fehler unabhängig von dem Kontrollparameter θ . Der größte Fehler tritt bei der maximalen Wellenzahl $\omega_j = \pi$ auf, was sich maßgeblich auf die Skalen der Lösung auswirkt, die mit der Größenordnung der Gitterskale h vorliegen [134]. Eine nicht ausreichende Dämpfung dieser Skalen kann sich in der Ausbildung parasitärer Moden manifestie-

ren, was wiederum zu einer massiven Verfälschung der Lösung führen kann. Es ist daher essentiell, dass ausreichend numerische Dissipation durch das Diskretisierungsschema bereitgestellt wird, um die Entstehung solcher Fehlerartefakte zu unterbinden. Die viereckigen Symbole in Abbildung 3.7b kennzeichnen die Grenzfrequenzen $\omega_{j,c}$ aller drei Schemata, bei welcher die effektive Wellenzahl $\omega_{j,mod}$ um mehr als 10% von der exakten Wellenzahl ω_j abweicht [81]. Das 0-exakte Schema weist die niedrigste Grenzfrequenz $\omega_{j,c} \approx \pi/4$ auf, gefolgt vom 2-exakten Schema mit $\omega_{j,c} \approx \pi/2$ und dem 1-exakten Schema mit $\omega_{j,c} \approx 11\pi/20$. Auf den ersten Blick erscheint es, dass das 1-exakte Schema somit über bessere numerische Eigenschaften als das 2-exakte Schema verfügt. Bei einer genaueren Betrachtung des dispersiven Fehler ergibt sich jedoch, dass die Kurve des 2-exakten Schemas über den gesamten Wellenzahlbereich eine geringere Abweichung zu der durchgezogenen Geraden aufweist und somit über bessere dispersive Eigenschaften verfügt. Dies ist insbesondere bis zu einer Wellenzahl von $\omega_j \approx 3\pi/8$ der Fall. Wie in Abbildung 3.7a zu erkennen ist, lässt sich der Anteil der numerischen Dissipation durch den Kontrollparameter θ steuern. Wird zusätzlich zum konvektiven Operator jedoch auch der diffusive Operator $\partial^2\phi/\partial x^2$ in Betracht gezogen, so könnte beispielsweise auch die physikalische Dissipation durch die Viskosität ν des Strömungsmediums ausreichend sein, um numerische Fehlerartefakte zu dämpfen. Dieser Effekt könnte insbesondere verstärkt werden, wenn zusätzlich eine turbulente Viskosität ν_t durch ein SGS-Modell eingebracht wird. Ziel der folgenden Analyse ist es daher, eine Relation zwischen dem Parameter θ und der physikalischen Diffusion der unterliegenden Advektions-Diffusions-Gleichung zu finden, sodass die betrachteten k -exakten Diskretisierungsschemata stabil bleiben. Diese Relation lässt sich über eine Von-Neumann-Stabilitätsanalyse herleiten.

3.5.2 Von-Neumann-Stabilitätsanalyse

Im folgenden Abschnitt soll eine Methode hergeleitet werden, mittels der sich der Kontrollparameter θ in Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit U und der Viskosität ν bestimmen lässt, sodass das numerische Diskretisierungsverfahren stabil bleibt und gleichzeitig der Anteil an numerischer Dissipation so gering wie möglich gehalten wird. Für die Von-Neumann-Analyse muss neben der räumlichen Diskretisierung von Gleichung (3.125) auch die zeitliche Diskretisierung in Betracht gezogen werden. Hierfür wird das Crank-Nicolson-Verfahren eingesetzt, welches auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit für die zeitliche Diskretisierung der Transportgleichungen Anwendung finden soll:

$$\frac{\bar{\phi}_\alpha^{n+1} - \bar{\phi}_\alpha^n}{\Delta t} + \frac{U}{h} \left(\phi^{n+1/2} \Big|_{x_{\alpha+1/2}} - \phi^{n+1/2} \Big|_{x_{\alpha-1/2}} \right) - \frac{\nu}{h} \left(\frac{\partial \phi^{n+1/2}}{\partial x} \Big|_{x_{\alpha+1/2}} - \frac{\partial \phi^{n+1/2}}{\partial x} \Big|_{x_{\alpha-1/2}} \right) = 0. \quad (3.135)$$

Hierbei wird der *Deferred-Correction*-Ansatz angewendet [73, 125], bei welchem lediglich die volumetrischen Mittelwerte $\bar{\phi}_\alpha$ von benachbarten Elementen implizit behandelt werden. Im Gegensatz dazu wird der k -exakte Korrekturterm $\Delta\phi_\alpha^{(k+1)}(\mathbf{x})$ explizit berechnet, welcher für die höhere Genauigkeit bei der Rekonstruktion der Oberflächenwerte nötig ist. Zur Verdeutlichung sei hierbei auf Gleichun-

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUMG

gen (3.48) und (3.113) verwiesen. Diese explizite Behandlung hat den maßgeblichen Vorteil, dass die Ableitungen in diesem Term lediglich zu Beginn eines Zeitschrittes berechnet werden müssen. Dadurch kann im Gegensatz zu einem voll-impliziten Verfahren deutlich an Rechenzeit eingespart werden, ohne die Stabilität des Verfahrens maßgeblich zu beeinflussen. Dies wurde in vorangegangenen Arbeiten für die vorgestellten Verfahren gezeigt [222]. Unter Berücksichtigung der Umrechnung von Punktwerten zu volumetrischen Mittelwerten lässt sich der konvektive Fluss berechnen durch

$$\begin{aligned} \phi^{n+1/2} \Big|_{x_{\alpha+1/2}} &\approx \frac{1}{2} \left(a_u \bar{\phi}_\alpha^{n+1} + a_d \bar{\phi}_{\alpha+1}^{n+1} \right) + \frac{1}{2} \left(a_u \bar{\phi}_\alpha^n + a_d \bar{\phi}_{\alpha+1}^n \right) \\ &+ \left(b_u \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \Big|_{x_\alpha}^{(k)} + b_d \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \Big|_{x_{\alpha+1}}^{(k)} \right) h + \left(c_u \frac{\partial^2 \phi^n}{\partial x^2} \Big|_{x_\alpha}^{(k-1)} + c_d \frac{\partial^2 \phi^n}{\partial x^2} \Big|_{x_{\alpha+1}}^{(k-1)} \right) h^2. \end{aligned} \quad (3.136)$$

Die diffusiven Flüsse können approximiert werden mit

$$\frac{\partial \phi^{n+1/2}}{\partial x} \Big|_{x_{\alpha+1/2}} \approx \frac{1}{2h} \left(\bar{\phi}_{\alpha+1}^{n+1} - \bar{\phi}_\alpha^{n+1} \right) + \frac{1}{2h} \left(\bar{\phi}_{\alpha+1}^n - \bar{\phi}_\alpha^n \right). \quad (3.137)$$

Durch die Definition der Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl (CFL-Zahl) $\sigma = U\Delta t/h$ sowie der lokalen Gitter-Reynolds-Zahl $Re_h = Uh/\nu$, lässt sich die diskretisierte Gleichung (3.135) ausdrücken zu

$$\bar{\phi}_\alpha^{n+1} + \sigma \sum_{m=-1}^1 S_m^{(IMP)} \bar{\phi}_{\alpha+m}^{n+1} = \bar{\phi}_\alpha^n - \sigma \sum_{m=-3}^3 S_m^{(EXP)} \bar{\phi}_{\alpha+m}^n. \quad (3.138)$$

Die Koeffizienten $S_m^{(IMP)}$ und $S_m^{(EXP)}$ sind in Tabelle 3.2-3.4 gegeben.

Für die Analyse der Stabilitätseigenschaften der k -exakten Verfahren wird der numerische Fehler $\bar{\varepsilon}_\alpha^n$ eingeführt. Ähnlich zu $\bar{\phi}_\alpha$ breitet sich dieser Fehler ebenfalls mit der unterliegenden Transportgleichung (3.135) aus [111]. Um die Stabilität des Verfahrens zu garantieren, sollte $\bar{\varepsilon}_\alpha^n$ daher nicht anwachsen, wenn die Lösung zeitlich voranschreitet. Ein solches Kriterium lässt sich in Form einer Verstärkungsfunktion $G = \hat{\varepsilon}_j^{n+1} / \hat{\varepsilon}_j^n$ ausdrücken. Diese lässt sich durch einsetzen der Fourier-Mode des numerischen Fehlers $\hat{\varepsilon}_j(t_n) \exp(i2\pi j x_\alpha / L)$ in die diskretisierte Transportgleichung (3.138) ausdrücken durch

$$G(\omega_j) = \frac{1 - \sigma \sum_{m=-3}^3 S_m^{(EXP)} \exp(i\omega_j m)}{1 + \sigma \sum_{m=-1}^1 S_m^{(IMP)} \exp(i\omega_j m)}. \quad (3.139)$$

Eine stabile Diskretisierung erfordert die Bedingung $|G(\omega_j)| \leq 1$ [111]. Diese wird in der folgenden Herleitung quadriert, um die Entstehung imaginärer Terme zu unterbinden. Dadurch lässt sich das Stabilitätskriterium darstellen durch

$$\left| 1 - \sigma \sum_{m=-3}^3 S_m^{(EXP)} \exp(i\omega_j m) \right|^2 - \left| 1 + \sigma \sum_{m=-1}^1 S_m^{(IMP)} \exp(i\omega_j m) \right|^2 \leq 0. \quad (3.140)$$

Tabelle 3.2: Implizite Diskretisierungskoeffizienten für die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse der 1- und 2-exakten Schemata.

Schema	$S_{-1}^{(IMP)}$	$S_0^{(IMP)}$	$S_1^{(IMP)}$
$k = 1, 2$	$-\frac{1}{4} \left(\theta + \frac{2}{\text{Re}_h} + 1 \right)$	$\frac{1}{2} \left(\theta + \frac{2}{\text{Re}_h} \right)$	$-\frac{1}{4} \left(\theta + \frac{2}{\text{Re}_h} - 1 \right)$

Tabelle 3.3: Explizite Diskretisierungskoeffizienten für die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse des 1-exakten Schemas.

Element	$S_m^{(EXP)} (k = 1)$
$\alpha - 3$	0
$\alpha - 2$	$\frac{1}{8} \psi_u (\theta + 1)$
$\alpha - 1$	$\frac{1}{8} \left[\theta (\psi_d - \psi_u - 2) - \psi_d - \psi_u - \frac{4}{\text{Re}_h} - 2 \right]$
α	$-\frac{1}{8} \left[\theta (\psi_d + \psi_u - 4) - \psi_d + \psi_u - \frac{8}{\text{Re}_h} \right]$
$\alpha + 1$	$-\frac{1}{8} \left[\theta (\psi_d - \psi_u + 2) - \psi_d - \psi_u + \frac{4}{\text{Re}_h} - 2 \right]$
$\alpha + 2$	$\frac{1}{8} \psi_d (\theta - 1)$
$\alpha + 3$	0

Tabelle 3.4: Explizite Diskretisierungskoeffizienten für die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse des 2-exakten Schemas.

Element	$S_m^{(EXP)} (k = 2)$
$\alpha - 3$	$-\frac{1}{96} \psi_u (\theta + 1)$
$\alpha - 2$	$\frac{1}{96} [\theta (\psi_d + 13\psi_u) - \psi_d + 13\psi_u]$
$\alpha - 1$	$\frac{1}{96} \left[\theta (11\psi_d - 10\psi_u - 24) - 11\psi_d - 10\psi_u - \frac{48}{\text{Re}_h} - 24 \right]$
α	$-\frac{1}{48} \left[\theta (7\psi_d + 7\psi_u - 24) - 7\psi_d + 7\psi_u - \frac{48}{\text{Re}_h} \right]$
$\alpha + 1$	$-\frac{1}{96} \left[\theta (10\psi_d - 11\psi_u + 24) - 10\psi_d - 11\psi_u + \frac{48}{\text{Re}_h} - 24 \right]$
$\alpha + 2$	$\frac{1}{96} [\theta (13\psi_d + \psi_u) - 13\psi_d + \psi_u]$
$\alpha + 3$	$-\frac{1}{96} \psi_d (\theta - 1)$

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Um eine Vereinfachung der trigonometrischen Beziehungen zu realisieren, wird die Substitution $X_j := \cos(\omega_j)$ eingeführt. Da $\omega_j \in [0, \pi]$ gilt, ist X_j dementsprechend auf dem Wertebereich $[0, 1]$ definiert. Nach einigen algebraischen Umformungen lässt sich das Stabilitätskriterium $|G(\omega_j)| \leq 1$ schließlich in Form einer quadratischen Ungleichung darstellen:

$$A(X_j)\theta^2 + B(X_j)\theta + C(X_j) \leq 0. \quad (3.141)$$

Die Koeffizienten $A, B, C = f(X_j; \sigma, \text{Re}_h, \psi_u, \psi_d)$ sind hierbei definiert durch:

$$A(X_j) = \sigma^2 [a_1(X_j)\psi_u^2 + a_2(X_j)\psi_u\psi_d + a_3(X_j)\psi_u + a_4(X_j)\psi_d^2 + a_5(X_j)\psi_d], \quad (3.142a)$$

$$B(X_j) = \sigma^2 \left[b_1(X_j)\frac{\psi_u}{\text{Re}_h} + b_2(X_j)\frac{\psi_d}{\text{Re}_h} + b_3(X_j)\psi_u^2 + b_4(X_j)\psi_u + b_5(X_j)\psi_d^2 + b_6(X_j)\psi_d \right] + \sigma [b_7(X_j)\psi_u + b_8(X_j)\psi_d + b_9(X_j)], \quad (3.142b)$$

$$C(X_j) = \sigma^2 \left[c_1(X_j)\frac{\psi_u}{\text{Re}_h} + c_2(X_j)\frac{\psi_d}{\text{Re}_h} + c_3(X_j)\psi_u^2 + c_4(X_j)\psi_u\psi_d + c_5(X_j)\psi_u + c_6(X_j)\psi_d^2 + c_7(X_j)\psi_d \right] + \sigma \left[c_8(X_j)\frac{1}{\text{Re}_h} + c_9(X_j)\psi_u + c_{10}(X_j)\psi_d \right], \quad (3.142c)$$

wobei die Koeffizienten $a_i(X_j)$, $b_i(X_j)$ und $c_i(X_j)$ in Tabelle 3.5 dargestellt sind. Für gegebene Parameter $\sigma, \text{Re}_h, \psi_u$ und ψ_d lässt sich somit ein entsprechender Kontrollparameter θ bestimmen, welcher der Ungleichung (3.141) genügt. Dies führt dazu, dass die Verstärkungsfunktion inhärent die Stabilitätsbedingung $|G(\omega_j)| \leq 1$ einhält und somit die Stabilität der unterliegenden diskretisierten linearen Transportgleichung (3.125) erfüllt ist.

Es gilt nun eine Relation für θ zu finden, welche die Ungleichung (3.141) über den definierten Wertebereich $X_j \in [0, 1]$ erfüllt. Für $X_j = 0$ und $X_j = 1$ lässt sich einfach zeigen, dass dies stets der Fall ist. Für den restlichen Bereich stellt sich ein entsprechender Beweis jedoch deutlich schwieriger dar. Das Einsetzen der zulässigen Parameter $\sigma > 0, \text{Re}_h \geq 0$ und $\psi_u, \psi_d \in [0, 1]$ in die Koeffizienten $A(X_j)$, $B(X_j)$ und $C(X_j)$ lässt jedoch darauf schließen, dass die Bedingungen $A(X_j) < 0$, $B(X_j) < 0$ und $B(X_j)^2 - 4A(X_j)C(X_j) > 0$ im betrachteten Bereich erfüllt sind. Aus diesen Bedingungen kann dann folgende Relation für θ zur Erfüllung von Ungleichung (3.141) abgeleitet werden:

$$\frac{-B(X_j) - \sqrt{B^2(X_j) - 4A(X_j)C(X_j)}}{2A(X_j)} \leq \theta \leq \frac{-B(X_j) + \sqrt{B^2(X_j) - 4A(X_j)C(X_j)}}{2A(X_j)}. \quad (3.143)$$

Das Ziel der gegenwärtigen Methode ist die Minimierung der numerischen Dissipation durch eine adaptive Steuerung von θ . Die vorangegangene Fehleranalyse des konvektiven Operators zeigt, dass der Kontrollparameter möglichst klein gewählt werden sollte, um den dissipativen Fehler zu reduzieren. Dementsprechend wird die untere Grenze in Gleichung (3.143) für die Berechnung von θ gewählt, welche mit $|G(\omega_j)| = 1$ korrespondiert. Das bedeutet, dass durch θ gerade so viel Fehlerdämpfung

Tabelle 3.5: Koeffizienten a_i , b_i and c_i in Gleichung (3.142) für das 1- und 2-exakte Diskretisierungsschema.

Koeffizient	$k = 1$	$k = 2$
$a_1(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/8$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^2 - 37)/288$
$a_2(X_j)$	$X_j(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^3 - 12X_j^2 + 35X_j + 12)/144$
$a_3(X_j)$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$(X_j - 7)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/24$
$a_4(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/8$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^2 - 37)/288$
$a_5(X_j)$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$(X_j - 7)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/24$
$b_1(X_j)$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/2$	$(X_j - 7)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/12$
$b_2(X_j)$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/2$	$(X_j - 7)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/12$
$b_3(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^2 - 37)/144$
$b_4(X_j)$	0	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/12$
$b_5(X_j)$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^2 - 37)/144$
$b_6(X_j)$	0	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/12$
$b_7(X_j)$	$-(X_j - 1)(X_j + 1)/2$	$(X_j - 7)(X_j - 1)(X_j + 1)/12$
$b_8(X_j)$	$-(X_j - 1)(X_j + 1)/2$	$(X_j - 7)(X_j - 1)(X_j + 1)/12$
$b_9(X_j)$	$2(X_j - 1)$	$2(X_j - 1)$
$c_1(X_j)$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)/2$	$(X_j - 7)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/12$
$c_2(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/2$	$-(X_j - 7)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/12$
$c_3(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/8$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^2 - 37)/288$
$c_4(X_j)$	$-X_j(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^3 - 12X_j^2 + 35X_j + 12)/144$
$c_5(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$-(X_j - 5)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/24$
$c_6(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/8$	$-(X_j - 1)^2(X_j + 1)(X_j^2 - 37)/288$
$c_7(X_j)$	$(X_j - 1)^2(X_j + 1)/4$	$-(X_j - 5)(X_j - 1)^2(X_j + 1)/24$
$c_8(X_j)$	$4(X_j - 1)$	$4(X_j - 1)$
$c_9(X_j)$	$-(X_j - 1)(X_j + 1)/2$	$(X_j - 7)(X_j - 1)(X_j + 1)/12$
$c_{10}(X_j)$	$(X_j - 1)(X_j + 1)/2$	$-(X_j - 7)(X_j - 1)(X_j + 1)/12$

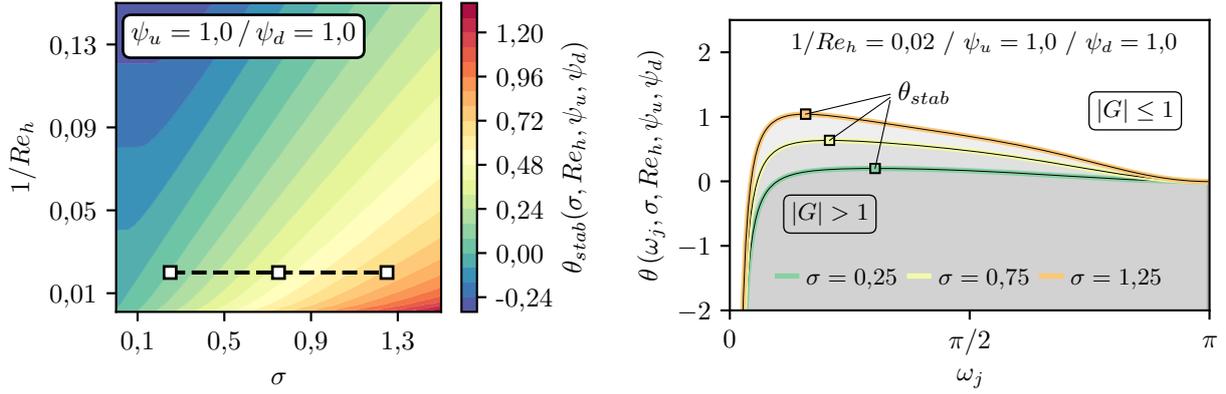


Abbildung 3.8: Werte des Kontrollparameters θ_{stab} , für welche die Stabilitätsgleichung (3.141) des 2-exakten Schemas für alle Wellenzahlen ω_j erfüllt ist (links). Die weißen Quadrate kennzeichnen die Maxima, die aus den entsprechenden Kurvenverläufen von θ auf der rechten Seite entnommen wurden.

eingbracht wird, dass das Diskretisierungsverfahren stabil bleibt. Um dies für alle Wellenzahlen zu garantieren muss schließlich das Maximum von θ im gesamten Intervall $X_j \in (0,1)$ gefunden werden, welches im Folgenden als θ_{stab} bezeichnet wird.

$$\theta_{stab}(\sigma, Re_h, \psi_u, \psi_d) = \max_{X_j} \left[\frac{-B(X_j) - \sqrt{B^2(X_j) - 4A(X_j)C(X_j)}}{2A(X_j)} \right]. \quad (3.144)$$

Abbildung 3.8 zeigt exemplarisch, wie die Werte von θ_{stab} bestimmt werden. Auf der linken Seite sind θ_{stab} -Werte für $k = 2$, $\psi_U = 1$, $\psi_D = 1$ und variierende Werte von σ und Re_h dargestellt. Die weißen Quadrate referenzieren die entsprechenden Kurven auf der rechten Seite, welche den Verlauf von θ über ω_j darstellen und verwendet werden, um θ_{stab} zu bestimmen. Es ist deutlich zu erkennen, dass θ_{stab} den zulässigen Wertebereich $\theta \in [0,1]$ in bestimmten Regionen über- oder unterschreitet. In diesen Bereichen wird θ_{stab} auf den zulässigen Wertebereich beschränkt. Die daraus resultierende Größe wird im Folgenden mit θ_0 bezeichnet:

$$\theta_0(\sigma, Re_h, \psi_u, \psi_d) = \max [0, \min (1, \theta_{stab})]. \quad (3.145)$$

Die Werte von θ_0 werden in dieser Arbeit numerisch über den Parameterbereich $\sigma \in [10^{-9}, 5]$ und $1/Re_h \in [0, 0,5]$ berechnet. Die Limitierungsfaktoren werden auf den Wertebereich $\psi_\alpha \in [0, 1]$ beschränkt. In Abbildung 3.9 ist θ_0 für den untersuchten Bereich von σ und Re_h und ausgewählte Kombinationen von ψ_u und ψ_d für das 1- und 2-exakte Schema dargestellt. In den blauen Bereichen mit $\theta_0 = 0$ können die Schemata als numerisch stabil betrachtet werden, unabhängig davon ob eine zentrale oder eine Aufwind-Diskretisierung verwendet wird. Im Gegensatz dazu kann die Stabilität in den roten Regionen nicht garantiert werden, da dort für $|G(\omega_j)| \leq 1$ Werte von $\theta > 1$ gewählt werden müssten. Für den Fall, in dem beide Limitierungswerte ψ_u und ψ_d den Wert null annehmen, sind beide Diskretisierungsschemata stabil. Beide Verfahren approximieren den Fluss für $\theta_0 = 0$ je-

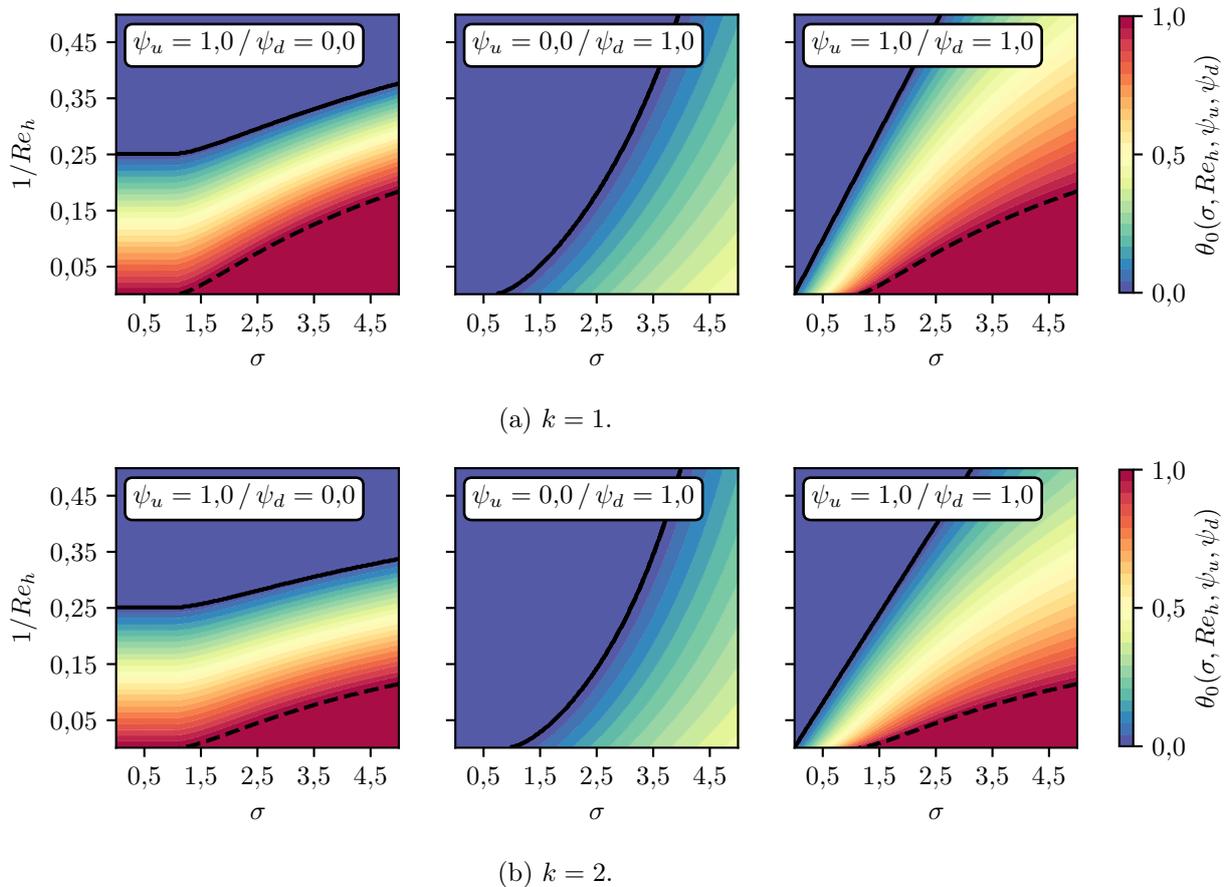


Abbildung 3.9: Beschränkter Kontrollparameter θ_0 für das 1- und 2-exakten Schema bei variierenden Limitierungswerten ψ_u und ψ_d . Durchgezogene Linien kennzeichnen die Grenzen zu numerisch stabilen Bereichen in dunkelblau, wohingegen gestrichelte Linien die Grenzen zu numerisch instabilen Regionen in dunkelrot darstellen. Dazwischen lässt sich mit einer geeigneten Wahl von θ_0 eine stabile Diskretisierung erreichen.

doch mit einer Genauigkeit von mindestens zweiter Ordnung, weshalb nach Godunovs Theorem die Entstehung von Extremwerten in der Nähe von Diskontinuitäten nicht unterbunden wird. Um diese Bedingung zu erfüllen muss $\theta_0 = 1$ gesetzt werden, wenn das stromaufwärts gelegene Element mit $\psi_u = 0$ vollständig limitiert ist. Aus den Abbildungen lässt sich deutlich erkennen, dass es essentiell ist, die Limiterungsfaktoren bei der Stabilitätsanalyse zu berücksichtigen. Interessanterweise weist das 2-exakte Schema eine höhere Stabilität auf als das 1-exakte Schema. Dieses Verhalten erscheint kontraintuitiv, da Verfahren höherer Ordnung als anfälliger für numerische Instabilitäten gelten.

3.5.3 Approximation von θ_0 mit neuronalen Netzwerkmodellen

Auf Basis der vorangegangenen Analyse stellt sich die Frage, wie sich das Stabilitätskriterium in den Strömungslöser **ThetaCOM** integrieren lässt. Die Berechnung von θ_0 ist mit einem relativ hohen Rechenaufwand verbunden und muss an jeder Elementoberfläche des Dualgitters erfolgen, was die Performance des Verfahrens maßgeblich beeinträchtigen würde. Eine Alternative wäre, die Ergebnis-

se der Gleichungen (3.144) und (3.145) durch ein ordnungsreduziertes Modell (*reduced-order model*) zu approximieren. Da das unterliegende Problem analytisch definiert ist, wäre beispielsweise ein nichtlinearer Regressionsansatz eine vernünftige Wahl für die Modellreduktion. Hierfür gilt es eine nichtlineare Ansatzfunktion zu spezifizieren, was sich für die gegebenen Daten jedoch als nicht trivial herausgestellt hat. Sollen die Gleichungen beispielsweise durch multivariate Polynome approximiert werden, so kann eine ausreichende Genauigkeit nur unter Verwendung eines hohen Polynomgrades realisiert werden, was wiederum die Kompaktheit des reduzierten Modells beeinträchtigt. Dies ist auch der Fall für andere Ansätze, wie beispielsweise der symbolischen Regression. In einer vorangegangenen Arbeit [223] wurde jedoch gezeigt, dass sich das Regressionsproblem durch die Verwendung neuronaler Netzwerke in Form sehr kompakter Modelle approximieren lässt. Letztere werden auch als Perzeptron-Modelle bezeichnet und stellen ein mehrdimensionales, nichtlineares Regressionsmodell dar, mit welchem die Eingabegrößen σ , $1/\text{Re}_h$, ψ_u und ψ_d auf einen entsprechenden Ausgabewert θ_0 abgebildet werden können. Das Modell besteht aus mehreren Schichten von miteinander verbundenen Recheneinheiten, welche als Neurone bezeichnet werden. Jedes Neuron berechnet eine gewichtete Summe seiner Eingabewerte, welche entweder die Eingangsgrößen des Netzwerks oder die Ausgangsgrößen eines Neurons aus einer vorangehenden Schicht darstellen. Das Ergebnis der gewichteten Summe wird anschließend als Parameter einer nichtlinearen Funktion ausgewertet, welche auch als Aktivierungsfunktion bezeichnet wird. Die Koeffizienten der Gewichtung stellen die Freiheitsgrade des Netzwerk-Modells dar, welche es in einem iterativen Prozess zu bestimmen gilt. Dieser wird auch als Netzwerk-Training bezeichnet. Für eine ausführliche Behandlung des mehrlagigen Perzeptron-Modells sei auf die Literatur verwiesen [14, 19, 109, 262].

3.5.3.1 Struktur des neuronalen Netzwerkmodells

In einer vorangegangenen Arbeit [223] wurden inkompressible, strömungsmechanische Testfälle betrachtet, für welche die in Abschnitt 3.2.4 beschriebene Limitierung des Rekonstruktionspolynoms nicht notwendig ist. Lediglich in wandnahen Elementen wurden die Limitierungsfaktoren zu null gesetzt, um dort die Fehlerordnung lokal zu begrenzen. Da somit ψ_u und ψ_d nur die Werte null und eins annehmen konnten, war es zielführender, für die verschiedenen Kombinationen dieser Werte separate Netzwerkmodelle mit nur zwei Eingangsgrößen ($\sigma, 1/\text{Re}_h$) zu trainieren. In dieser Arbeit soll dieser Ansatz erweitert werden, um ein Modell für die Approximation von θ_0 über den gesamten Parameterbereich $\psi_u \times \psi_d = [0,1] \times [0,1]$ zu ermöglichen. Dafür wäre es naheliegend, die Netzwerkstruktur auf vier Eingangsgrößen ($\sigma, 1/\text{Re}_h, \psi_u, \psi_d$) zu erweitern. Vorläufige Untersuchungen zeigten jedoch, dass mit dieser Konfiguration sehr große Netzwerkmodelle notwendig sind, um θ_0 ausreichend genau zu approximieren. Ein weiteres Problem stellt die Auflösung des Parameterraumes für die Erzeugung der Trainingsdaten dar, deren Anzahl mit einer vierten Potenz skaliert. Aus diesem Grund wird ein alternativer Ansatz gewählt, bei welchem die Approximation von θ_0 durch einen Verbund neuronaler Netzwerke realisiert wird. Der Parameterbereich $\psi_u \times \psi_d$ wird dabei durch ein kartesisches Gitter von $N_{\psi_u} \times N_{\psi_d}$ Wertepaaren (ψ_u, ψ_d) diskretisiert. Jedem Gitterpunkt wird ein separates Perzeptron-Modell mit lediglich zwei Eingangsgrößen ($\sigma, 1/\text{Re}_h$) zugeordnet. Jedes Perzeptron-Modell wird mit

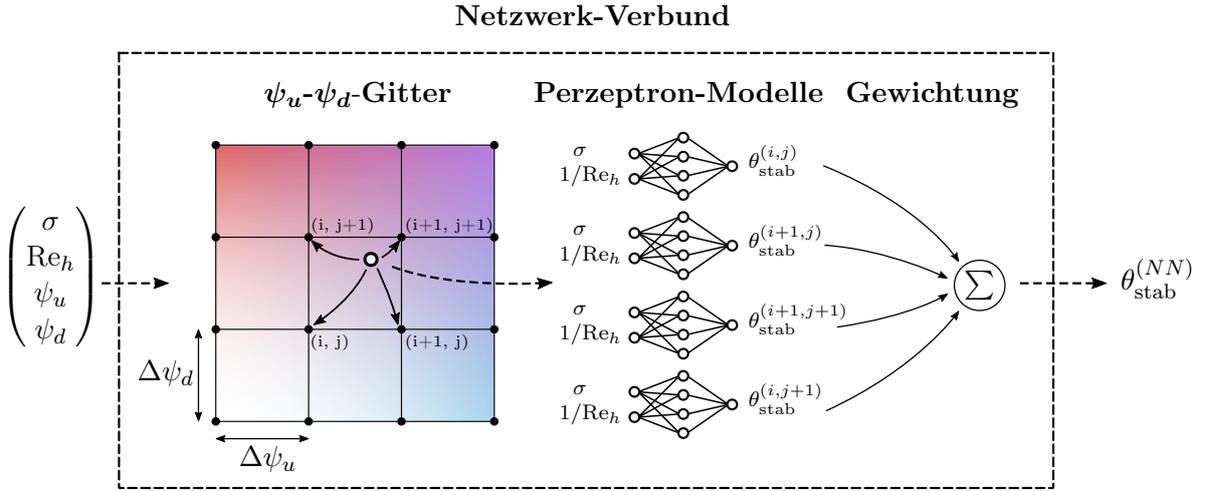


Abbildung 3.10: Ansatz zur Bestimmung des Kontrollparameters $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ mit einem Verbund neuronaler Netzwerkmodelle.

einem separaten Datensatz trainiert, sodass es den Kontrollparameter θ_{stab} für seine entsprechenden Wertepaare (ψ_u, ψ_d) über einen vorgegebenen Parameterbereich von σ und $1/\text{Re}_h$ ausreichend genau approximieren kann.³ Für die Berechnung von θ_0 mit dem Netzwerkverbund werden für einen gegebenen Eingangsvektor $(\sigma, \text{Re}_h, \psi_u, \psi_d)$ zunächst die Perzeptron-Modelle der vier nächstliegenden Knotenpunkte zum Punkt (ψ_u, ψ_d) gewählt, um jeweils θ_{stab} zu approximieren. Anschließend wird der Wert $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ als gewichtete Summe dieser vier Werte interpoliert, was über eine bilineare Interpolation [200] erfolgt

$$\theta_{\text{stab}}^{(NN)} = (1-s)(1-t)\theta_{\text{stab}}^{(i,j)} + s(1-t)\theta_{\text{stab}}^{(i+1,j)} + st\theta_{\text{stab}}^{(i+1,j+1)} + (1-s)t\theta_{\text{stab}}^{(i,j+1)}. \quad (3.146)$$

Hierbei stellt $\theta_{\text{stab}}^{(i,j)}$ den Ausgabewert eines Perzeptron-Modells am Knotenpunkt (i,j) dar. Die Parameter s und t werden berechnet durch

$$s = \frac{\psi_u}{\Delta\psi_u} - i, \quad t = \frac{\psi_d}{\Delta\psi_d} - j. \quad (3.147)$$

mit den Schrittweiten $\Delta\psi_u$ und $\Delta\psi_d$ des kartesischen $\psi_u \times \psi_d$ -Gitters. Nach der Approximation von θ_{stab} durch den Netzwerkverbund wird Gleichung (3.145) verwendet, um den beschränkten Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ zu bestimmen, welcher für die Stabilisierung des Diskretisierungsverfahrens verwendet wird. Zur Verdeutlichung ist der Vorgang zur Bestimmung von $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ schematisch in Abbildung 3.10 dargestellt.

Die verwendeten Netzwerkmodelle verfügen über eine Eingangs- und eine Ausgangsschicht, sowie eine einzelne Zwischenschicht. Die Zahl der Neurone N_n in der Zwischenschicht variiert in Abhängigkeit der Exaktheit des Schemas sowie in Abhängigkeit der Limitergrößen ψ_u und ψ_d . Die

³Es sei darauf hingewiesen, dass sich die Größe θ_0 ebenfalls als Ausgabegröße für die Perzeptron-Modelle anbieten würde. Die Approximation wird jedoch durch die Wahl von θ_{stab} drastisch verbessert.

3. METHODIK ZUR FINITE-VOLUMEN-DISKRETISIERUNG HOHER ORDNUNG

Eingangsschicht umfasst zwei Neurone und die Ausgangsgröße ein Neuron. Die Netzwerkmodelle agieren damit als ineinander verschachtelte, nichtlineare Funktionen, durch welche sich $\theta_{\text{stab}}^{(i,j)}$ für eine entsprechende Kombination von (ψ_u, ψ_d) berechnen lässt durch

$$\theta_{\text{stab}}^{(i,j)}(\sigma, \text{Re}_h) = b^{(2)} + \sum_{p=1}^{N_n} w_p^{(2)} g_{\text{soft}} \left(b_p^{(1)} + w_{p1}^{(1)} \sigma + w_{p2}^{(1)} (1/\text{Re}_h) \right) \quad (3.148)$$

Hierbei sind $w_{pq}^{(r)}$ die Gewichte zwischen Neuron p in Schicht $r - 1$ und Neuron q in Schicht r . Jedes Neuron enthält zudem einen Bias-Wert $b_p^{(r)}$. Die Parameter $w_{pq}^{(r)}$ und $b_p^{(r)}$ werden für jedes Netzwerkmodell durch den Trainingsprozess separat bestimmt und müssen für die Simulation lediglich in entsprechenden Datenfeldern gespeichert werden. Für alle Perzeptron-Modelle wird die nichtlineare *Softplus*-Funktion $g_{\text{soft}}(x)$ als Aktivierungsfunktion gewählt

$$g_{\text{soft}}(x) = \frac{1}{1 + \widetilde{\exp}(x)} \quad \text{mit} \quad \widetilde{\exp}(x) = \frac{x^2 + 6x + 12}{x^2 - 6x + 12}, \quad (3.149)$$

welche auf dem (2,2)-Padé Approximant der Exponentialfunktion basiert. Letztere ist eine Approximation von $\exp(x)$ für das Intervall $|x| < 1/2$ und hat sich in numerischen Voruntersuchungen als sehr guter Kompromiss zwischen Genauigkeit und Komplexität der Modelle herausgestellt. Während der Simulation werden die Werte $\theta_0^{(NN)}$ an jeder Elementoberfläche $A_{\alpha\beta}$ zu jedem Zeitschritt neu berechnet und für die Lösung der Transportgleichung verwendet. Auf Basis der Limitierungsfaktoren wird für jede Oberfläche das entsprechende Netzwerkmodell ausgewählt, womit dann der Wert von $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ über die Eingangsgrößen $\sigma = U\Delta t/h$ und $1/\text{Re}_h = \nu_{\text{tot}}/(Uh)$ bestimmt wird. Diese Größen werden berechnet durch:

$$h = \sqrt{\Delta x_i^{(\alpha\beta)} \Delta x_i^{(\alpha\beta)}}, \quad U = \frac{2|\dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)}|}{(\bar{\rho}_\alpha + \bar{\rho}_\beta)|A_{\alpha\beta}|}, \quad \nu_{\text{tot}} = \frac{1}{2} (\bar{\nu}_\alpha + \bar{\nu}_\beta) + \frac{1}{2} (\bar{\nu}_{t,\alpha} + \bar{\nu}_{t,\beta}). \quad (3.150)$$

Die Ausgabewerte des Netzwerk-Verbunds $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ werden schließlich über Gleichung (3.145) beschränkt, um den finalen Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ zu berechnen.

Für die thermochemischen Feldgrößen h und Y_s wird der Kontrollparameter statt der Reynoldszahl über die entsprechende Péclet-Zahl $\text{Pe}_h = \rho U h (c_p/\lambda)_{\text{tot}}$ und $\text{Pe}_Y = U h / D_{\text{tot}}$ berechnet. Da sich für den Multi-Spezies-transport die Diffusivität D der jeweiligen Spezies unterscheidet, resultieren an einer Oberfläche unterschiedliche Kontrollparameter für jede Komponente. Dies bewirkt eine Verletzung der Spezies-Massenerhaltung, was sich anhand der Summe der konvektiven Spezies-Flüsse $F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}(Y_s)$ über $A_{\alpha\beta}$ zeigen lässt:

$$\sum_{s=1}^{N_s} F_{C,LO}^{(\alpha\beta)}(Y_s) = \underbrace{\frac{1}{2} \dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \sum_{s=1}^{N_s} (\bar{Y}_{s,u} + \bar{Y}_{s,d}) - \frac{1}{2} \dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)} \sum_{s=1}^{N_s} \theta_s (\bar{Y}_{s,d} - \bar{Y}_{s,u})}_{\dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)}}. \quad (3.151)$$

Die Flüsse müssen zur Massenerhaltung mit dem integrierten Massenstrom $\dot{m}^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ übereinstimmen, was sich für variierende Kontrollparameter nicht stets erfüllen lässt. Der resultierende Fehler kann in den Simulationen zu unphysikalischen Temperaturen führen. Um dies zu unterbinden wird für die thermochemischen Transportgleichungen an jeder Oberfläche stets der maximale Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ verwendet, der sich für alle Spezies und für die Enthalpie ergibt. Hierdurch wird sowohl das Stabilitätskriterium, als auch die Spezies-Massenerhaltung erfüllt. Theoretisch müsste ein ähnliches Vorgehen auch für die Bestimmung der Limiter ψ_α durchgeführt werden, sodass die Massenerhaltung auch durch die Flussanteile $F_{C,HO}$ erfüllt ist. Numerische Experimente haben jedoch gezeigt, dass die entsprechenden Fehler vernachlässigbar klein sind und ohne diese Anpassung eine höhere Genauigkeit erzielt wird.

3.5.3.2 Training des neuronalen Netzwerkmodells

Während dem Trainingsprozess werden dem Netzwerk festgelegte Eingangsgrößen σ und $1/\text{Re}_h$ präsentiert. Die daraus bestimmten Ausgangswerte $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ werden anschließend mit den Zielgrößen θ_{stab} aus der Stabilitätsgleichung (3.144) verglichen. Mit der resultierenden Abweichung werden dann die Netzwerk-Gewichte iterativ angepasst, sodass die folgende Fehlerfunktion E für alle N_P Proben des Trainingsdatensatzes minimiert wird:

$$E = \frac{1}{N_P} \sum_{n=1}^{N_P} \left(\theta_{\text{stab},n} - \theta_{\text{stab},n}^{(NN)} \right)^2. \quad (3.152)$$

Typischerweise erfolgt die Minimierung von Gleichung (3.152) für neuronale Netzwerkmodelle mit dem Ansatz eines stochastischen Gradientenabstiegs, was im Englischen als *Stochastic Gradient Descent* (SGD) bezeichnet wird. Dieser Ansatz ist insbesondere zielführend zur Optimierung hochdimensionaler Probleme [25]. Da die Dimension des betrachteten Regressionsproblems jedoch über eine sehr kleine Eingabedimension verfügt, können die Netzwerkgewichte sehr effizient durch Optimierungsmethoden zweiter Ordnung bestimmt werden [262]. Dazu zählt auch der in dieser Arbeit verwendete Levenberg-Marquardt (LM) Algorithmus [140, 151], welcher sich insbesondere für das Training von kleinen bis mittelgroßen Netzwerken eignet [104, 267]. Für jedes Modell werden mehrere Trainingsdurchläufe mit variierender Neuronenzahl N_n und dazu entsprechenden Trainingsdatensätzen unternommen. Die trainierten Modelle werden dann mit einem Validierungsdatensatz getestet. Die Modellgüte wird dazu mit dem *Root Mean Square Error Normalized by the Standard Deviation* (NRMSE) und dem maximalen absoluten Fehler $E_{\text{abs}}^{(\text{max})}$ bewertet

$$\text{NRMSE} = \frac{\sqrt{\frac{1}{N_P} \sum_n \left(\theta_{0,n} - \theta_{0,n}^{(NN)} \right)^2}}{s(\theta_0)} \quad \text{und} \quad E_{\text{abs}}^{(\text{max})} = \max_n \left| \theta_{0,n} - \theta_{0,n}^{(NN)} \right|, \quad (3.153)$$

wobei $s(\cdot)$ die Standardabweichung darstellt. Letztendlich wird das kompakteste Modell ausgewählt, welches alle Werte im Validierungsdatensatz mit einer vorgegebenen Fehlertoleranz approximieren kann. Ein bedeutender Nachteil der LM-Methode ist jedoch, dass der Algorithmus zur Optimierung

inhärent auf der Summe der kleinsten Quadrate beruht. Die Netzwerkoeffizienten werden dadurch in solch einer Weise trainiert, dass der Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ aufgrund von Approximationsfehlern sowohl über- als auch unterschätzt wird. Während eine Überschätzung lediglich mit einer erhöhten numerischen Dissipation für das Diskretisierungsschema einhergeht, führt eine Unterschätzung zu einer Verletzung der Stabilitätsgleichung (3.141). In einer vorangegangenen Arbeit [223] wurde bereits beschrieben, dass eine Unterschätzung von θ_0 beispielsweise numerische Artefakte in den turbulenten Spektren in LES induzieren kann, was auf eine unzureichende Dämpfung von parasitären Moden zurückgeführt wird. Wie in der Arbeit gezeigt wurde, lässt sich dieses Problem vermeiden, indem die Fehlerfunktion E für das Netzwerktraining durch einen zusätzlichen Term angepasst wird:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^K \left[\left(\theta_{\text{stab},n} - \theta_{\text{stab},n}^{(NN)} \right)^2 + k_p \left| \theta_{\text{stab},n} - \theta_{\text{stab},n}^{(NN)} \right| H \left(\theta_{\text{stab},n} - \theta_{\text{stab},n}^{(NN)} \right) \right]. \quad (3.154)$$

Der zusätzliche Term dient als Schwellwertfunktion und beinhaltet die Heaviside-Funktion $H(x)$ sowie die Konstante $k_p = 1000$. Er wird lediglich aktiviert, wenn die vorhergesagten Kontrollparameter $\theta_{\text{stab}}^{(NN)}$ ihre entsprechenden Zielwerte θ_{stab} unterschreiten. Auf diese Weise werden die Netzwerkoeffizienten inhärent so trainiert, dass eine Unterschätzung von θ_{stab} vermieden wird. Leider lässt sich dieser zusätzliche Term nicht ohne weiteres mit der LM-Optimierungsmethode vereinen, da letztere auf quadratischen Fehlerfunktionen basiert [202]. Mit einem SGD-Optimierungsalgorithmus ließe sich der Term ohne größeren Aufwand implementieren. Allerdings weist diese Methode deutlich schlechtere Konvergenzeigenschaften für die Regression des betrachteten Problems auf. Wie in der vorangegangenen Arbeit [223] gezeigt wurde, lassen sich die Methoden allerdings nacheinander anwenden, um so die jeweiligen Vorteile zu nutzen. Das Netzwerktraining wird daher in die folgenden drei Schritte unterteilt:

1. Training von mehreren Modellen mit variierender Neuronenzahl N_n unter Verwendung der LM-Methode und der Fehlerfunktion (3.152).
2. Auswahl des kompaktesten Modells, mit welchem sich ein Validierungsdatensatz mit vorgegebenen Fehlertoleranzen approximieren lässt.
3. Optimierung der Gewichte des Gewinnermodells mit einem SGD-Optimierungsalgorithmus und der Fehlerfunktion (3.154), um die Unterschätzung des Kontrollparameters θ_{stab} zu minimieren.

Diese Prozedur wird für jedes Wertepaar (ψ_u, ψ_d) durchgeführt, um somit den gesamten Netzwerkverbund zu trainieren.

3.5.4 Ergebnisse des Netzwerk-Trainings

In diesem Abschnitt wird im Detail auf die Durchführung des Trainings der Netzwerkverbunde eingegangen. Für beide k -exakten Schemata wird jeweils ein Verbund mit 8×8 Netzwerkmodellen verwendet. Diese Anzahl hat sich in numerischen Experimenten als ausreichend gezeigt, um θ_0 über den betrachteten Parameterbereich zu approximieren. Die Suche nach den vier nächsten Modellen

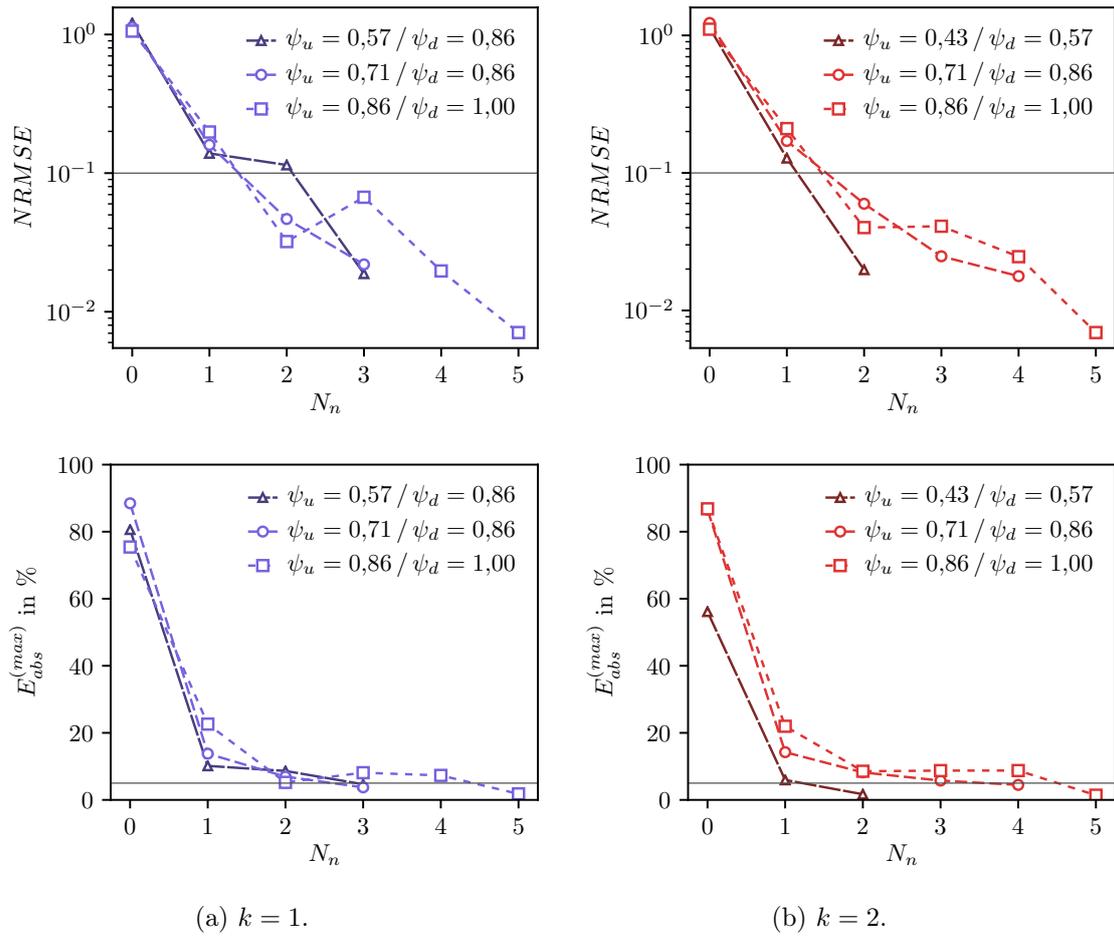


Abbildung 3.11: NRMSE und maximaler absoluter Fehler $E_{\text{abs}}^{\text{max}}$ zur Approximation von $\theta_0^{(NN)}$ für ausgewählte Netzwerk-Modelle in Abhängigkeit der Neuronenzahl N_n nach dem LM-Training.

im Netzwerkverbund lässt sich außerdem sehr effizient realisieren, wenn die Anzahl der Modelle eine Zweierpotenz darstellt und sich dadurch eine binäre Modulo-Operation verwenden lässt [113]. Für jedes der 64 Netzwerkmodelle gilt es die optimale Neuronenzahl N_n und die dazugehörigen Netzwerkoeffizienten zu bestimmen. Dazu wird für jedes Netzwerkmodell ein separater Trainingsdatensatz erzeugt, indem θ_{stab} äquidistant über den Parameterbereich $\sigma \times 1/\text{Re}_h \in [10^{-9}, 0,5] \times [0,5]$ und mit der entsprechenden Kombination von (ψ_u, ψ_d) berechnet wird. Die Größe des Trainingsdatensatzes wird in Abhängigkeit von N_n gewählt, wobei pro Netzwerkoeffizient 250 Stichproben zu generieren sind. Mit den berechneten Trainingsdaten lassen sich dann die Netzwerkoeffizienten des Modells über die LM-Methode bestimmen, was in dieser Arbeit durch die Open Source Python Bibliothek *Scipy* [249] erfolgt. Dieser Schritt wird sukzessive für unterschiedliche Neuronenzahlen wiederholt, bis das Netzwerkmodell einen separaten Validierungsdatensatz mit einer vorgegebenen Genauigkeit approximieren kann. Abbildung 3.11 zeigt die Fehlernormen NRMSE und $E_{\text{abs}}^{(\text{max})}$ einiger ausgewählter Netzwerkmodelle nach dem LM-Training über der Neuronenzahl N_n . Die Fehler

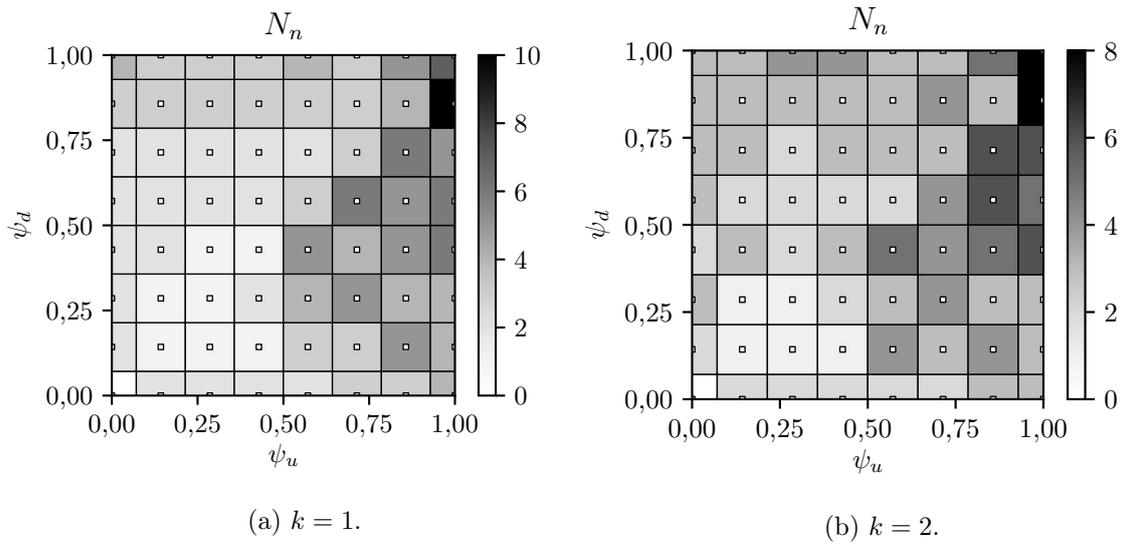


Abbildung 3.12: Neuronenzahl N_n der Netzwerk-Modelle im Verbund zur adaptiven Berechnung des Kontrollparameters $\theta_0^{(NN)}$.

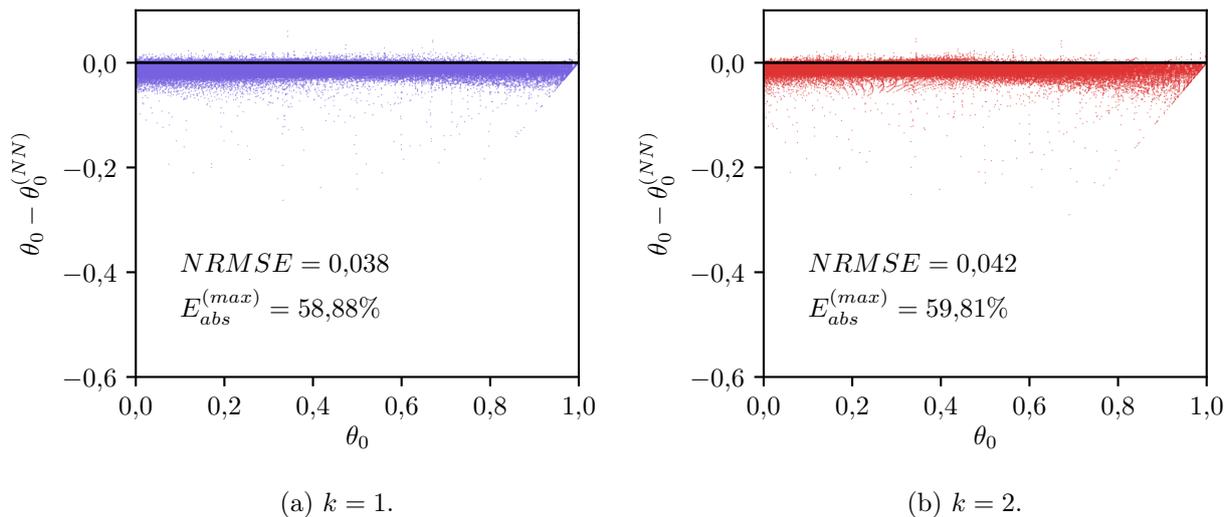


Abbildung 3.13: Abweichung zwischen dem beschränkten analytischen Kontrollparameter θ_0 und dem durch die Netzwerkverbunde approximierten Wert $\theta_0^{(NN)}$ für beide k -exakten Schemata.

werden mit einem separaten Validierungsdatensatz berechnet, welcher 62500 Stichproben umfasst. Die Schwellwerte zur Bewertung der Modellgüte wurden vorab durch numerische Experimente bestimmt und bewirken einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Kompaktheit der Modelle. Abbildung 3.12 zeigt die Anzahl der Neuronen aller Modelle im gesamten Netzwerkverbund. Es ist zu erkennen, dass für beide Fälle $k = 1$ und $k = 2$ die Netzwerke mehr Neurone im Bereich $\psi_u > 0,5$ benötigen, um die Validierungsdatensätze ausreichend genau zu approximieren. Die größten Modelle resultieren, wenn ψ_d und ψ_u nahe eins sind und die Lösung somit nur schwach limitiert wird.

Im nächsten Schritt wird die erweiterte SGD-Optimierung mit der Fehlerfunktion E aus Gleichung (3.154) auf die ausgewählten Modelle angewendet. Die Gewichte der Modelle werden dadurch so verändert, dass der Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ infolge von Approximationsfehlern eher überschätzt wird, um somit die unterliegende Stabilitätsgleichung (3.144) nicht zu verletzen. Für die Optimierung wird der Adam Algorithmus [128] der Open Source Bibliothek *PyTorch* [187] verwendet und das Training erfolgt mit den Datensätzen des vorangegangenen LM-Trainings. Die Güte der Netzwerkverbunde nach dem zusätzlichen SGD-Trainingsschritt sind in Abbildung 3.13 dargestellt. Gezeigt ist die Abweichung des approximierten und anschließend beschränkten Kontrollparameters $\theta_0^{(NN)}$ zum analytischen Pendant θ_0 . Die Daten werden mit einem weiteren Validierungsdatensatz berechnet, welcher 360000 Stichproben umfasst und sich über den gesamten Parameterbereich von σ , Re_h , ψ_u und ψ_d erschließt. Der Einfluss der SGD-Optimierung ist deutlich daran zu erkennen, dass der überwiegende Anteil der Fehlerdifferenzen negativ ist, wodurch die Unterprognose von θ_0 aufgrund von Approximationsfehlern deutlich reduziert wird. Es fällt auf, dass der Schwellwert $E_{\text{abs}}^{\text{max}} \leq 5\%$, welcher im ersten Trainingsschritt zur Auswahl der Modelle verwendet wurde, für beide k -exakten Schemata deutlich überschritten wird. Diese hohen Fehler sind wenigen Ausreißern geschuldet. Die Ergebnisse in Kapitel 4 werden jedoch zeigen, dass diese Ausreißer keine maßgebliche Auswirkungen auf die Güte oder Stabilität der Lösung in den betrachteten Testfällen haben. Der überwiegende Anteil der Validierungsdaten wird im Gegensatz dazu mit einem außerordentlich kleinen Fehler approximiert, was anhand der geringen NRMSE-Werte zu erkennen ist.

4 Verifikation und Validierung

In diesem Kapitel wird die Verifikation und Validierung des k -exakten Multi-Korrekturverfahrens behandelt, welches im Rahmen dieser Arbeit in den Strömungslöser **ThetaCOM** implementiert wurde. Hierzu werden verschiedene Testfälle betrachtet, welche sich entsprechend ihrer Komplexität in die folgenden drei Gruppen unterteilen lassen:

1. Kanonische Testfälle
2. Laminare Testfälle
3. Turbulente Testfälle

Die kanonischen Testfälle stellen generische strömungsmechanische Probleme dar, für welche eine analytische Lösung bekannt ist. Sie eignen sich somit zur direkten Verifikation der numerischen Operatoren hinsichtlich ihrer räumlichen Fehlerordnung. Die laminaren und turbulenten Testfälle weisen im Gegensatz dazu eine höhere Komplexität auf und dienen dazu, das Verfahren mit experimentellen Daten oder Vergleichsdaten aus DNS zu validieren.

Es werden zwei k -exakte Multi-Korrekturverfahren untersucht, welche entsprechend ihrer Exaktheit mit $k = 1$ und $k = 2$ bezeichnet werden. Für das 1-exakte Verfahren wird der Green-Gauss-Gradient über Gleichung (3.23) korrigiert und es erfolgt keine Berechnung von höheren Ableitungen. Die in Kapitel 3.3 dargestellten Korrekturterme $F_{C,HO}^{(\alpha\beta)}$ und $F_{D,HO}^{(\alpha\delta)}$ zur Berechnung der konvektiven und diffusiven Flüsse vereinfachen sich dementsprechend. Auch in die k -exakte Projektionsmethode werden lediglich die 1-exakten Korrekturen eingesetzt und die Berechnung der adaptiven Dissipation erfolgt mit dem Modell, welches für $k = 1$ hergeleitet wurde. Für das 2-exakte Verfahren erfolgt im Gegensatz dazu die Berechnung der Hesse-Matrix und es wird ein weiterer Korrekturschritt für die Gradienten benötigt. Die Berechnungen der Fluss-Korrekturterme sowie der Korrekturterme der Projektionsmethode erfolgen mit den dargestellten 2-exakten Formulierungen. Die Berechnung der Laplace-Flüsse zur Lösung der Druckkorrektur-Gleichung erfolgt allerdings aus den in Kapitel 3.4 genannten Gründen auch für dieses Verfahren mit einer 1-exakten Rekonstruktion.

Um den Einfluss der k -exakten Diskretisierung auf den numerischen Fehler bewerten zu können werden die Testfälle zusätzlich mit konventionellen Diskretisierungsverfahren berechnet. Diese Schemata weisen formal eine 0-exakte Rekonstruktion auf, weshalb keine Korrektur der Green-Gauss-Gradienten erfolgt. Für die Diskretisierung der konvektiven Flüsse wird je nach Testfall das *Central Discretization Scheme* (CDS) Verfahren oder das *Quadratic Upwind Discretization Scheme* (QUDS) Verfahren verwendet. Beide Methoden waren bereits in **ThetaCOM** implementiert und sind im

Detail in Anhang D dargestellt. Das CDS-Verfahren wird stets für die Flussberechnung der Impulserhaltungsgleichungen und ohne eine Limitierung eingesetzt. Dieses Verfahren verfügt insbesondere auf kartesischen Rechengittern über eine geringe numerische Dissipation, weshalb es sich einerseits für LES eignet [213] und andererseits zu Instabilitäten neigt. Die Verwendung des QUDS-Verfahrens erfolgt für die Diskretisierung der Enthalpie- und Spezies-Flüsse und es wird zusammen mit dem Limitierungsansatz von Venkatakrishnan [245] eingesetzt. Dies ist darin begründet, dass Spezies- und Enthalpie-Transportgleichungen in reaktiven Strömungen eine höhere numerische Dissipation benötigen, um die Lösung infolge der großen Gradienten nahe der Flammenfront zu stabilisieren. Die Berechnung diffusiver Flüsse erfolgt mit dem dargestellten Verfahren nach Mathur und Murthy ohne die hergeleiteten k -exakten Korrekturterme.

Für alle drei betrachteten Verfahren wird zur Lösung aller Transportgleichungen die BICGSTAB-Methode mit einer Jacobi-Präkonditionierung verwendet. Die Poisson-Gleichung wird stets mit dem FGMRES-Verfahren und einer geometrischen Mehrgitter-Präkonditionierung gelöst, welche auf drei Gitterschrittweiten mit einem V -Zyklus realisiert wird. Es sei zu erwähnen, dass sich mit **The-taCOM** lediglich dreidimensionale Rechengitter verwenden lassen. Für die behandelten ein- und zweidimensionalen Testfälle werden daher ebenfalls stets dreidimensionale Rechengebiete definiert. Die dritte Raumrichtung wird dann durch ein einzelnes Element aufgelöst und der Raumebene wird eine symmetrische Randbedingung aufgeprägt.

4.1 Kanonische Testfälle

Für die Verifizierung der Testfälle in diesem Abschnitt wird die L^2 -Fehlernorm verwendet, welche definiert ist durch

$$E_{L^2}(\bar{\phi}) = \left[\frac{\sum_{\alpha=1}^{N_K} (\bar{\phi}_\alpha - \bar{\phi}_\alpha^{\text{ex}})^2 |\Omega_\alpha|}{\sum_{\alpha=1}^{N_K} |\Omega_\alpha|} \right]^{1/2} \quad (4.1)$$

wobei $\bar{\phi}_\alpha^{\text{ex}}$ die exakte volumengemittelte, analytische Lösung darstellt. Die Fehlernorm wird auf unterschiedlich feinen Rechengittern berechnet, um so die Fehlerordnung der jeweiligen Diskretisierungsverfahren zu bestimmen. Da die exakten volumetrischen Mittelwerte für die teils verzerrten median-dualen Elemente nur schwer zu berechnen sind, werden sie über die Punktwerte der bekannten analytischen Lösung und deren Ableitungen mit den geometrischen Momente der Elemente approximiert zu

$$\bar{\phi}_\alpha^{\text{ex}} = \phi \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{\text{ex}} + \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{\text{ex}} \mathcal{M}_{i,\alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}_\alpha}^{\text{ex}} \mathcal{M}_{ij,\alpha} + \mathcal{O}(h^3). \quad (4.2)$$

Die Genauigkeit dieser Approximation ist ausreichend, um die in dieser Arbeit betrachteten Verfahren hinsichtlich einer dritten Fehlerordnung zu verifizieren.

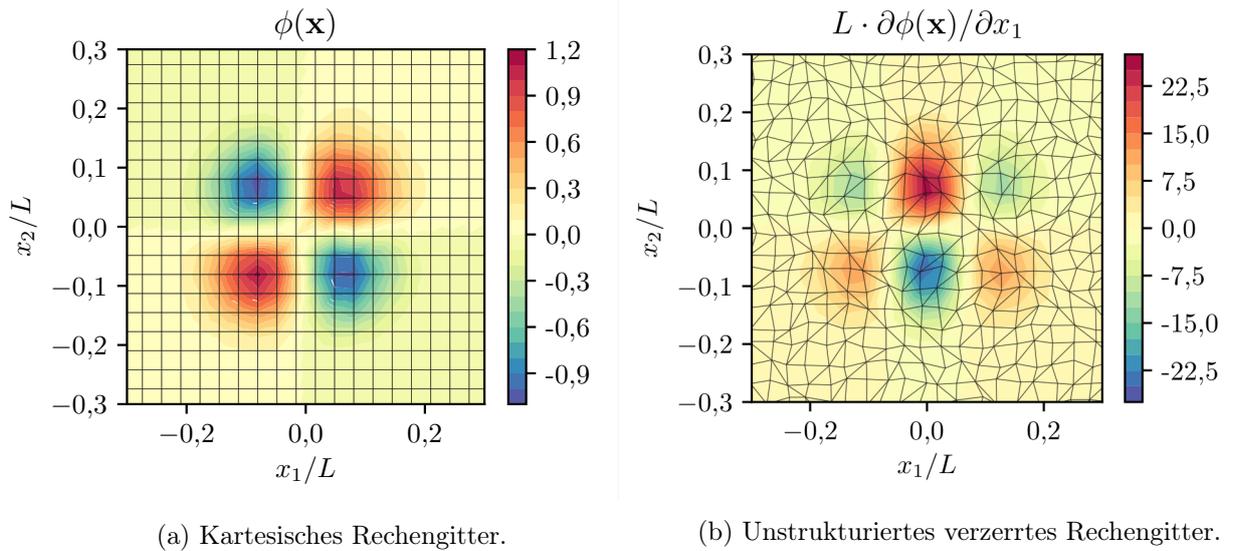


Abbildung 4.1: Feldfunktion $\phi(\mathbf{x})$ und deren erste Ableitung $\partial\phi(\mathbf{x})/\partial x_1$ zur Verifikation der k -exakten Gradientenkorrektur. Die beiden verwendeten Gittertypen sind exemplarisch mit einer Schrittweite von $L/32$ dargestellt.

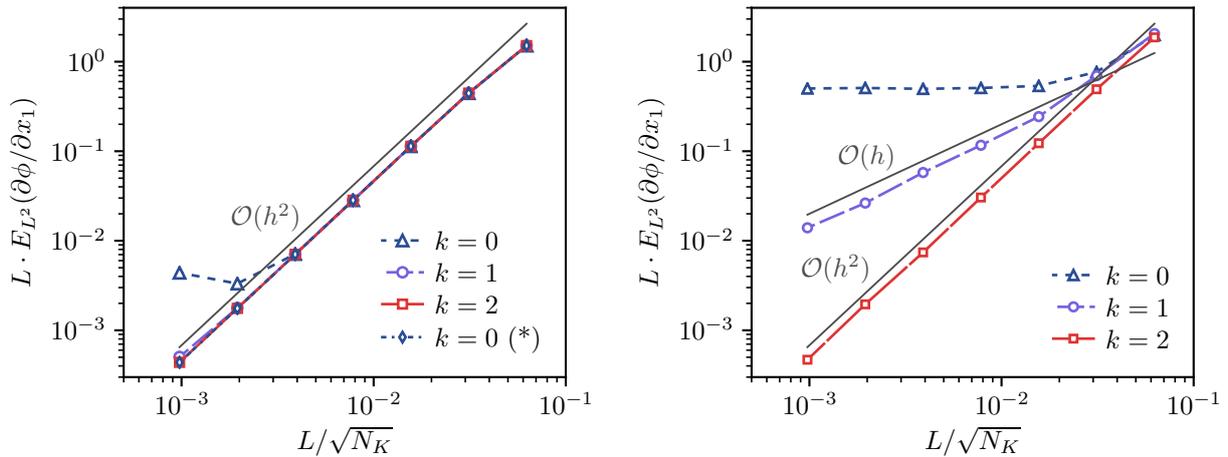
4.1.1 Einfluss der k -exakten Gradientenkorrektur

Wie in Kapitel 3.2 erläutert wurde, manifestiert sich bei der Gradientenberechnung mit dem allgemeinen Green-Gauss-Ansatz nach Gleichung (3.14) ein Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(1)$. Durch den folgenden Testfall lässt sich zeigen, inwiefern dieser Fehler durch die Verzerrung des Rechengitters beeinflusst wird. Des Weiteren dient der Testfall zur Verifizierung der implementierten Gradientenberechnung mit dem k -exakten Multi-Korrekturverfahren in **ThetaCOM**. Es gilt den Gradienten einer Feldgröße $\phi(\mathbf{x})$ in einem quadratischen Rechengebiet $\Omega \in [-L/2, L/2] \times [-L/2, L/2]$ mit $L = 1$ m zu berechnen, wobei $\phi(\mathbf{x})$ definiert ist durch

$$\phi(\mathbf{x}) = A \sin(2\pi f x_1 x_2) \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{\sigma^2}\right). \quad (4.3)$$

Die Parameter $A = 50$, $f = 2/L^2$, und $\sigma = L/10$ werden so gewählt, dass ϕ im Randbereich von Ω ausreichend klein ist. Die Berechnung des Gradienten erfolgt auf zwei verschiedenen Gittertypen: Einem kartesischen Rechengitter bestehend aus quadratischen Elementen sowie einem verzerrten Rechengitter, welches sich aus Dreiecken und Vierecken zusammensetzt. An den vier Rändern des Rechengebietes werden Symmetrie-Randbedingungen aufgeprägt. Die Abbildungen 4.1a und 4.1b zeigen die analytische Lösung von $\phi(\mathbf{x})$ und dem Gradienten $\partial\phi(\mathbf{x})/\partial x_1$, zusammen mit der primären Repräsentation der verwendeten Gittertypen.

Es wird eine Konvergenzstudie der L^2 -Fehlernorm von $\partial\phi/\partial x_1$ durchgeführt. Hierfür wird die Anzahl der Knotenpunkte N_K sukzessive erhöht, wodurch sich die mittlere Schrittweite $h = L/\sqrt{N_K}$ zwischen zwei Knotenpunkten von $L/16$ auf $L/1024$ reduziert. Abbildung 4.2a zeigt die mit der Länge L skalierten L^2 -Fehlernormen, welche auf dem kartesischen Rechengittertyp berechnet wer-



(a) Kartesisches Rechengitter.

(b) Unstrukturiertes verzerrtes Rechengitter.

Abbildung 4.2: Gitterkonvergenz der L^2 -Fehlernorm von $\partial\phi/\partial x_1$ für den Testfall der k -exakten Gradientenkorrektur. Die mit einem Stern gekennzeichnete Fehlerkurve wurde auf einem skalierten Rechengebiet berechnet.

den. Die Berechnung für $k = 0$ weist auf kartesischen Gittern in der Theorie einen räumlichen Fehler zweiter Ordnung auf, da die Korrekturmatrizen \mathbf{G}_α und \mathbf{H}_α in Einheitsmatrizen und die Matrix $\partial\mathcal{M}_{jk}/\partial x_i|_{\mathbf{x}_\alpha}^{(1)}$ in eine Nullmatrix übergehen. Die Stagnation der Fehlerkurve ab einer gewissen Unterschreitung von h ist auf Rundungsfehler der Gitterkoordinaten zurückzuführen, die bei der Erzeugung der kartesischen Rechengittern entstehen und sich in kleinsten Abweichungen der Höhen-Seiten-Verhältnisse der Elemente äußern. Diese weichen für die Rechengitter mit $h = L/512$ und $h = L/1024$ im Bereich der 13. Nachkommastelle von dem idealen Wert eins ab. Auch diese kleinsten Abweichungen bewirken eine lokale Variation der geometrischen Momente und führen damit zum Einbruch der Fehlerkonvergenz. Dieser Fehler fällt auf einem größeren Rechengebiet nicht mehr ins Gewicht, was anhand der 0-exakten Konvergenzkurve dargestellt, die mit einem Stern gekennzeichnet ist und auf einem skalierten Rechengebiet mit $L = 1000$ m berechnet wurde. Für die 1- und 2-exakten Gradientenoperatoren bleibt im Gegensatz dazu die Fehlerordnung auf dem kleineren Rechengebiet erhalten, was den entsprechenden Korrekturschritten zuzuschreiben ist. Allerdings ist auch für den 1-exakten Operator eine leichte Abweichung von $\mathcal{O}(h^2)$ auf dem feinsten Gitter zu erkennen. Abbildung 4.2b zeigt die Fehlernormen für den verzerrten, unstrukturierten Gittertyp. Dabei lässt sich deutlich der Effekt der verschiedenen Korrekturschritte identifizieren. Für den 2-exakten Gradientenoperator bleibt die zweite Fehlerordnung erhalten und trotz der Verzerrung des Gitters liegen die absoluten Fehlerwerte nahe bei den Werten des kartesischen Rechengitters. Das 1-exakte Verfahren geht in eine erste Fehlerordnung über und das 0-exakte Verfahren konvergiert bereits ab der zweiten Verfeinerung nicht mehr weiter.

4.1.2 Diffusiver Transport einer instantanen Punktquelle

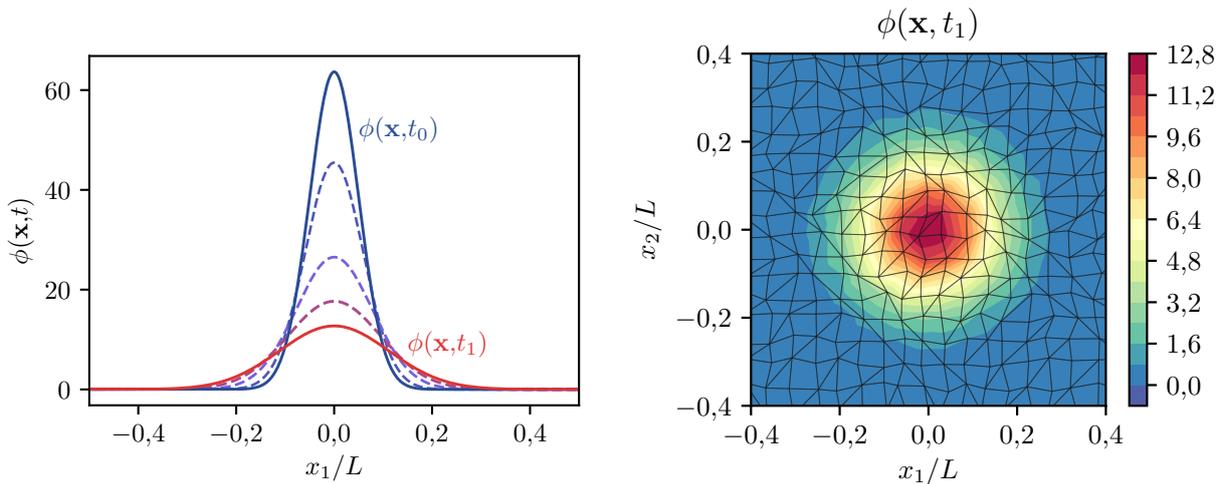
Mit diesem Testfall lässt sich der Einfluss des k -exakten Korrekturterms $F_{D,HO}^{(\alpha\beta)}$ identifizieren, welcher in Kapitel 3.3 zur Berechnung der diffusiven Flüsse hergeleitet wird. Es wird ein zweidimensionales Rechengebiet $\Omega \in [-L, L] \times [-L, L]$ mit $L = 1$ m betrachtet, in welchem sich eine Feldgröße ϕ gemäß der Gleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} \right) \quad (4.4)$$

ausbreitet. Die Feldgröße ϕ wird zum Startzeitpunkt $t = 0$ s als instantane Punktquelle in Form eines Dirac-Impulses $\delta(\mathbf{x})$ im Ursprung initialisiert und breitet sich anschließend radial im Rechengebiet aus. Unter der Annahme, dass letzteres unendlich groß ist, lässt sich der zeitliche Verlauf von ϕ analytisch durch folgende Funktion beschreiben [188]

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi Dt} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{4Dt}\right). \quad (4.5)$$

Für die Simulation des Testfalls wird das Feld zunächst mit $\phi(\mathbf{x}, t_0 = 0,25$ s) initialisiert und anschließend bis zum Zeitpunkt $t_1 = 1,25$ s simuliert. Dafür wird der Parameter $D = 0,005$ m²/s so gewählt, dass ϕ im Randbereich von Ω stets ausreichend klein ist. Somit kann der Einfluss der Randbedingungen auf die Lösung vernachlässigt werden. Der zu simulierende Verlauf von ϕ ist in Abbildung 4.3a für $x_2 = 0$ dargestellt. Ähnlich zum vorherigen Testfall werden die Berechnungen auf einem verzerrten, unstrukturierten Gitter mit N_K Knotenpunkten durchgeführt, welches exemplarisch in Abbildung 4.3b dargestellt ist. An allen Seiten des Rechengebiets werden Symmetrie-Randbedingungen aufgeprägt.



(a) Feldgröße ϕ für $x_2 = 0$ im Zeitintervall $t \in [t_0, t_1]$.

(b) Unstrukturiertes Rechengitter der Schrittweite $L/16$ und Verteilung von ϕ zum Zeitpunkt t_1 .

Abbildung 4.3: Diffusiver Transport einer instantanen Punktquelle.

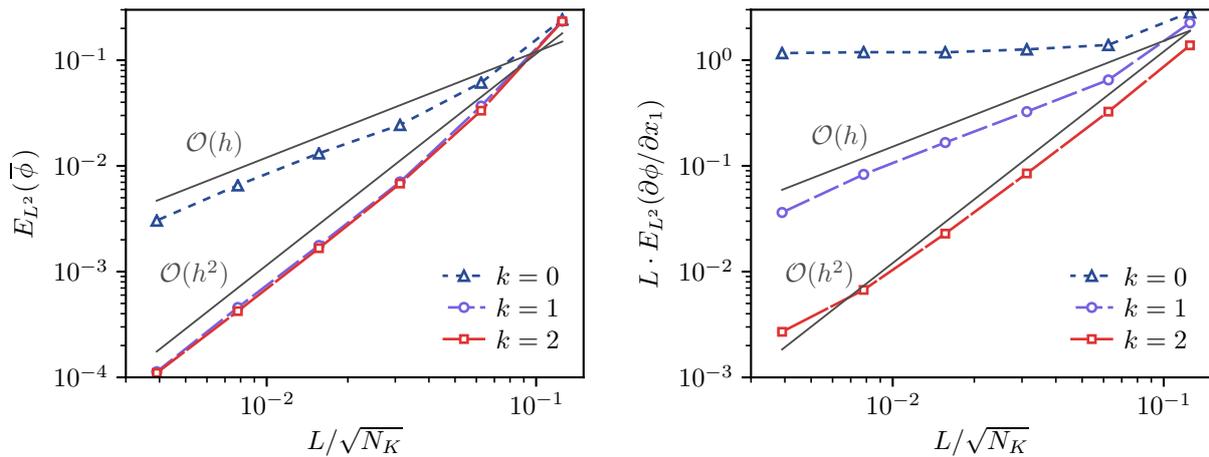
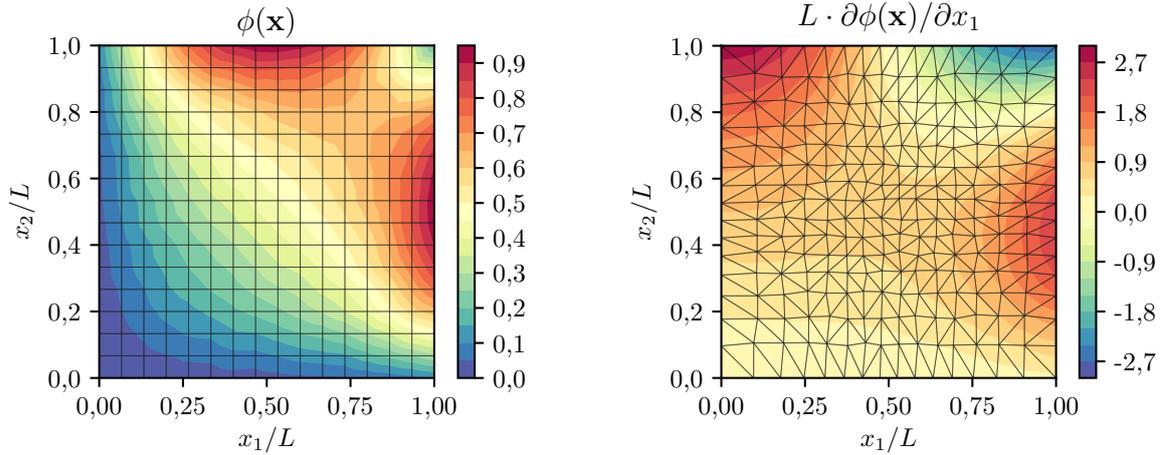
(a) L^2 -Norm des volumetrischen Mittelwerts.(b) L^2 -Norm des x_1 -Gradienten.Abbildung 4.4: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den diffusiven Transport einer instantanen Punktquelle unter sukzessiver Verfeinerung des Rechengitters.

Abbildung 4.4a zeigt die Konvergenz des L^2 -Fehlers von $\bar{\phi}_\alpha$ unter einer sukzessiven Verfeinerung des Rechengitters von der Schrittweite $h = L/8$ bis $h = L/256$. Die Parameter k bezeichnen die Exaktheit, mit welcher die Berechnung der diffusiven Flüsse in Gleichung (3.74) erfolgt. Beide 1- und 2-exakten Schemata konvergieren auf dem verzerrten Gitter mit einer zweiten Fehlerordnung. Die Verwendung von $k = 2$ scheint jedoch keine wesentlichen Verbesserung gegenüber dem 1-exakten Schema zu bewirken. Ein deutlicher Unterschied zwischen den Fällen $k = 1$ und $k = 2$ zeigt sich für das Konvergenzverhalten des Gradienten von ϕ in Abbildung 4.4b. Die 2-exakte Rekonstruktion führt hierbei zu einer Reduzierung des Fehlers von $\partial\phi/\partial x_1$ sowie teilweise zu einer zweiten räumlichen Fehlerordnung. Im Gegensatz zum vorherigen Testfall geht diese jedoch nach Unterschreitung einer gewissen Fehlerschwelle in eine erste Ordnung über. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die volumetrischen Mittelwerte $\bar{\phi}_\alpha$ zur Rekonstruktion des Gradienten mit einem Fehler von $\mathcal{O}(h^2)$ behaftet sind. Dieser Fehler wird in die Gradientenberechnung übertragen und führt dazu, dass sich der Fehler des Gradienten ab einer gewissen Schrittweite mit $\mathcal{O}(h)$ manifestiert. Die Gradientenberechnung der 1-exakten Rekonstruktion weist im Gegensatz dazu inhärent einen Fehler erster Ordnung auf, was anhand der entsprechenden Kurve in Abbildung 4.4b zu erkennen ist. Für das konventionelle Schema ohne k -exakte Korrekturen entsteht bei der Approximation von $\partial\phi/\partial x_1$ ein konstanter Fehler.

4.1.3 Diffusiver Transport unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen

Für diesen Testfall wird Gleichung (4.4) mit Dirichlet-Randbedingungen gelöst. Hierfür wird ein Rechengbiet $\Omega \in [0, L] \times [0, L]$ mit $L = 1$ m betrachtet, an dessen Berandung folgende Werte für ϕ



(a) Kartesisches Rechengitter.

(b) Unstrukturiertes verzerrtes Rechengitter.

Abbildung 4.5: Feldfunktion $\phi(\mathbf{x})$ und deren erste Ableitung $\partial\phi(\mathbf{x})/\partial x_1$ zur Verifikation des diffusiven Transports unter Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen. Die beiden verwendeten Gittertypen sind exemplarisch mit einer Schrittweite von $L/16$ dargestellt.

aufgeprägt werden:

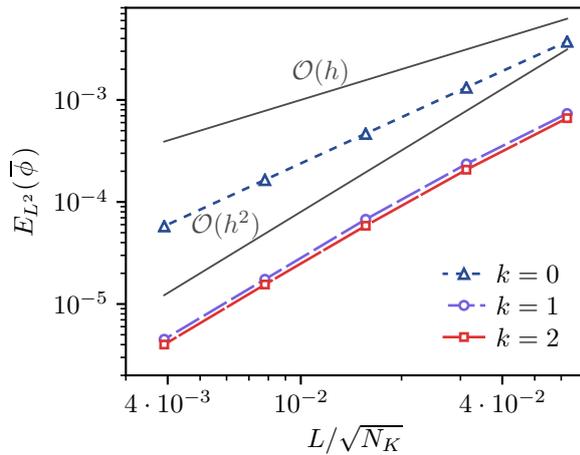
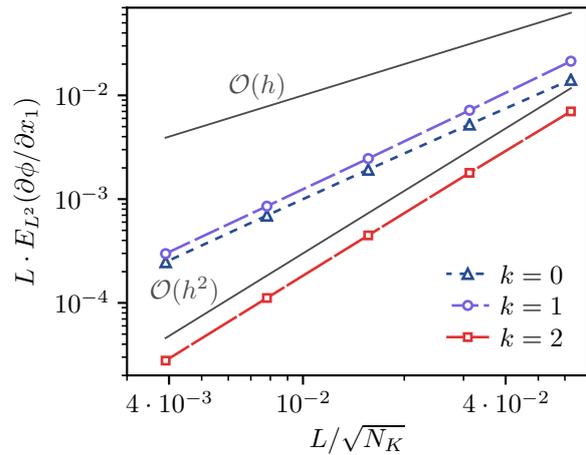
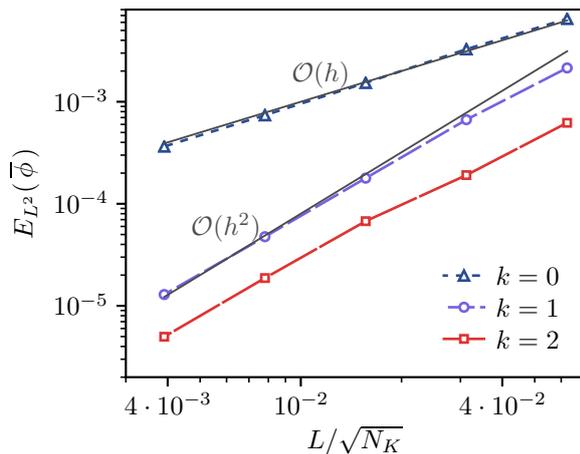
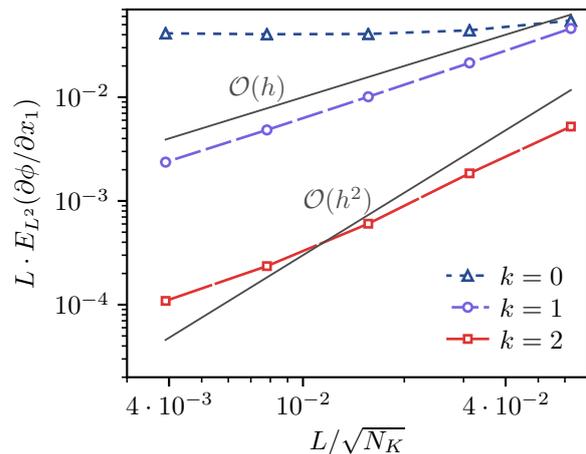
$$\begin{aligned} \phi(x_1 = 0) &= 0, & \phi(x_1 = 1) &= \sin(\pi x_2), \\ \phi(x_2 = 0) &= 0, & \phi(x_2 = 1) &= \sin(\pi x_1), \end{aligned} \quad (4.6)$$

Mit diesen Randbedingungen lässt sich für $t \rightarrow \infty$ folgende stationäre Lösung herleiten [171, 172]

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{\sinh(\pi x_1) \sin(\pi x_2) + \sinh(\pi x_2) \sin(\pi x_1)}{\sinh(\pi)}. \quad (4.7)$$

Für die Simulation des Testfalls wird das Rechenggebiet zunächst mit $\phi(\mathbf{x}) = 1$ initialisiert. Anschließend wird Gleichung (4.4) gelöst, bis sich die L^2 -Fehlernorm von $\bar{\phi}_\alpha$ zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten um weniger als 10^{-12} ändert. Die Berechnung erfolgt auf einem kartesischen und einem unstrukturierten Gittertyp, welche jeweils in Abbildung 4.5 zusammen mit der Lösung $\phi(\mathbf{x})$ und deren x_1 -Gradienten dargestellt sind. Die Schrittweite der Rechengitter wird sukzessive von $h = L/16$ zu $h = L/256$ reduziert.

Die Ergebnisse für das kartesische Gitter sind in Abbildung 4.6 dargestellt. Bezüglich $E_{L^2}(\bar{\phi})$ konvergiert das 0-exakte Schema mit einem räumlichen Fehler, der zwischen einer ersten und zweiten Ordnung liegt. Die Abweichung von einer zweiten Fehlerordnung ist dem Einfluss der Randbedingungen zuzuschreiben. Für das 1- und 2-exakte Schema reduziert sich dieser Fehler im Vergleich zum 0-exakten Fall um etwa eine Größenordnung und fällt für ausreichend kleine Schrittweiten mit einer zweiten Fehlerordnung ab. Ähnlich zum diffusiven Transport einer Punktquelle unterscheiden sich die Fehlerkurven von $E_{L^2}(\bar{\phi})$ für $k = 1$ und $k = 2$ nur marginal, wohingegen der Fehler des Gradienten in x_1 -Richtung deutlich beeinflusst wird. So bleibt mit dem 2-exakten Schema ein Fehler zweiter Ordnung auf dem kartesischen Gitter erhalten, wohingegen das 1-exakte Schema in eine erste

(a) L^2 -Norm des volumetrischen Mittelwerts.(b) L^2 -Norm des x_1 -Gradienten.Abbildung 4.6: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den diffusiven Transport einer Feldgröße ϕ unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen auf kartesischen Rechengittern.(a) L^2 -Norm des volumetrischen Mittelwerts.(b) L^2 -Norm des x_1 -Gradienten.Abbildung 4.7: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den diffusiven Transport einer Feldgröße ϕ unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen auf unstrukturierten verzerrten Rechengittern.

Fehlerordnung übergeht. Interessanterweise weist hier der Gradient des 1-exakten Schemas einen etwas größeren Fehler auf als mit $k = 0$.

Der Einfluss der Gitterverzerrung wird anhand der Ergebnisse auf dem unstrukturierten Gitter in Abbildung 4.7 beleuchtet. Das konventionelle Verfahren mit $k = 0$ geht in eine erste Fehlerordnung über und es erhöht sich das absolute Fehlerniveau. Dies ist ebenfalls für das $k = 1$ Verfahren zu erkennen, welches jedoch eine zweite räumliche Fehlerordnung erhält. Mit der 2-exakten Rekonstruktion lassen sich ähnliche Fehler wie auf dem kartesischen Rechengitter erzielen. Dies ist nicht der Fall für die Approximation von $\partial\phi(\mathbf{x})/\partial x_1$. Hier geht das 2-exakte Schema analog zum vorherigen

Testfall in eine erste Fehlerordnung über. Allerdings sind die absoluten Fehler deutlich geringer als für $k = 1$. Letzteres zeigt ebenfalls eine erste Fehlerordnung, wobei sich der Fehler im Vergleich zum kartesischen Rechengitter erhöht. Die Berechnung des x_1 -Gradienten mit $k = 0$ konvergiert auf dem unstrukturierten Rechengitter ab der ersten Gitterverfeinerung nicht mehr.

4.1.4 Konvektiver Transport einer skalaren Feldgröße

Dieser Testfall dient dazu, den in **ThetaCOM** implementierten Ansatz zur Gradientenlimitierung aus Abschnitt 3.2.4 zu verifizieren. Hierfür gilt es die Differentialgleichung

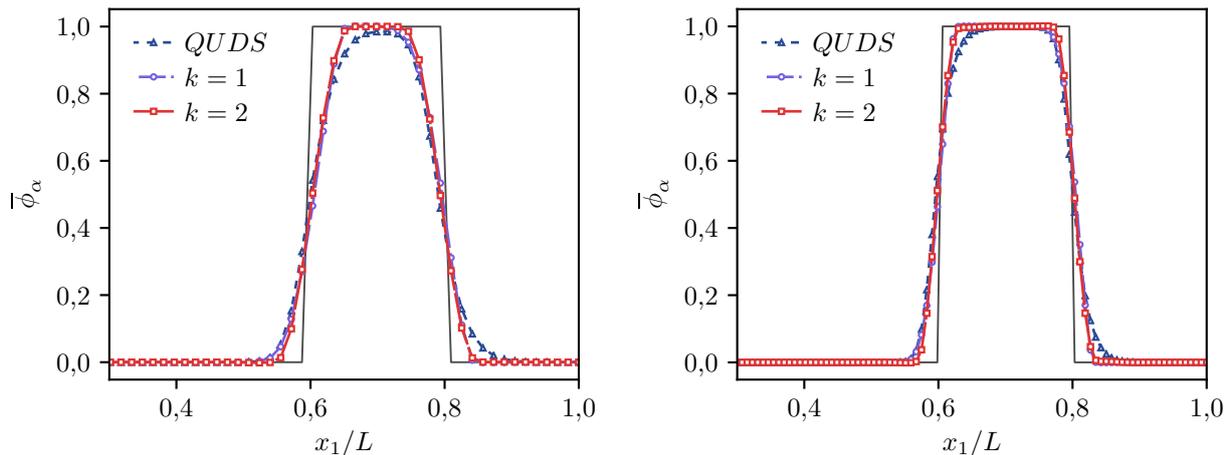
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad (4.8)$$

zu lösen, welche den konvektiven Transport einer Feldgröße $\phi(x,t)$ mit einer konstanten Geschwindigkeit $U = 1 \text{ m/s}$ beschreibt. Gleichung (4.8) wird auf einem eindimensionalen, periodischen Rechengebiet $\Omega \in [0,L]$ mit $L = 1 \text{ m}$ gelöst und es wird die folgende diskontinuierliche Startlösung $\phi(x,0)$ vorgegeben [133]

$$\phi(x,0) = \begin{cases} 1 & \text{für } |x/L - 0,2| \leq 0,1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.9)$$

Die exakte Lösung von Gleichung (4.8) stellt eine Translation der Startlösung um den Betrag $T \cdot U$ dar, wobei T die Simulationszeit ist. Die Simulationen werden auf zwei Rechengittern mit jeweils konstanten Schrittweiten von $h = L/64$ und $h = L/128$ durchgeführt. Der Zeitschritt Δt der Simulationen wird so gewählt, dass sich eine CFL-Zahl von $\sigma = U\Delta t/h = 0,05$ einstellt.

Abbildung 4.8 zeigt den Verlauf der volumetrischen Mittelwerte $\bar{\phi}_\alpha$, die mit den drei Diskretisierungsschemata nach einer Simulationszeit von $T = 0,5 \text{ s}$ hervorgehen. Die analytische Lösung ist durch



(a) Schrittweite $h = 1/64$.

(b) Schrittweite $h = 1/128$.

Abbildung 4.8: Testfall des konvektiven Transports einer skalaren Feldgröße nach einer Simulationszeit von $T = 0,5 \text{ s}$. Die dunkelgraue Linie kennzeichnet die analytische Lösung.

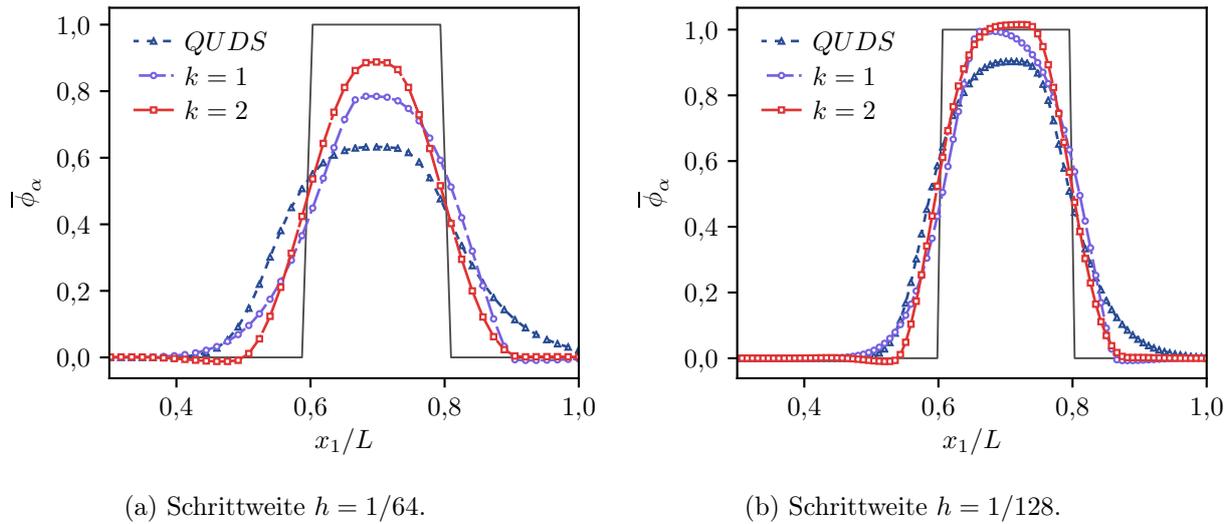


Abbildung 4.9: Testfall des konvektiven Transports einer skalaren Feldgröße nach einer Simulationszeit von $T = 10,5$ s. Die dunkelgraue Linie kennzeichnet die analytische Lösung.

die dunkelgraue, durchgezogene Linie dargestellt. Es ist zu erkennen, dass das QUDS-Verfahren mit dem Venkatakrishnan-Limiter eine etwas stärkere Glättung der Unstetigkeiten von $\bar{\phi}_\alpha$ verursacht. Des Weiteren wird das Maximum der Lösung auf dem groben Rechengitter infolge der hohen numerischen Diffusion des Verfahrens reduziert. Im Gegensatz dazu bleibt mit beiden k -exakten Verfahren und dem beschriebenen Ansatz zur Gradientenkorrektur das Maximum der Lösung auch auf dem groben Rechengitter erhalten. Auch im Bereich der Diskontinuitäten ist die Glättung der Lösung deutlich schwächer ausgeprägt und der Verlauf von $\bar{\phi}_\alpha$ ist deutlich symmetrischer.

Abbildung 4.9 zeigt den Verlauf von $\bar{\phi}_\alpha$ nach einer Simulationszeit von $T = 10,5$ s und damit nach mehr als zehn Durchschreitungen des periodischen Rechengebiets Ω . Die mit dem QUDS-Verfahren berechnete Lösung ist auf dem groben Gitter stark verfälscht und der Wert des Maximums reduziert sich um etwa 40 %. Beide k -exakten Verfahren erfahren ebenfalls eine stärkere Verfälschungen der Lösung, wobei das 1-exakte Schema eine höhere Asymmetrie aufweist. Das Maximum der Lösung bleibt jedoch insbesondere auf dem feinen Rechengitter besser erhalten. Für $k = 2$ lässt sich auf dem groben Gitter eine ähnliche Lösungsqualität erzielen, wie mit dem QUDS-Verfahren auf dem feinen Gitter. Insbesondere auf dem feinen Gitter ist jedoch ein leichtes Überschwingen der Lösung der Nähe der Diskontinuitäten zu erkennen. Dieses Verhalten ist auf die Wahl des Parameters $K = 1,0$ zurückzuführen, welcher der Deaktivierung der Limitierung in kontinuierlichen Regionen dient und in diesem Fall etwas zu hoch gewählt ist. Für kleinere Werte von K lässt sich dieses Fehlerartefakt hingegen vermeiden.

4.1.5 Konvektiver Transport eines pseudoisotropen Wirbels

Zur Verifizierung der räumlichen Fehlerordnung des konvektiven Operators wird der Testfall eines pseudoisotropen Wirbeltransports herangezogen, dessen Startlösung sowie deren Herleitung im

Detail in Anhang E dargestellt ist. Der Wirbel wird durch ein reibungsfreies Fluid mit der Geschwindigkeit $\mathbf{u}_0 = (50, 0)^T$ m/s, der Temperatur $T_0 = 300$ K und dem Druck $p_0 = 100$ kPa bewegt. Des Weiteren wird für das Fluid die Zusammensetzung von trockener Luft gewählt, womit sich die Dichte $\rho_0 = 1,28286$ kg/m³ und die Schallgeschwindigkeit $a_0 = 344,108$ m/s bei Umgebungsbedingungen ergeben. Die Stärke und das Längenmaß des Wirbels werden über die Parameter $\kappa = 0,1$ und $R = 0,005$ m vorgegeben. Für den Testfall wird der Wirbel im Zentrum $\mathbf{x}_c = (L/2, L/2)^T$ des periodischen Rechengebiets $\Omega \in [0, L] \times [0, L]$ plaziert und anschließend über die Distanz $\delta x = L$ transportiert. Der Wirbel durchschreitet somit einmal das gesamte Rechengebiet und sollte dann wieder an seiner Ausgangsposition ankommen. Als Längenmaß wird $L = 0,1$ m verwendet. Der Wirbeltransport wird auf fünf Rechengittern durchgeführt, deren Knotenpunktzahl zwischen $N_K = 16^2$ und $N_K = 256^2$ variiert. Auf allen Gittern wird der Zeitschritt Δt so gewählt, dass sich eine ausreichend kleine CFL-Zahl $\sigma = 0,03$ einstellt, sodass der Einfluss zeitlicher Diskretisierungsfehler vernachlässigt werden kann. Der Testfall wird auf einem kartesischen und einem verzerrten Gittertyp durchgeführt, welche in Abbildung 4.10 dargestellt sind. Für beide k -exakten Schemata erfolgen die Simulationen zunächst ohne den Ansatz der Gradientenlimitierung. Dessen Einfluss auf den räumlichen Fehler wird anschließend separat untersucht. Als konventionelles Diskretisierungsschema wird das CDS-Verfahren zur Diskretisierung der Impulserhaltungsgleichungen und das limitierte QUDS-Verfahren für die thermochemischen Transportgleichungen eingesetzt.

Abbildung 4.11 zeigt die Feldlösung der Temperatur T , des Drucks p sowie der Geschwindigkeit u_1 nach einer vollständigen Durchschreitung des Wirbels durch das periodische Rechengebiet auf dem kartesischen Rechengitter mit $N_K = 64^2$ Knotenpunkten. Die analytische Lösung ist durch die schwarzen Iso-Linien dargestellt. Das Ergebnis des konventionellen Diskretisierungsansatz ist stark verfälscht, was anhand der veränderten Form und Position des Wirbels zu erkennen ist und dem dispersiven Fehler des Verfahrens geschuldet ist. Die Feldlösung der Temperatur weist außerdem ein zu geringeres Maximum im Zentrum des Wirbels auf, was der höheren numerischen Dissipation des limitierten QUDS-Verfahrens zuzuschreiben ist. Im Nachlauf des Geschwindigkeitsfeldes lassen sich wiederum Fehlermoden erkennen, welche auf die unzureichende numerische Dämpfung des CDS-Verfahrens zurückzuführen sind. Das 1-exakte Schema erhält hingegen die Form und die Position des Wirbels deutlich besser und auch die Extremwerte im Wirbelzentrum werden mit einer höheren Genauigkeit vorhergesagt. Die beste Übereinstimmung zur analytischen Lösung wird mit dem 2-exakten Verfahren erzielt, für welches keine Abweichungen in der Form oder Position des Wirbels zu erkennen sind. Lediglich im Temperatur und Druckfeld bilden sich schwache Fehlermoden aus, welche sich in Strömungsrichtung ausbreiten. Die Feldlösungen aller drei Verfahren ändern sich nur geringfügig auf dem verzerrten Gittertyp und sind daher zur besseren Übersicht nicht dargestellt.

In Abbildung 4.12 sind die Fehlernormen der u_1 -Geschwindigkeit und der Enthalpie h für den kartesischen Gittertyp dargestellt. Die Fehler des CDS/QUDS und des 1-exakten Verfahrens fallen jeweils mit einer zweiten Ordnung, wobei letzteres geringere absolute Fehlerniveaus aufweist. Für $k = 2$ fallen die Fehlernormen auf den gröberen Gittern teilweise mit einer vierten Ordnung und gehen dann in eine dritte Ordnung über. Im Vergleich zum konventionellen Ansatz lässt sich der Fehler

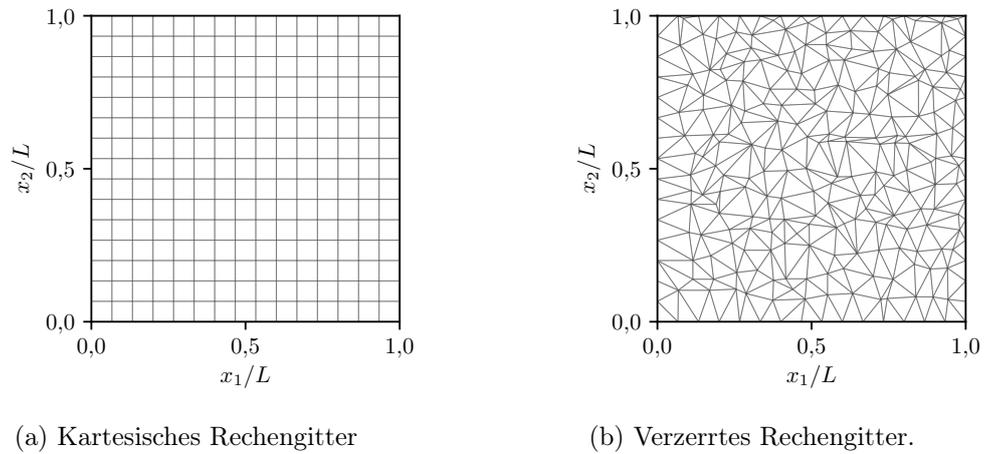
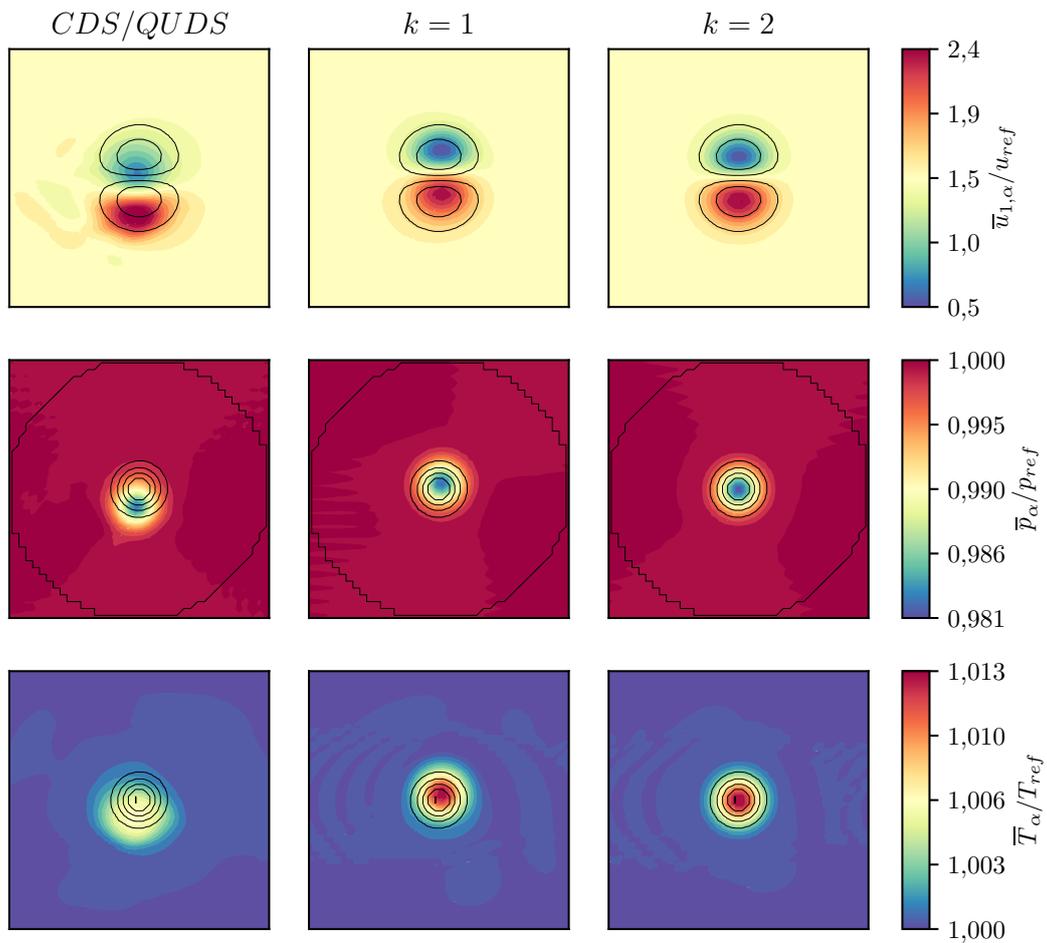
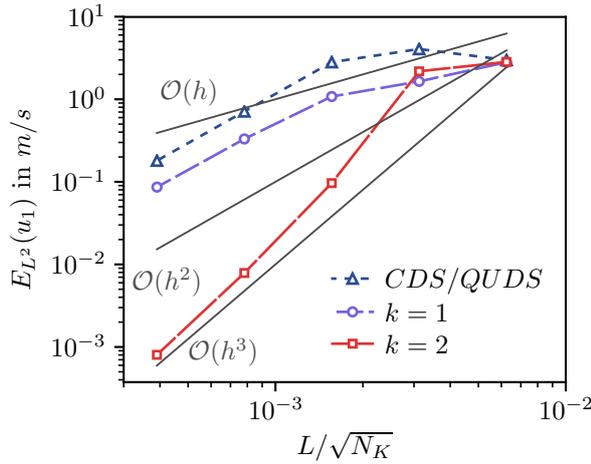
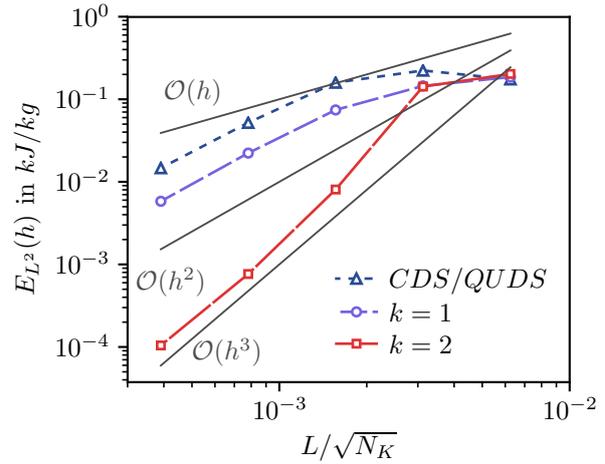


Abbildung 4.10: Gittertypen für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels.

Abbildung 4.11: Feldlösung des pseudoisotropen Wirbels nach einer vollständigen Durchschreitung des kartesischen Gitters mit $N_K = 64^2$ Knotenpunkten.

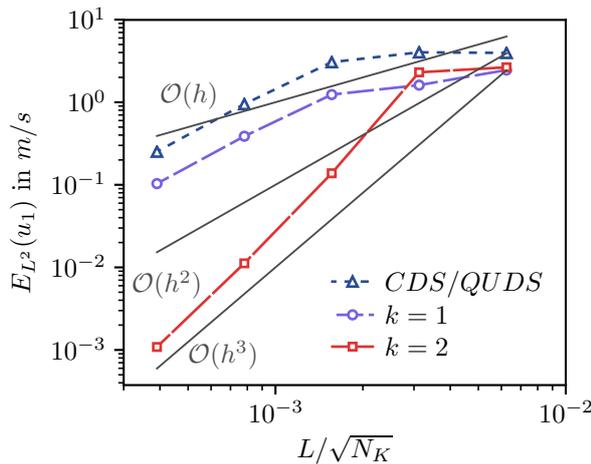


(a) L^2 -Norm der Geschwindigkeit u_1 .

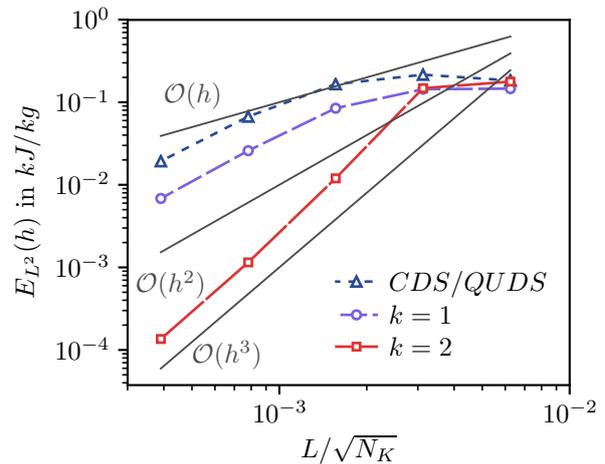


(b) L^2 -Norm der Enthalpie.

Abbildung 4.12: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels unter sukzessiver Verfeinerung des kartesischen Gitters.



(a) L^2 -Norm der Geschwindigkeit u_1 .



(b) L^2 -Norm der Enthalpie.

Abbildung 4.13: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels unter sukzessiver Verfeinerung des verzerrten Gitters.

mit diesem Verfahren um bis zu zwei Größenordnungen reduzieren. Die Ergebnisse demonstrieren somit das Potential der k -exakten Verfahren zur Auflösung von Wirbelstrukturen auf deutlich größeren Rechengittern als mit dem konventionellen Diskretisierungsansatz. Um den Testfall beispielsweise mit einem Fehler von $E_{L^2}(u_1) \leq 2 \cdot 10^{-1}$ m/s zu berechnen, ist mit dem konventionellen Verfahren eine Auflösung der Wirbelskala R mit 12,8 Gitterpunkten notwendig. Mit dem 1-exakten Verfahren lässt sich im Gegensatz dazu die Auflösung auf 6,4 Knotenpunkte und mit dem 2-exakten Verfahren auf 3,2 Knotenpunkte reduzieren. Anhand Abbildung 4.13 ist zu erkennen, dass sich auf dem unstrukturierten Gittertyp mit allen drei Schemata ähnliche Fehlerkonvergenzen einstellen wie auf dem kartesischen Gittertyp. Es ist allerdings ein marginaler Anstieg der absoluten Fehlerniveaus zu

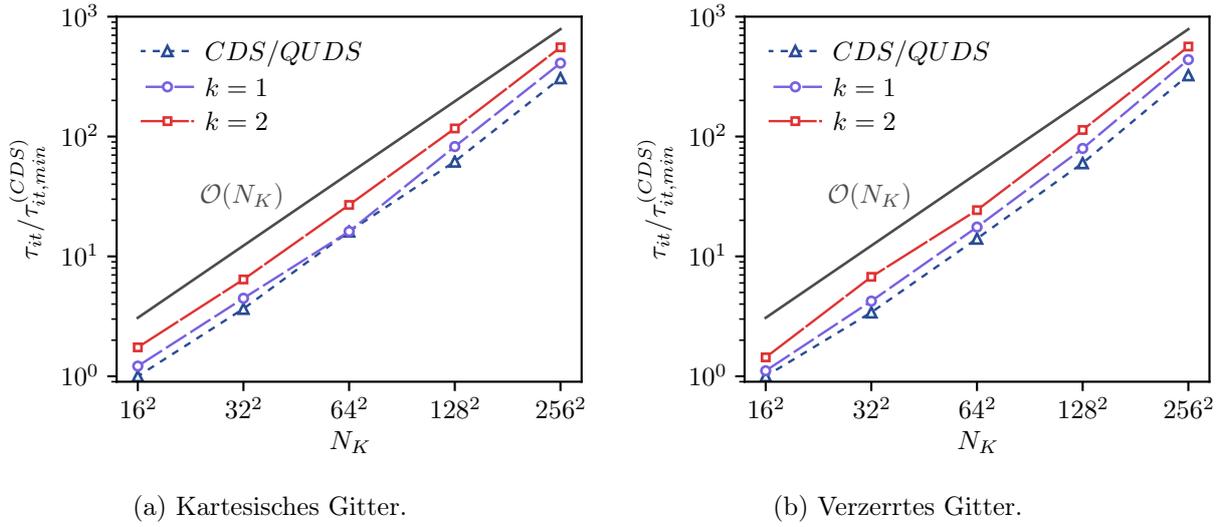


Abbildung 4.14: Mittlere Iterationszeiten für den pseudoisotropen Wirbeltransport.

erkennen. Die Ergebnisse zeigen, dass die in Kapitel 3.4 genannten Vereinfachungen des 2-exakten Verfahrens keine wesentlichen Einflüsse auf dessen räumliche Fehlerordnung verursachen, sodass deren Einsatz zugunsten der Rechenzeiterparnis gerechtfertigt ist.

Zur Bewertung der Verfahren hinsichtlich ihrer Rechenzeiten sind in Abbildung 4.14 mittlere Iterationszeiten τ_{it} gezeigt, welche sich auf den beiden Gittertypen in Abhängigkeit der Knotenpunktzahl N_K einstellen. Die Werte τ_{it} gehen als Mittelwerte aus den Iterationszeiten von 1000 Zeitschritten hervor, welche in separaten Simulationen seriell mit einer einzigen *Central Processing Unit* (CPU) berechnet wurden. Die Daten sind mit der mittleren Iterationszeit $\tau_{it,min}^{(CDS)}$ normiert, welche sich mit dem CDS/QUDS-Verfahren und $N_K = 16^2$ ergibt. Beide k -exakten Verfahren weisen höhere Iterationszeiten als das konventionelle Schema auf, was der Berechnung der Korrekturterme und den höheren Ableitungen zur 2-exakten Rekonstruktion geschuldet ist. Mit dem 1-exakten Verfahren erhöht sich die mittlere Iterationszeit im Durchschnitt um circa 25 % und mit dem 2-exakten Verfahren um circa 75 %. Für den Fall, dass eine bestimmte Fehlerschwelle unterschritten werden soll, lässt sich mit den k -exakten Verfahren jedoch deutlich Rechenzeit einsparen. Wird erneut eine Fehlerschwelle von $E_{L^2}(u_1) \leq 2 \cdot 10^{-1}$ m/s als Referenz gewählt, so lässt sich mit dem 2-exakten Verfahren die Rechenzeit infolge des größeren Rechengitters unter Beibehaltung des Zeitschrittes um circa 90 % reduzieren. Da auf dem größeren Rechengitter infolge des CFL-Kriteriums der Zeitschritt jedoch um den Faktor vier erhöht werden kann, lässt sich mit dem 2-exakten Verfahren im Vergleich zum CDS/QUDS-Schema eine Rechenzeiterparnis von circa 95 % realisieren. Für die 1-exakte Methode liegt unter diesen Annahmen die Rechenzeiterparnis gegenüber dem konventionellen Verfahren mit gleichem Zeitschritt bei circa 75 % und mit einem reduzierten Zeitschritt bei circa 85 %.

Im Folgenden soll der Einfluss des Verfahrens zur Gradientenlimitierung auf den räumlichen Diskretisierungsfehler für das 1- und 2-exakte Verfahren untersucht werden. Dazu werden zwei Fälle betrachtet:

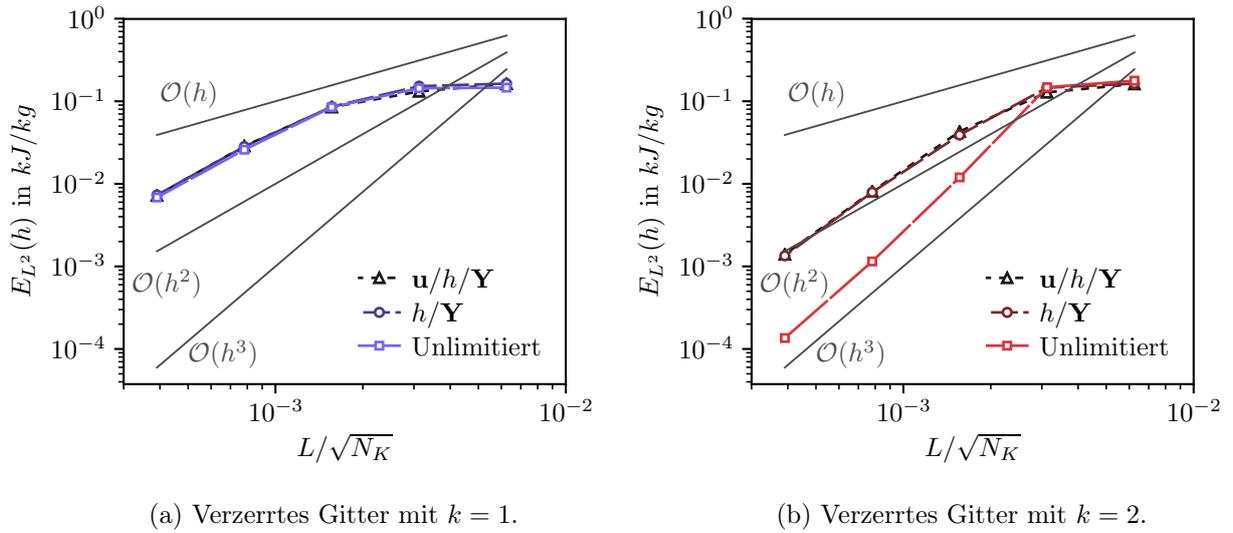


Abbildung 4.15: L^2 -Fehlernorm der Enthalpie h für den pseudoisotropen Wirbeltransports, für den Fall der Limitierung aller Feldgrößen ($\mathbf{u}/h/\mathbf{Y}$), für die Limitierung der von Enthalpie und Spezies (h/\mathbf{Y}) und für den Fall ohne Limitierung.

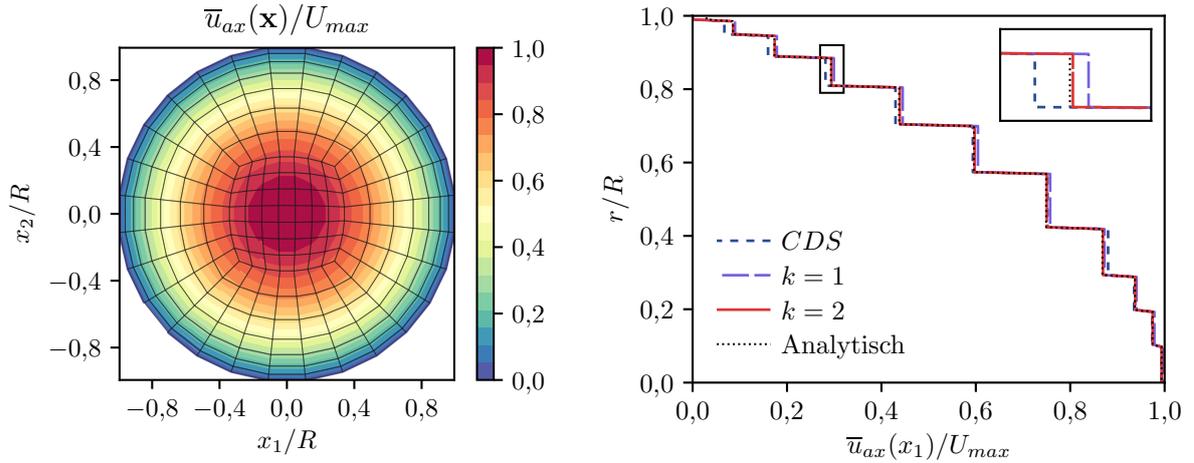
1. Die Limitierung aller Feldgrößen \mathbf{u} , h und \mathbf{Y}
2. Die Limitierung der thermochemischen Feldgrößen h und \mathbf{Y} und keine Limitierung der Geschwindigkeit \mathbf{u}

Der Einfluss der Limitierung auf die Fehlernorm der Enthalpie ist in Abbildung 4.15 für den unstrukturierten Gittertyp dargestellt. Auf dem kartesischen Gitter ergeben sich ähnliche Ergebnisse, welche daher zur Übersichtlichkeit nicht dargestellt werden. Zum Vergleich dienen die Konvergenzkurven der unlimitierten Simulationen. Für das 1-exakte Schema sind für beide Fälle nur marginale Abweichungen zu den Fehlernormen des unlimitierten Verfahrens zu erkennen. Mit dem 2-exakten Schema stellen sich für beide Konfigurationen eine leichte Abweichung von einer dritten Fehlerordnung und höhere Fehlerniveaus als im unlimitierten Fall ein. Dies ist insbesondere für die feinste Schrittweite zu erkennen, bei welcher der Fehler um etwa eine Größenordnung ansteigt.

4.1.6 Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr

Dieser Testfall bietet die Möglichkeit, die implementierten Diskretisierungsverfahren hinsichtlich des überlagerten diffusiven und konvektiven Transports in der Anwesenheit von Wand-Randbedingungen zu verifizieren. Dafür wird eine laminare, stationäre Rohrströmung untersucht, für welche sich unter dem Einfluss eines axialen Druckgradienten ein parabolisches Profil der Axialgeschwindigkeit ausbildet. Dieses geht als analytische Lösung aus den inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen hervor und lässt sich in Abhängigkeit der radialen Koordinate $r = \sqrt{(x_1^2 + x_2^2)}$ ausdrücken durch [216]

$$u_{\text{ax}}(\mathbf{x}) = U_{\text{max}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right], \quad (4.10)$$



(a) Normiertes axiales Geschwindigkeitsfeld \bar{u}_{ax}/U_{max} über dem Rohrquerschnitt.

(b) Normierte Profile der axialen Geschwindigkeit \bar{u}_{ax}/U_{max} .

Abbildung 4.16: Axiales Geschwindigkeitsfeld und Strömungsprofile für den Testfall der Hagen-Poiseuille-Strömung durch ein kreisrundes Rohr auf einem Gitter mit mittlerer Schrittweite $h^+ = 1,63$.

mit der maximalen Geschwindigkeit auf der Rohrachse $U_{max} = (GR^2)/(4\mu)$. Letztere ist definiert durch den axialen Druckgradienten G , die dynamische Viskosität μ und den Rohrradius R . Es bietet sich an, die Lösung in entdimensionierter Form darzustellen. Hierfür wird die Wand-Längenskala $\delta_\nu = \mu/(\rho u_\tau)$ definiert, die sich aus der Schubspannungsgeschwindigkeit $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$ berechnen lässt. Letztere beinhaltet die Wandschubspannung τ_w , welche sich für den Testfall ergibt zu

$$\tau_w = \mu \left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=R} = -2\mu \frac{U_{max}}{R}. \quad (4.11)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass das Vorzeichen von τ_w aus der Wahl des Koordinatensystems hervorgeht. Für die weitere Herleitung wird τ_w positiv definiert. Unter der Definition von δ_ν und u_τ lassen sich die dimensionslosen Größen $r^+ = r/\delta_\nu$ und $u^+ = u/u_\tau$ berechnen, was zum folgenden entdimensionierten analytischen Strömungsprofil führt:

$$u^+ = U_{max}^+ \left[1 - \left(\frac{r^+}{Re_\tau} \right)^2 \right], \quad (4.12)$$

mit der normierten Hauptachsen-Geschwindigkeit U_{max}^+ und der Reynolds-Zahl $Re_\tau = (\rho u_\tau R)/\mu$. Für den Testfall werden die Parameter $G = 0,48 \text{ Pa/m}$, $\mu = 0,01 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $\rho = 1,0 \text{ kg/m}^3$ und $R = 0,5 \text{ m}$ gewählt, womit sich im Rohr die Geschwindigkeit $U_{max} = 3 \text{ m/s}$ auf der Hauptachse einstellt.

Für die Simulationen wird der Rohrquerschnitt in der x_1 - x_2 -Ebene definiert und wie in Abbildung 4.16a durch quadratische Elemente diskretisiert. Die Rohraußenseite wird durch Wandrandbedingungen modelliert und in axialer Richtung werden periodische Randbedingungen aufgebracht. Dies ermöglicht die Auflösung der Strömungsrichtung durch lediglich zwei Knotenpunkte. Die

Tabelle 4.1: Eigenschaften der Rechengitter für die Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr. Dargestellt sind die Anzahl der Knotenpunkt N_K in der x_1 - x_2 -Ebene, die radialen und tangentialen Schrittweiten der wandnähesten Knotenpunkte $h_{\text{rad},1}^+$ und $h_{\text{tan},1}^+$, sowie die mittlere Gitterschrittweite h^+ über den gesamten Radius.

Gitter	N_K	$h_{\text{rad},1}^+$	$h_{\text{tan},1}^+$	h^+
1	78	1,79	9,07	3,55
2	390	0,57	3,89	1,63
3	1734	0,24	1,81	0,76
4	7302	0,12	0,88	0,37
5	29958	0,06	0,43	0,18

wesentlichen Eigenschaften der verwendeten fünf Rechengitter sind in Tabelle 4.1 aufgeführt. Die Simulationen werden mit den unlimitierten k -exakten Verfahren und mit dem unlimitierten CDS-Verfahren berechnet. Die Zeitschritte werden auf Basis mittleren radialen Schrittweite h^+ so gewählt, dass sich CFL-Zahlen $\sigma < 0,05$ einstellen, sodass der Einfluss zeitlicher Diskretisierungsfehler vernachlässigt werden kann. Zu Simulationsbeginn wird das Strömungsfeld mit $\mathbf{u} = 0$ initialisiert und der Druckgradient G wird den Impulserhaltungsgleichungen als Quellterm aufgeprägt. Anschließend erfolgt eine zeitliche Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen, bis sich ein stationärer Zustand einstellt.

Abbildung 4.16b zeigt die Strömungsprofile der volumetrisch gemittelten axialen Geschwindigkeit \bar{u}_{ax} über der x_1 -Achse. Die dargestellten Profile werden auf einem vergleichsweise groben Gitter mit der mittleren Schrittweite $h^+ = 1,63$ berechnet. Die höchste Übereinstimmung zum analytischen Profil wird mit dem 2-exakten Verfahren erreicht. Im Vergleich dazu wird \bar{u}_{ax} mit dem 1-exakten Verfahren über den gesamten Radius leicht überschätzt. Das konventionelle Verfahren weist die größten Abweichungen zur analytischen Lösung auf, welche sich insbesondere durch zu niedrige axiale Geschwindigkeiten im Wandbereich äußern.

Zur Bewertung der Konvergenz wird die Änderung der L^2 -Fehlernorm des axialen Geschwindigkeitsfeldes $E_{L^2}(\mathbf{u}_{\text{ax}})$ verwendet. Die Simulation wird beendet, sobald sich die Fehlernorm zwischen zwei aufeinander folgenden Zeitschritten um weniger als 10^{-10} ändert. Abbildung 4.17 zeigt exemplarisch das Konvergenzverhalten der drei Verfahren in Bezug auf die Fehlernorm $E_{L^2}(\mathbf{u}_{\text{ax}})$ für zwei Gitter mit den Schrittweiten $h^+ = 0,76$ und $h^+ = 0,37$. Auf beiden Gittern ist zu erkennen, dass die Fehlernorm mit allen drei Verfahren zunächst in gleicher Form absinkt und erst dann in verschiedene Fehlerniveaus konvergiert. Dabei ist jedoch kein eindeutiger Trend hinsichtlich der Reihenfolge zu erkennen, mit denen die drei Verfahren konvergieren.

Abbildung 4.18a zeigt die Gitterkonvergenz der L^2 -Fehlernorm des volumetrisch gemittelten axialen Geschwindigkeitsfeldes. Alle drei Diskretisierungsverfahren weisen einen Fehler zweiter Ordnung auf. Der Fehler des 2-exakten Verfahrens ist jedoch auf allen Rechengittern um mindestens eine Größenordnung geringer als mit dem CDS-Schema. Auch das 1-exakte Verfahren weist geringere Fehler als das konventionelle Schema auf. Die zweite Fehlerordnung des 2-exakten Verfahrens ist der niedrigen Reynoldszahl des Testfalls geschuldet. Hierdurch tritt der räumliche Fehler des diffusiven

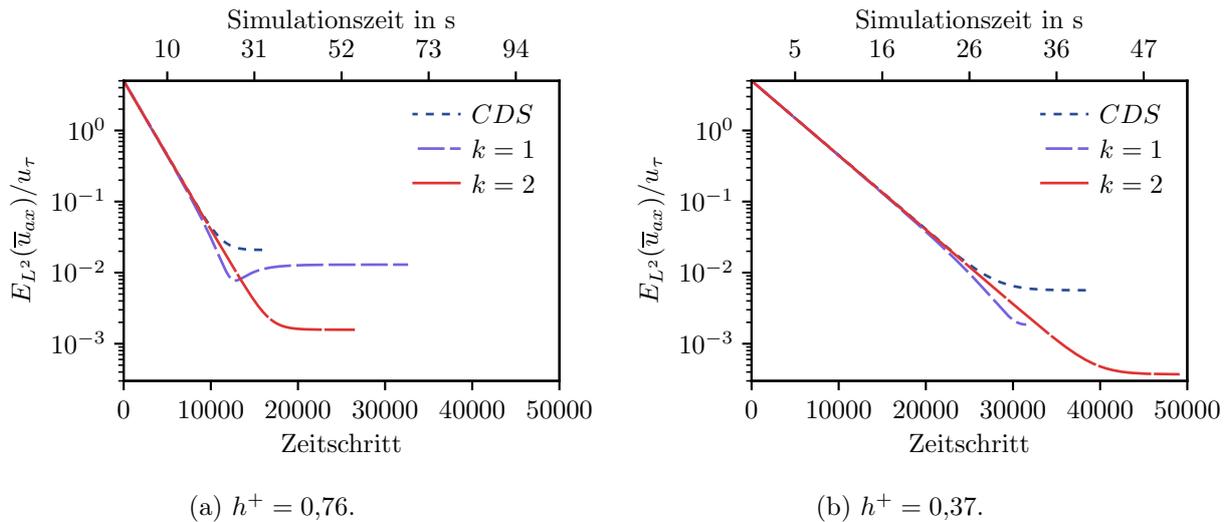
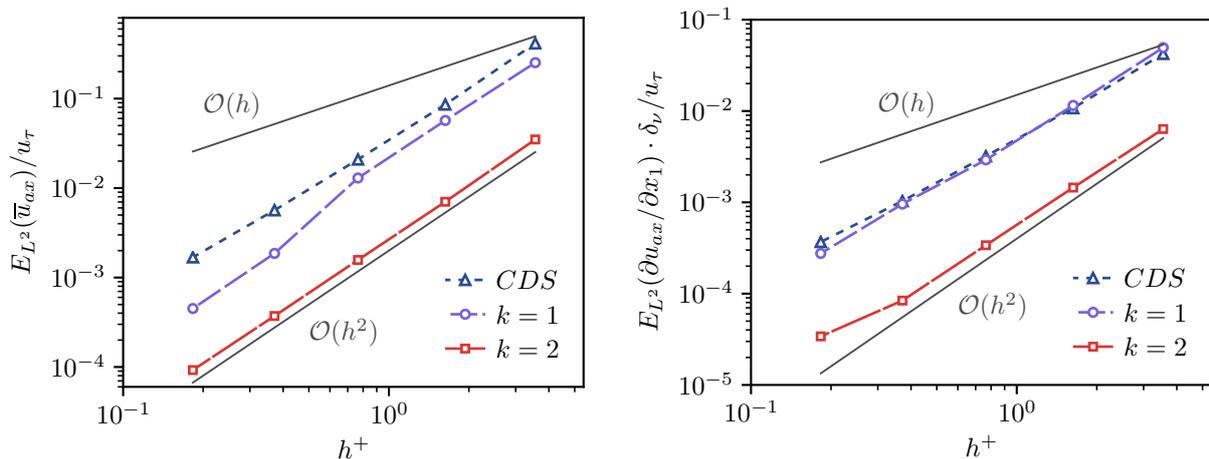


Abbildung 4.17: Konvergenzverläufe der Fehlernorm $E_{L^2}(\mathbf{u}_{ax})$ für die Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr für zwei ausgewählte Rechengitter.



(a) Normierte L^2 -Norm der volumetrisch gemittelten axialen Geschwindigkeit.

(b) Normierte L^2 -Norm des axialen Geschwindigkeitsgradienten in x_1 -Richtung.

Abbildung 4.18: Ergebnisse der Gitterkonvergenzstudie zum Testfall der Hagen-Poiseuille Strömung durch ein kreisrundes Rohr.

Operators in den Vordergrund, welcher lediglich mit $\mathcal{O}(h^2)$ diskretisiert wird. Abbildung 4.18b zeigt den normierten L^2 -Fehler des x_1 -Gradienten des axialen Geschwindigkeitsfeldes. Auch hier lässt sich der Fehler mit dem 2-exakten Verfahren im Vergleich zur konventionellen Methode bei gleicher Schrittweite um etwa eine Größenordnung reduzieren. Der Fehler fällt außerdem bis zu einer gewissen Schrittweite mit einer zweiten Ordnung und geht danach in eine erste Ordnung über. Dieser Effekt konnte bereits für den Testfall des diffusiven Transports einer Punktquelle beobachtet und begründet werden. Im Gegensatz dazu zeigt das Verfahren mit $k = 1$ über alle Schrittweiten eine zweite Fehlerordnung für den axialen Geschwindigkeitsgradienten, wobei der Fehler ein ähnliches

Niveau wie das CDS-Verfahren aufweist. Die Fehlerordnung von letzterem fällt allerdings ebenfalls auf dem feinsten Gitter leicht ab.

4.2 Laminare Testfälle

In diesem Abschnitt wird das k -exakte Multi-Korrekturverfahren hinsichtlich der Simulation laminarer Strömungen validiert. Diese weisen im Vergleich zu den kanonischen Testfällen eine höhere Komplexität auf und lassen sich anhand experimenteller Messdaten validieren. Untersucht werden die Strömung in einer zweidimensionalen Kavität, die Umströmung eines Zylinders in $2D$, die Interaktion zwischen einem Wirbel und einer vorgemischten H_2 -Luft-Flamme, sowie die Umströmung einer Kugel in $3D$.

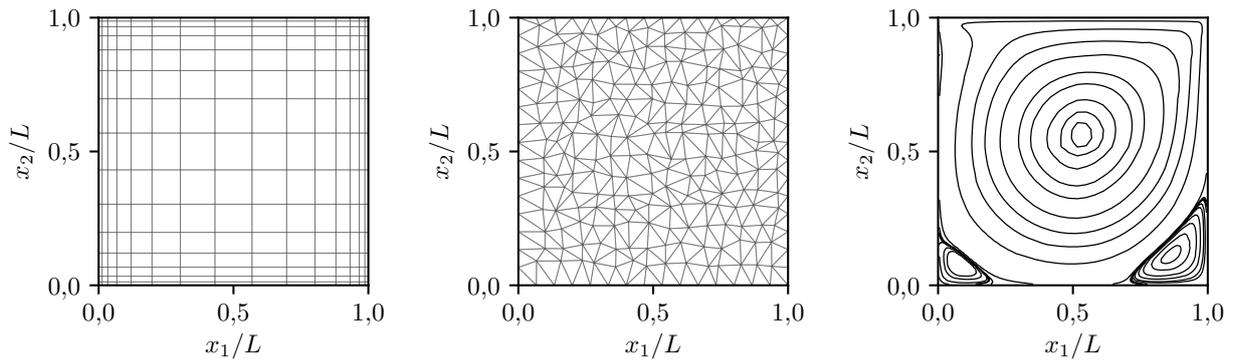
4.2.1 Laminare Strömung in einer Kavität

Die Simulation einer laminaren Strömung in einer Kavität ist ein häufig verwendeter Testfall zur Validierung von inkompressiblen Lösungsverfahren [13, 24, 29, 87, 241, 265]. In dieser Arbeit wird er zur Validierung der beiden k -exakten Multi-Korrekturverfahren unter dem Einfluss von Dirichlet-Randbedingungen verwendet. Dafür gilt es eine zweidimensionale, quadratische Kavität der Größe $\Omega \in [0,L] \times [0,L]$ zu simulieren, für welche die Referenzlänge $L = 1$ m gewählt wird. Der obere Rand der Kavität bewegt sich mit der Geschwindigkeit $u_1 = 1,0$ m/s und die übrigen Ränder werden als Wände behandelt. Für die Simulationen werden zwei Rechengittertypen verwendet, welche exemplarisch in den Abbildungen 4.19a und 4.19b dargestellt sind. Gittertyp A besteht aus Rechtecken und weist eine höhere Auflösung im Wandbereich auf. Gittertyp B ist durch vollständig unstrukturierte, verzerrte Dreiecke definiert. Die Anzahl der Knotenpunkte in der x_1 - x_2 -Ebene variiert mit $N_K = \{16^2, 32^2, 64^2, 128^2\}$. Die Berechnung erfolgt mit dem unlimitierten CDS-Schema, sowie den unlimitierten 1- und 2-exakten Multi-Korrekturverfahren. Zu Beginn der Simulationen wird das Geschwindigkeitsfeld mit $\mathbf{u} = 0$ initialisiert. Anschließend werden die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen für eine Simulationszeit von 120 s gelöst. Diese Zeit wurde in vorangegangenen numerischen Experimenten als ausreichend identifiziert, um eine konvergierte Lösung für alle Schemata und Rechengitter zu gewährleisten. Um den Einfluss des zeitlichen Diskretisierungsfehlers ausreichend klein zu halten, wird der Zeitschritt in Abhängigkeit der mittleren Schrittweite $h = L/\sqrt{N_K}$ so gewählt, dass sich in den Simulationen eine CFL -Zahl von $\sigma \approx 0,2$ einstellt.

Abbildung 4.19c zeigt die Stromfunktion ψ , welche mit dem 2-exakten Schema auf dem Gittertyp A und mit 64^2 Knotenpunkten berechnet wird. Diese lässt sich durch das Lösen folgender Differentialgleichung berechnen

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} = u_1 - u_2. \quad (4.13)$$

Zur numerischen Berechnung von ψ wird die Divergenz von Gleichung (4.13) gebildet, welche sich anschließend in Form einer Poisson-Gleichung nach ψ lösen lässt. Dies erfolgt analog zur Druckkorrektur-Gleichung für δp in der Projektionsmethode. Die resultierende Feldlösung von ψ



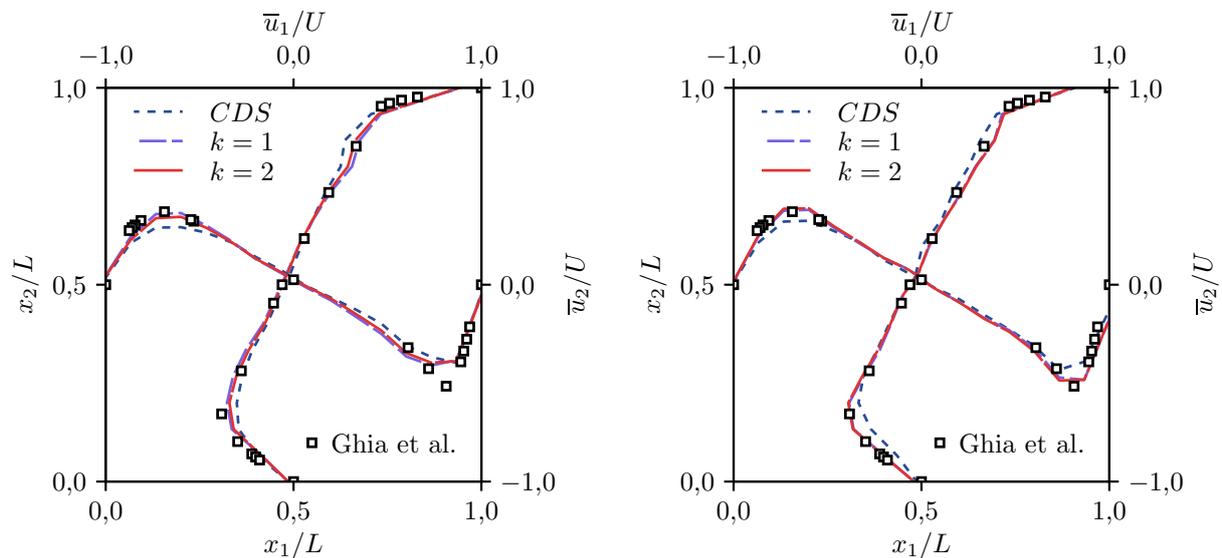
(a) Gittertyp A.

(b) Gittertyp B.

(c) Stromfunktion ψ .

Abbildung 4.19: Gittertypen und Stromfunktion für den Testfall der laminaren Strömung in einer Kavität. Die Rechengitter verfügen über 16^2 Knotenpunkte in der x_1 - x_2 -Ebene. Die Stromfunktion ψ wird auf einem Rechengitter mit 64^2 Knotenpunkten und dem 2-exakten Verfahren berechnet.

hat eine sehr gute Übereinstimmung mit Simulationen aus verschiedenen Arbeiten, welche häufig im Zusammenhang mit diesem Testfall referenziert werden. Hierzu zählen beispielsweise die Arbeiten von Ghia et al. [87], Botella und Peyret [24] oder Bruneau und Saad [29]. Das Strömungsfeld ist charakterisiert durch einen primären Wirbel, welcher sich im Zentrum des Rechengebiets ausbildet, sowie durch zwei kleine Wirbel in den unteren Ecken der Kavität. Die Feldlösungen, welche aus dem CDS und dem 1-exakten Verfahren hervorgehen, weisen ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung mit den Daten aus der Literatur auf und sind der Übersicht wegen nicht dargestellt.



(a) Gittertyp A.

(b) Gittertyp B.

Abbildung 4.20: Geschwindigkeitsprofile der laminaren Strömung in einer Kavität mit 16^2 Knotenpunkten. Die Referenzdaten sind der Arbeit von Ghia et al. [87] entnommen.

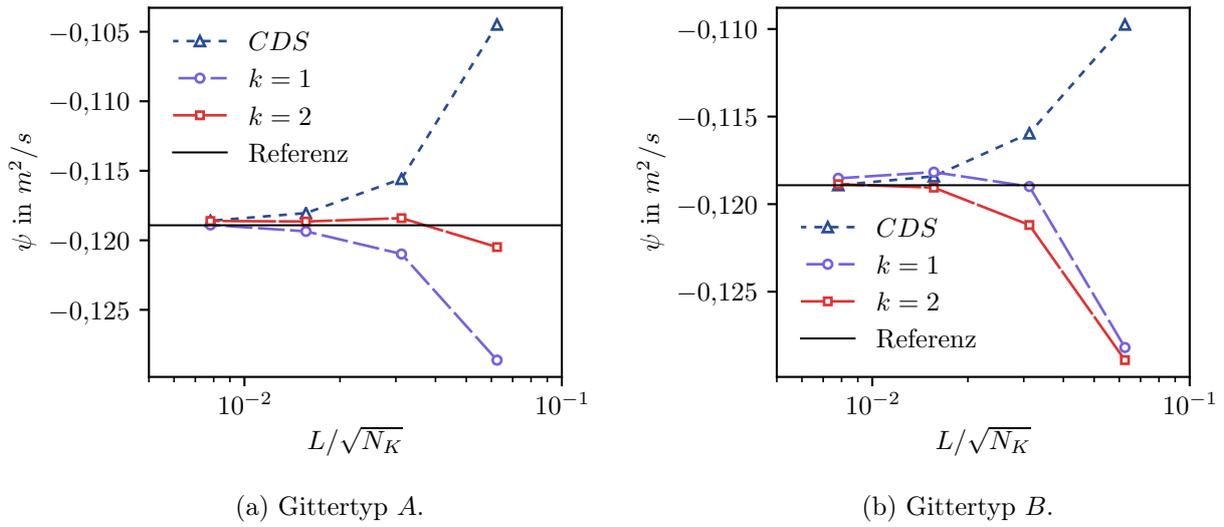


Abbildung 4.21: Konvergenz der Stromfunktion ψ im primären Wirbel der Kavität unter sukzessiver Verfeinerung des Rechengitters. Der Referenzwert ist der Arbeit von Bruneau und Saad [29] entnommen.

Abbildung 4.20 zeigt die Profile des volumetrisch gemittelten Geschwindigkeitsfeldes $\bar{\mathbf{u}}$, welche auf beiden Gittertypen und mit 16^2 Knotenpunkten berechnet wurden. Hierbei ist \bar{u}_1 über der x_2 -Koordinate und \bar{u}_2 über der x_1 -Koordinate dargestellt. Zur Validierung der Ergebnisse dienen die Simulationsdaten aus der Arbeit von Ghia et al. [87]. Die k -exakten Verfahren weisen auf beiden Gittertypen eine sehr gute Übereinstimmung mit den Referenzdaten auf. Interessanterweise wird eine höhere Genauigkeit auf dem Gittertyp B erzielt, was insbesondere anhand des Wendepunkts des \bar{u}_2 -Profils bei $x_1/L \approx 0,9$ und $x_2/L \approx 0,25$ zu erkennen ist. Diese bessere Übereinstimmung ergibt sich erstaunlicherweise trotz der größeren Wandauflösung und der stark unregulären Elemente. Das CDS-Schema weist im Gegensatz zu den k -exakten Verfahren auf beiden Gittern größere Abweichungen zu den Referenzdaten auf, was deutlich anhand der Profil-Wendepunkte erkennbar ist. Bei einer Verfeinerung lassen sich die Referenzdaten mit beiden Gittertypen und mit allen drei Schemata ohne größere Abweichungen reproduzieren.

Zum weiteren Vergleich der verschiedenen Schemata wird das Minimum der Stromfunktion ψ im Zentrum des primären Wirbels der Kavität untersucht. Dieses ist in Abbildung 4.21 für beide Gittertypen über der mittleren Schrittweite $h = L/\sqrt{N_K}$ aufgetragen. Als Referenz dient der Wert $\psi = -0,118920 \text{ m}^2/\text{s}$, welcher in der Arbeit von Bruneau und Saad [29] mit einer Finite-Differenzen-Methode auf 128×128 Gitterpunkten berechnet wurde. Alle drei Diskretisierungsverfahren konvergieren mit abnehmender Gitterschrittweite gegen den Referenzwert. Für den Gittertyp A stellt sich bei allen Schrittweiten die geringste Abweichung mit dem 2-exakten Verfahren ein, wohingegen das 1-exakte Verfahren auf dem Gittertyp B und die beiden größten Schrittweiten die beste Übereinstimmung zeigt.

4.2.2 Laminare Strömung um einen Zylinder

Dieser Testfall wurde von Schäfer et al. [215] innerhalb des Forschungsprogramms *Flow Simulation with High-Performance Computers* beschrieben und in verschiedenen Publikationen zur Validierung von Diskretisierungsverfahren hoher Ordnung für zeitgenaue Simulation viskoser Strömungen verwendet [13, 241, 265]. Betrachtet wird die Strömung eines inkompressiblen Fluids in einem rechteckigen Kanal, in dessen Zentrum ein zylindrisches Hindernis plaziert wird. Unter der vorgegebenen Reynolds-Zahl $Re = 100$ bildet sich hinter dem Zylinder eine Kármánsche Wirbelstraße aus, wodurch der Zylinder periodische Oszillationen in Widerstands- und Auftriebskraft erfährt. Ziel der Simulationen ist eine möglichst akkurate Vorhersage der daraus resultierenden Maxima in den Widerstands- und Auftriebskoeffizienten des Zylinders, sowie der Frequenz f dieser Schwingungen. Letztere wird über die Strouhal-Zahl $St = Df/U$ charakterisiert, deren Berechnung über den Zylinderdurchmesser D und die mittlere Strömungsgeschwindigkeit $U = 1,0$ m/s erfolgt. Die Randbedingungen des Testfalls erlauben es, das Problem in $2D$ zu behandeln. Der Zylinder hat den Durchmesser $D = 0,1$ m und die Maße des Kanals betragen $2,2$ m \times $0,41$ m. Für die obere und untere Berandung des Kanals werden Wand-Randbedingungen verwendet und am Eintritt wird ein parabolisches Strömungsprofil aufgeprägt. Eine detaillierte Beschreibung des Testfalls ist in der Arbeit von Schäfer et al. [215] zu finden. Der Testfall wird auf vier Rechengittern mit variierender Anzahl an Knotenpunkten $N_K = \{2786, 6088, 12283, 24059\}$ berechnet. Das gesamte Rechengebiet wird durch dreieckige Elemente diskretisiert und der Bereich um den Zylinder wird verfeinert, um Fehler infolge der Oberflächenkrümmung zu minimieren. Abbildung 4.22 zeigt exemplarisch das größte Rechengitter mit 2786 Knotenpunkten in der x_1 - x_2 -Ebene. Die Simulationen werden mit den beiden k -exakten Multi-Korrekturverfahren und dem konventionellen CDS-Schema durchgeführt. Da der Testfall ein vergleichsweise kontinuierliches Problem darstellt, wird für die jeweiligen Verfahren kein Limitierungsansatz verwendet. Zu Beginn der Simulation wird das Rechengebiet mit $\mathbf{u} = 0$ initialisiert. Anschließend erfolgt die Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen für eine Simulationszeit von 8 s. Der Zeitschritt Δt wird in Abhängigkeit der Rechengitter vorgegeben, sodass sich eine CFL -Zahl von $\sigma \approx 0,5$ einstellt.

Abbildung 4.23 zeigt die Feldlösungen für den Geschwindigkeitsbetrag $|\bar{\mathbf{u}}_\alpha|$, die Druckdifferenz $\bar{p}_\alpha - p_{\text{ref}}$ zum Referenzdruck p_{ref} und die Wirbelstärke $\bar{\omega}_\alpha$ zum Zeitpunkt der maximalen Auftriebskraft. Die Lösungen gehen aus den Simulationen des 2-exakten Schemas mit 6088 und 24059

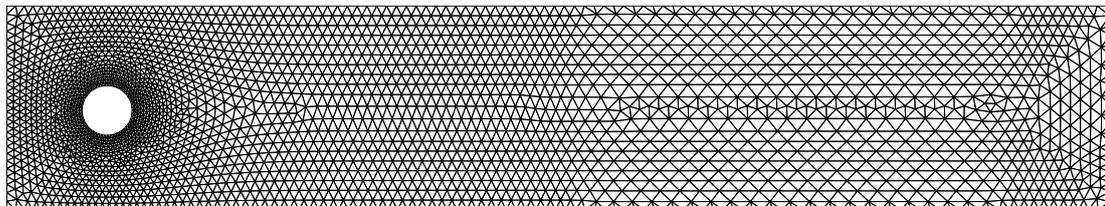


Abbildung 4.22: Rechengitter zur laminaren Umströmung eines Zylinders mit 2786 Knotenpunkten.

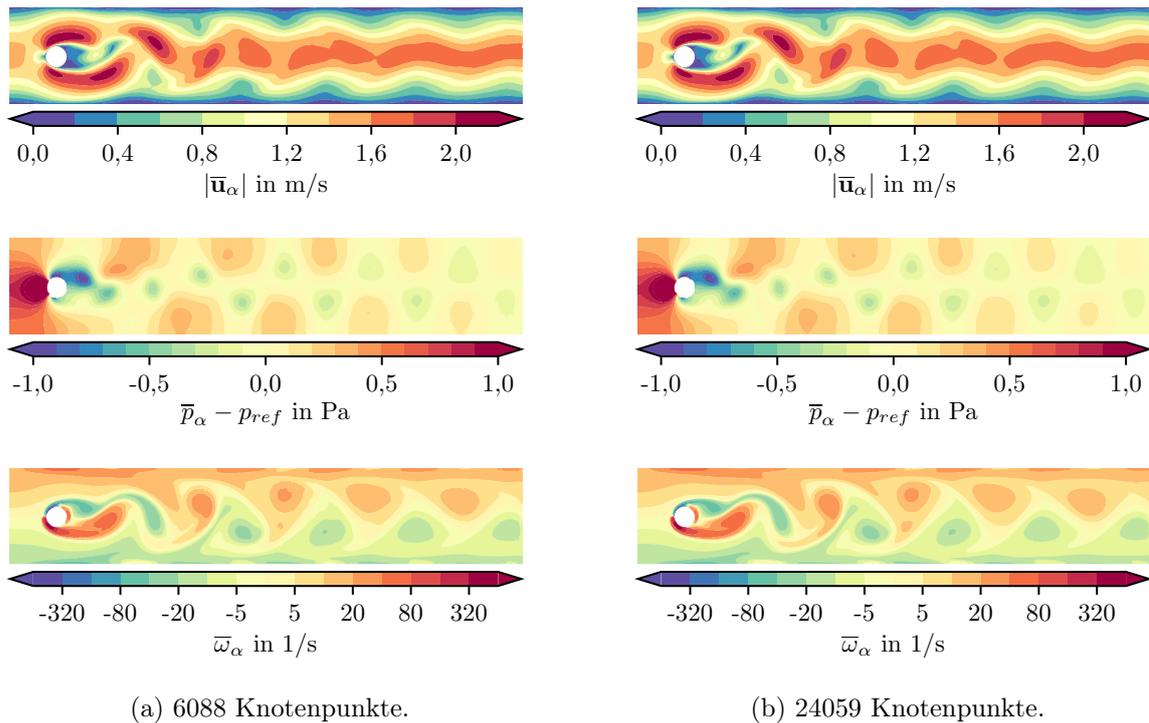
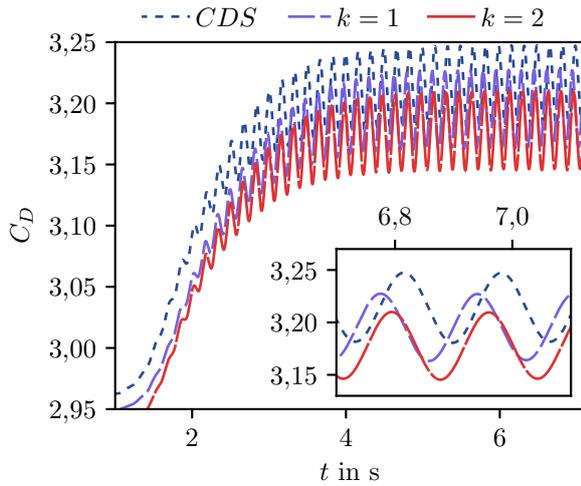


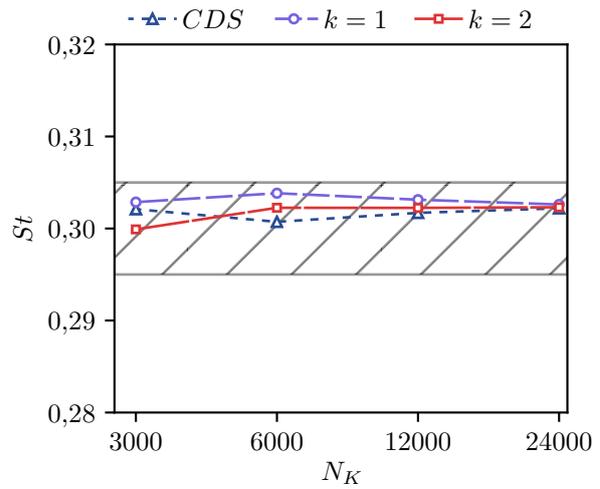
Abbildung 4.23: Feldlösung der laminaren Strömung um einen Zylinder in 2D während des Zustands der maximalen Auftriebskraft, berechnet mit dem 2-exakten Verfahren. Gezeigt sind der Betrag des Geschwindigkeitsfeldes $|\bar{\mathbf{u}}_\alpha|$ (oben), die Druckdifferenz zum Referenzdruck $\bar{p}_\alpha - p_{ref}$ (Mitte) und die Wirbelstärke $\bar{\omega}_\alpha$ (unten).

Knotenpunkten hervor. In beiden Fällen lässt sich deutlich eine Kármánsche Wirbelstraße hinter dem Zylinder erkennen, deren Verlauf sehr gut mit anderen Arbeiten aus der Literatur übereinstimmt [13, 241, 265]. Auch auf dem deutlich größeren Rechengitter werden die absoluten Werte aller drei Feldgrößen akkurat vorhergesagt.

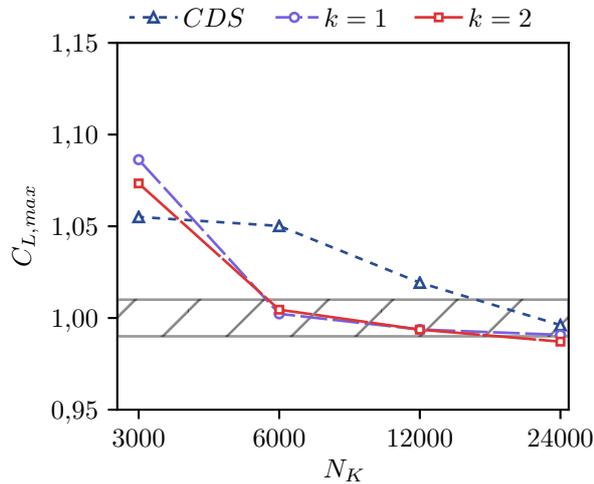
In Abbildung 4.24a ist der zeitliche Verlauf des Widerstandskoeffizienten C_D dargestellt, der mit den drei Diskretisierungsverfahren auf dem Gitter mit 6088 Knotenpunkten berechnet wurde. Die zeitlichen Verläufe der k -exakten Schemata zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zu den Vergleichsdaten aus der Literatur [13, 241, 265]. Zwischen dem 1- und 2-exakten Schema ist ein Phasenversatz zu erkennen, was weniger ein Hinweis auf die Genauigkeit der Verfahren ist, sondern auf Unterschiede in der Auflösung des Ablöseprozess der Kármánschen Wirbelstraße hindeutet. Ein ähnliches Verhalten wurde auch in der Arbeit von Bassi et al. [13] bei der Simulation mit einem *Discontinuous Galerkin*-Verfahren und einem *Artificial Compressibility*-Ansatz festgestellt. Mit dem CDS-Verfahren oszilliert der Widerstandskoeffizient nicht nur mit einem Phasenversatz, sondern auch mit deutlich höherem Mittelwert. Abbildungen 4.24b - 4.24d zeigen die Strouhal-Zahl St , sowie die Maxima des Auftriebs- und des Widerstandskoeffizienten C_L und C_D , welche mit den drei Diskretisierungsverfahren auf den verschiedenen Gittern berechnet wurden. Zum Vergleich dienen Referenzwerte aus der Arbeit von Schäfer et al. [215], welche durch die gestrichelten Bereiche dargestellt sind. Die Strouhal-Zahl wird in allen Simulationen innerhalb des Toleranzbereichs vorhergesagt. Bezüglich



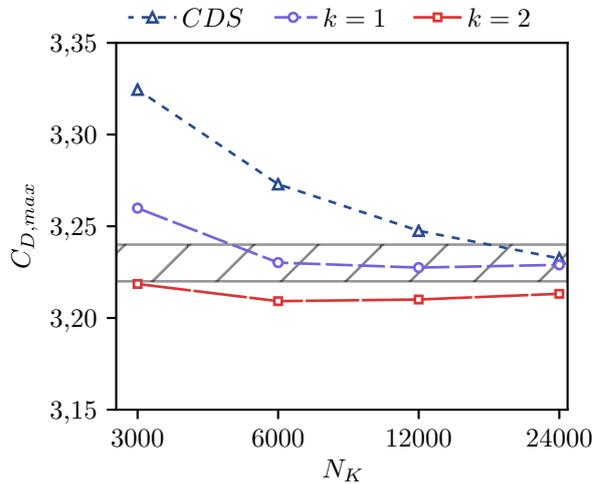
(a) Zeitlicher Verlauf des Druckkoeffizienten C_D auf dem Rechengitter mit $N_K = 6088$.



(b) Gitterkonvergenz der Strouhal-Zahl St .



(c) Gitterkonvergenz des maximalen Auftriebskoeffizienten $C_{L,max}$.



(d) Gitterkonvergenz des maximalen Druckkoeffizienten $C_{D,max}$.

Abbildung 4.24: Einfluss der Diskretisierungsschemata auf den Testfall eines laminar umströmten Zylinders in $2D$. Die gestrichelten Bereiche kennzeichnen die Referenzwerte aus der Arbeit von Schäfer et al. [215].

der Koeffizienten $C_{L,max}$ und $C_{D,max}$ weist das 1-exakte Verfahren die beste Übereinstimmung auf, wobei bereits auf dem Gitter mit 6088 Knotenpunkten beide Zielgrößen ausreichend genau berechnet werden. Das 2-exakte Verfahren hat eine ähnlich gute Übereinstimmung ab dieser Gitterfeinheit, wobei der maximale Widerstandskoeffizient jedoch leicht unterschätzt wird. Mit dem CDS -Verfahren lassen sich beide Koeffizienten auf dem Gitter mit 12283 Knotenpunkten mit einem ähnlichen Fehler berechnen, wie mit dem 2-exakten Verfahren bei $N_K = 6088$. Dementsprechend lässt sich die Gesamtrechenzeit des Testfalls mit $k = 1$ um circa 55 % und mit $k = 2$ um circa 45 % reduzieren, wenn auf dem größeren Gitter ein entsprechend größerer Zeitschritt verwendet wird. Bei einem direkten

Vergleich der Iterationsdauer benötigt das 1-exakte Verfahren hingegen etwa 20 % und das 2-exakten Verfahren circa 50 % mehr Rechenzeit als das konventionelle Diskretisierungsschema.

4.2.3 Wirbel-Zündkern-Interaktion in einem vorgemischten H_2 -Luft-Gemisch

Dieser Testfall dient dazu, die Anwendbarkeit des k -exakten Multi-Korrekturverfahrens für die Simulation von transienten Verbrennungsvorgängen zu demonstrieren. Betrachtet wird der Zündkern einer vorgemischten Wasserstoff-Luft-Flamme, welcher mit einem Wirbelpaar wechselwirkt und dadurch eine Faltung und Dehnung der Flammenfront induziert [244]. Diese Wechselwirkung lässt sich in unterschiedliche Regime einteilen, welche in verschiedenen Arbeiten experimentell und numerisch untersucht wurden [67, 131, 244]. Wirbel-Zündkern-Interaktionen stellen zudem ein kanonisches Problem für ein breites Spektrum technischer Verbrennungsprozesse dar und sind für die Modellierung von turbulenten, vorgemischten Flammen von Bedeutung [244].

Abbildung 4.25 zeigt einen schematischen Aufbau des Testfalls, zusammen mit den verschiedenen Flammenregimen für die Wirbel-Zündkern-Interaktion, welche der Arbeit von Vasudeo et al. [244] entnommen wurden. Die Testfall-Bedingungen werden ebenfalls in Anlehnung an die Arbeit von Vasudeo et al. gewählt, wozu ein zweidimensionales Rechengebiet mit den Maßen $3\text{ cm} \times 4\text{ cm}$ betrachtet wird. Zu Beginn der Simulation wird ein gegenläufiges Wirbelpaar in Form zweier überlagerter Lamb-Oseen-Wirbelmodelle [184] initialisiert. Die tangentielle Geschwindigkeit eines solchen Wirbels

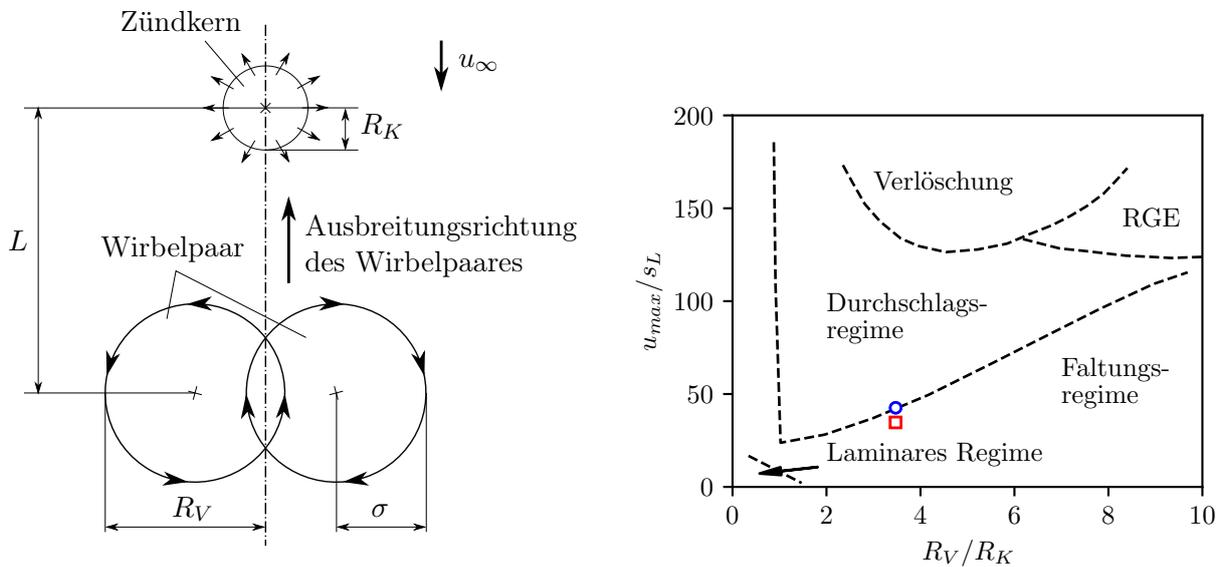


Abbildung 4.25: Schematischer Aufbau des Testfalls zur Wirbel-Zündkern-Interaktion in einem vorgemischten H_2 -Luft-Gemisch (links) und Flammen-Regime des Testfalls nach Vasudeo et al. [244] (rechts). Die Abkürzung RGE kennzeichnet das *Regeneration after General Extinction* Regime. Das rote, quadratische Symbol kennzeichnet das Regime aus der Arbeit von Vasudeo et al., wohingegen das blaue, runde Symbol die Regimeposition dieser Arbeit darstellt.

Tabelle 4.2: Temperatur und Gaszusammensetzungen für den initialen Zustand des Testfalls zur Wirbel-Zündkern-Interaktion.

Gaszustand	T	Y_{H_2}	Y_{O_2}	Y_{N_2}	$Y_{\text{H}_2\text{O}}$	Y_{OH}	Y_{O}
Unverbrannt	300,00 K	0,01885	0,14958	0,83157	–	–	–
Verbrannt	1907,42 K	–	0,00320	0,83174	0,16445	0,00054	0,00001

ist definiert durch [131, 244]

$$u_{\text{tan}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{\psi}{2\pi r} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma^2}\right) \right] & \text{für } r \leq \sigma, \\ 0 & \text{für } r > \sigma, \end{cases} \quad (4.14)$$

mit dem Radius $r = \sqrt{(x_1 - x_{1,c})^2 + (x_2 - x_{2,c})^2}$, der Wirbelskale $\sigma = 1,5$ mm, der Wirbelstärke ψ und der initialen Position des Wirbels $\mathbf{x}_c = [\pm 1 \text{ mm}, -1,5 \text{ mm}]^T$. Mit den gewählten Parametern für σ und \mathbf{x}_c lässt sich für das Wirbelpaar der äußere Radius $R_V = 2,5$ mm definieren. Gleichung (4.14) enthält eine Unstetigkeit an der Stelle $r = \sigma$. Diese kann in der Simulation parasitäre Druckmoden induzieren, deren Behandlung in der Literatur jedoch nicht näher beschrieben wird. Zur Vermeidung von Unstetigkeiten im Geschwindigkeitsfeld wird das Wirbelfeld in dieser Arbeit mit einer kontinuierlichen Funktion $H(r)$ multipliziert, welche definiert ist durch

$$H(r) = 1 - \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{r - (1 + \epsilon)\sigma}{(1 - \epsilon)\sigma}\right) \right]. \quad (4.15)$$

Der Parameter ϵ steuert das Maß zur Glättung und wird zu 0,3 gesetzt. Es ergibt sich das folgende modifizierte Geschwindigkeitsfeld ohne Diskontinuität, welches als Startlösung eines Wirbels dient

$$u_{\text{tan}}(\mathbf{x}) = \frac{\psi}{2\pi r} H(r) \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma^2}\right) \right]. \quad (4.16)$$

Zur Generierung des Wirbelpaares wird die Lösung zweier entgegengesetzter Wirbel überlagert, deren Felder sich auf der Hauptachse des Rechengebiets überschneiden. Die Wirbelstärke wird mit $\psi \approx 9,9399 \cdot \sigma \cdot u_{\text{max}}$ in Abhängigkeit einer maximalen tangentialen Geschwindigkeit $u_{\text{max}} = 40$ m/s ausgedrückt, welche sich an der Stelle $r = \sigma$ einstellen soll. Der Zündkern mit dem Radius $R_K = 0,72$ mm wird mit einer Entfernung $L = 3$ mm zum Wirbelpaar plaziert. Die Temperatur und Gaszusammensetzung des Zündkerns ist in Tabelle 4.2 dargestellt und geht aus dem Gleichgewichtszustand des Gemisches nach der Verbrennung in einem isobaren Reaktormodell hervor. Die Initialisierung der Enthalpie und der Massenbrüche erfolgt durch eine Gaußsche Pulsfunktion, welche für die Spezies-Massenbrüche Y_s folgende Form hat:

$$Y_s = Y_{s,b} + (Y_{s,u} - Y_{s,b}) \exp\left(-\frac{r^2}{R_K^2}\right). \quad (4.17)$$

Der Radius r wird hierbei im Bezug zum Mittelpunkt des Zündkerns berechnet. Mit $Y_{s,u}$ und $Y_{s,b}$ werden die Massenbrüche des unverbrannten und verbrannten Gases bezeichnet. Bei dem unverbrannten Gas handelt es sich um ein stöchiometrisches Gemisch aus Wasserstoff und verdünnter Luft, welche ein molares N_2/O_2 -Verhältnis von 6,35 aufweist. Für den Umgebungsdruck wird $p_0 = 1$ bar vorgegeben. Zum besseren Konvergenzverhalten des Lösungsverfahrens wird dem gesamten Geschwindigkeitsfeld eine konstante Hintergrundgeschwindigkeit von $u_\infty = -2$ m/s in x_2 -Richtung aufgeprägt. Am oberen und unteren Rand des Rechengebiets wird jeweils eine Ein- und Ausström-Randbedingung aufgeprägt und die seitlichen Begrenzungen werden als periodische Ränder behandelt. Für die Modellierung des Verbrennungsvorgangs wird das in Abschnitt 2.1.3 dargestellte FRC Modell verwendet. Durch die Verwendung der speziesabhängigen Diffusionskoeffizienten D_s werden außerdem die Einflüsse von differentieller Diffusion abgebildet.

Mit den gegebenen Parametern für R_V , R_K und u_{\max} stellt sich in der Arbeit von Vasudeo et al. eine Wirbel-Zündkern-Interaktion im Faltungsregime ein. Dieses Regime kennzeichnet sich dadurch, dass der Zündkern durch das Wirbelpaar stark deformiert wird, jedoch nicht verlöscht. Die entsprechende Position im Regime-Diagramm ist in Abbildung 4.25 anhand des roten Symbols dargestellt. Die Position auf der Diagrammordinate hängt dabei neben der Geschwindigkeit u_{\max} auch von der laminaren Flammgeschwindigkeit s_L ab. In der Arbeit von Vasudeo et al. wurde für die Simulationen der *GRI-Mech* 2.11 Reaktionsmechanismus [79] verwendet, welcher unter den gegebenen Bedingungen eine Flammgeschwindigkeit $s_L \approx 1,15$ m/s berechnet. Für die Simulationen dieser Arbeit wird jedoch der neuere H_2 -Reaktionsmechanismus von Ó Connaire [179] verwendet, welcher acht Spezies und 19 Elementarreaktionen umfasst. Mit diesem Mechanismus wird eine laminare Flammgeschwindigkeit $s_L = 0,9388$ m/s und eine Flammstärke $\delta_F = 0,45793$ mm vorhergesagt. Mit der veränderten Flammgeschwindigkeit verschiebt sich die Position des Testfalls im Regime-Diagramm hin zum Bereich des Durchschlagsregimes, was anhand des blauen Symbols in Abbildung 4.25 gezeigt ist. Dieses Regime kennzeichnet sich dadurch, dass der Zündkern durch die Interaktion mit dem Wirbelpaar lokal verlöscht und gespalten wird. Die genannten Unterschiede des Flammenregimes sind für diese Arbeit jedoch unerheblich, da die Daten von Vasudeo et al. aufgrund ihrer eingeschränkten Beschaffenheit nicht hinreichend zur Validierung der Verfahren höherer Ordnung sind. Daher wird für die dargestellten Parameter zunächst eine Referenzlösung auf einem kartesischen Rechennetz mit 2048×1536 Knotenpunkten erzeugt. Anschließend wird untersucht, ob die Ausbreitung der Flammenfront mit den verschiedenen Diskretisierungsverfahren auch auf größeren Rechengittern akkurat vorhergesagt werden kann. Die Referenzlösung wird mit den beiden k -exakten Multi-Korrekturverfahren sowie mit dem konventionellen CDS/QUDS-Verfahren durchgeführt. Für letzteres werden die Flüsse der Impulserhaltungsgleichungen mit dem unlimitierten CDS-Verfahren und die Flüsse der Spezies- und Enthalpiegleichungen mit dem limitierten QUDS-Verfahren berechnet. Für die k -exakten Verfahren werden die Rekonstruktionspolynome der Spezies und der Enthalpie limitiert, wohingegen die Berechnung von Geschwindigkeit und Druck unlimitiert erfolgt. Die Interaktion des Wirbels und des Flammenkerns wird über die Dauer der che-

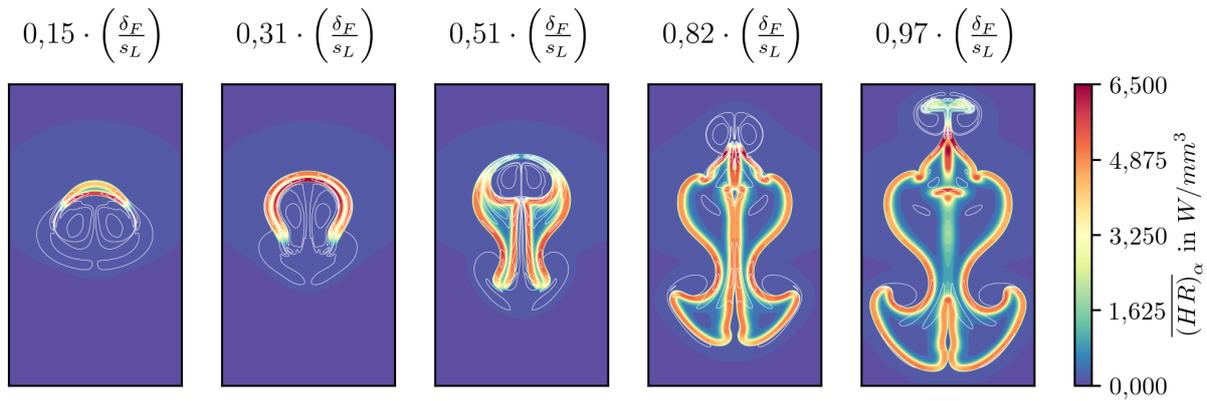


Abbildung 4.26: Volumetrisch gemittelte Wärmefreisetzungsraten $\overline{(HR)}_\alpha$ zu verschiedenen Zeitpunkten der Wirbel-Zündkern-Interaktion, berechnet auf dem Referenz-Rechengitter mit 2048×1536 Knotenpunkten. Die weißen Iso-Linien kennzeichnen die normierte Wirbelstärke $\omega \cdot (\delta_F / s_L) \in \{10, 20, 40, 80, 160\}$.

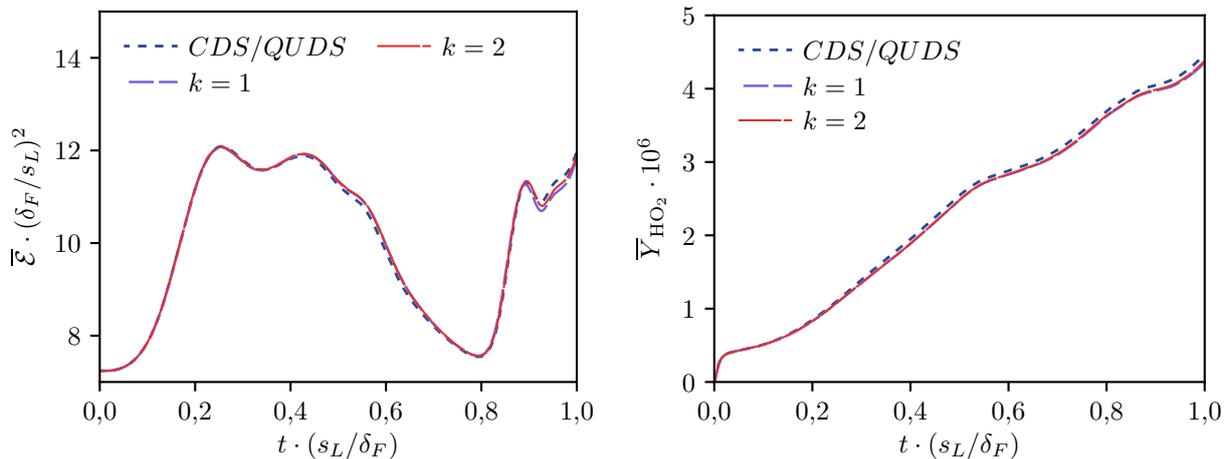


Abbildung 4.27: Zeitlicher Verlauf der integralen Enstrophie $\bar{\mathcal{E}}$ und des integralen Hydroperoxy-Massenbruchs \bar{Y}_{HO_2} während der Wirbel-Zündkern-Interaktion, berechnet auf dem Referenz-Rechengitter mit 2048×1536 Knotenpunkten.

mischen Zeitskala $(\delta_F / s_L) = 0,48778$ ms simuliert, wofür in der Referenzsimulation ein Zeitschritt von $\Delta t = 0,05 \mu\text{s}$ gewählt wird.

Abbildung 4.26 zeigt die volumetrisch gemittelte Wärmefreisetzungsraten $\overline{(HR)}_\alpha$ der Wirbel-Zündkern-Interaktion, welche mit dem 2-exakten Verfahren berechnet wurde. Die weißen Iso-Linien kennzeichnen die Wirbelstärke ω und dienen zur Darstellung des Wirbelpaares. Dieses trifft zu Beginn der Simulation unmittelbar auf den Zündkern und induziert eine starke Deformation der Flammenfront, welche sich hufeisenförmig um das Wirbelpaar ausbreitet. Dabei löst sich ein zweites Wirbelpaar in entgegengesetzter Richtung ab, welches den unteren Bereich des Flammenkerns aufweitet. Das zentrale Wirbelpaar verfügt über einen ausreichend großen Impuls, um die Flammenfront lokal zu verlöschen und in zwei separate Zündkerne zu zerteilen, was für $t = 0,51 \cdot (\delta_F / s_L)$ zu erkennen

ist. Im Anschluss an die Verlöschung werden heiße Abgase wieder durch das zentrale Wirbelpaar eingesogen und initiieren dann eine erneute Zündung des Gemisches. Des Weiteren vereinen sich die Flammenfronten der beiden getrennten Zündkerne zu einem einzigen Flammenkern, was für den Zeitpunkt $t = 0.97 \cdot (\delta_F/s_L)$ zu erkennen ist.

Abbildung 4.27 zeigt die zeitlichen Verläufe der integralen Mittelwerte der Enstrophie $\bar{\mathcal{E}}$ und des Hydroperoxyl-Massenbruchs \bar{Y}_{HO_2} , welche durch Integration über das gesamte Rechengebiet berechnet werden:

$$\bar{\mathcal{E}}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \iiint_{\Omega} \mathcal{E}(t) \, dV \quad \text{und} \quad \bar{Y}_{\text{HO}_2}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \iiint_{\Omega} Y_{\text{HO}_2}(t) \, dV. \quad (4.18)$$

Die Enstrophie $\mathcal{E} = \omega^2$ geht dabei aus dem Quadrat der Wirbelstärke ω hervor und dient für diesen Testfall zur Charakterisierung des Strömungsfeldes. Das Hydroperoxyl-Radikal stellt hingegen eine intermediäre Reaktionsspezies dar, welche zur Abbildung des Reaktionsverlaufs im Rechengebiet verwendet wird. Beide Kennlinien dienen im weiteren Verlauf zur Bewertung der Diskretisierungsschemata, wenn der Testfall auf gröberen Rechengittern reproduziert wird. Bezüglich dem Verlauf der Kurven ist zunächst ein Anstieg der Enstrophie bis zum Zeitpunkt $t \approx 0,25 \cdot (\delta_F/s_L)$ zu erkennen, welcher mit der hufeisenförmigen Deformation des Zündkerns einhergeht. Anschließend fällt die Enstrophie im Rechengebiet ab, was mit der Durchschreitung des Wirbels durch den Zündkern und der lokalen Verlöschung der Flammenfront korreliert. Für den Zeitpunkt $t \approx 0,80 \cdot (\delta_F/s_L)$ steigt die Kurve der Enstrophie erneut an, was dem Zeitpunkt der erneuten Zündung entspricht. Die Kurve des Hydroperoxyl-Radikals kennzeichnet sich im Gegensatz zur Enstrophie über den gesamten Simulationsablauf durch einen monotonen Anstieg. Für die Ergebnisse der Referenzsimulationen in Abbildung 4.27 lassen sich bis zum Zeitpunkt $t \approx 0,9 \cdot (\delta_F/s_L)$ nur marginale Abweichungen zwischen den Kennlinien der drei Verfahren erkennen.

Eine bedeutendes Kriterium für das k -exakte Multi-Korrekturverfahren ist die parallele Skalierbarkeit. Das Rechengitter der Referenzsimulationen umfasst unter Berücksichtigung der dritten Raumdimension 6,3 Millionen Knotenpunkte und bietet daher eine entsprechend hohe Anzahl an Freiheitsgraden, um die parallelen Skalierungseigenschaften der k -exakten Verfahren im Vergleich zum konventionellen Schema zu bestimmen. Dazu wurde für jedes der drei Schemata die mittlere Iterationszeit τ_{it} in Abhängigkeit der Prozessoranzahl $N_P = \{64, 128, 256, 512, 1024, 2048\}$ in fünf unabhängigen Simulationsdurchläufen bestimmt. In jedem Durchlauf erfolgte die Berechnung von jeweils zehn Zeitschritten des Testfalls. Zur Vergleichbarkeit wurde für das Krylov-Lösungsverfahren eine konstante Anzahl von fünf Subiterationen festgelegt. Abbildung 4.28 zeigt die parallele Beschleunigung $\tau_{\text{it},32}^{(CDS)}/\tau_{\text{it}}$, welche im Englischen auch als *Speedup* bezeichnet wird. Diese setzt die mittlere Iterationszeit $\tau_{\text{it},32}^{(CDS)}$ des CDS/QUDS-Verfahrens bei 64-Prozessoren ins Verhältnis zu den mittleren Iterationszeiten τ_{it} aller übrigen Fälle. Es ist zu erkennen, dass die Iterationszeiten aller drei Verfahren linear mit der Anzahl der Prozessoren N_P skalieren und sich der *Speedup* erst ab $N_P = 1024$ reduziert. Dies zeigt, dass sich mit dem Multi-Korrekturansatz eine Rekonstruktion höherer Ordnung realisieren lässt, ohne dass die parallele Skalierbarkeit maßgeblich beeinflusst wird.

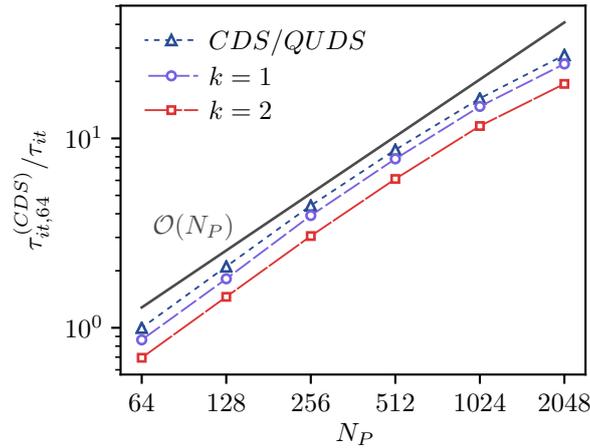
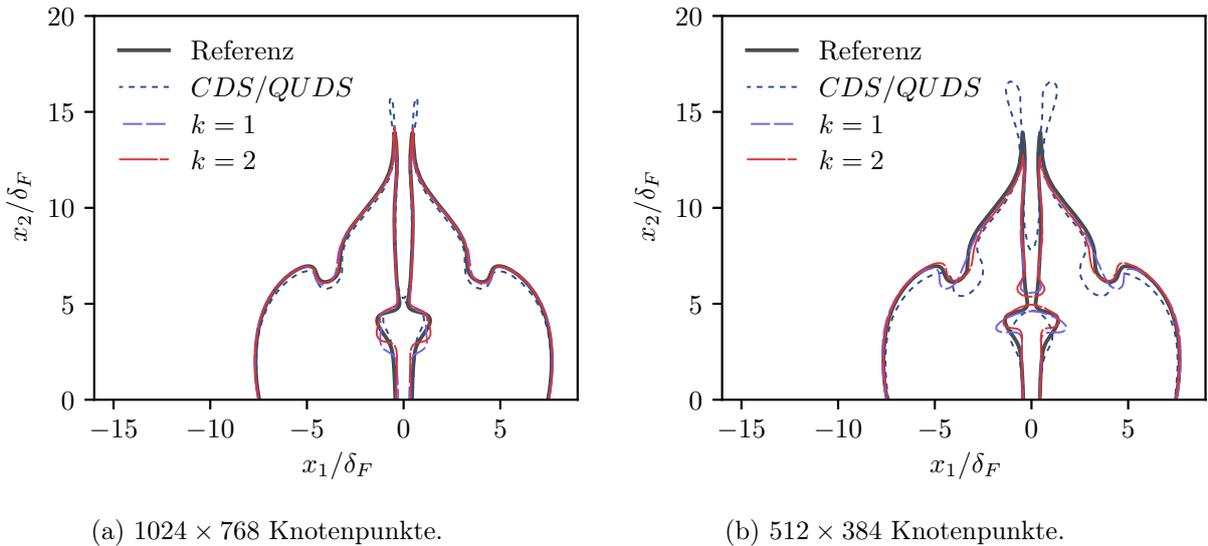


Abbildung 4.28: Parallele Beschleunigung der Diskretisierungsverfahren für den Testfall der Wirbel-Zündkern-Interaktion auf dem Referenz-Rechengitter mit 2048×1536 Knotenpunkten.



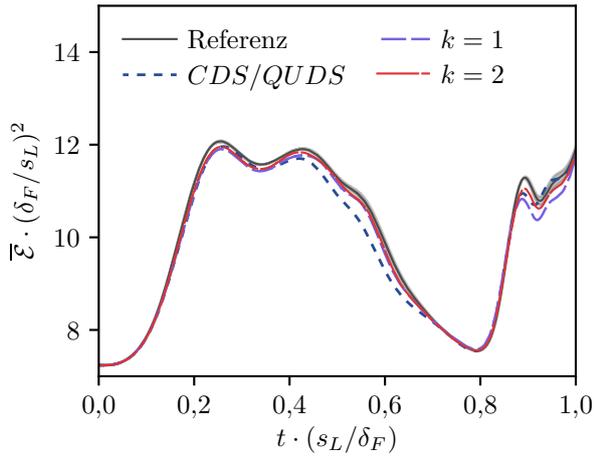
(a) 1024×768 Knotenpunkte.

(b) 512×384 Knotenpunkte.

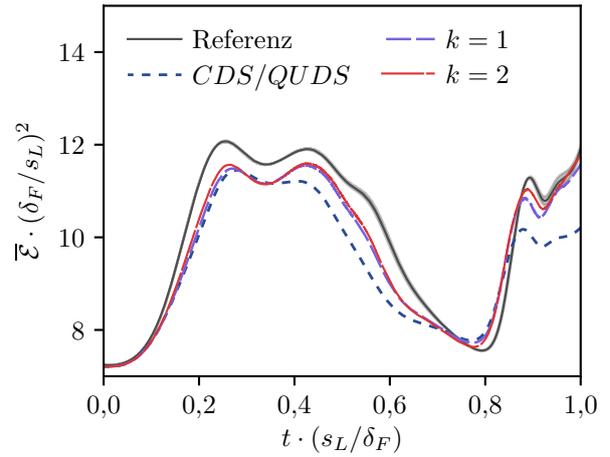
Abbildung 4.29: Iso-Linien der Temperatur mit $T = 1192,4$ K für die Wirbel-Zündkern-Interaktion zum Zeitpunkt $t = 0,82 \cdot (\delta_F/s_L)$.

Analog zu den vorangegangenen Testfällen weisen beide k -exakten Verfahren höhere Rechenzeiten als die konventionelle Methode auf. Für $k = 1$ steigt die mittlere Iterationszeit im Durchschnitt um circa 10 % und für $k = 2$ um circa 40 % an. Der Anstieg ist bedeutend geringer als in den vorangegangenen nichtreaktiven Testfällen, was der Berechnung des chemischen Quellterms geschuldet ist. Dieser beansprucht zusätzliche Rechenzeit, wodurch der zeitliche Beitrag der k -exakten Korrekturen in den Hintergrund rückt.

Abbildung 4.29a zeigt die Iso-Linien der Temperatur mit $T = 1192,4$ K, welche mit den drei Verfahren auf einem größeren Gitter zum Zeitpunkt $t = 0,82 \cdot (\delta_F/s_L)$ berechnet wurden. Zum Vergleich

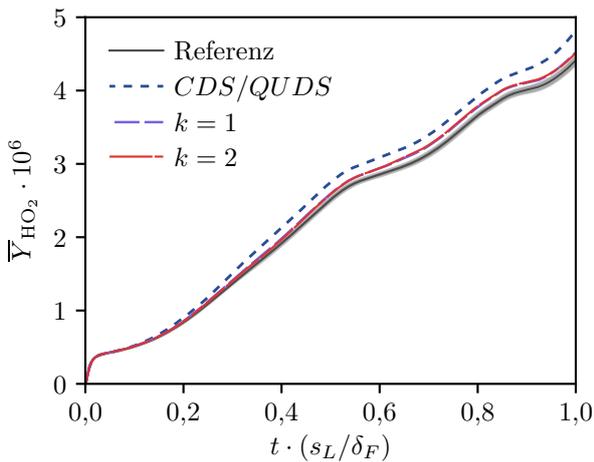


(a) 1024×768 Knotenpunkte.

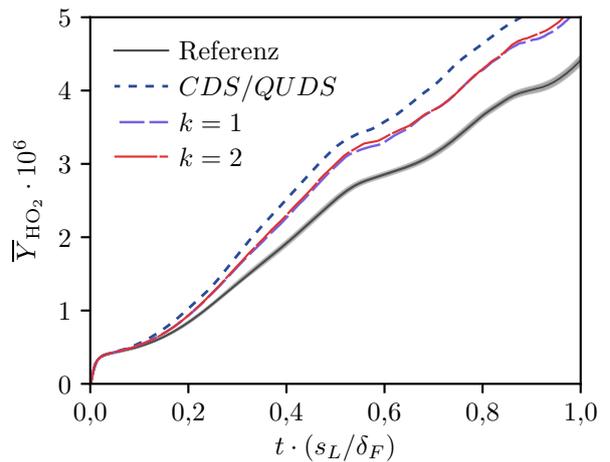


(b) 512×384 Knotenpunkte.

Abbildung 4.30: Zeitlicher Verlauf der integralen Enstrophie $\bar{\mathcal{E}}$ für die Wirbel-Zündkern-Interaktion auf den größeren Rechengittern.



(a) 1024×768 Knotenpunkte.



(b) 512×384 Knotenpunkte.

Abbildung 4.31: Zeitlicher Verlauf des integralen Hydroperoxyl-Massenbruchs \bar{Y}_{HO_2} für die Wirbel-Zündkern-Interaktion auf den größeren Rechengittern.

dient die graue, durchgezogene Iso-Linie, welche aus der 2-exakten Referenzsimulationen mit dem feinen Rechengitter hervorgeht. Das Gitter besteht aus 1024×768 Knotenpunkten und verfügt somit über das halbe Auflösungsvermögen des Referenzgitters. Die Flammstärke δ_F wird hierbei mit 11,72 Knotenpunkten aufgelöst. Trotz der geringeren Auflösung wird die Flammenform insbesondere mit beiden k -exakten Verfahren akkurat vorhergesagt. Das CDS/QUDS-Schema weist hingegen größere Abweichungen in Bereichen auf, in denen die Flammenfront eine starke Krümmung erfährt. Diese Fehler verstärken sich auf dem noch größeren Gitter mit 512 Knotenpunkten in Abbildung 4.29b, auf dem auch mit dem 1-exakten Verfahren etwas größere Abweichungen zur Referenz auftreten. Mit $k = 2$ wird hingegen auch auf diesem Gitter eine sehr gute Übereinstimmung erreicht. Im Zentrum

der Abbildung ist jedoch mit allen drei Verfahren eine zu frühe Vereinigung der beiden getrennten Zündkernregionen zu erkennen.

Abbildung 4.30a zeigt die Verläufe der Enstrophie unter dem Einfluss der größeren räumlichen Auflösung. Die Kurven der Referenzsimulationen sind zum Vergleich in Form eines Konfidentsbandes dargestellt. Mit beiden k -exakten Verfahren lässt sich der Verlauf der Referenzsimulationen bis zum Zeitpunkt $t \approx 0,9(\delta_F/s_L)$ sehr gut reproduzieren, wohingegen das CDS/QUDS-Verfahren im Bereich $0,4(\delta_F/s_L) < t < 0,7(\delta_F/s_L)$ von der Referenzkurve abweicht. Auf dem größeren Gitter in Abbildung 4.30b zeigen alle drei Verfahren größere Abweichungen zur Referenz. Mit dem 1- und 2-exakten Verfahren wird die integrale Enstrophie zwar überwiegend unterschätzt, dennoch wird der Kurvenverlauf mit einer höheren Genauigkeit reproduziert als mit dem konventionellen Verfahren. Ein ähnliches Verhalten zeichnet sich auch für die integralen Kurven des Hydroperoxyl-Radikals in Abbildung 4.31 ab.

4.2.4 Laminare Strömung um eine Kugel

Dieser Testfall dient zur Demonstration des k -exakten Multi-Korrekturverfahrens hinsichtlich der Simulation dreidimensionaler, transientser Strömungen auf vollständig unstrukturierten Gittern. Es wird eine Kugel mit Radius $R = 1$ mm betrachtet, welche von einem Fluid mit einer Reynoldszahl $Re = 300$ umströmt wird. Wie beispielsweise in der Arbeit von Johnson und Patel [123] beschrieben wird, bilden sich bei dieser Reynoldszahl im Nachlauf der Kugel periodische, haarnadelförmige Wirbelstrukturen aus, die es für den Testfall vorherzusagen gilt. Die Simulation erfolgt in einem Rechengebiet der Größe $\Omega \in 120 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 30 \text{ mm}$, welches durch eine Eintritts-, eine Austritts- und vier Symmetrie-Randbedingungen begrenzt ist. Die Kugel wird 20 mm hinter der Eintritts-Randbedingung plziert und ihre Oberfläche wird durch eine Wand-Randbedingung abgebildet. Am Eintritt des Rechengebiets wird eine konstante Geschwindigkeit von $u_1 = 1,5 \text{ m/s}$ vorgegeben und für die kinematische Viskosität des Fluids wird $\nu = 10^{-5} \text{ Pa}$ gewählt.

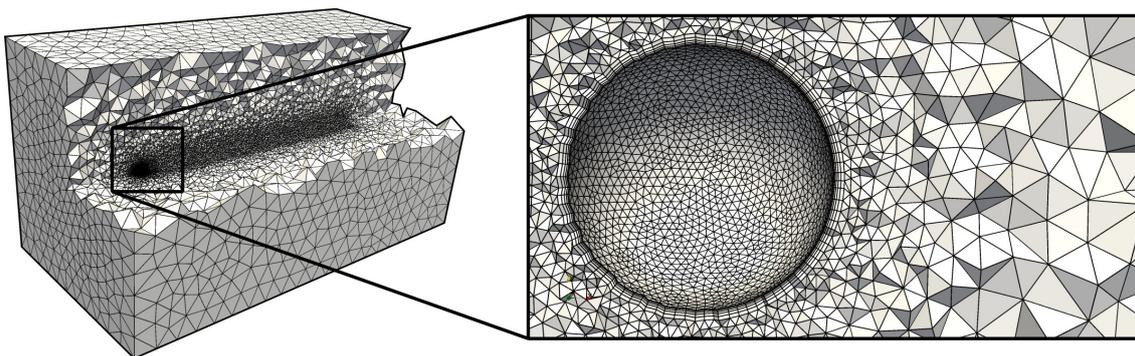


Abbildung 4.32: Rechengitter für die laminar umströmte Kugel mit 139589 Knotenpunkten.

Die Simulation des Testfalls erfolgt auf vier Rechengittern, welche sich hinsichtlich der Anzahl ihrer Knotenpunkte $N_K = \{92381, 139589, 252101, 610159\}$ unterscheiden. Die Gitter bestehen überwiegend aus Tetraeder-Elementen, deren mittlere Elementgröße im Nachlauf der Kugel zwischen 0,2 mm und 0,5 mm variiert. Die Grenzschicht der Kugel wird durch prismatische Elemente diskretisiert,

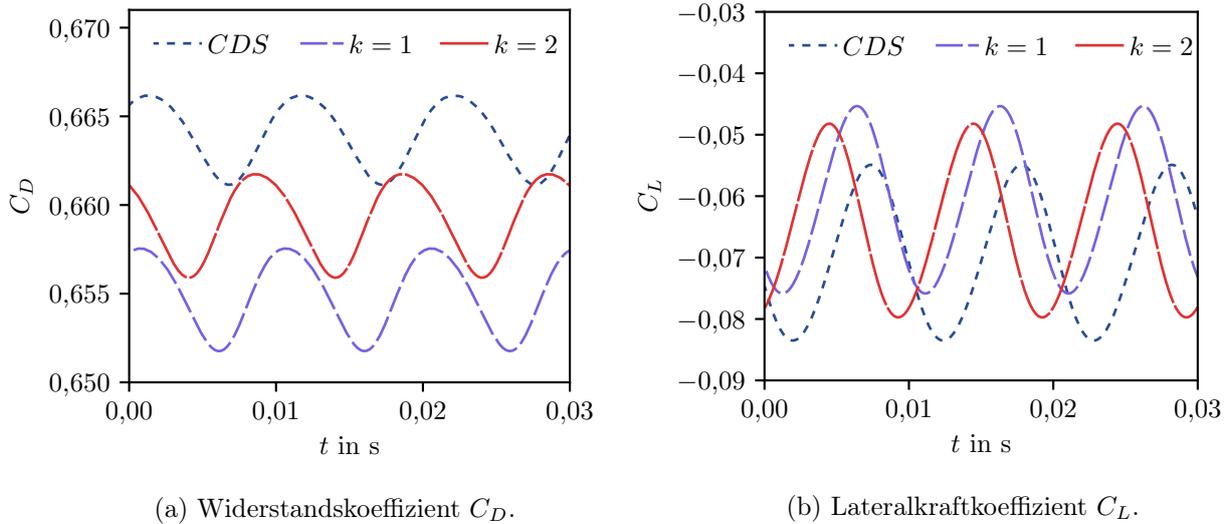
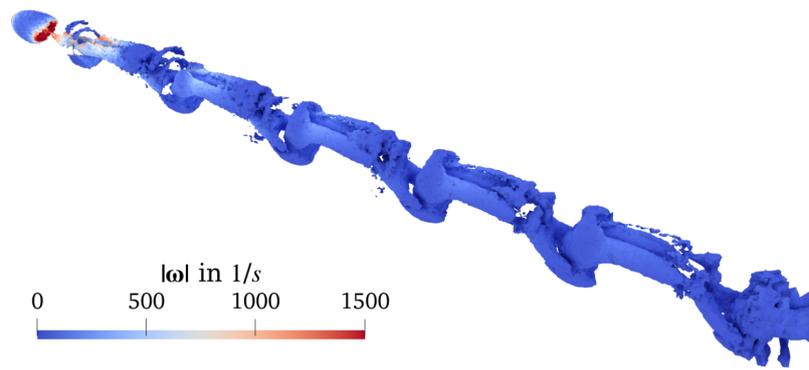
(a) Widerstandskoeffizient C_D .(b) Lateralkraftkoeffizient C_L .

Abbildung 4.33: Zeitliche Koeffizientenverläufe der laminar umströmten Kugel, berechnet auf dem feinsten Gitter mit 610159 Knotenpunkten.

deren wandnähester Abstand zwischen 0,004 mm und 0,010 mm liegt. Die Elemente auf der Kugeloberfläche werden außerdem verfeinert, um räumliche Fehler infolge der Oberflächenkrümmung zu reduzieren. Abbildung 4.32 zeigt einen Schnitt durch das Rechengitter mit 139589 Knotenpunkten. Zu Beginn der Simulationen wird das Geschwindigkeitsfeld mit $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ initialisiert und anschließend erfolgt die Strömungsberechnung für eine Simulationszeit von 0,88 s. Der Zeitschritt wird in Abhängigkeit des Rechengitters so gewählt, dass sich eine CFL -Zahl von $\sigma \approx 0,2$ einstellt. Zur Validierung der Lösung werden die zeitlichen Verläufe des Widerstandskoeffizienten C_D und des Lateralkraftkoeffizienten C_L berechnet, welche sich aus den entsprechenden Oberflächenkräften ergeben. Die laterale Kraftkomponente wird hierbei senkrecht zur Symmetrieebene der Wirbelstrukturen im Nachlauf der Kugel definiert. Die Güte der Simulationen lässt sich anhand der Mittelwerte und Amplituden der beiden Koeffizienten bewerten, sowie durch die Strouhal-Zahl, welche sich aus der Frequenz der Widerstandskraft berechnet. Betrachtet werden die beiden k -exakten Verfahren und das konventionelle CDS-Verfahren. Da für das Strömungsfeld eine glatte Lösung zu erwarten ist, wird keines der drei Verfahren limitiert.

Abbildung 4.33 zeigt den zeitlichen Verlauf der Koeffizienten C_D und C_L für ein ausgewähltes Zeitfenster der Simulationen auf dem feinsten Rechengitter. Der Lateralkraftkoeffizient C_L kennzeichnet sich bei allen drei Diskretisierungsverfahren durch einen nahezu sinusförmigen Verlauf. Des Weiteren ist in allen drei Fällen ein ähnlicher Phasenversatz gegenüber dem Widerstandskoeffizienten C_D zu erkennen. Diese Koeffizientenverläufe stimmen sehr gut mit den Simulationsergebnissen anderer Autoren überein, wie beispielsweise Gassner et al. [83] oder Johnson und Patel [123]. Allerdings unterscheiden sich die drei Schemata deutlich hinsichtlich der Mittelwerte beider Koeffizienten. Ähnlich zum Testfall des laminar umströmten Zylinders weisen die Kurvenverläufe der Verfahren trotz gleicher Startlösung einen Phasenversatz zueinander auf.



(a) CDS-Verfahren.

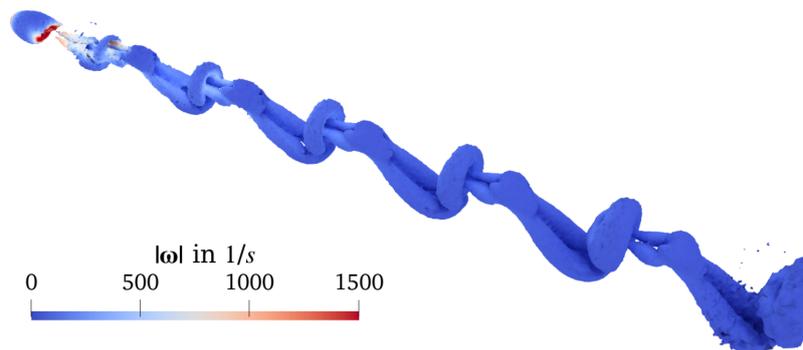
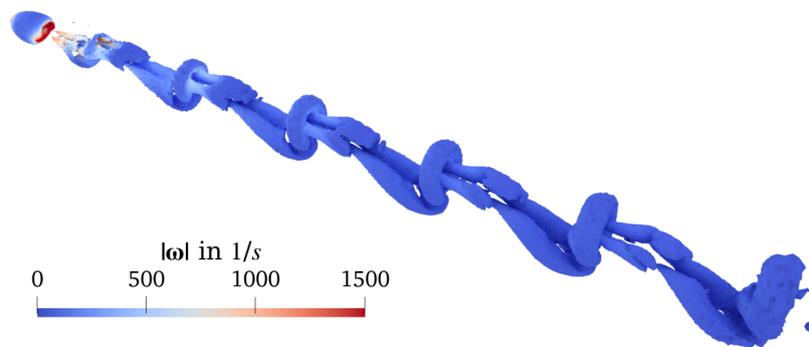
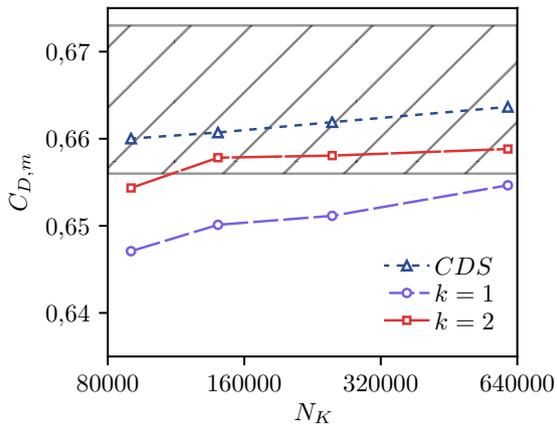
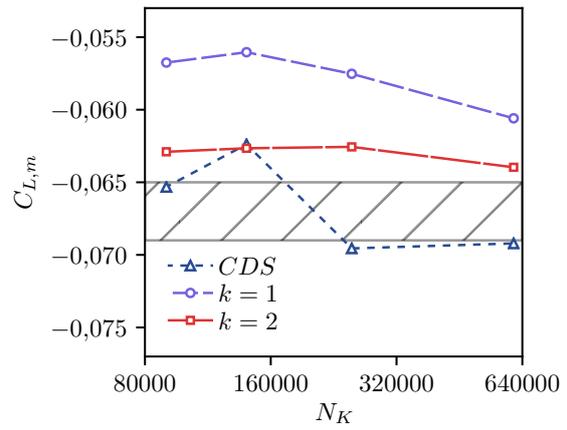
(b) $k = 1$.(c) $k = 2$.

Abbildung 4.34: Wirbelstrukturen der laminar umströmten Kugel, dargestellt durch das λ_2 -Wirbelkriterium für das Rechengitter mit 610159 Knotenpunkte.

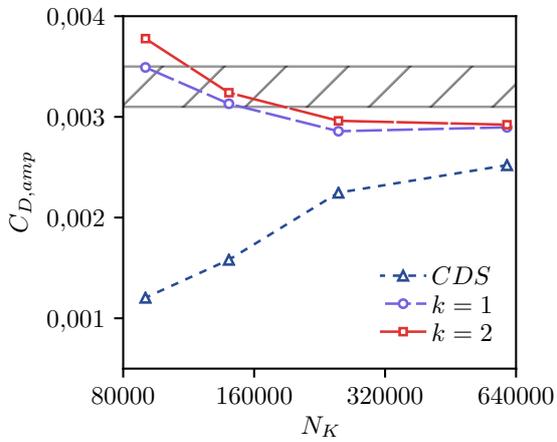
In Abbildung 4.34 sind die haarnadelförmigen Wirbelstrukturen dargestellt, welche sich hinter der Kugel ausbilden. Die Strukturen werden mit dem λ_2 -Kriterium nach Jeong und Hussain [121] visualisiert, für welches ein Wert von $\lambda_2 = -100$ zur Darstellung der Iso-Konturen gewählt wird. Des Weiteren sind die Oberflächen der Iso-Konturen farblich durch den Betrag der Wirbelstärke codiert. Die Ergebnisse entstammen den Simulationen mit den drei genannten Diskretisierungsmethoden und dem feinsten Rechengitter. Es ist zu beobachten, dass die Strömung eine planare Symmetrie um diejenige Ebene beibehält, in welcher der Ablöseprozess hinter der Kugel eingeleitet wird [237]. Insbesondere für das 2-exakte Verfahren stimmt die Form der Haarnadelwirbel sehr gut mit Ergeb-



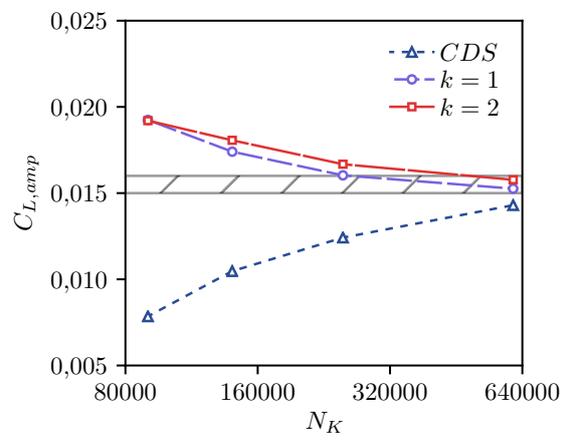
(a) Mittelwert des Widerstandskoeffizienten.



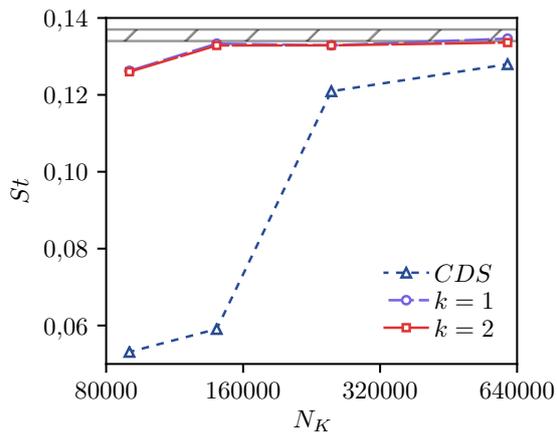
(b) Mittelwert des Lateralkraftkoeffizienten.



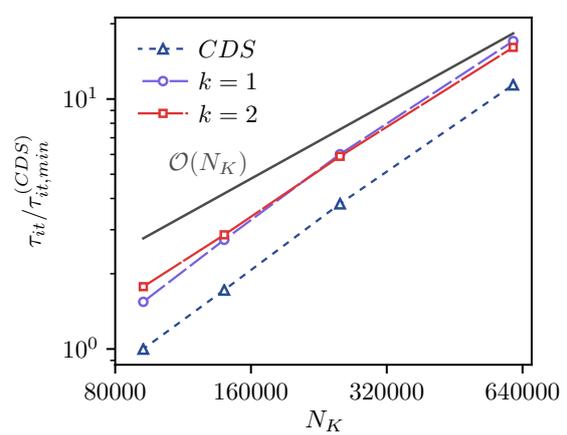
(c) Amplitude des Widerstandskoeffizienten.



(d) Amplitude des Lateralkraftkoeffizienten.



(e) Strouhal-Zahl.



(f) Mittlere Iterationszeit.

Abbildung 4.35: Kenngrößen und mittlere Iterationszeit der laminar umströmten Kugel in Abhängigkeit der Knotenpunktzahl N_K . Die gestrichelten Bereiche umfassen Referenzwerte aus der Literatur [83, 123, 127, 237].

nissen aus der Literatur überein [103, 83, 123, 127, 237]. Mit dem 1-exakten Verfahren lassen sich die Strukturen ähnlich detailliert auflösen und ihre Form bleibt über eine weite Distanzen erhalten. Dies ist nicht der Fall für das konventionelle CDS-Schema, für welches aus dem λ_2 -Kriterium sehr undeutliche und inkohärente Wirbelstrukturen hervorgehen.

Abbildung 4.35 zeigt die Mittelwerte und Amplituden der Koeffizienten C_D und C_L , sowie die Strouhal-Zahl St , welche mit den drei Diskretisierungsverfahren und den vier Rechengittern berechnet werden. Die gestrichelten Bereiche kennzeichnen den Bereich, innerhalb dem die Referenzwerte aus der Literatur bestimmt wurden [83, 123, 127, 237] und dienen zur Bewertung der Simulationsergebnisse. Sie sollen aufzeigen, wie stark die jeweiligen Kenngrößen in der Literatur über den entsprechenden Wertebereich streuen. Die beste Übereinstimmung wird mit dem 2-exakten Verfahren auf dem feinsten Gitter erzielt. Doch auch mit den deutlich gröberen Gittern lassen sich insbesondere die Strouhal-Zahl und die Amplituden $C_{D,amp}$ und $C_{L,amp}$ mit einer hohen Genauigkeit reproduzieren. Ähnliche Ergebnisse stellen sich auch mit dem 1-exakten Verfahren ein, bei dem jedoch etwas höhere Abweichungen in den Mittelwerten des Lateralkraftkoeffizienten $C_{L,m}$ auftreten. Mit dem konventionellen CDS-Verfahren lassen sich mit allen vier Gittern die Mittelwerte mit einer ähnlichen Genauigkeit berechnen, wie mit den beiden k -exakten Verfahren. Auf den beiden gröberen Gittern werden die Amplituden und die Strouhal-Zahl jedoch deutlich unterschätzt. Im Gegensatz dazu lassen sich die Amplituden und die Strouhal-Zahl mit den beiden k -exakten Verfahren auf dem Gitter mit 252101 Knotenpunkten bereits genauer berechnen, als mit dem CDS-Verfahren auf dem feinsten Gitter. In Abbildung 4.35f ist die mittlere Iterationszeit τ_{it} der drei Verfahren dargestellt, welche sich auf den vier verschiedenen Gittern einstellt. Die Daten sind mit der mittleren Iterationszeit $\tau_{it,min}^{(CDS)}$ des CDS-Verfahrens und dem größten Gitter normiert. Die mittleren Iterationszeiten wurden durch separate Simulationsdurchläufe mit sechs Prozessoren bestimmt und aus den Iterationszeiten von 100 Zeitschritten berechnet. Gegenüber dem konventionellen Schema steigt τ_{it} unter Beibehaltung der Knotenpunktzahl und je nach Gitter für $k = 1$ um 50-55 % und für $k = 2$ um 40-80 % an. Mit beiden k -exakten Verfahren lässt sich mit dem Gitter mit $N_K = 252101$ jedoch eine mindestens gleichwertige Güte der Kenngrößen berechnen, wie mit dem CDS-Schema auf dem feinsten Gitter. Dementsprechend kann unter Verwendung des gröberen Gitters die mittlere Iterationszeit mit beiden Verfahren um circa 45 % reduziert werden. Unter Berücksichtigung des größeren Zeitschrittes des gröberen Gitters, lässt die Gesamtrechnzeit mit beiden Verfahren um circa 60 % reduzieren.

4.3 Turbulente Testfälle

In diesem Abschnitt werden drei turbulente Strömungsprobleme zur Validierung des k -exakten Multi-Korrekturverfahrens untersucht. Dies erfolgt zunächst durch zwei nichtreaktive Testfälle, in denen eine turbulente Rohrströmung und ein turbulenter Freistrahler untersucht werden. Abschließend erfolgt die Simulation einer turbulenten H_2 -Luft-Freistrahlerflamme auf einem vollständig unstrukturierten Gitter. Alle Simulationen erfolgen unter Anwendung des in Kapitel 2.2 dargestellten LES-Ansatzes

und mit dem WALE-Modell, um den Einfluss der Feinstrukturen zu modellieren, wobei für alle Simulationen die Modellkonstante $C_W = 0,5$ verwendet wurde.

4.3.1 Turbulente Rohrströmung

Für diesen Testfall werden LES Rechnungen einer turbulenten Rohrströmung durchgeführt, welche sich durch die Reynoldszahl $Re_\tau = u_\tau R/\nu = 180$, den Rohrradius $R = 50$ cm und die Schubspannungsgeschwindigkeit $u_\tau = 3,6$ m/s kennzeichnet. Die niedrige Reynoldszahl birgt die Schwierigkeit, dass sich in dem Testfall eine unphysikalische Relaminarisierung der Strömung einstellen kann, wenn die Simulation durch ein Diskretisierungsverfahren mit einer zu hohen numerischen Dissipation erfolgt [51, 161]. Daher eignet sich dieses Strömungsproblem hervorragend zu Validierung des Multi-Korrekturverfahrens hinsichtlich dem Einfluss der adaptiven numerischen Dissipation. Die Länge des betrachteten Rohres wird mit $L = 10R$ vorgegeben und an beiden Enden werden periodische Randbedingungen aufgeprägt. Die übrige Berandung wird durch eine Wand-Randbedingung modelliert und den Impulsgleichungen wird ein konstanter axialer Druckgradient $\partial p_d/\partial x_1 = 518,4$ Pa/m aufgeprägt, der den Reibungsverlusten entgegenwirkt und eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit induziert. Eine detaillierte Beschreibung des Testfalls ist in den Arbeiten von Eggels et al. [66] und Fukagata und Kasagi [82] zu finden. Des Weiteren werden DNS Ergebnisse von Fukagata und Kasagi für die Bewertung der Simulationsergebnisse herangezogen.

Die Simulationen erfolgen mit drei Rechengittern unterschiedlicher Auflösung und mit den beiden k -exakten Multi-Korrekturverfahren zunächst ohne Limitierung der Rekonstruktionspolynome. Der Einfluss der Limitierung wird im späteren Verlauf dieses Kapitels gesondert betrachtet. Zum Vergleich wird der Testfall mit dem unlimitierten CDS-Verfahren berechnet. Zu Beginn jeder Simulation wird das Geschwindigkeitsfeld mit einer voll ausgebildeten turbulenten Rohrströmung initialisiert. Anschließend erfolgt die Strömungsberechnung für 30 Durchlaufzeiten, um Einflüsse der Startlösung zu eliminieren. Danach werden zeitliche Strömungsfeldstatistiken für einen Zeitraum von 250 Durchflusszeiten erfasst. Diese umfassen das zeitlich gemittelte axiale Geschwindigkeitsfeld $\langle u_{ax} \rangle$ und die gemittelten Geschwindigkeitsfluktuationen $\langle u'_{ax} u'_{ax} \rangle$, $\langle u'_{rad} u'_{rad} \rangle$ und $\langle u'_{tan} u'_{tan} \rangle$. Es hat sich gezeigt, dass sich bei einer statistischen Mittelung der volumetrischen Mittelwerte insbesondere in Wandnähe Abweichungen zu den DNS Ergebnissen ergeben. Aus diesem Grund erfolgt die Berechnung der

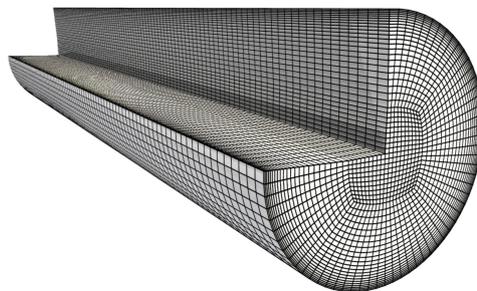


Abbildung 4.36: Rechengitter mit 54665 Knotenpunkten zur Simulation der turbulenten Rohrströmung.

Tabelle 4.3: Eigenschaften der Rechengitter für den Testfall der turbulenten Rohrströmung. Mit N_i wird die Knotenpunktzahl in axialer, radialer und tangentialer Richtung gekennzeichnet und h_i^+ stellen dimensionslose Schrittweiten der wandnähesten Elemente dar.

N_K	N_{rad}	N_{tan}	N_{ax}	h_{rad}^+	h_{tan}^+	h_{ax}^+
54665	21	48	64	2,45	23,54	28,13
200984	33	76	96	1,56	14,88	18,75
496521	45	104	128	1,13	10,88	14,06
Referenz DNS [82]	96	128	256	0,46	8,54	6,79

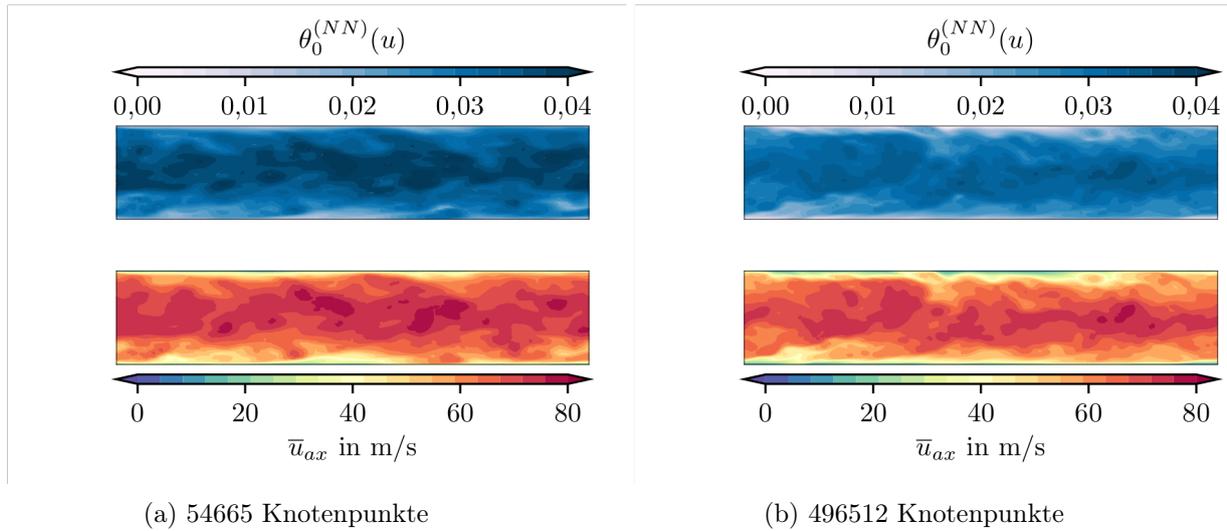


Abbildung 4.37: Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ und instantanes axiales Geschwindigkeitsfeld der turbulenten Rohrströmung, berechnet mit dem 2-exakten Verfahren.

Strömungsfeldstatistiken mit den rekonstruierten Punktwerten der entsprechenden Feldgrößen. Die verwendeten Rechengitter bestehen aus hexaedrischen Elementen, welche im Wandbereich erhöhte Höhen-Seiten-Verhältnisse aufweisen, um eine bessere Auflösung der Grenzschicht zu realisieren. Das größte Rechengitter mit 54665 Knotenpunkten ist exemplarisch in Abbildung 4.36 gezeigt. Die spezifischen Eigenschaften aller drei Rechengitter sind in Tabelle 4.3 dargestellt, zusammen mit den Eigenschaften des DNS-Rechengitters aus der Arbeit von Fukagata und Kasagi [82].

Abbildung 4.37 zeigt den Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$, welcher in Abhängigkeit des instantanen Geschwindigkeitsfeldes mit dem neuronalen Netzwerkmodell des 2-exakten Schemas auf verschiedenen Gittern berechnet wird. Aufgrund der höheren Strömungsgeschwindigkeiten wird eine höhere numerische Dissipation in der Kernströmung des Rohrs durch das Netzwerkmodell eingebracht. Im Gegensatz dazu, wird die Dissipation im wandnahen Bereich deutlich reduziert, da dort das Verfahren infolge der höheren viskosen Kräfte inhärent eine höhere numerische Stabilität aufweist. Der Vergleich beider Rechengitter zeigt, dass infolge der reduzierten Auflösung auf dem gröberen Gitter höhere Werte für $\theta_0^{(NN)}$ aus dem Netzwerkmodell hervorgehen. Dies ist insbesondere im Kernbereich der Strömung zu erkennen.

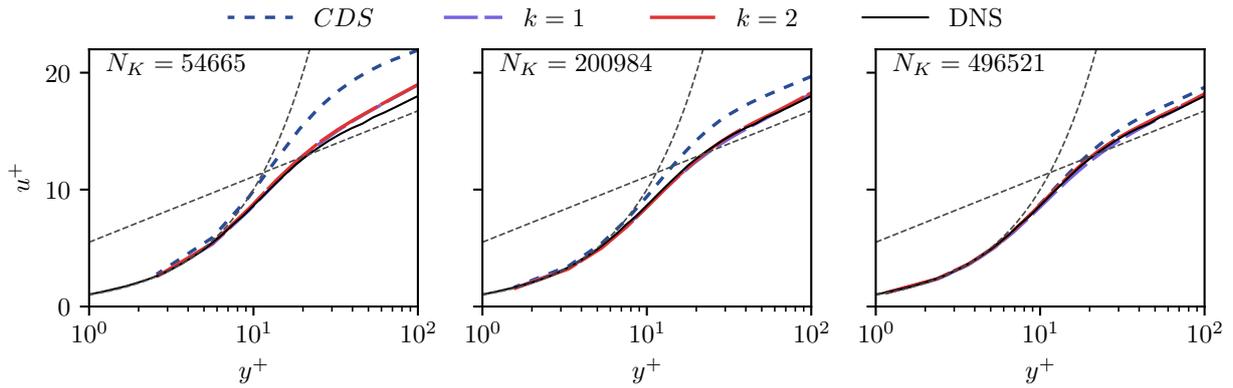


Abbildung 4.38: Normiertes Profil der gemittelten axialen Geschwindigkeit $u^+ = \langle u_{ax} \rangle / u_\tau$ über der dimensionslosen Wandkoordinate $y^+ = yu_\tau / \nu$ für den Testfall der turbulenten Rohrströmung. Die gestrichelten Linien kennzeichnen das universelle Wandgesetz $u^+ = y^+$ und das logarithmischen Wandgesetz $u^+ = 5,5 + \ln(y^+)/0,41$. Das DNS-Profil entstammt der Arbeit von Fukagata und Kasagi [82].

Abbildung 4.38 zeigt die normierten Profile der mittleren axialen Geschwindigkeit $u^+ = \langle u_{ax} \rangle / u_\tau$ für die drei Rechengitter und die drei Diskretisierungsverfahren. Die Profile sind über der dimensionslosen Wandkoordinate $y^+ = yu_\tau / \nu$ aufgetragen, wobei y dem Abstand zur Wand entspricht. Die gestrichelten Linien kennzeichnen das universelle Wandgesetz in der viskosen Unterschicht für $y^+ < 5$ und das logarithmische Wandgesetz für $y^+ > 30$. Beide Bereiche werden von der Übergangsschicht ($5 < y^+ < 30$) getrennt [198, 216]. Mit dem CDS-Verfahren wird die Geschwindigkeit in der Übergangsschicht und in der Region des logarithmischen Wandgesetzes im Vergleich zu den DNS Ergebnissen deutlich überschätzt. Auch auf dem feinsten Rechengitter lässt sich das DNS-Profil mit diesem Verfahren nicht vollständig reproduzieren. Mit den beiden k -exakten Verfahren wird im Gegensatz dazu bereits auf dem Gitter mit 200984 Knotenpunkten eine direkte Übereinstimmung zu den DNS-Ergebnissen erreicht. Beide k -exakten Verfahren erzielen zudem auf dem größten Gitter eine ähnlich gute Übereinstimmung zur Referenz, wie das konventionellen Verfahren auf dem feinsten Gitter. In Abbildung 4.39 sind die Strömungsprofile der gemittelten Fluktuationen $\langle u'_{ax} u'_{ax} \rangle$, $\langle u'_{rad} u'_{rad} \rangle$ und $\langle u'_{tan} u'_{tan} \rangle$ dargestellt. Alle drei DNS-Profile lassen sich mit den k -exakten Verfahren auf dem feinsten Gitter mit einer sehr hohen Übereinstimmung reproduzieren. Die axialen Fluktuationen zeigen sogar bereits auf dem größten Gitter sehr geringe Abweichungen zu den Referenzdaten. Mit dem konventionellen Verfahren lassen sich lediglich die axialen Fluktuationen auf dem feinsten Gitter ausreichend genau berechnen, wohingegen die radialen und tangentialen Fluktuationen auf allen Gittern Unterschiede zu den DNS-Profilen aufweisen. Die Profile, die mit beiden k -exakten Verfahren auf dem Gitter mit $N_K = 200984$ hervorgehen haben außerdem eine ähnliche Übereinstimmung mit den DNS-Daten, wie die Profile des CDS-Verfahrens auf dem feinsten Gitter.

Um die drei Verfahren hinsichtlich ihrer Performance zu bewerten wird die Abweichung der Profile auf den unterschiedlichen Gittern in Abbildung 4.38 und 4.39 zu den jeweiligen DNS-Profilen bestimmt und als L^2 -Fehlernorm über der mittleren Iterationszeit τ_{it} dargestellt. Die Ergebnisse sind in

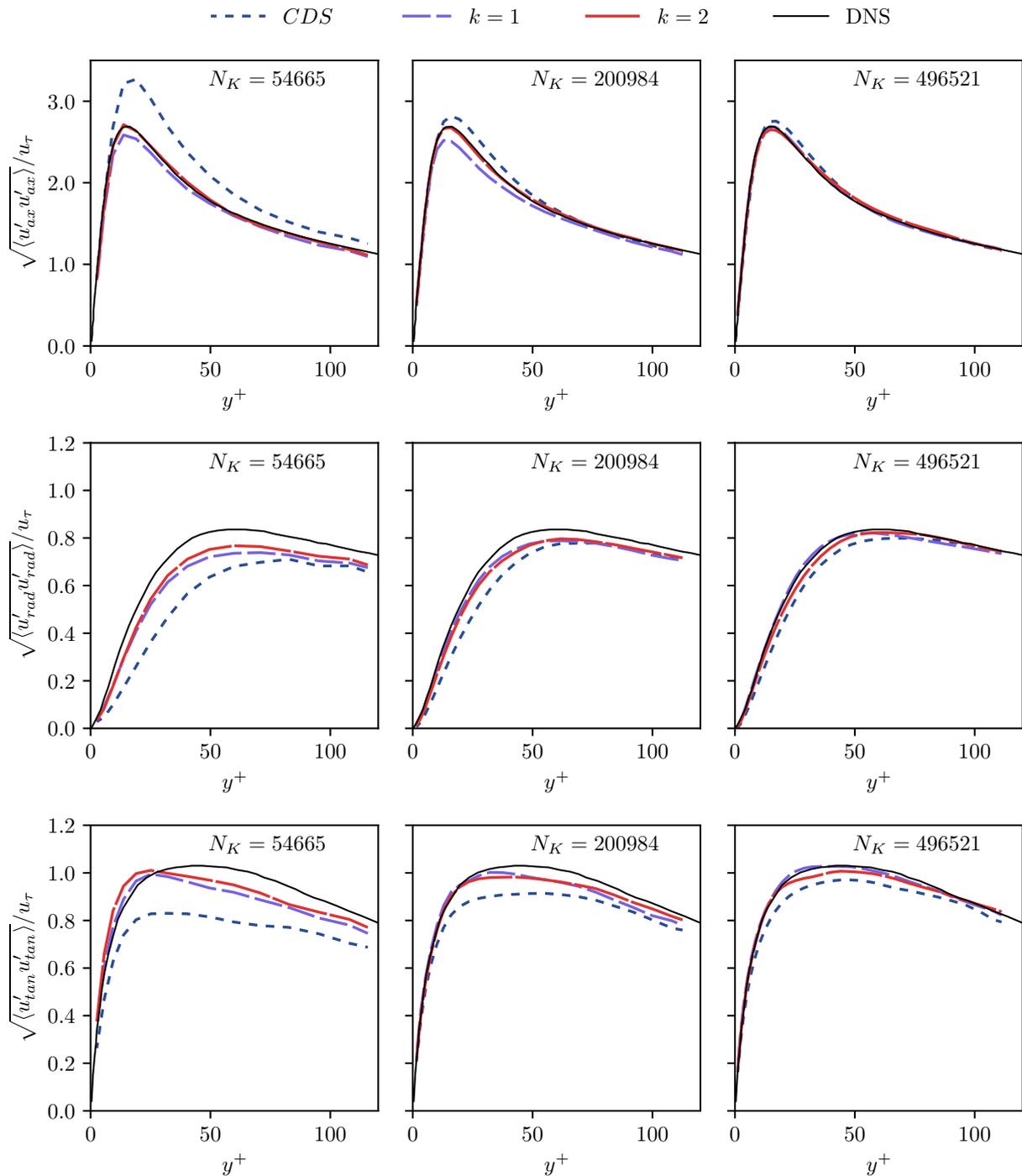


Abbildung 4.39: Normierte Profile der axialen, radialen und tangentialen Fluktuationen $\langle u'_{ax} u'_{ax} \rangle$, $\langle u'_{rad} u'_{rad} \rangle$ und $\langle u'_{tan} u'_{tan} \rangle$ für den Testfall der turbulenten Rohrströmung. Die DNS-Profile entstammen der Arbeit von Fukagata und Kasagi [82].

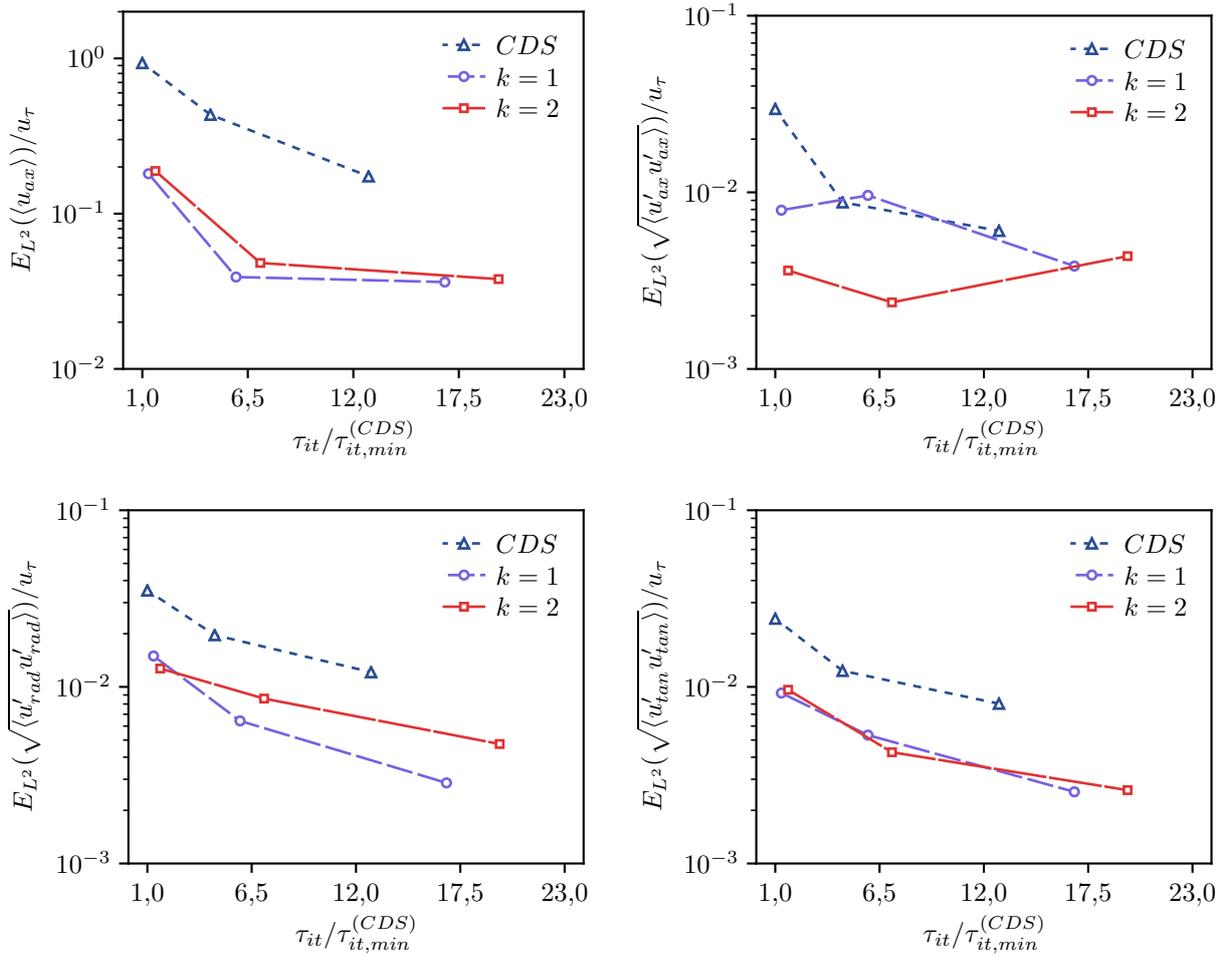


Abbildung 4.40: L^2 -Fehlernorm der Strömungsprofile der turbulenten Rohrströmung auf den unterschiedlichen Gittern im Bezug auf die DNS-Referenzprofile. Die Fehler sind aufgetragen über der normierten mittleren Iterationszeit $\tau_{it}/\tau_{it,min}^{(CDS)}$.

Abbildung 4.40 zeigt. Die gemittelten Iterationszeiten gehen aus separaten Simulationsdurchläufen mit zwei Prozessoren hervor und werden aus 100 Iterationszeiten berechnet. Die Iterationszeiten werden mit $\tau_{it,min}^{(CDS)}$ normiert, was der mittleren Iterationszeit des CDS-Verfahrens auf dem größten Gitter entspricht. Da die Iterationszeiten direkt mit der Knotenpunktanzahl in Verbindung stehen, lassen sich aus Abbildung 4.40 ebenfalls die drei Rechengitter zu den L^2 -Fehlernormen zuordnen. Mit dem 1-exakten Verfahren beträgt der durchschnittliche Anstieg der mittleren Iterationszeit im Vergleich zum konventionellen Schema circa 30% und mit dem 2-exakten Verfahren circa 65%. Es zeigt sich jedoch, dass sich mit beiden k -exakten Verfahren auf dem größten Gitter ähnliche oder sogar geringere Fehlernormen berechnen lassen als mit dem CDS-Schema und dem feinsten Gitter. Um eine gleichwertige oder sogar bessere Lösung zu erzielen als mit dem CDS-Verfahren, lässt sich dadurch die Rechenzeit mit $k=2$ um 86% und mit $k=1$ um 89% reduzieren. Wird berücksichtigt, dass sich unter Beibehaltung der CFL-Zahl der Zeitschritt auf diesem Gitter um den Faktor zwei

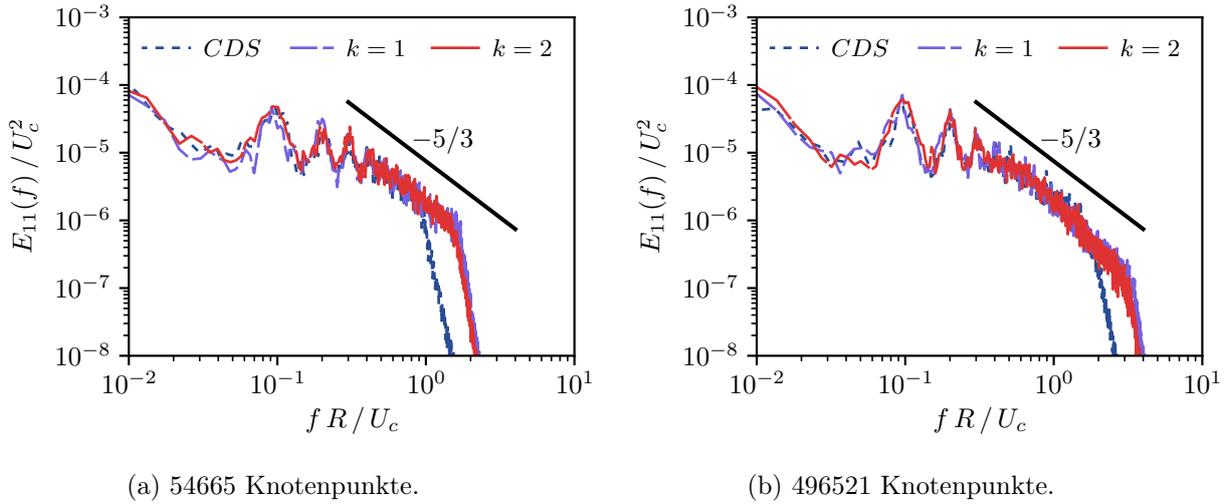


Abbildung 4.41: Eindimensionale Energiespektren $E_{11}(f)$ der axialen Geschwindigkeit für den Testfall der turbulenten Rohrströmung.

vergrößern lässt, so kann mit dem 1-exakten Verfahren ein Rechenzeitersparnis von 95 % und mit dem 2-exakten Verfahren 93 % erzielt werden.

Abbildung 4.41 zeigt eindimensionale Energiespektren der axialen Geschwindigkeit $E_{11}(f)$, welche definiert sind durch [198]

$$E_{11}(f) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle u_1(t)u_1(t + \tau) \rangle \exp(-2\pi I f \tau) d\tau. \quad (4.19)$$

Die Spektren werden durch die zeitlichen Signale von u_{ax} berechnet, die im Zentrum des Rohrs an der axialen Position $x_1 = 5R$ aufgenommen werden. Die Werte werden mit der gemittelten axialen Geschwindigkeit auf der Hauptachse U_c normalisiert. Abbildung 4.41a zeigt die Spektren, welche auf dem groben Gitter mit $N_K = 54665$ berechnet werden. Alle drei Schemata weisen einen ausgeprägten Abfall mit einer Steigung von $-5/3$ auf. Dies entspricht dem Inertialbereich des Spektrums, welcher durch einen konstanten Energietransfer von großen zu kleinen turbulenten Skalen charakterisiert ist [198]. Mit dem CDS-Verfahren erstreckt sich der Inertialbereich auf dem groben Gitter bis zu einer Grenzfrequenz $f \cdot (R/U_c) \approx 0,8$, wohingegen die beiden k -exakten Verfahren den Bereich bis zur Grenzfrequenz $f \cdot (R/U_c) \approx 1,5$ auflösen. Das Verhältnis dieser beiden Grenzfrequenzen entspricht etwa dem Wert zwei, was konsistent zu dem Verhältnis der jeweiligen Grenzfrequenzen $\omega_{j,c}$ in Abbildung 3.7 ist. Ein Unterschied zwischen dem 1- und 2-exakten Verfahren hinsichtlich dieses Auflösungsvermögens lässt sich nicht erkennen. Es sei zu erwähnen, dass die Auflösung des Inertialbereichs mit den k -exakten Verfahren stark durch den Kontrollparameter θ beeinflusst wird. Zu hohe Werte bewirken eine Verringerung der Grenzfrequenz infolge der höheren Dissipation. Eine zu geringe Dissipation führt hingegen dazu, dass sich Fehlerartefakte im Spektrum einstellen. Letzteres tritt beispielsweise ein, wenn für die Bestimmung der Netzwerk-Koeffizienten auf den zusätzlichen SGD-Trainingsschritt verzichtet wird [223]. Abbildung 4.41b zeigt die Spektren, die auf dem feinsten

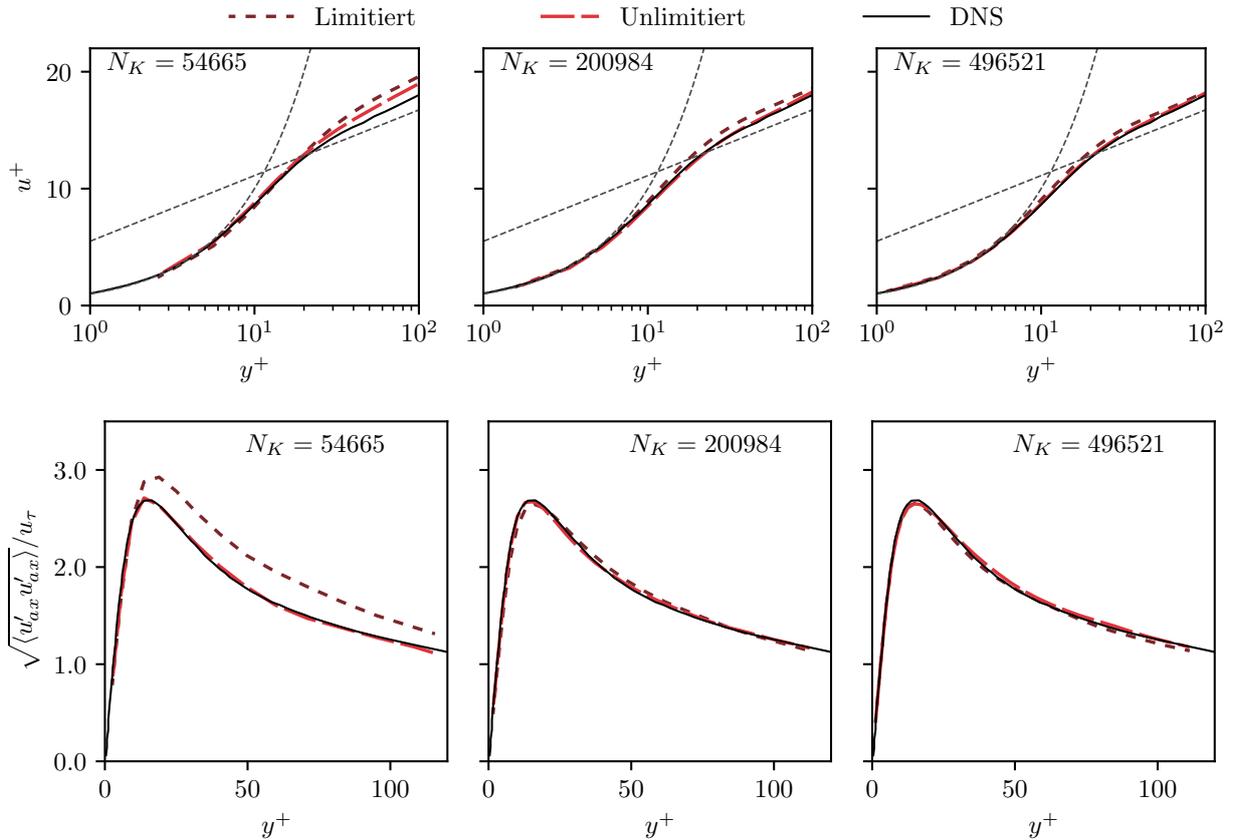
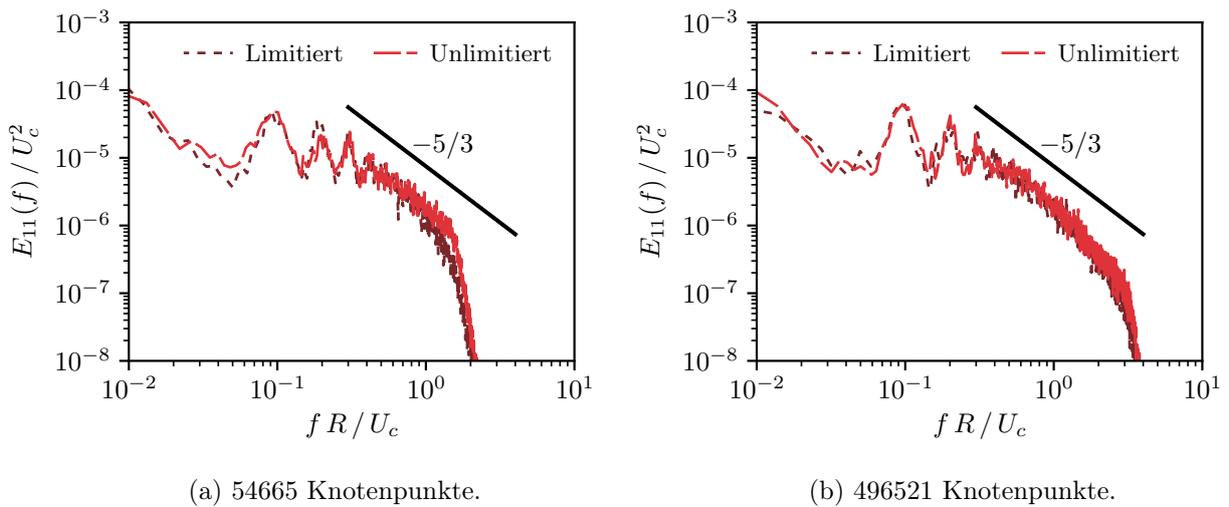


Abbildung 4.42: Normierte Profile der gemittelten axialen Geschwindigkeit $u^+ = \langle u_{ax} \rangle / u_\tau$ und der axialen Fluktuationen $\langle u_{ax} u_{ax} \rangle$ für den Testfall der turbulenten Rohrströmung, berechnet mit dem limitierten 2-exakten Verfahren. Die DNS-Profile entstammen der Arbeit von Fukagata und Kasagi [82].



(a) 54665 Knotenpunkte.

(b) 496521 Knotenpunkte.

Abbildung 4.43: Eindimensionale Energiespektren $E_{11}(f)$ der axialen Geschwindigkeit für den Testfall der turbulenten Rohrströmung für das limitierte 2-exakte Verfahren.

Gitter berechnet werden. Der Inertialbereich des Spektrums wird mit allen drei Verfahren zu höheren Grenzfrequenzen hin aufgelöst, wobei sich ähnliche Verhältnisse der Grenzfrequenzen zwischen CDS und k -exakten Verfahren einstellen, wie auf dem groben Gitter. Es ist außerdem zu erkennen, dass das CDS-Verfahren auf dem feinen Gitter eine ähnliche Grenzfrequenz aufweist, wie die beiden k -exakten Verfahren auf dem groben Gitter.

Abschließend wird untersucht, wie sich die Limitierung der k -exakten Rekonstruktionspolynome auf die Güte der Lösung auswirkt. Die Ergebnisse werden im Folgenden nur für das 2-exakte Schema dargestellt, da sie sich nur geringfügig vom 1-exakten Verfahren unterscheiden. Abbildung 4.42 zeigt die Profile der mittleren axialen Geschwindigkeit und der gemittelten axialen Fluktuationen. Auf dem größten Gitter werden beide Größen durch das limitierte Verfahren im Kernbereich der Strömung stärker überschätzt als ohne Limitierung. Unter Verfeinerung des Gitters nimmt dieser Effekt deutlich ab, sodass sich die DNS Ergebnisse auf dem feinsten Rechengitter mit sehr hoher Übereinstimmung reproduzieren lassen. Die Abweichungen auf den größeren Gittern lassen sich dadurch erklären, dass der Kontrollparameter $\theta_0^{(NN)}$ im limitierten Verfahren neben den Parametern σ und $1/Re_h$ auch durch die Limitervariablen Ψ_u und Ψ_d berechnet wird. Für den Fall, dass die Limitierung aktiviert wird, beispielsweise infolge von wandnahen, unteraufgelösten Gradienten, wird durch das Netzwerkmodell zusätzliche numerische Dissipation zur Stabilisierung eingebracht. Auf dem feinsten Gitter ist die Auflösung ausreichend fein, sodass hier die Limitierung nicht aktiviert wird. Die Limitierung schlägt sich auch zu einem gewissen Maß im Energiespektrum nieder, was in Abbildung 4.43 dargestellt ist. Auf dem groben Gitter wird der Inertialbereich des Spektrums in der limitierten Simulation bis zu einer etwas geringeren Grenzfrequenz aufgelöst, was auf dem feineren Gitter jedoch nicht der Fall ist.

4.3.2 Turbulenter Freistrah

Für diesen Testfall wird die Strömung eines turbulenten Freistrahls mittels LES berechnet. Zur Demonstration des Multi-Korrekturverfahrens erfolgen die Simulationen auf vollständig unstrukturierten Gittern. Der betrachtete Strahl strömt durch eine Düse mit Durchmesser D mit einer Geschwindigkeit U_{Strahl} in das Rechengebiet und wird von einem Mantelstrom mit der Geschwindigkeit U_{Mantel} umgeben. Hierfür wird das folgende Geschwindigkeitsprofil am Eintritt des Rechengebiets vorgegeben [23]

$$u(r) = U_{\text{Mantel}} + \frac{U_{\text{Strahl}}}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{D - 2r}{4\delta_m} \right) \right], \quad (4.20)$$

wobei $\delta_m = D/20$ die Impulsverlustdicke darstellt. Die Parameter des Testfalls werden so gewählt, dass sich eine Reynoldszahl $Re = 10000$ einstellt, welche mit dem Durchmesser $D = 4,3$ mm und der Geschwindigkeitsdifferenz $\Delta U = 35$ m/s zwischen U_{Strahl} und U_{Mantel} gebildet wird. Außerdem wird das Verhältnis $\Delta U / (U_{\text{Strahl}} + U_{\text{Mantel}}) = 0,99$ zwischen der Strahl- und Mantelstromgeschwindigkeit vorgegeben. Zur Validierung der Simulation stehen detaillierte experimentelle Daten von Wygnanski und Fiedler [264] oder Panchapakesan und Lumley [185] zur Verfügung. Des Weiteren sind in

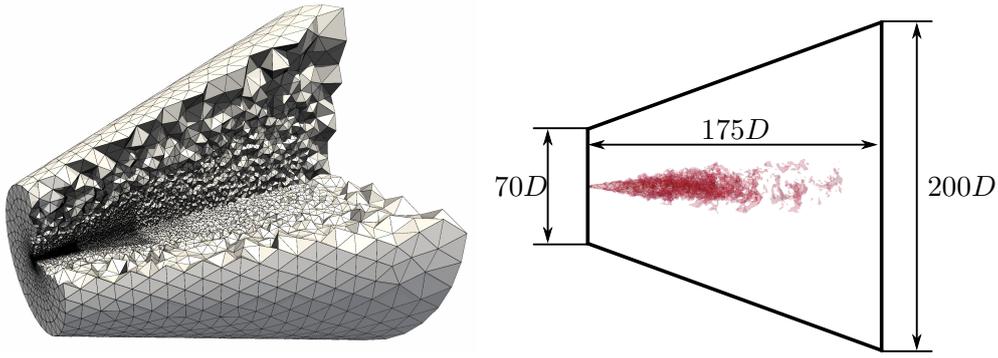


Abbildung 4.44: Rechennetz für den Testfall des turbulenten Freistrahls mit 147811 Knotenpunkten (links) und entsprechende Abmessungen des Rechengebiets (rechts).

der Literatur zahlreiche Arbeiten zu finden, in denen ebenfalls der Freistrahls bei der genannten Reynoldszahl betrachtet wird [23, 91, 126, 144, 183].

Eine Besonderheit des Testfalls stellt die Transition des vorgegebenen Geschwindigkeitsfeldes in den selbstähnlichen Bereich dar. Dieser kennzeichnet sich durch ein Gleichgewicht zwischen der von der Hauptströmung erzeugten turbulenten kinetischen Energie und der viskosen Dissipation der kleinsten Skalen [91, 112]. Die Strömungsprofile des Freistrahls lassen sich infolgedessen auf einer einzigen Kurve über der Ähnlichkeitsvariable η darstellen [198], welche definiert ist durch

$$\eta = \frac{r}{x_1 - x_t} \quad \text{mit} \quad r = \sqrt{x_2^2 + x_3^2}. \quad (4.21)$$

Der Punkt x_t stellt den virtuellen Ursprung des selbstähnlichen Bereichs dar [198]. Die Region, innerhalb der die Transition in die Selbstähnlichkeit erfolgt, wird als Übergangsbereich bezeichnet und findet sich stromabwärts der Einströmdüse bei $0 \leq x_1/D \leq 25$ [198]. Ein umfassender Überblick über die Theorie zur Selbstähnlichkeit turbulenter Freistrahls ist beispielsweise in den Arbeiten von Lipari und Standsby [142] oder Pope [198] zu finden.

Abbildung 4.44 zeigt das betrachtete Rechengebiet des Testfalls sowie ein dafür generiertes Rechengitter mit 147811 Knotenpunkten. Insgesamt werden die LES auf vier Rechengittern unterschiedlicher Auflösungen durchgeführt. Die Selbstähnlichkeit der Strömung wird zur Abschätzung der Schrittweite h berücksichtigt, sodass die Elemente mit zunehmendem Abstand zum Einlass und zur Hauptachse des Strahls anwachsen. Zu diesem Zweck werden die longitudinalen und lateralen integralen Längenskalen L_{11} und L_{22} im selbstähnlichen Bereich zu $L_{11} \approx 0,038x_1 + 0,035r$ und $L_{22} \approx 0,016x_1 + 0,015r$ approximiert. Diese Relationen wurden aus experimentellen Daten von Wygnanski und Fiedler [264] bestimmt. In der Nähe der Düse und im Übergangsbereich der Strömung wird die Elementgröße in Abhängigkeit des Eintrittsdurchmessers D bestimmt. Tabelle 4.4 zeigt für alle vier Gitter die entsprechenden Verhältnisse von D/h im Übergangsbereich und die Verhältnisse von L_{11}/h und L_{22}/h in der selbstähnlichen Region. Jede Simulation wird mit der Lösung des vollständig ausgebildeten Freistrahls initialisiert und für 10 Durchlaufzeiten simuliert, um sämtliche Einflüsse der Startlösung vernachlässigen zu können. Anschließend erfolgt eine zeitliche Mittelung

Tabelle 4.4: Eigenschaften der Rechengitter für den Testfall des turbulenten Freistrahls.

Bezeichnung	Knotenpunkte	Tetraeder	Übergangszone		Selbstähnlicher Bereich	
			D/h	L_{11}/h	L_{22}/h	
150k	147811	874125	3,5	1,8	0,8	
260k	257744	1528089	4,4	2,3	1,0	
450k	453878	2696141	5,5	2,8	1,2	
800k	816944	4858854	6,9	3,5	1,5	

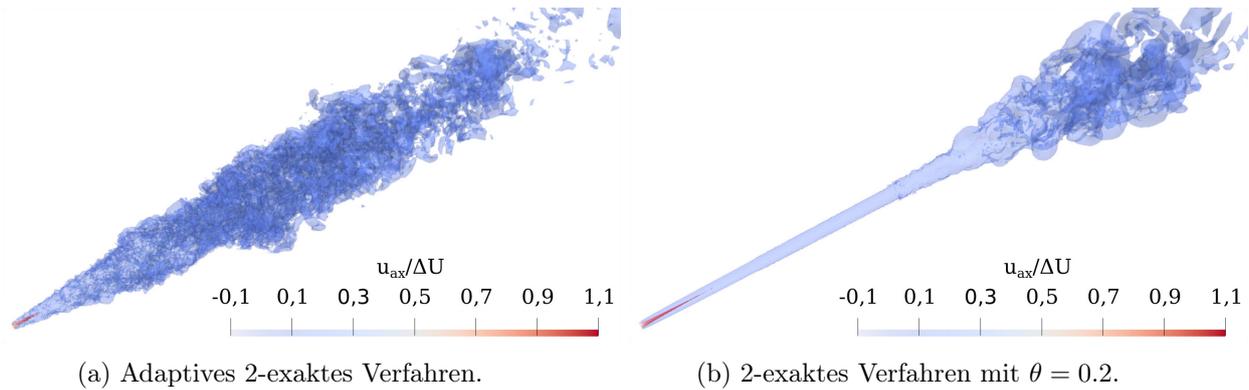


Abbildung 4.45: Einfluss des Kontrollparameters θ auf die LES des turbulenten Freistrahls. Dargestellt sind Iso-Konturen der skalierten Wirbelstärke mit $|\omega|(x_1/\Delta U) = 2$, welche farblich durch die normierte instantane Axialgeschwindigkeit $u_{ax}/\Delta U$ codiert sind. Die Ergebnisse gehen aus dem 2-exakten Verfahren und dem Rechengitter mit 816944 Knotenpunkten hervor.

des Strömungsfeldes für weitere 40 Durchlaufzeiten des Freistrahls, um somit die zeitlichen Statistiken der Strömungsgrößen zu berechnen. Die Zeitschritte werden auf den jeweiligen Gittern so gewählt, dass sich stets eine CFL-Zahl von $\sigma \approx 0,3$ einstellt. Für die beiden k -exakten Verfahren wird in diesem Testfall keine Limitierung der Rekonstruktionspolynome unternommen.

Abbildung 4.45 zeigt die Iso-Konturen der skalierten Wirbelstärke $|\omega| \cdot (x_1 \Delta U) = 2$. Das Ergebnis auf der linken Seite geht aus der Simulation mit dem feinsten Gitter und dem 2-exakten Verfahren mit der adaptiven Berechnung des Kontrollparameters θ hervor. Der Übergangsbereich in die Selbstähnlichkeit ist anhand der kohärenten Strukturen im Bereich des Eintritts zu beobachten. Mit zunehmendem Abstand zum Eintritt bildet sich die selbstähnliche Region aus, was anhand der gefalteten, turbulenten Strukturen zu erkennen ist. Ähnliche Verläufe der skalierten Wirbelstärke sind auch für das 1-exakte Schema mit adaptiver Berechnung von θ sowie für das konventionelle CDS-Verfahren zu erkennen, welche nicht dargestellt sind. Dementsprechend verfügen die genannten Verfahren über eine ausreichend geringe numerische Dissipation, sodass sich der Entstehungsprozess turbulenter Strukturen akkurat abbilden lässt. In Abbildung 4.45b ist hingegen der Einfluss einer zu hohen numerischen Dissipation dargestellt. Dieses Ergebnis wird ebenfalls mit dem feinsten Gitter und dem 2-exakten Verfahren generiert, jedoch mit einem konstanten Kontrollparameter von $\theta = 0,2$ im gesamten Rechengebiet. Die daraus resultierende hohe Dissipation führt zu einer starken Dämpfung der turbulenten Fluktuationen im Übergangsbereich des Strahls. Dadurch bildet

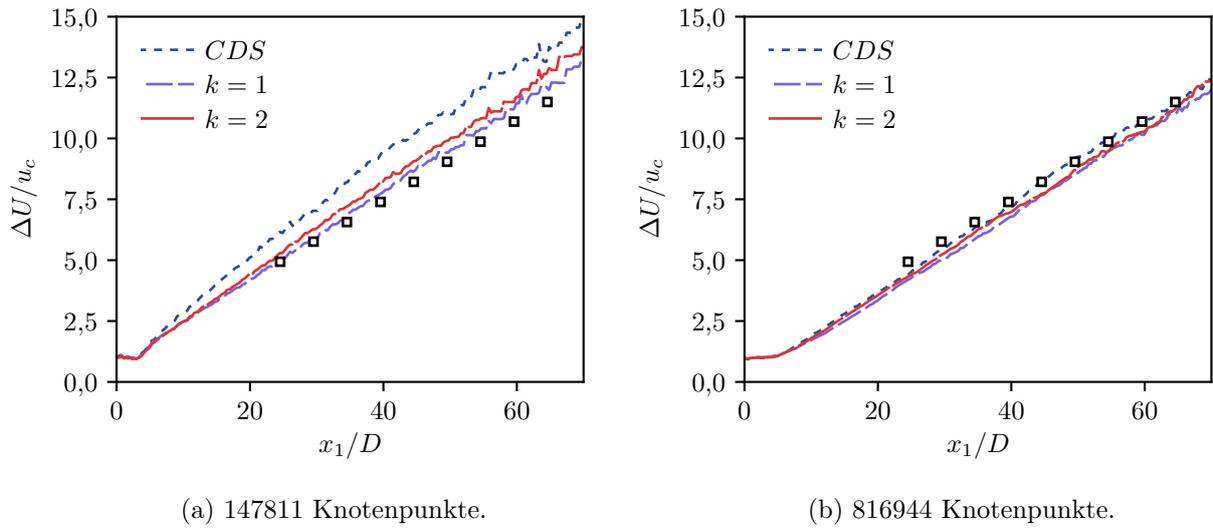
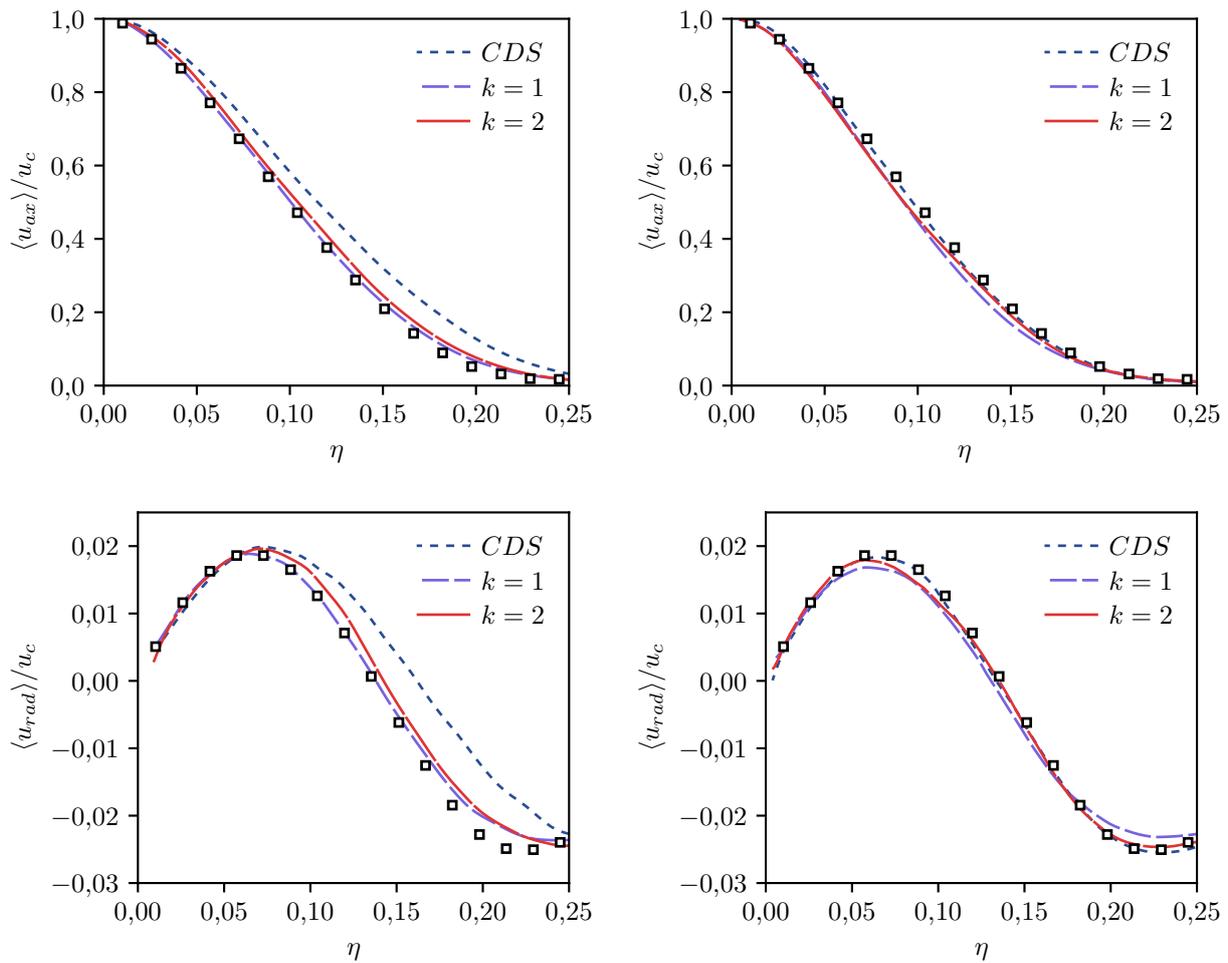


Abbildung 4.46: Profile der inversen Hauptachsengeschwindigkeit $\Delta U/u_c$ des turbulenten Freistrahls, berechnet auf zwei verschiedenen Rechengittern. Zum Vergleich dienen experimentellen Daten von Panchapakesan und Lumley [185].

sich die turbulente Strömung erst viel weiter stromabwärts und nur in sehr groben und kohärenten Strukturen aus. Dies zeigt deutlich den Vorteil des adaptiven Ansatzes, für welchen die numerische Dissipation in ausreichendem Maße und automatisch reduziert wird, so dass sich turbulente Strukturen physikalisch ausbilden können.

Abbildung 4.46 zeigt die normierte inverse Geschwindigkeit $\Delta U/u_c$ auf der Hauptachse des Freistrahls, berechnet mit dem größten und dem feinsten Rechengitter. Zur Validierung der Ergebnisse dienen experimentelle Messdaten aus der Arbeit von Panchapakesan und Lumley [185] bei $Re = 11000$, welche durch die quadratischen Symbole dargestellt sind. Die experimentellen Daten sind zur besseren Vergleichbarkeit um $8D$ in axialer Richtung verschoben. Die Kurven kennzeichnen sich durch einen anfänglich horizontalen Verlauf, welcher den Übergangsbereich des Freistrahls darstellt, sowie durch einen Bereich linearen Anstiegs, in welchem das selbstähnliche Regime herrscht. Die Geschwindigkeitsprofile beider k -exakten Verfahren zeigen auf dem groben Rechengitter eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Mit dem CDS-Verfahren wird im Gegensatz dazu ein zu starker Abfall der Hauptachsengeschwindigkeit berechnet, was sich in einer falschen Steigung des Profils äußert. Für alle drei Verfahren ist zu erkennen, dass sich die Transition in den selbstähnlichen Bereich bei Verfeinerung des Gitters stromabwärts verlagert. Dieser Effekt kann sich durch parasitäre Fehlermoden erklären lassen, welche durch die unreguläre Gitterstruktur im Bereich der hohen Geschwindigkeitsgradienten entstehen. Diese treten auf dem feineren Gitter infolge der höheren Auflösung in den Hintergrund, wodurch das initiale Profil des Freistrahls über eine längere Distanz erhalten bleibt.

In Abbildung 4.47 sind Profile der gemittelten axialen und radialen Geschwindigkeit des Freistrahls dargestellt, welche über der Ähnlichkeitsvariable η aufgetragen sind. Zur Berechnung der Daten werden die Profile von $\langle u_{ax} \rangle / u_c$ und $\langle u_{rad} \rangle / u_c$ ähnlich zu der Arbeit von Bogey et al. [23]

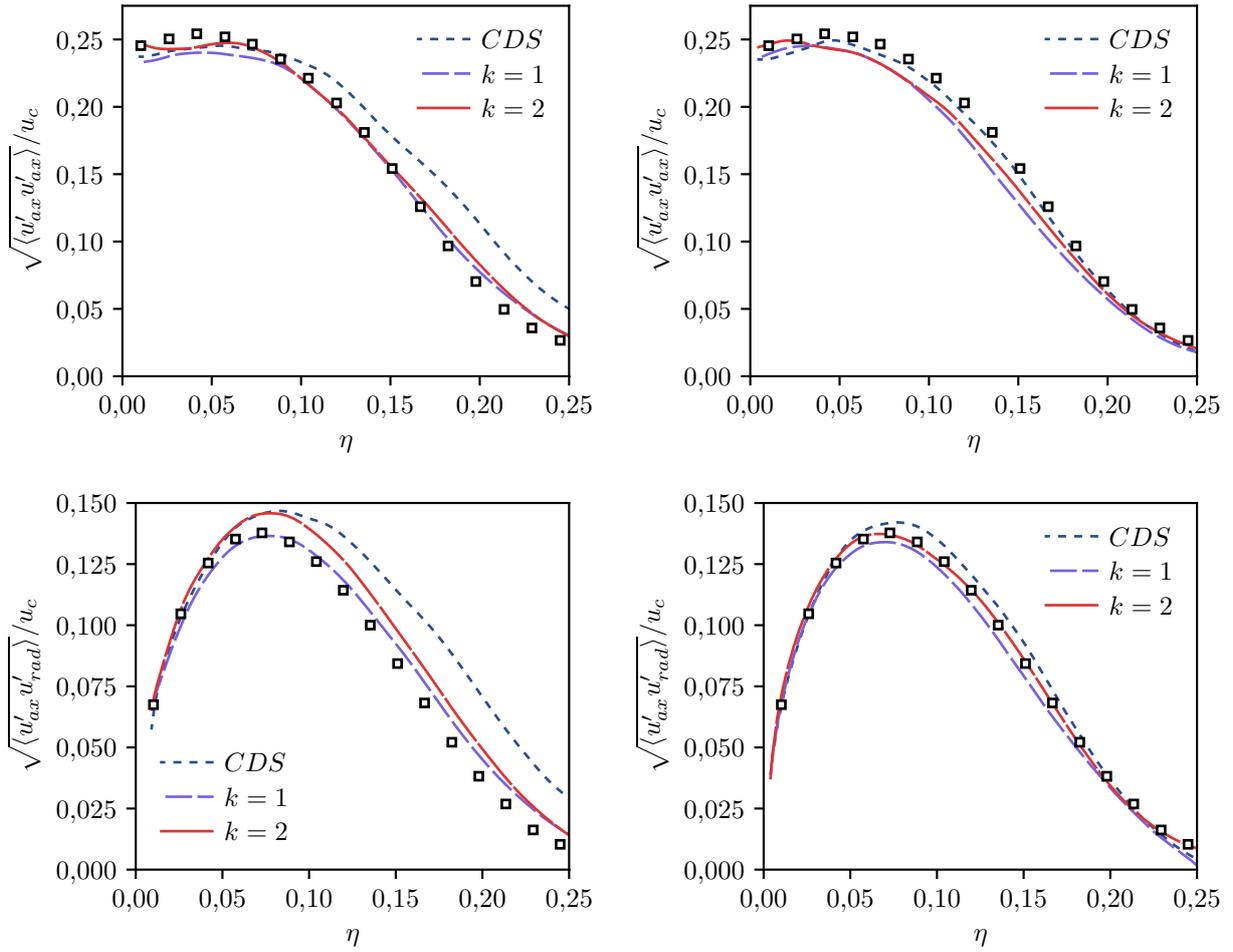


(a) 147811 Knotenpunkte.

(b) 816944 Knotenpunkte.

Abbildung 4.47: Profile der gemittelten axialen und radialen Geschwindigkeit $\langle u_{ax} \rangle / u_c$ und $\langle u_{rad} \rangle / u_c$ des turbulenten Freistrahls. Zum Vergleich dienen experimentellen Daten von Panchapakesan und Lumley [185].

über den Bereich $50 \leq x_1/D \leq 70$ gemittelt. Die beiden k -exakten Verfahren zeigen auf dem groben Gitter eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Mit dem konventionellen Schema lässt sich eine Übereinstimmung mit den Referenzdaten nur bei einer deutlich höheren Gitterauflösung realisieren. Ähnliche Ergebnisse liegen für die Reynoldsspannungen $\langle u'_{ax} u'_{ax} \rangle$ und $\langle u'_{ax} u'_{rad} \rangle$ vor, welche in Abbildung 4.48 für das größte und das feinste Rechengitter dargestellt sind. Selbst auf dem groben Gitter wird eine hohe Übereinstimmung zwischen Simulation und experimentellen Daten mit beiden k -exakten Verfahren erzielt. Das CDS-Verfahren erfordert im Gegensatz dazu erheblich mehr Elemente für eine akkurate Vorhersage der Fluktuationen. Diese Ergebnisse zeigen deutlich den Vorteil des Ansatzes der höheren Ordnung im Vergleich zur konventionellen Diskretisierungsmethode. Eine akkurate Lösung lässt sich mit weniger Elementen realisieren, was zu erheblichen Einsparungen an Speicher und Rechenzeit führt. Darüber hinaus sind durch die adaptive Bestimmung von θ keine



(a) 147811 Knotenpunkte.

(b) 816944 Knotenpunkte.

Abbildung 4.48: Profile der Reynoldsspannungen $\langle u'_{ax}u'_{ax} \rangle$ und $\langle u'_{ax}u'_{rad} \rangle$ des turbulenten Freistrahls. Zum Vergleich dienen experimentellen Daten von Panchapakesan und Lumley [185].

umfangreichen Testläufe notwendig, um das ideale Maß an numerischer Dissipation zur Erhaltung von Genauigkeit und Stabilität zu identifizieren.

Abbildung 4.49 zeigt die berechneten L^2 -Fehlernormen der drei Verfahren, welche aus den Abweichungen der LES Profile zu den experimentellen Messdaten von Panchapakesan und Lumley [185] berechnet werden. Die Fehlernormen sind über der jeweiligen mittleren Iterationszeit τ_{it} der Verfahren dargestellt. Letztere sind mit der maximalen mittleren Iterationszeit $\tau_{it,min}$ normiert, die sich mit dem CDS-Verfahren und dem größten Rechengitter einstellt. Alle Iterationszeiten wurden in separaten Simulationsdurchläufen aus 100 Zeitschritten und auf vier Prozessoren berechnet. Die geringe Anzahl der experimentellen Datenpunkten hat zur Folge, dass die berechneten Fehlernormen ab einem gewissen Grad an Aussagekraft über die Güte der Lösung verlieren. Zur besseren Einschätzung der Lösungsgüte sind daher die dünnen Linien in Abbildung 4.49 dargestellt, welche 5 % der jeweiligen Profilmaxima darstellen. Es ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der beiden k -exakten Verfahren

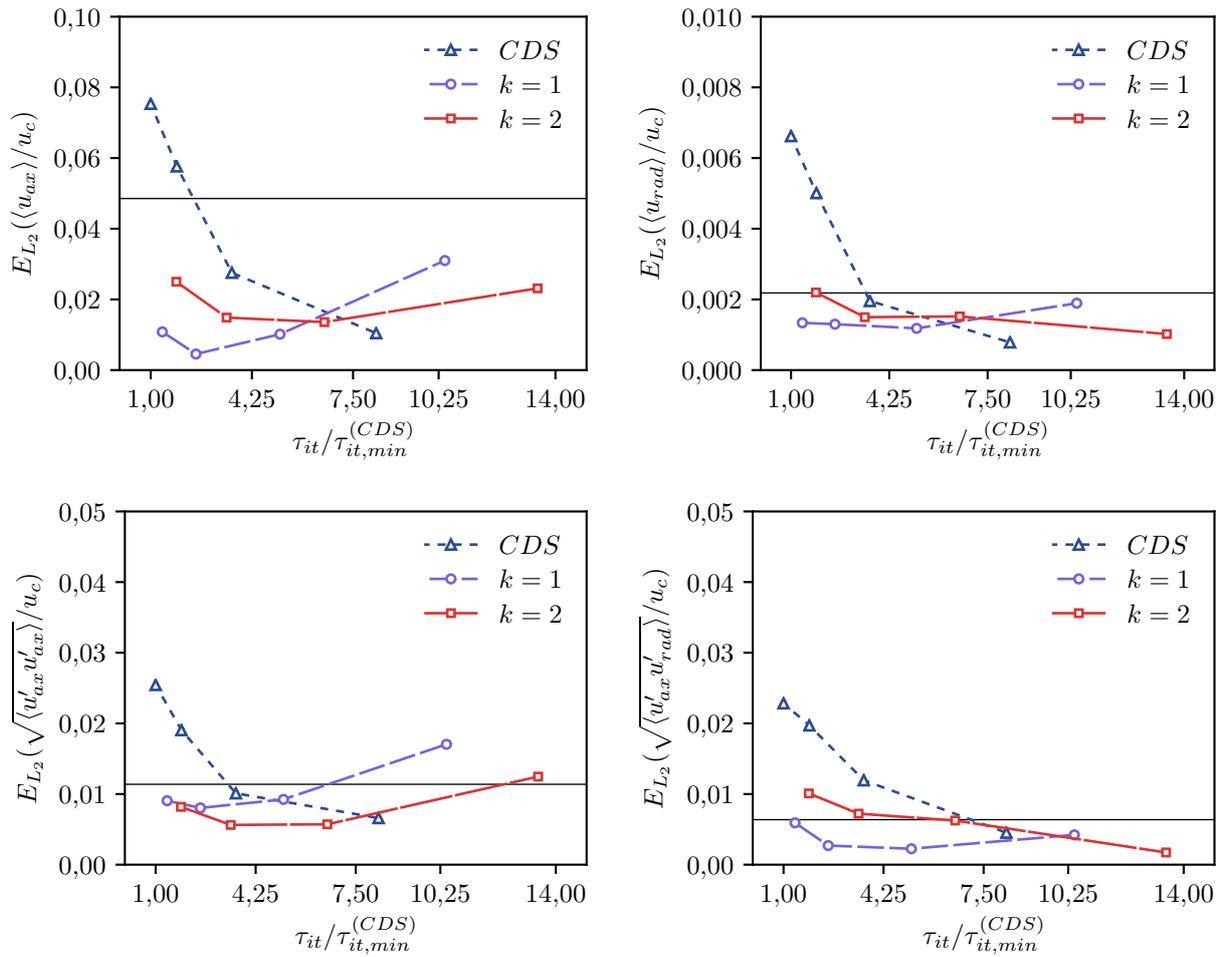


Abbildung 4.49: L^2 -Fehlernorm zwischen den LES Ergebnissen und den experimentellen Profilen des turbulenten Freistrahls von Panchapakesan und Lumley [185], dargestellt über der normierten mittleren Iterationszeit $\tau_{it}/\tau_{it,min}^{(CDS)}$.

diese Güte größtenteils bereits auf dem größten Rechengitter erreichen. Mit dem konventionellen Verfahren ist im Gegensatz dazu circa die dreifache Menge an Knotenpunkten notwendig. Infolgedessen kann die durchschnittliche Iterationszeit mit dem 2-exakten Verfahren um circa 50 % reduziert werden, um eine Lösung mit der Qualität CDS-Verfahrens und dem Gitter mit 453878 Knotenpunkten zu erzielen. Mit dem 1-exakten Verfahren wird für diesen Fall die mittlere Iterationszeit um circa 60 % reduziert. Unter Betrachtung der Gesamtrechnzeit ist die Ersparnis durch die k -exakten Verfahren noch deutlicher. Auf den größeren Rechengittern lässt sich das geforderte CFL-Kriterium mit größeren Zeitschritten erfüllen, so dass die Simulationszeit zur Berechnung der Statistiken des Geschwindigkeitsfeldes mit weniger Zeitschritten erfolgen kann. Angenommen, es soll eine statistisch stationäre Lösung von ähnlicher Qualität wie mit dem CDS-Verfahren und dem Gitter mit 453878 Knotenpunkten berechnet werden. Dies lässt sich mit dem 2-exakten Verfahren auf dem größten Gitter und einem 1,56-fachen Zeitschritt realisieren, so sich dass circa 65 % der Rechenzeit einsparen lässt. Mit dem 1-exakten Verfahren lassen sich in diesem Fall circa 75 % einsparen. Bezüglich der

Gitterschrittweite können außerdem mit beiden k -exakten Verfahren etwa 1,5 mal größere Elemente verwendet werden als für das CDS-Verfahren.

4.3.3 H3-Flamme

Die H3-Flamme wurde im Rahmen des *Second International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Non-Premixed Flames* [7] vorgestellt und stellt einen Standardtestfall für die Modellierung von nicht-vorgemischten Flammen dar, welcher bereits in zahlreichen Arbeiten durch numerische Simulationen untersucht wurde [60, 74, 75, 77, 78, 150, 186, 194]. In dieser Arbeit soll er dazu dienen, die Anwendbarkeit des k -exakten Multi-Korrekturverfahrens für die Simulation von turbulenten reaktiven Strömungen zu demonstrieren. Der Brenner der H3-Flamme besteht aus einer Brennstoffdüse mit einem Innendurchmesser von $D = 8$ mm, aus welcher ein verdünntes H_2/N_2 -Gemisch mit einer mittleren Geschwindigkeit von $U = 34,8$ m/s strömt. Die Brennstoffdüse ist von einem koaxialen Injektor mit einem Durchmesser von 140 mm umgeben, aus dem ein Luft-Mantelstrom mit 0,2 m/s strömt. Der Brennstoffstrahl und der Luft-Mantelstrom werden jeweils mit einer Temperatur von 300 K und unter atmosphärischen Druck in die Verbrennungszone eingebracht. Der Testfall wurde in mehreren Arbeiten durch optische Messverfahren untersucht und bietet somit entsprechende Datensätze für die Validierung der Simulationsergebnisse. In der Arbeit von Meier et al. [156] wurden Konzentrationsmessungen von Sauerstoff, Wasserstoff, Stickstoff und Wasser durch Raman-Messungen ermittelt. In der Arbeit von Neuber et al. [169] wurden außerdem Stickoxid- und Hydroxyl-Radikal-Konzentrationen (OH) durch laserinduzierte Fluoreszenz (LIF) und spontane Ramanspektroskopie bestimmt. Messungen des Strömungsfeldes wurden mittels Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) von Cheng et al. [35] durchgeführt.

Aufgrund der relativ simplen Geometrie des Testfalls wird das Rechengebiet in der Literatur häufig durch eine strukturierte Vernetzung diskretisiert. In dieser Arbeit soll jedoch gezeigt werden, dass sich mit dem k -exakten Multi-Korrekturverfahren akkurate LES Ergebnisse auch auf einem vollständig unstrukturierten Rechengitter erreichen lassen. Die primäre Repräsentation des Rechengebiets, welche eine Länge von 155 Durchmessern aufweist, wird daher überwiegend durch Tetraederelemente diskretisiert, wie es in Abbildung 4.50 dargestellt ist. Die mittlere Schrittweite h der Elemente nimmt mit dem Abstand zur Brennstoffdüse und zur Brennerhauptachse zu, ähnlich zum Testfall des turbulenten Freistrahls. Neben der Flammenzone erstreckt sich das Rechengebiet auch über fünf Durchmesser in den Mantelstrom-Injektor und über einen halben Durchmesser in die Brennstoffdüse. Die Einlaufstrecke des koaxialen Injektors ist aufgrund der niedrigen Strömungsgeschwindigkeit ausreichend für die Ausbildung des laminaren Grenzschichtprofils des Mantelstroms. Das zeitlich variierende turbulente Geschwindigkeitsprofil des Brennstoffstrahls wird im Gegensatz dazu aus den LES Ergebnissen einer turbulenten Rohrströmung extrahiert und an der Eintritts-Randbedingung der Brennstoffdüse aufgeprägt. Für die Vorläufer-Simulation der Brennstoff-Rohrströmung wird ein Rechengitter und ein Simulationsaufbau in Anlehnung an den Testfall aus Abschnitt 4.3.1 verwendet. Um eine erhöhte Auflösung der Wandgrenzschicht um die Brennstoffdüse zu realisieren wird dort das Rechengitter durch prismatische Elemente diskretisiert, was ebenfalls in Abbildung 4.50

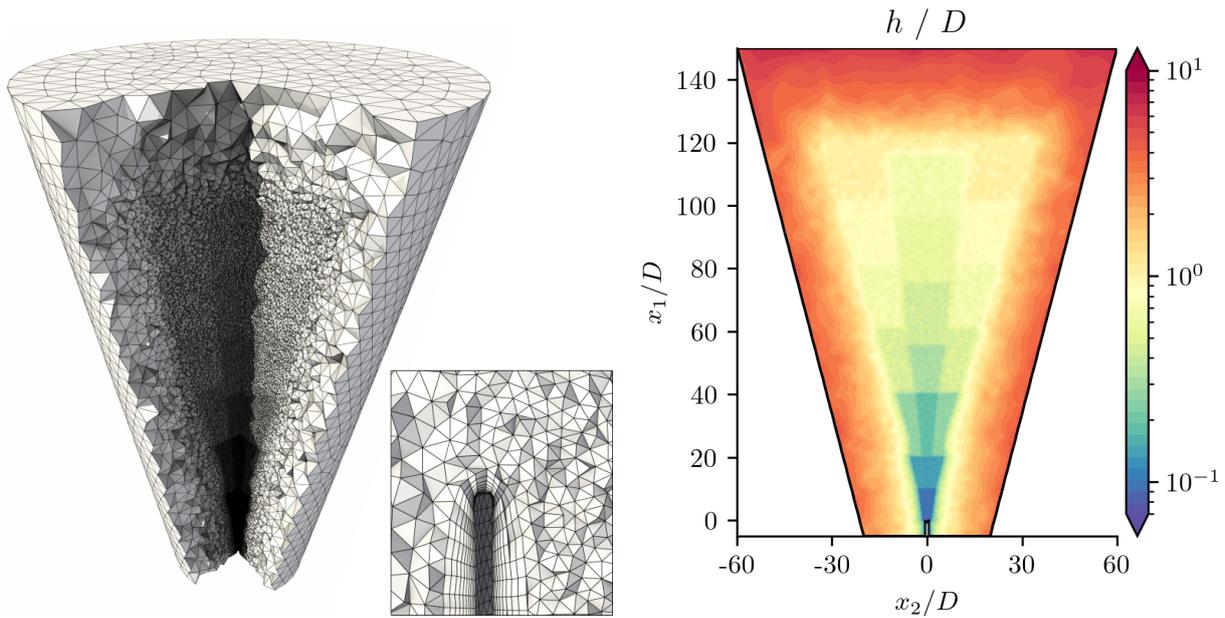


Abbildung 4.50: Grobes Rechengitter mit einer Million Knotenpunkten für den Testfall der H3-Flamme, mit der entdimensionierten Schrittweite h/D in der x_1 - x_2 -Ebene des Gitters.

dargestellt ist. Für den Testfall werden zwei Rechengitter mit unterschiedlichem Auflösungsvermögen untersucht. Das grobe Rechengitter, dessen mittlere Schrittweite h ebenfalls in Abbildung 4.50 dargestellt ist, umfasst 1056108 Knotenpunkte und 6145732 Elemente. Für die Generierung des feinen Gitters, welches aus 2416412 Knotenpunkten und 14253216 Elementen besteht, werden die dargestellten Element-Schrittweiten um durchschnittlich 25 % reduziert. An der oberen Berandung des Rechengebiets wird eine Austritts-Randbedingung verwendet, wohingegen den konischen Seitenflächen eine Eintritts-Randbedingung mit der Geschwindigkeit und der Fluid-Zusammensetzung des Luft-Mantelstroms aufgeprägt wird. Analog zum Testfall der laminaren Wirbel-Zündkern-Interaktion in Abschnitt 4.2.3 wird der H_2 -Reaktionsmechanismus von Ó Connaire [179] mit acht Spezies und 19 Elementarreaktionen verwendet. Mit diesem Mechanismus lassen sich keine Stickoxidemissionen modellieren, was zugunsten der reduzierten Rechenzeit in Kauf genommen wird. Die Turbulenz-Chemie-Interaktion der unaufgelösten Skalen erfolgt mit dem APDF-Modell. Des Weiteren wird der Einfluss von Wärmestrahlung über das in den Kapiteln 2.1.3 und 2.2.3 beschriebene Modell berücksichtigt. Für das dargestellte Rechengitter werden LES mit den beiden k -exakten Verfahren durchgeführt. Hierbei erfolgt zunächst lediglich eine Limitierung für die Enthalpie h und die chemischen Spezies \mathbf{Y} . Die Berechnung der übrigen Feldgrößen erfolgt ohne eine Limitierung. Im Verlauf des Kapitels wird dann der Einfluss der Limitierung anhand des 1-exakten Verfahrens im Detail untersucht. Zum Vergleich der k -exakten Schemata werden die LES ebenfalls mit dem konventionellen CDS/QUDS-Schema durchgeführt, für welches ebenfalls nur eine Limitierung der Enthalpie- und Spezies-Transportgleichungen erfolgt. Jede Simulation wird mit der Startlösung einer vollständig ausgebildeten Flamme initialisiert und anschließend für 0,035 s berechnet, um Einflüsse durch den

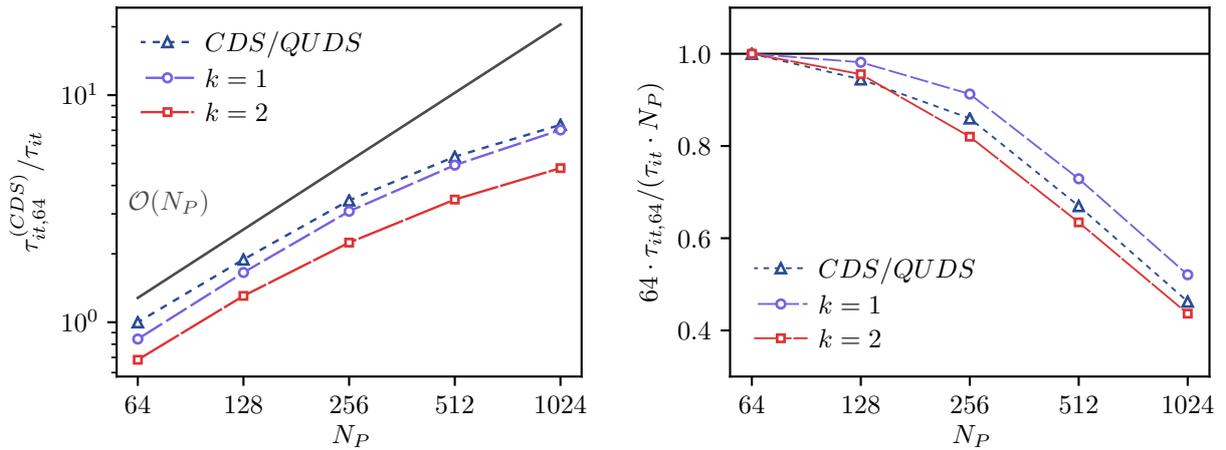


Abbildung 4.51: Parallele Beschleunigung (links) und parallele Effizienz (rechts) der drei Diskretisierungsverfahren für den Testfall der H3-Flamme auf dem feinen Rechengitter mit 2,4 Millionen Knotenpunkten.

Wechsel der Diskretisierungseigenschaften im Bezug auf die Startlösung zu vermeiden. Anschließend erfolgt eine zeitliche Mittelung für 0,965 s. Für alle Simulationen wird der Zeitschritt zu $\Delta t = 1 \mu\text{s}$ gewählt.

Ähnlich zu dem Testfall der laminaren Wirbel-Zündkern-Interaktion wird zunächst die parallele Beschleunigung der betrachteten Diskretisierungsverfahren im Bezug auf die mittlere Iterationszeit τ_{it} untersucht. Diese wurde in Abhängigkeit der Prozessoranzahl $N_P = \{64, 128, 256, 512, 1024\}$ durch fünf unabhängige Simulationsdurchläufe auf dem feinen Gitter mit jeweils zehn Zeitschritten des Testfalls berechnet, wobei die Lösung der Transporgleichungen zur Vergleichbarkeit mit ausschließlich fünf Subiterationen des Krylov-Lösungsverfahrens erfolgte. Aus den Ergebnissen lassen sich die Kurven der parallelen Beschleunigung und der parallelen Effizienz in Abbildung 4.51 darstellen. Zur Normierung der Daten dient die mittlere Iterationszeit $\tau_{it,64}^{(CDS)}$ des konventionellen Verfahrens mit $N_P = 64$. Mit $k = 1$ nimmt die mittlere Iterationszeit durchschnittlich um 12% gegenüber dem konventionellen Verfahren zu, mit $k = 2$ beträgt der Anstieg durchschnittlich 50%. Für alle drei Verfahren ist ab $N_P = 256$ eine konstante Verringerung der parallelen Effizienz zu erkennen. Das 1-exakte Verfahren weist dabei stets eine höhere Effizienz auf als das konventionelle Schema. Die Ergebnisse lassen darauf schließen, dass die parallele Skalierbarkeit auf dem vollständig unstrukturierten Gitter unter Verwendung der Multi-Korrekturmethode im Vergleich zum konventionellen Verfahren nicht beeinträchtigt wird.

Abbildung 4.52 zeigt instantane, Favre-gefilterte Temperaturfelder in der x_1 - x_2 -Ebene, welche mit den verschiedenen Diskretisierungsverfahren und Rechengittern berechnet wurden. Die Ergebnisse unterscheiden sich maßgeblich in den kohärenten Wirbelstrukturen, welche auf dem feineren Gitter durch kleinere Skalen aufgelöst werden. Eine Besonderheit des Testfalls stellt der Bereich $x_1/D \leq 15$ dar, in dem der unverbrannte Brennstoff auf den umgebenden Luftstrom trifft. In dieser Region ist die Vermischung auch durch molekulare Diffusion getrieben [60, 192]. Ab der Position $15 < x_1/D < 20$

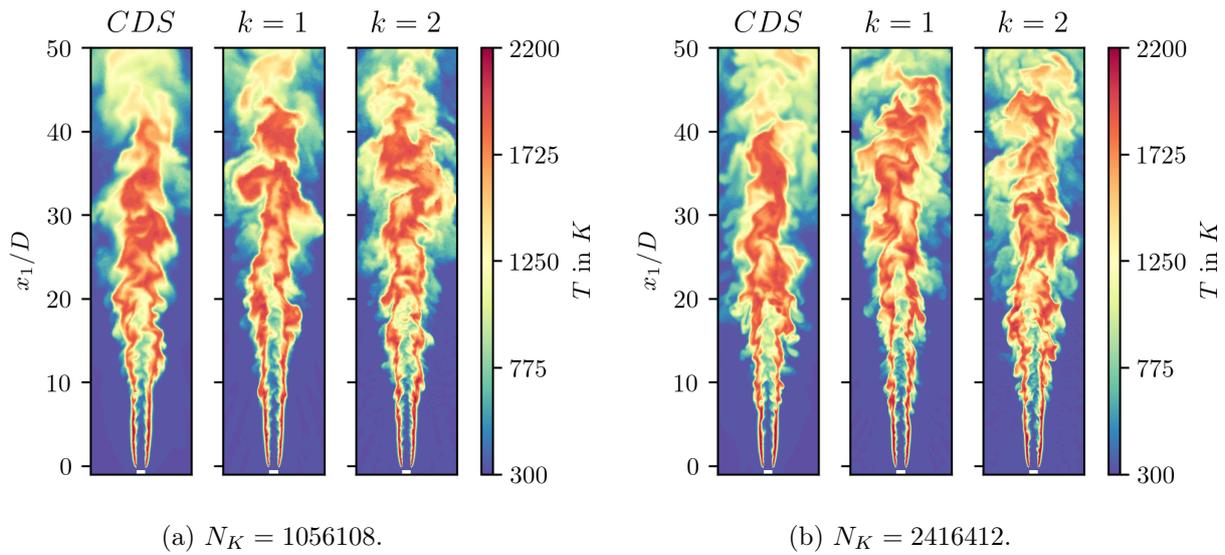


Abbildung 4.52: Favre-gefiltertes, instantanes Temperaturfeld der H3-Flamme, berechnet mit verschiedenen Rechengittern und Diskretisierungsverfahren.

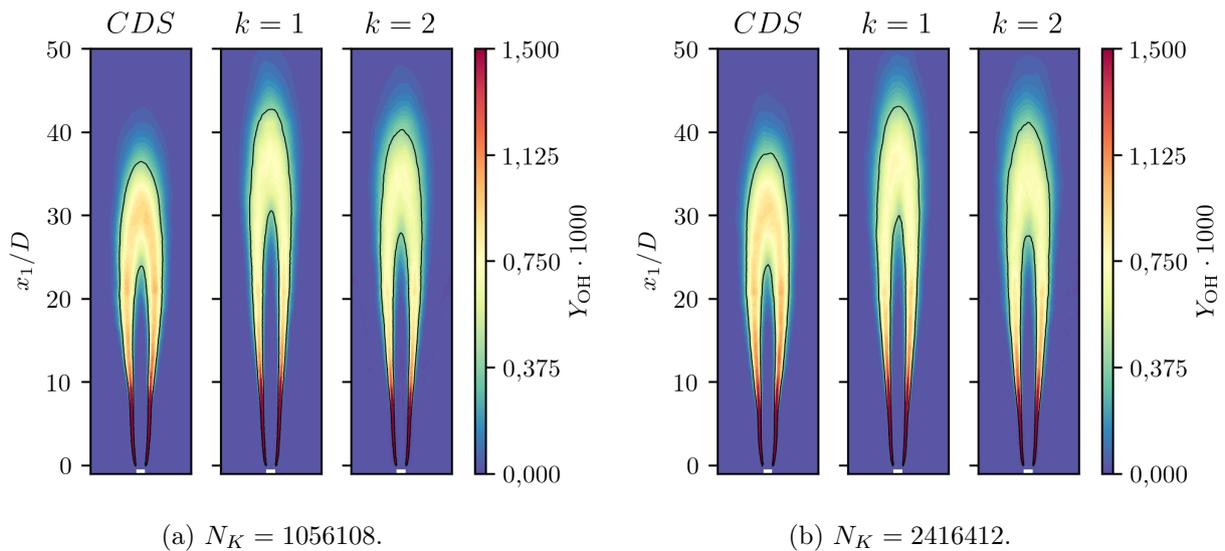


Abbildung 4.53: Zeitliche Mittelwerte des Favre-gefilterten Hydroxyl-Radikal-Massenbruchs $\langle Y_{\text{OH}} \rangle$ der H3-Flamme, berechnet mit verschiedenen Rechengittern und Diskretisierungsverfahren.

tritt hingegen der turbulenter Transport in den Vordergrund [60, 156]. Diese Transition wird in allen Simulationen wiedergegeben, wobei sich mit dem CDS/QUDS-Verfahren jedoch ab $x_1/D \approx 15$ größere kohärente Strukturen ausbilden als mit den beiden k -exakten Verfahren. Zudem werden heiße Temperaturbereiche durch die Schemata hoher Ordnung über eine weitere Strecke transportiert, was sich durch höhere Temperaturen im Bereich $x_1/D > 40$ äußert. Die Unterschiede im Flammenbild sind noch deutlicher anhand des zeitlich gemittelten OH-Massenbruchs in Abbildung 4.53 zu erkennen. Die Ausdehnung der Reaktionszone ist hierbei durch die schwarze Iso-Linie hervorgehoben,

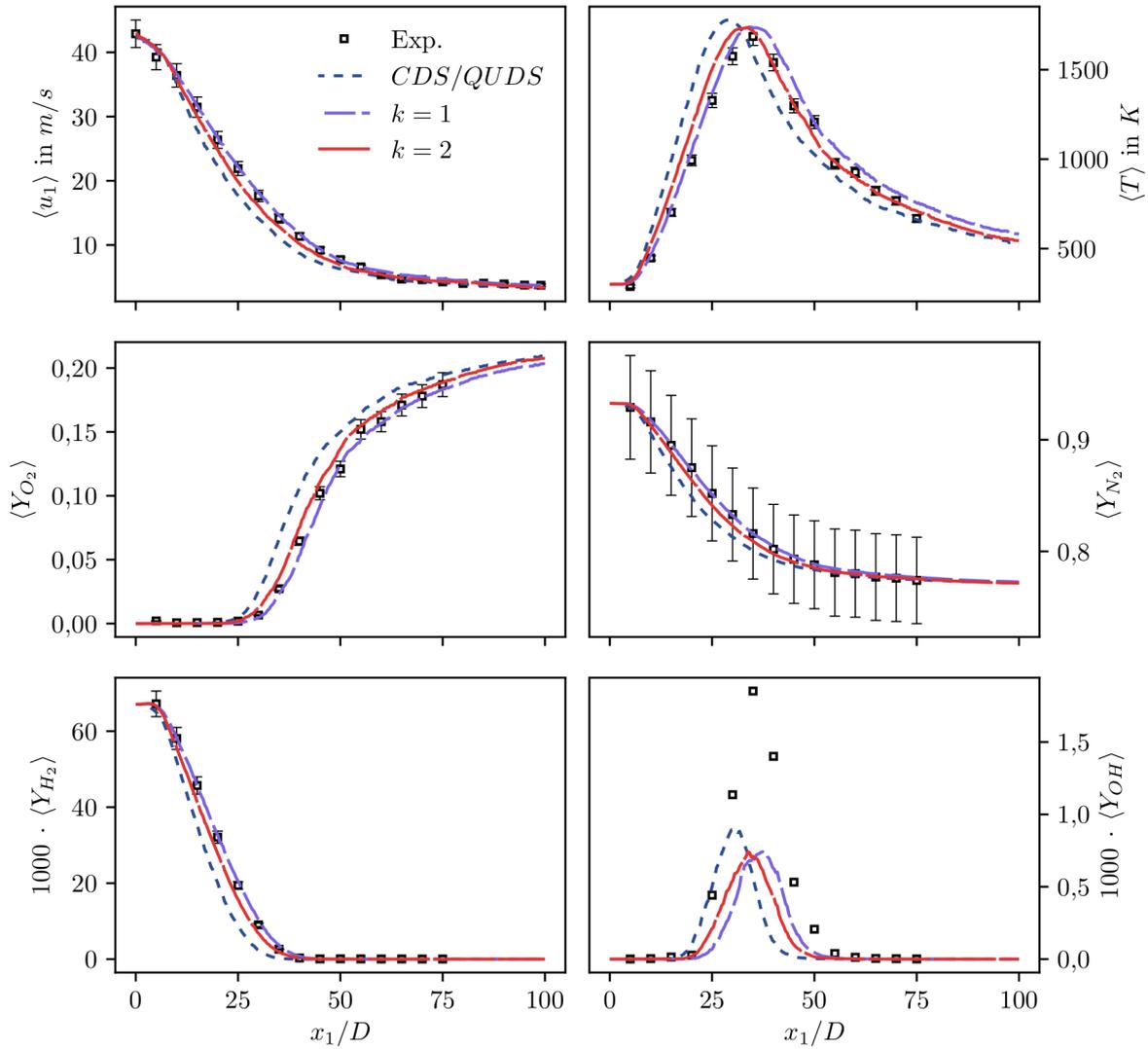


Abbildung 4.54: Zeitlich gemittelte Profile ausgewählter Feldgrößen entlang der Hauptachse der H3-Flamme, berechnet mit einer Million Knotenpunkten. Zum Vergleich dienen experimentelle Messdaten von Cheng et al. [35] und Meier et al. [156].

welche einem zeitlich gemittelten Massenbruch von $\langle Y_{OH} \rangle = 0,0004$ entspricht. Es ist zu erkennen, dass sich auf beiden Rechengittern mit dem CDS/QUDS-Verfahren eine kürzere und breitere Reaktionszone ausbildet, welche sich im Vergleich zu den k -exakten Verfahren durch höhere $\langle Y_{OH} \rangle$ -Werte kennzeichnet. Auf beiden Rechengittern stellt sich außerdem für $k = 1$ eine etwas längere Reaktionszone ein als für $k = 2$. Abgesehen von einer geringen Erhöhung der Flammenlänge ist mit allen drei Verfahren für den zeitlich gemittelten OH-Massenbruch kein maßgeblicher Unterschied zwischen den beiden Rechengittern zu erkennen.

Im Folgenden werden die zeitlich gemittelten Simulationsergebnisse mit experimentellen Profildaten von Cheng et al. [35] und Meier et al. [156] verglichen. Da sich die berechneten Profile der beiden Rechengitter nur marginal unterscheiden, sind lediglich die Ergebnisse des groben Gitters

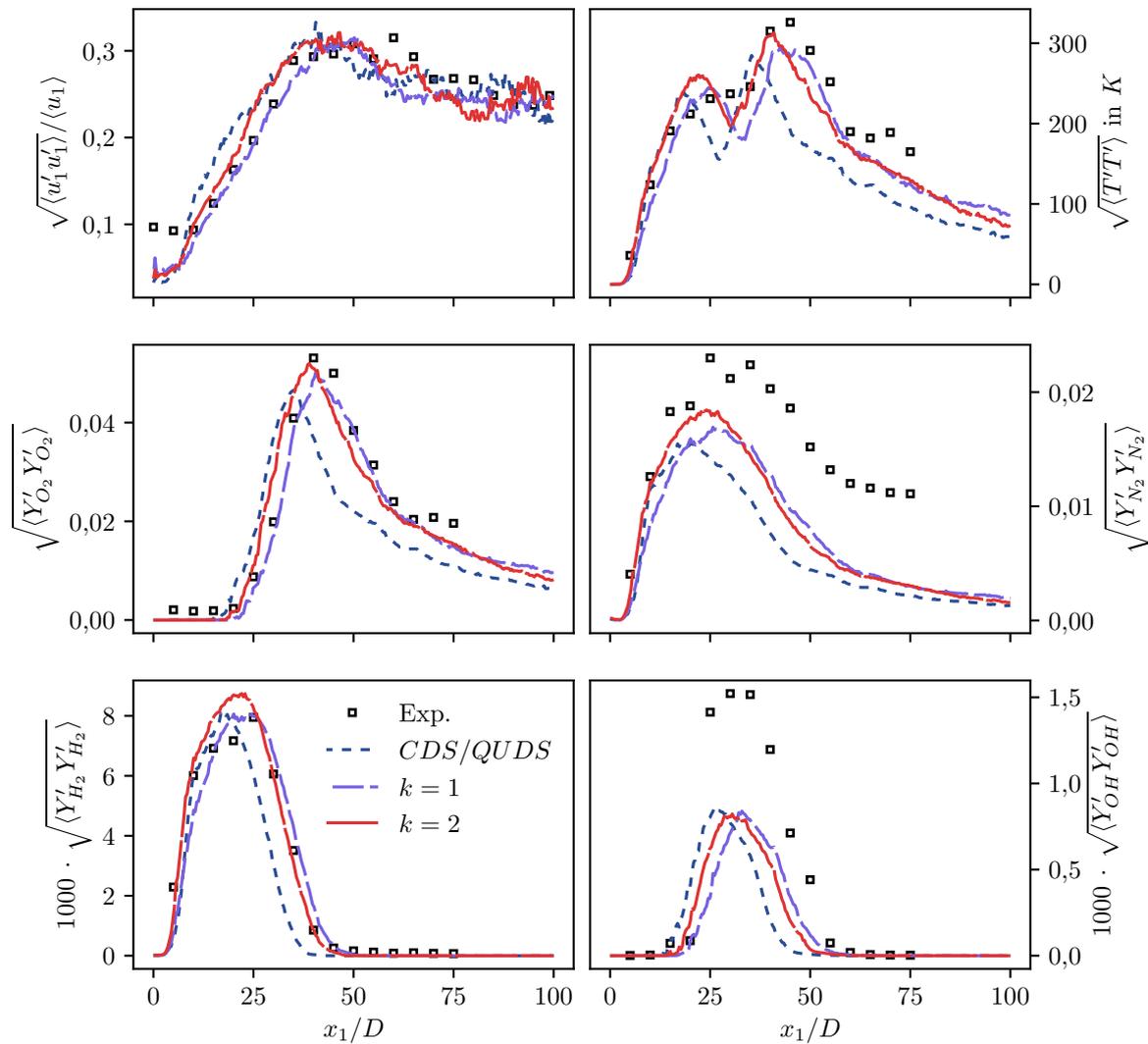


Abbildung 4.55: Zeitlich gemittelte Fluktuationen ausgewählter Feldgrößen entlang der Hauptachse der H3-Flamme, berechnet einer Million Knotenpunkten. Zum Vergleich dienen experimentelle Messdaten von Cheng et al. [35] und Meier et al. [156].

gezeigt. Abbildungen 4.54 zeigt die Profile der axialen Geschwindigkeit $\langle u_1 \rangle$, der Temperatur $\langle T \rangle$, sowie der Spezies-Massenbrüche $\langle Y_{O_2} \rangle$, $\langle Y_{N_2} \rangle$, $\langle Y_{H_2} \rangle$ und $\langle Y_{OH} \rangle$ entlang der Flammenhauptachse. Die entsprechenden zeitlich gemittelten Fluktuationen sind in Abbildung 4.55 dargestellt. Alle Feldgrößen stellen Favre-gefilterte Werte dar, auf deren gesonderte Kennzeichnung verzichtet wird. Beide k -exakten Verfahren zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zu den experimentellen Vergleichsdaten, wobei sich die Flamme des 2-exakten Verfahrens etwas weiter stromaufwärts positioniert als mit $k = 1$. Dieser Unterschied liegt jedoch größtenteils innerhalb der Fehlertoleranz der Messdaten. Lediglich für das gemittelte Hydroxyl-Radikals $\langle Y_{OH} \rangle$ wird durch beide Verfahren das Maximum bei $x_1/D \approx 40$ deutlich unterschätzt. Die axiale Position des Maximums wird hingegen durch beide Schemata akkurat vorhergesagt. Die gemittelten Fluktuationen weisen eine ähnlich gute Überein-

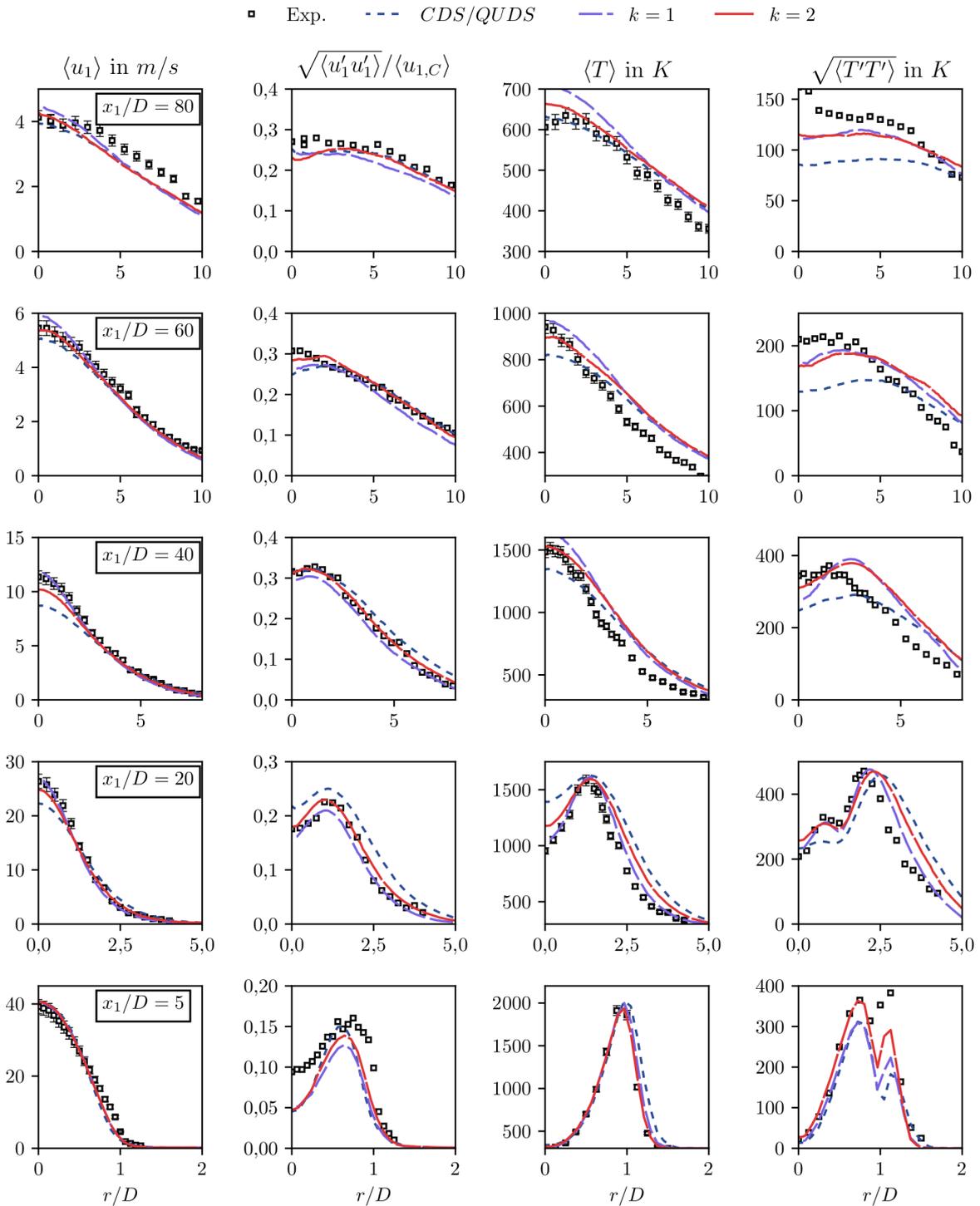


Abbildung 4.56: Zeitlich gemittelte radiale Strömungsprofile für ausgewählte Feldgrößen der H3-Flamme, berechnet mit einer Million Knotenpunkten. Zum Vergleich dienen experimentelle Messdaten von Cheng et al. [35] und Meier et al. [156].

stimmung zu dem experimentellen Daten auf. Insbesondere der Verlauf von $\sqrt{\langle T'T' \rangle}$, $\sqrt{\langle Y'_{O_2} Y'_{O_2} \rangle}$ und $\sqrt{\langle Y'_{H_2} Y'_{H_2} \rangle}$ wird mit einer sehr hohen Genauigkeit berechnet. Dabei sei zu erwähnen, dass die dargestellten Profile der Temperatur- und Speziesfluktuationen lediglich aus den aufgelösten Anteilen der Feldgrößen extrahiert wurden und keine modellierten Anteile des APDF-Modells umfassen. Eine ebenfalls gute Übereinstimmung resultiert für die axiale Turbulenzintensität $\sqrt{\langle u'_1 u'_1 \rangle} / \langle u_1 \rangle$, welche jedoch die experimentellen Intensitätsniveaus am Eintritt um circa 5% unterschätzt. Der berechnete Wert von circa 5% an der Position $x_1/D = 0$ deckt sich jedoch sehr gut mit den Simulationsergebnissen anderer Arbeiten [78, 186]. Größere Abweichungen in den Profilen der gemittelten Fluktuationen sind hingegen für den N₂-Massenbruch ab $x_1/D > 25$ und für das Maximum des OH-Massenbruchs zu erkennen. Im Vergleich zu den beiden k -exakten Verfahren liegen für das konventionelle CDS/QUDS-Schema größere Abweichungen zu den experimentellen Profilen vor, welche die Verschiebung der Reaktionszone in Abbildung 4.53 widerspiegeln. Beispielsweise fällt die gemittelte axiale Geschwindigkeit in Abbildung 4.54 mit einer höheren Rate ab als in den Experimenten. Gleichzeitig positionieren sich die Maxima der Temperatur und des OH-Massenbruchs circa $5D$ zu weit stromaufwärts. Auch für die Massenbrüche von O₂ und H₂ ist eine Verschiebung stromaufwärts zu erkennen. Für das gemittelte OH-Profil stellt sich ein höheres Maximum ein als mit den k -exakten Verfahren. Weitere Unterschiede zeigen sich in den gemittelten Fluktuationen in Abbildung 4.55. Mit dem konventionellen Verfahren wird die axiale Turbulenzintensität $\sqrt{\langle u'_1 u'_1 \rangle} / \langle u_1 \rangle$ im Bereich $10 < x_1/D < 20$ um circa 5% überschätzt. Für die Fluktuationen von O₂ und H₂ liegt ab der Position $x_1/D = 25$ ein zu früher Abfall der Profile vor, welcher gegenüber den Experimenten circa $5D$ zu weit stromaufwärts positioniert ist. Zur Bewertung der Simulationsergebnisse stehen ebenfalls experimentelle Strömungsprofile in radialer Richtung an verschiedenen Höhenpositionen zur Verfügung. Diese sind in Abbildung 4.56 für die Feldgrößen $\langle u_1 \rangle$, $\sqrt{\langle u'_1 u'_1 \rangle} / \langle u_1 \rangle$, $\langle T \rangle$ und $\sqrt{\langle T'T' \rangle}$ gezeigt. Auch hier lässt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den k -exakten Simulationsergebnissen und den Messdaten feststellen, wohingegen mit dem konventionellen Verfahren stellenweise größere Abweichungen vorliegen.

In Abbildung 4.57 ist auf der linken Seite das Feld der aufgelösten turbulenten kinetischen Energie $\langle u'_i u'_i \rangle / 2$ dargestellt, welches mit den drei Diskretisierungsschemata auf dem groben Rechengitter berechnet wird. Die gestrichelten Iso-Linien zeigen ausgewählte Bereiche der lokalen Gitterschrittweite. Im Gegensatz zur modellierten turbulenten kinetischen Energie $\langle \nu_t^2 \rangle / (C_W \Delta)^2$, welche in allen Simulationsergebnissen ähnliche Werte annimmt, ist die aufgelöste Energie mit dem CDS/QUDS-Verfahren viel höher als in den k -exakten Simulationen. Das Maximum von $\langle u'_i u'_i \rangle / 2$ tritt außerdem an der Position $x_1/D = 10$ in Erscheinung, wo sich das Rechengitter von $h/D = 0,10$ auf $h/D = 0,15$ vergrößert. Ein ähnliches Bild stellt sich auch auf dem feinen Rechengitter trotz der höheren Auflösung ein, da sich auch hier die Schrittweite an der gleichen Position ändert. Die Iso-Linien der skalierten Wirbelstärke $|\boldsymbol{\omega}| \cdot (x_1/U)$ auf der rechten Seite von Abbildung 4.57 zeigen, dass mit dem konventionellen Verfahren ab der Position $x_1/D > 20$ weniger Wirbelstrukturen vorliegen als mit den k -exakten Verfahren. In der Gesamtheit deuten die Ergebnisse darauf hin, dass beide Rechengitter eine zu geringe Auflösung für das CDS/QUDS-Verfahren aufweisen. Dies ist mitunter auf die

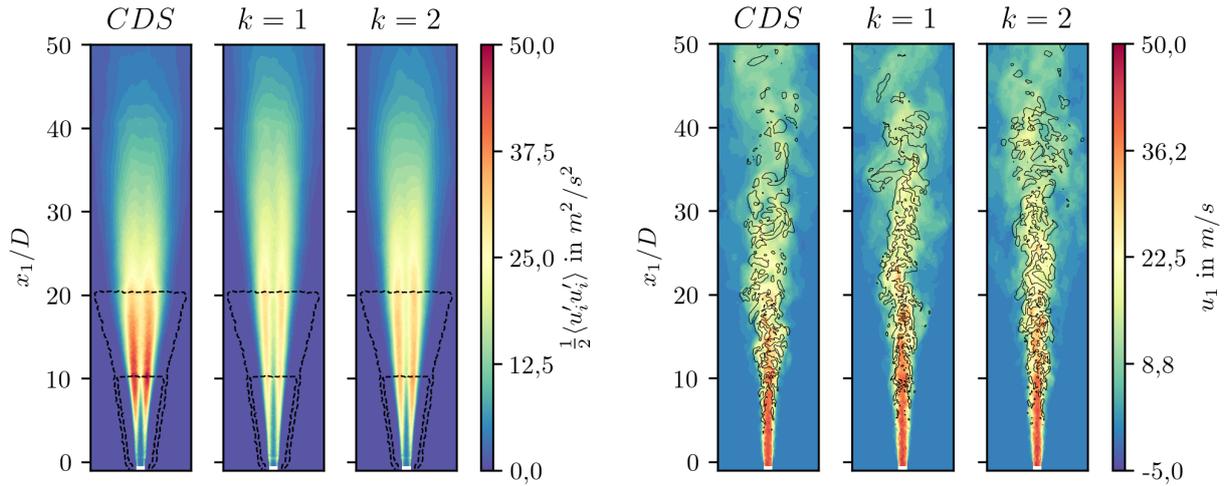


Abbildung 4.57: Aufgelöste turbulente kinetische Energie $\langle u_1' u_1' \rangle / 2$ mit überlagerten Iso-Linien der Gitterschrittweite $h/D = \{0,10,0,15\}$ (links) und Favre-gefiltertes, instantanes axiales Geschwindigkeitsfeld, mit überlagerten Iso-Linien der skalierten Wirbelstärke $|\omega| \cdot (x_1/U) = 15$ (rechts). Die Ergebnisse gehen aus dem groben Rechengitter mit einer Million Knotenpunkten hervor.

anisotrope Ausrichtung der Elemente zurückzuführen, wodurch eine höhere numerische Diffusion eingebracht wird. Diese bewirkt eine zu frühe Dissipation feinskaliger Strukturen und begünstigt die Durchmischung von Brennstoff und Oxidator, was wiederum zu der veränderten Form und Position der Flamme führt. Diese Effekte werden insbesondere durch die abrupten Sprünge in der Gitterschrittweite verstärkt. Im Gegensatz dazu werden feinskalige Strukturen mit den beiden Verfahren hoher Ordnung infolge der k -exakten Korrekturen über weitere Strecken transportiert und führen somit zu einer akkuraten Ausbildung der Flammenfront.

Abschließend soll der Einfluss der Limitierung auf die k -exakten Simulationsergebnisse im Detail untersucht werden. Hierzu wurde die Simulation mit dem 1-exakten Verfahren auf dem groben Rechengitter wiederholt, wobei in einem Fall auf die Limitierung der Feldgrößen verzichtet und in einem anderen Fall die Rekonstruktionspolynome aller Feldgrößen \mathbf{u} , h und \mathbf{Y} limitiert wurden. Im unlimitierten Fall musste der Kontrollparameter θ der thermochemischen Feldgrößen allerdings im gesamten Rechengebiet auf einen unteren Schwellwert von 0,5 gesetzt werden, um eine stabile Simulation zu erreichen. Abbildung 4.58 zeigt links den zeitlich gemittelten OH-Massenbruch, der sich für die beiden Konfigurationen des 1-exakten Verfahrens in der x_1 - x_2 -Ebene einstellt. Zum Vergleich ist ebenfalls das Feld für den Fall dargestellt, für den lediglich die Limitierung der thermochemischen Feldgrößen h und \mathbf{Y} erfolgt. Die vollständig limitierte Flamme kennzeichnet sich durch eine circa 20% geringere Länge, was anhand der schwarzen Iso-Linien ersichtlich ist. Das Simulationsergebnis weist somit Ähnlichkeiten zu den Ergebnissen des konventionellen CDS/QUDS-Verfahrens auf, wobei sich mit dem k -exakten Verfahren geringere Maximalwerte von $\langle Y_{OH} \rangle$ einstellen. Auf der rechten Seite in Abbildung 4.58 ist außerdem zu erkennen, dass in der limitierten Konfiguration deutlich weniger Wirbelstrukturen stromab der Position $x_1/D = 20$ vorliegen. Die Limitierung des

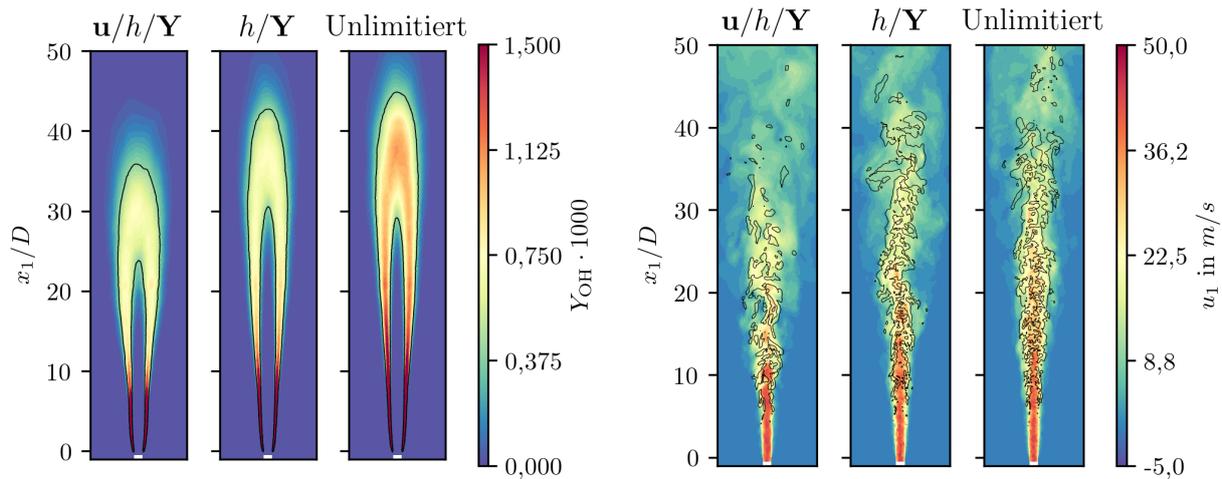


Abbildung 4.58: Einfluss der Limitierung des 1-exakten Verfahrens auf die zeitlichen Mittelwerte des Favre-gefilterten Hydroxyl-Radikal-Massenbruchs $\langle Y_{OH} \rangle$ (links) und auf das instantane axiale Geschwindigkeitsfeld (rechts). Letzteres ist zusammen mit Iso-Linien der skalierten Wirbelstärke $|\boldsymbol{\omega}| \cdot (x_1/U) = 15$ dargestellt. Die Ergebnisse gehen aus dem groben Rechengitter mit einer Million Knotenpunkten hervor.

Geschwindigkeitsfeldes scheint somit ähnliche Fehlereffekte hervorzurufen, wie das konventionelle CDS/QUDS-Verfahren. Ein vollständiger Verzicht auf die Limitierung wirkt sich ebenfalls auf das Flammenbild aus und führt zu einer längeren Flamme und höheren $\langle Y_{OH} \rangle$ -Maximalwerten. Anhand der gemittelten Strömungsprofile in Hauptachsenrichtung in Abbildung 4.59 zeigt sich jedoch, dass sich infolge einer fehlenden Limitierung ein zu hohes Temperaturmaximum einstellt. Zudem ist mit diesem Verfahren zu erkennen, dass der zeitlich gemittelte H_2 -Massenbruch hinter der Brennstoffdüse zunächst in unphysikalischer Weise ansteigt. Dieser Anstieg ist auf Überschwinger in der Lösung von Y_{H_2} zurückzuführen, die im unlimitierten Fall infolge der hohen Gradienten an der Brennstoffdüse resultieren und sich in der zeitlichen Mittelung als ein Maximum manifestieren. Andererseits bewirkt der Verzicht auf die Limitierung auch, dass sich für das Maximum des gemittelten Hydroxyl-Radikal-Massenbruchs $\langle Y_{OH} \rangle$ eine geringere Abweichung zu den Messdaten einstellt. Mit dem vollständig limitierten Verfahren ergeben sich hingegen ähnliche axiale Profile wie mit dem konventionellen CDS/QUDS-Verfahren, was sich in einer axialen Verschiebung der Profile um circa $5D$ stromaufwärts äußert. Insgesamt legen die Ergebnisse nahe, dass eine Limitierung der Spezies-Massenbrüche essentiell für ein physikalisches Simulationsergebnis ist. Eine Limitierung der Geschwindigkeiten bewirkt hingegen eine zu starke Verfälschung des Strömungsfeldes aufgrund der damit verbundenen hohen numerischen Dissipation und führt dadurch zu einer fehlerhaften Vorhersage des Flammenbildes.

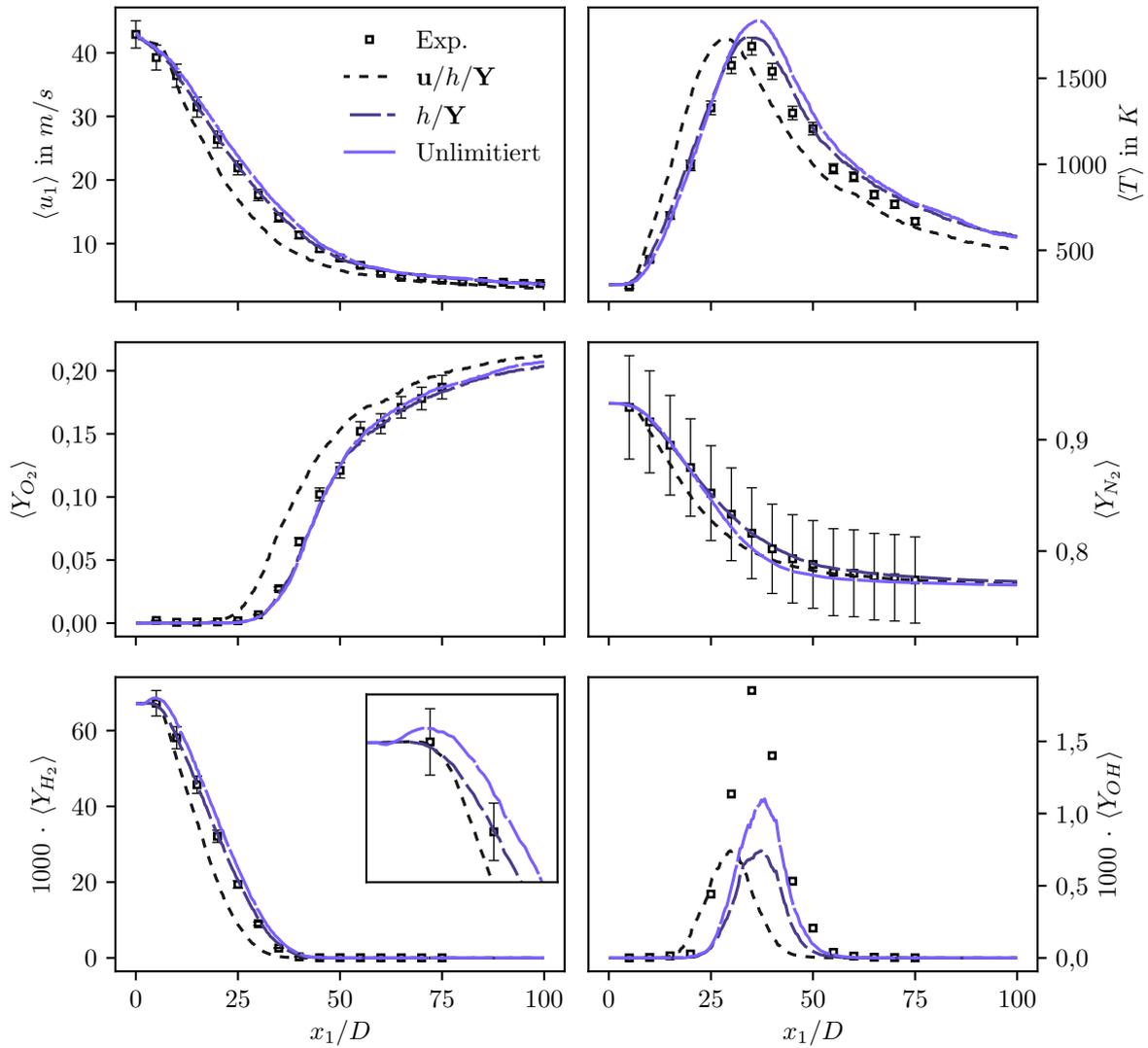


Abbildung 4.59: Einfluss der Limitierung des 1-exakten Verfahrens auf die zeitlich gemittelten axialen Profile ausgewählter Feldgrößen der H₃-Flamme, berechnet auf dem Rechengitter mit einer Million Knotenpunkten. Zum Vergleich dienen experimentelle Messdaten von Cheng et al. [35] und Meier et al. [156].

5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde der DLR Strömungslöser **ThetaCOM** um ein räumliches Diskretisierungsverfahren hoher Ordnung zur Simulation von turbulenten Verbrennungsvorgängen auf unstrukturierten Rechengittern erweitert. Die Methode ermöglicht auch auf stark verzerrten Gittern den konvektive Transport mit einer dritten und den diffusiven Transport mit einer zweiten räumlichen Fehlerordnung und reduziert das eingebrachte Maß an numerischer Dissipation auf ein Minimum. Die maßgeblichen Bestandteile der Arbeit, welche bereits in Teilen in Veröffentlichungen präsentiert wurden [221, 222, 223, 224], lassen sich folgendermaßen gliedern:

1. *k*-exakte Rekonstruktion

Die Rekonstruktion der Lösung mit einer höheren räumlichen Genauigkeit erfolgt mit dem *k*-exakten Multi-Korrekturverfahren, welches auf einer Rekonstruktion von Taylorpolynomen *k*-ten Grades basiert. Deren Koeffizienten werden in Relation zu Green-Gauss Gradienten der Feldgrößen gesetzt, welche über sukzessive Korrekturschritte mit höheren Genauigkeitsniveaus approximiert werden. Hierdurch lässt sich die räumliche Genauigkeit eines bestehenden Finite-Volumen-Strömungslösers mit moderaten Implementierungsaufwand erhöhen, ohne dessen parallelen Skalierungseigenschaften maßgeblich zu beeinflussen. Die ursprünglich von Pont et al. [197] beschriebene Methode wurde im Rahmen dieser Arbeit zur Anwendung auf knotenzentrierten Rechengittern mit $k = 1$ und $k = 2$ erweitert.

2. Flussberechnung

Die Berechnung der konvektiven und diffusiven Flüsse wurde mit dem Ansatz der *k*-exakten Rekonstruktion in Einklang gebracht. Hierbei wurde eine Methode zur Ein-Punkt-Integration der Flussintegrale vorgestellt, mit der sich die höhere räumliche Genauigkeitsordnung erhalten lässt. Für die konvektiven Flüsse wurde ein zentraler Diskretisierungsansatz mit numerischer Dissipation und ein Ansatz zur Gradientenlimitierung implementiert. Die Berechnung der diffusiven Flüsse erfolgt mit dem Diskretisierungsschema von Mathur und Murthy [153]. In beiden Fällen wurden entsprechende *k*-exakte Korrekturterme hergeleitet, mit denen sich eine höhere räumliche Genauigkeit auch auf stark verzerrten Gittern erhalten lässt.

3. Lösung des Transportgleichungssystems

Zur Lösung der Transportgleichungen reaktiver Fluide im Bereich niedriger Mach-Zahlen wurde ein iteratives Projektionsverfahren implementiert, mit dem sich eine räumlich und zeitlich kollokierte Anordnung der Feldgrößen und ein zeitlicher Fehler zweiter Ordnung realisieren lässt. Des Weiteren wurden entsprechende *k*-exakte Korrekturterme hergeleitet, mit denen

sich die räumliche Genauigkeit der Rekonstruktion erhalten lässt. Für eine effiziente implizite Behandlung der k -exakten Flüsse wurde die Methode der verzögerten Korrektur eingesetzt.

4. Adaptive Bestimmung der numerischen Dissipation

Zur adaptiven Bestimmung der numerischen Dissipation in der konvektiven Flussberechnung wurde ein Stabilitätskriterium auf Basis einer Von-Neumann-Stabilitätsanalyse für eine eindimensionale lineare Advektions-Diffusions-Gleichung hergeleitet. Die Stabilitätsgleichung wird zur Reduzierung der Rechenzeit indirekt durch ein Verbund aus kompakten neuronalen Netzwerkmodellen tabelliert und dient dazu, die numerische Dissipation zur Stabilisierung des Verfahrens in Abhängigkeit der lokalen Strömungsbedingungen zu bestimmen und auf ein Minimum reduzieren.

Durch zahlreiche Testfälle wurde die Fehlerordnung des implementierten Verfahrens mit $k = 1$ und $k = 2$ verifiziert und validiert. Dabei wurde gezeigt, dass die hohe räumliche Genauigkeit auch auf stark verzerrten Rechengittern erhalten bleibt. Der Einfluss der adaptiven numerischen Dissipation wurde insbesondere anhand turbulenter, inkompressibler Strömungsprobleme beleuchtet. Für den Testfall eines turbulenten Freistrahls hat eine konstante, zu hohe numerische Dissipation beispielsweise zu einer massiven Verfälschung des Simulationsergebnisses geführt. Im Gegensatz dazu ließ sich das Simulationsergebnis durch die adaptive Aufprägung der numerischen Dissipation über den Verbund neuronaler Netzwerkmodelle deutlich verbessern, sodass sich eine sehr gute Übereinstimmung zu experimentellen Messdaten erzielen ließ. Dies demonstrierte das Potential des adaptiven Ansatzes, da somit eine aufwändige, empirische Bestimmung des Kontrollparameters durch den Nutzer entfällt.

Im Vergleich zu einem konventionellen räumlichen Diskretisierungsschema ließen sich alle Testfälle mit den implementierten k -exakten Verfahren auf deutlich gröberen Rechengittern und mit einer wesentlich geringeren Abhängigkeit von der Güte der Rechenelemente berechnen. Außerdem ließ sich zeigen, dass die Rekonstruktion höherer Ordnung im Vergleich zur konventionellen Methode keine maßgeblichen Einbuße im Bezug auf die parallele Skalierbarkeit von **ThetaCOM** verursacht. Es wurde auch die theoretische Rechenzeiterparnis der k -exakten Verfahren untersucht, welche in Abbildung 5.1 zusammen mit der entsprechenden Ersparnis der Freiheitsgrade für ausgewählte Testfälle dargestellt ist. Die Zahl der notwendigen Freiheitsgrade, um die Zielgrößen der jeweiligen Testfälle mit einer hohen Übereinstimmung zu Referenzdaten aus der Literatur vorherzusagen, ließ sich mit den k -exakten Schemata gegenüber dem konventionellen Verfahren um mindestens 50 % reduzieren. Infolgedessen würde sich auch die Rechenzeit für die Berechnung gleichwertiger Ergebnisse um mindestens 45 % reduzieren lassen. Die Rechenzeiterparnisse ergeben sich einerseits durch die geringere Anzahl an Freiheitsgraden, als auch durch eine potentielle Erhöhung des numerischen Zeitschritts infolge der gröberen Gitterschrittweiten. Durch letzteres ließe sich insbesondere die Rechenzeit bei den turbulenten Strömungsproblemen zur Ermittlung von zeitlich gemittelten Feldgrößen reduzieren.

Der Einfluss des k -exakten Multi-Korrekturverfahrens auf die Simulation von reaktiven Strömungen wurde durch die Testfälle einer laminaren Wirbel-Zündkern-Interaktion und einer turbulenten H_2 -Luft-Diffusionsflamme beleuchtet. Im Gegensatz zum konventionellen Schema ließ sich der zeit-

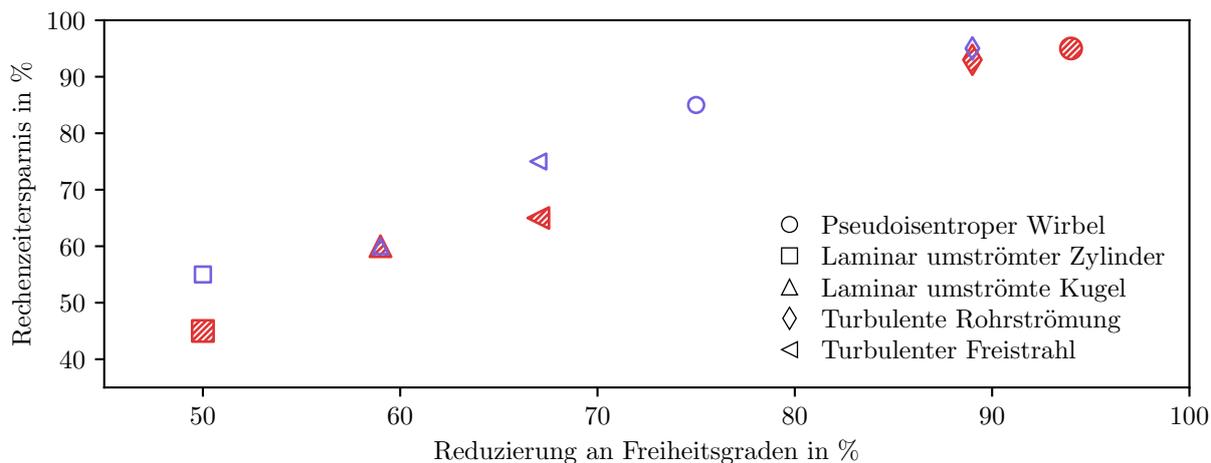


Abbildung 5.1: Theoretische Ersparnis von Freiheitsgraden und Rechenzeit, die sich mit den implementierten k -exakten Diskretisierungsverfahren bei der Berechnung ausgewählter Testfälle mit einer geforderten Güte im Vergleich zum konventionellen CDS-Verfahren ergaben. Die offenen Symbole kennzeichnen das 1-exakte Verfahren, die gestrichelten Symbole kennzeichnen das 2-exakte Verfahren.

liche Verlauf der Wirbel-Zündkern-Interaktion mit beiden k -exakten Verfahren auch mit einer reduzierten Gitterauflösung vorhersagen. Anhand der turbulenten H_2 -Luft-Diffusionsflamme wurde außerdem die Anwendbarkeit der k -exakten Verfahren zur Simulation von reaktiven, turbulenten Strömungen auf vollständig unstrukturierten Rechengittern demonstriert. Infolge der verschiedenen k -exakten Korrekturterme reagieren beiden Verfahren deutlich weniger sensitiv auf anisotrope Änderungen in der Gitterstruktur als das konventionelle Schema, wodurch sich sehr gute Übereinstimmungen zu experimentellen Messdaten erzielen ließen.

Unter Betrachtung aller durchgeführten Testfälle hat sich herausgestellt, dass sich der Genauigkeitsvorteil einer 2-exakten Rekonstruktion gegenüber dem 1-exakten Verfahren mit wachsender Komplexität des Strömungsproblems reduziert. Insbesondere für die turbulenten Testfälle haben sich zwischen beiden Verfahren nur marginale Unterschiede in den Simulationsergebnissen eingestellt - trotz des höheren Rechenaufwandes, der mit dem 2-exakten Verfahren einhergeht. Dies lässt darauf schließen, dass gewisse Fehlerquellen unter diesen Strömungsbedingungen in den Vordergrund treten, welche die Genauigkeitseffekte der 2-exakten Korrekturterme gegenüber dem 1-exakten Verfahren vermindern. Eine potentielle Fehlerquelle könnte die räumliche Genauigkeit der diffusiven Flussberechnung sein, welche für $k = 2$ inhärent auf eine zweite Ordnung begrenzt ist. Doch auch die Umrechnung von konservativen zu primitiven volumetrischen Mittelwerten geht mit einem räumlichen Fehler zweiter Ordnung einher, welcher in Kapitel 3.2.3 beleuchtet wurde. Dies könnte insbesondere in reaktiven Strömungsproblemen bei der Berechnung des chemischen Quellterms einen dominierenden Fehlerterm induzieren, welcher eine höhere Genauigkeit von $k = 2$ gegenüber $k = 1$ mindert. Potentielle Fehlerquellen wie diese sollten daher in weiteren Arbeiten untersucht werden.

A Asymptotisches Verhalten der kompressiblen Transportgleichungen bei niedrigen Mach-Zahlen

Der Zustand einer reaktiven Strömung lässt sich durch die Transportgleichungen von Masse, Impuls und Energie, sowie durch weitere Transportgleichungen der an der chemischen Reaktion beteiligten Komponentenmassen in kompressibler Formulierung beschreiben:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0, \quad (\text{A.1a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i, \quad (\text{A.1b})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_s) = -\frac{\partial j_{i,s}}{\partial x_i} + \dot{s}_s, \quad (\text{A.1c})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{Dp}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \rho u_i g_i + \dot{q}_{\text{rad}}, \quad (\text{A.1d})$$

mit der Dichte ρ , der Geschwindigkeit u_i , dem Druck p , den Spezies-Massenbrüchen Y_s und der Enthalpie h . Für technische Verbrennungssysteme, wie beispielsweise Brennkammern in Flugzeugtriebwerken, ist die Lösung der kompressiblen Transportgleichungen mittels numerischer Verfahren allerdings nur bedingt zielführend. Die starke Wärmefreisetzung in Flammennähe führt lokal zu hohen Temperaturen und damit zu hohen Dichtegradienten. Dies hat zur Folge, dass sich akustische Wellen um Größenordnungen schneller ausbreiten als die konvektiven Wellenanteile in der Strömung. Zeitgenaue numerische Lösungsverfahren sind dadurch auf sehr kleine Zeitschritte begrenzt, um die Ausbreitung der akustischen Wellen akkurat auflösen zu können. Zusätzlich führen die großen Geschwindigkeitsunterschiede in der Wellenausbreitung zu einer starken Disparität der Eigenwerte des zugrunde liegenden Gleichungssystems [263]. Dies geht mit einem schlechteren Konvergenzverhalten von konventionellen, kompressiblen Lösungsverfahren einher, bis hin zu einer Singularität des Gleichungssystems bei verschwindender Mach-Zahl [195, 263]. Eine Möglichkeit zur Vermeidung der genannten Probleme stellt die Vernachlässigung von Kompressibilitätseffekten dar, also Dichteänderungen die aus Druckschwankungen resultieren [86]. Durch die Untersuchung des asymptotischen Verhaltens der kompressiblen Transportgleichungen bei niedrigen Mach-Zahlen lassen sich entsprechende Terme für diese Vernachlässigung identifizieren [18, 45, 139, 148, 164], was im Folgenden dargestellt wird. Zunächst werden die kompressiblen Transportgleichungen in eine dimensionslose Form überführt [45, 139, 164], wofür die folgenden dimensionslosen Größen mit dem Referenzzu-

stand ϕ_∞ definiert werden:

$$\begin{aligned}
\hat{x}_i &= x_i/L_\infty, & \hat{t} &= tU_\infty/L_\infty, & \hat{u}_i &= u_i/U_\infty, \\
\hat{p} &= p/p_\infty, & \hat{\rho} &= \rho/\rho_\infty, & \hat{T} &= T/T_\infty, \\
\hat{h} &= h/(R_\infty T_\infty), & \hat{\tau}_{ij} &= \tau_{ij}L_\infty/(U_\infty\mu_\infty), & \hat{q}_i &= q_iL_\infty/(T_\infty\lambda_\infty), \\
\hat{j}_{i,s} &= j_{i,s}L_\infty/(\rho_\infty D_\infty), & \hat{s}_s &= \dot{s}_sL_\infty/(\rho_\infty U_\infty), & \hat{q}_{\text{rad}} &= \dot{q}_{\text{rad}}L_\infty^2/(\lambda_\infty T_\infty).
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Weiterhin wird die Variable $\epsilon_\infty = \gamma_\infty \text{Ma}_\infty^2$ definiert, wobei mit γ_∞ der Isentropenexponent des Gases im Referenzzustand bezeichnet wird. Durch die Referenzzustände ϕ_∞ lassen sich die kompressiblen Transportgleichungen in entdimensionierter Form darstellen:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} (\hat{\rho} \hat{u}_i) = 0, \tag{A.3a}$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{t}} (\hat{\rho} \hat{u}_i) + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} (\hat{\rho} \hat{u}_i \hat{u}_j) = \left(\frac{1}{\text{Re}_\infty} \right) \frac{\partial \hat{\tau}_{ij}}{\partial \hat{x}_j} - \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} \right) \frac{\partial \hat{p}}{\partial \hat{x}_i} + \left(\frac{1}{\text{Fr}_{i,\infty}} \right) \hat{\rho}, \tag{A.3b}$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{t}} (\hat{\rho} \hat{Y}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} (\hat{\rho} \hat{u}_i \hat{Y}_\alpha) = - \left(\frac{1}{\text{Pe}_\infty} \right) \frac{\partial \hat{j}_{i,\alpha}}{\partial \hat{x}_i} + \hat{s}_\alpha, \tag{A.3c}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \hat{t}} (\hat{\rho} \hat{h}) + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} (\hat{\rho} \hat{u}_i \hat{h}) &= - \left(\frac{\gamma_\infty}{\gamma_\infty - 1} \right) \left(\frac{1}{\text{Re}_\infty \text{Pr}_\infty} \right) \frac{\partial \hat{q}_i}{\partial \hat{x}_i} + \frac{D\hat{p}}{D\hat{t}} \\
&+ \left(\frac{\epsilon_\infty}{\text{Re}_\infty} \right) \hat{\tau}_{ij} \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial \hat{x}_j} + \left(\frac{\epsilon_\infty}{\text{Fr}_{i,\infty}} \right) \hat{\rho} \hat{u}_i \\
&+ \left(\frac{\gamma_\infty}{\gamma_\infty - 1} \right) \left(\frac{1}{\text{Re}_\infty \text{Pr}_\infty} \right) \hat{q}_{\text{rad}}.
\end{aligned} \tag{A.3d}$$

Mit dieser Darstellung können diejenigen Terme in den Transportgleichungen bestimmt werden, die bei kleinen Mach-Zahlen $\text{Ma}_\infty \rightarrow 0$ zu vernachlässigen sind. Hierzu zählt die viskose Reibungsarbeit $\hat{\tau}_{ij} \partial \hat{u}_i / \partial \hat{x}_j$ und der Energiebeitrag der Gravitationskraft in der Enthalpiegleichung, welche jeweils mit der Variable ϵ_∞ skalieren. Es wird zudem deutlich, dass bei verschwindender Mach-Zahl eine Singularität in den Impulsgleichungen (A.3b) auftritt. Dieser Grenzfall lässt sich untersuchen, indem die dimensionslosen Feldgrößen durch eine Potenzreihe von ϵ_∞ ausgedrückt werden [45, 148, 164]:

$$\begin{aligned}
\hat{p} &= \hat{p}^{(0)} + \epsilon_\infty \hat{p}^{(1)} + \epsilon_\infty^2 \hat{p}^{(2)} + \dots \\
\hat{u}_i &= \hat{u}_i^{(0)} + \epsilon_\infty \hat{u}_i^{(1)} + \epsilon_\infty^2 \hat{u}_i^{(2)} + \dots \\
\hat{\tau}_{ij} &= \hat{\tau}_{ij}^{(0)} + \epsilon_\infty \hat{\tau}_{ij}^{(1)} + \epsilon_\infty^2 \hat{\tau}_{ij}^{(2)} + \dots
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Das Einsetzen der Potenzreihe in den Term des räumlichen Druckgradienten der Impulsgleichungen (A.3b) lässt darauf schließen, dass der Anteil $\hat{p}^{(0)}$ des Drucks unabhängig von räumlichen Variationen sein muss ($\partial \hat{p}^{(0)} / \partial \hat{x}_i = 0$), um eine Singularität für $\epsilon_\infty \rightarrow 0$ auszuschließen

$$\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} \right) \frac{\partial \hat{p}}{\partial \hat{x}_i} = \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} \right) \frac{\partial \hat{p}^{(0)}}{\partial \hat{x}_i} + \frac{\partial \hat{p}^{(1)}}{\partial \hat{x}_i} + \epsilon_\infty \frac{\partial \hat{p}^{(2)}}{\partial \hat{x}_i} + \mathcal{O}(\epsilon_\infty^2). \tag{A.5}$$

Wird die Potenzreihe in die substantiellen Ableitung des Drucks in der Enthalpiegleichung (A.3d) eingesetzt, so zeigt sich, dass lediglich der Anteil $\hat{p}^{(0)}$ zeitlich variiert, wohingegen der Anteil $\hat{p}^{(1)}$ für ausreichend kleine ϵ_∞ verschwindet:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon_\infty \rightarrow 0} \frac{D\hat{p}}{Dt} &= \lim_{\epsilon_\infty \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \left(\hat{p}^{(0)} + \epsilon_\infty \hat{p}^{(1)} + \epsilon_\infty^2 \hat{p}^{(2)} + \dots \right) + \hat{u}_i \left(\epsilon_\infty \frac{\partial \hat{p}^{(1)}}{\partial \hat{x}_i} + \epsilon_\infty^2 \frac{\partial \hat{p}^{(2)}}{\partial \hat{x}_i} + \dots \right) \\ &= \frac{\partial \hat{p}^{(0)}}{\partial \hat{t}}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Die Potenzreihenzerlegung veranschaulicht, dass der Druck für niedrige Mach-Zahlen in zwei Anteile $\hat{p}^{(0)}$ und $\hat{p}^{(1)}$ aufzuteilen ist und dass höhere Anteile vernachlässigt werden können. Dabei ist es üblich, den räumlich konstanten Anteil als thermodynamischen Druck \hat{p}_0 und den räumlich variablen Anteil als dynamischen Druck \hat{p}_d zu bezeichnen [45]:

$$\hat{p} = \hat{p}^{(0)} + \epsilon_\infty \hat{p}^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon_\infty^2) \approx \hat{p}_0 + \hat{p}_d. \quad (\text{A.7})$$

Der thermodynamische Druckanteil $\hat{p}_0 = f(t)$ ist dann also lediglich eine Funktion der Zeit, wohingegen der dynamische Druckanteil $\hat{p}_d = f(\mathbf{x})$ nur ortsabhängig ist. Für die Herleitung der Transportgleichungen (2.1) werden schließlich alle Terme vernachlässigt, welche mit dem Faktor ϵ_∞ skalieren. Zudem wird der singuläre Term des Druckgradienten in der Impulserhaltungsgleichung (A.3b) durch den Gradienten des dynamischen Drucks $\partial \hat{p}_d / \partial \hat{x}_i$ ersetzt. Aus Gleichung (A.7) ergibt sich auch, dass das ideale Gasgesetz für kleine Mach-Zahlen nur abhängig vom thermodynamischen Druckanteil ist, wie es auch in Gleichung (2.3) dargestellt ist. Im Falle eines offen durchströmten Systems, in dem keine signifikanten zeitlichen Druckänderungen auftreten [86], können außerdem die zeitlichen Änderungen des thermodynamischen Druckanteils $\partial \hat{p}_0 / \partial \hat{t}$ vernachlässigt werden.

B Konstruktion des Dualgitters

Im Folgenden wird auf die Konstruktion der median-dualen Repräsentation des Primärgitters eingegangen. Eine umfassende Einführung zu den entsprechenden Algorithmen und Datenstrukturen für den Umgang mit unstrukturierten Gittern ist in der Arbeit von Barth [12] gegeben. Ein duales Kontrollvolumen Ω_α wird stets um einen Knotenpunkt \mathbf{x}_α des Primärgitters $\mathcal{P}(\Omega)$ konstruiert. Hierbei werden um jede Primärgitter-Kante zwischen zwei Knotenpunkten \mathbf{x}_α und \mathbf{x}_β die Oberflächendreiecke $\mathcal{T} = (\mathbf{x}_\Gamma, \mathbf{x}_\lambda, \mathbf{x}_\kappa)$ aufgespannt, wie es in Abbildung B.1 dargestellt ist. Diese Oberflächendreiecke verbinden den entsprechenden Kanten-Mittelpunkt $\mathbf{x}_\Gamma = (\mathbf{x}_\beta + \mathbf{x}_\alpha)/2$ mit dem Mittelpunkt \mathbf{x}_λ einer an die Kante angrenzenden Primärgitter-Fläche, sowie dem Mittelpunkt \mathbf{x}_κ des zur Fläche zugehörigen Primärgitter-Elements. Eine Schleife über alle Primärgitter-Elemente und eine weitere Schleife über alle lokalen Elementkanten ermöglicht eine effiziente Konstruktion aller Oberflächendreiecke der Dualgitter-Kontrollvolumina. Mit Hilfe dieser Oberflächendreiecke lässt sich dann jedes Element Ω_α in eine Menge an Tetraedern $\sigma_{\mathcal{T}} \in \{\Omega_\alpha\}$ mit $\sigma_{\mathcal{T}} = (\mathbf{x}_\Gamma, \mathbf{x}_\lambda, \mathbf{x}_\kappa, \mathbf{x}_\alpha)$ aufteilen, sofern die Oberflächendreiecke \mathcal{T} stets in gleicher Weise um den Knotenpunkt \mathbf{x}_α orientiert sind. Die Aufteilung des Elements kann später für eine effiziente Berechnung der Gittereigenschaften, wie beispielsweise das Elementvolumen, ausgenutzt werden. Aus den angrenzenden Oberflächendreiecken \mathcal{T} einer Primärgitterkante lässt sich zudem die median-duale Fläche $A_{\alpha\beta}$ zweier benachbarter Elemente Ω_α und Ω_β bilden. Für die Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen mittels der Finite-Volumen Methode werden lediglich gewisse Metriken des Dualgitters benötigt, wie beispielsweise das Elementvolumen oder die Oberflächennormalen. Diese Größen lassen sich in einer allgemeinen Form als geometrische Momente zusammenfassen, wobei in dieser Arbeit zwischen Flächen- und Volumenmomenten unterschieden wird. Diese Momente bieten die Möglichkeit, Größe und Form der Dualgitterelemente in Form von Tensoren verschiedener Ränge abzubilden. Volumenmomente werden an Knotenpunkten \mathbf{x}_α gespeichert, wohingegen Flächenmomente den jeweiligen Dualgitter-Oberflächen (beziehungsweise Kanten des Primärgitters) zugeordnet werden. Im Folgenden wird näher auf die Definition und Berechnung der in dieser Arbeit verwendeten Momente eingegangen.

B.1 Geometrische Volumenmomente

Die Berechnung der Momente $\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \alpha}$ eines Dualgitter-Kontrollvolumens Ω_α lässt sich durch die Momente $\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \sigma_{\mathcal{T}}}$ der orientierten Tetraeder $\sigma_{\mathcal{T}}$ ausdrücken, welche von den Oberflächendrei-

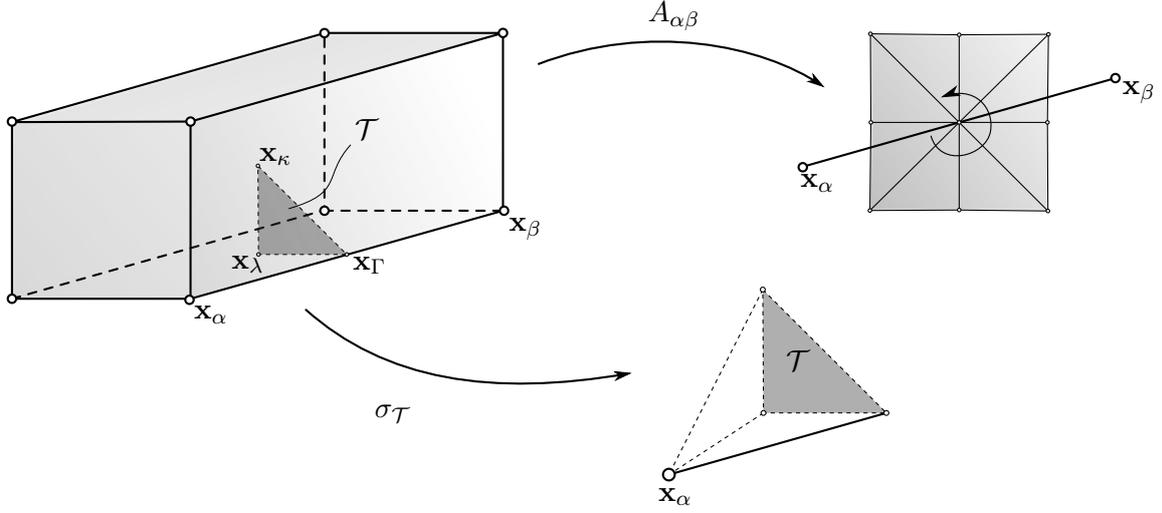


Abbildung B.1: Definition eines Oberflächen-Dreiecks \mathcal{T} zwischen benachbarten Elementen Ω_α und Ω_β . \mathcal{T} dient der Konstruktion eines Dualgitter-Elements Ω_α bestehend aus Tetraedern $\sigma_{\mathcal{T}}$ und definiert die median-dual Oberfläche $A_{\alpha\beta}$.

ecken \mathcal{T} und dem Knotenpunkt \mathbf{x}_α des Kontrollvolumens aufgespannt werden

$$\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \alpha} = \frac{1}{|\Omega_\alpha|} \sum_{\sigma_{\mathcal{T}} \in \Omega_\alpha} \mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \sigma_{\mathcal{T}}}. \quad (\text{B.1})$$

Diese Tetraeder-Momente $\mathcal{M}_{i_1 i_2 \dots i_R, \sigma_{\mathcal{T}}}$ lassen sich analytisch berechnen, wie es beispielsweise in der Arbeit von Pozo et al. [199] gezeigt ist. In dieser Arbeit werden geometrische Momente bis Rang zwei verwendet, welche für ein Tetraeder-Volumen berechnet werden können durch:

$$\mathcal{M}_{i, \sigma_{\mathcal{T}}} = \frac{1}{4} |\sigma_{\mathcal{T}}| \left(\Delta x_i^{(\alpha\Gamma)} + \Delta x_i^{(\alpha\lambda)} + \Delta x_i^{(\alpha\kappa)} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{ij, \sigma_{\mathcal{T}}} = \frac{1}{20} |\sigma_{\mathcal{T}}| & \left(2\Delta x_i^{(\alpha\Gamma)} \Delta x_j^{(\alpha\Gamma)} + 2\Delta x_i^{(\alpha\lambda)} \Delta x_j^{(\alpha\lambda)} + 2\Delta x_i^{(\alpha\kappa)} \Delta x_j^{(\alpha\kappa)} \right. \\ & + \Delta x_i^{(\alpha\Gamma)} \Delta x_j^{(\alpha\lambda)} + \Delta x_i^{(\alpha\Gamma)} \Delta x_j^{(\alpha\kappa)} + \Delta x_i^{(\alpha\lambda)} \Delta x_j^{(\alpha\kappa)} \\ & \left. + \Delta x_i^{(\alpha\lambda)} \Delta x_j^{(\alpha\Gamma)} + \Delta x_i^{(\alpha\kappa)} \Delta x_j^{(\alpha\Gamma)} + \Delta x_i^{(\alpha\kappa)} \Delta x_j^{(\alpha\lambda)} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

mit den lokalen Distanzvektoren des orientierten Tetraeders

$$\Delta \mathbf{x}^{(\alpha\Gamma)} = \mathbf{x}_\Gamma - \mathbf{x}_\alpha, \quad \Delta \mathbf{x}^{(\alpha\lambda)} = \mathbf{x}_\lambda - \mathbf{x}_\alpha, \quad \Delta \mathbf{x}^{(\alpha\kappa)} = \mathbf{x}_\kappa - \mathbf{x}_\alpha. \quad (\text{B.4})$$

Das Tetraedervolumen $|\sigma_{\mathcal{T}}|$ lässt sich über die Determinante der Distanzvektor-Einträge bestimmen

$$|\sigma_{\mathcal{T}}| = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} \Delta x_1^{(\alpha\Gamma)} & \Delta x_1^{(\alpha\lambda)} & \Delta x_1^{(\alpha\kappa)} \\ \Delta x_2^{(\alpha\Gamma)} & \Delta x_2^{(\alpha\lambda)} & \Delta x_2^{(\alpha\kappa)} \\ \Delta x_3^{(\alpha\Gamma)} & \Delta x_3^{(\alpha\lambda)} & \Delta x_3^{(\alpha\kappa)} \end{vmatrix}. \quad (\text{B.5})$$

B.2 Geometrische Flächenmomente

Zur Berechnung des Flächenmoments werden alle Dreiecke $\mathcal{T} \in \{A_{\alpha\beta}\}$ mit $\mathcal{T} = (\mathbf{x}_{\Gamma}, \mathbf{x}_{\lambda}, \mathbf{x}_{\kappa})$ verwendet, die an einer Primärgitter-Kante um den Mittelpunkt \mathbf{x}_{Γ} aufgespannt sind. Haben alle Dreiecke die gleiche Orientierung, so kann das Flächenmoment $\mathcal{S}_{i,j_1j_2\dots j_R}^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ durch die Momente der Teilflächen $\mathcal{S}_{i,j_1j_2\dots j_R}^{(\mathcal{T},\Gamma)}$ ausgedrückt werden:

$$\mathcal{S}_{i,j_1j_2\dots j_k}^{(\alpha\beta,\Gamma)} = \sum_{\mathcal{T} \in \{A_{\alpha\beta}\}} \mathcal{S}_{i,j_1j_2\dots j_k}^{(\mathcal{T},\Gamma)} \quad \text{mit} \quad \mathcal{S}_{i,j_1j_2\dots j_k}^{(\mathcal{T},\Gamma)} = \iint_{\mathcal{T}} n_i f_{j_1j_2\dots j_R}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_{\Gamma}) \, dA. \quad (\text{B.6})$$

Zur Überschaubarkeit wird hierbei die Funktion $f_{j_1j_2\dots j_R}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_{\Gamma})$ eingeführt:

$$f_{j_1j_2\dots j_R}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_{\Gamma}) = (x_{j_1} - x_{j_1,\Gamma}) (x_{j_2} - x_{j_2,\Gamma}) \dots (x_{j_R} - x_{j_R,\Gamma}). \quad (\text{B.7})$$

Es gilt nun, die Flächenintegrale der Dreiecke \mathcal{T} in Abhängigkeit ihrer Eckpunkte zu bestimmen. Hierfür wird eine Parametrisierung $\mathbf{m}(\xi, \eta)$ in Abhängigkeit der lokalen Dreieckskoordinaten $\xi, \eta \in [0, 1]$ gewählt, welche definiert ist durch

$$\mathbf{m}(\xi, \eta) = (1 - \xi)\eta \Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\lambda)} + \xi\eta \Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\kappa)} + \mathbf{x}_{\Gamma}, \quad (\text{B.8})$$

mit den lokalen Abstandsvektoren $\Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\lambda)} = \mathbf{x}_{\lambda} - \mathbf{x}_{\Gamma}$ und $\Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\kappa)} = \mathbf{x}_{\kappa} - \mathbf{x}_{\Gamma}$. Durch die Parametrisierung kann das Flächenmoment in Gleichung (B.6) ausgedrückt werden durch [48]

$$\mathcal{S}_{i,j_1j_2\dots j_k}^{(\mathcal{T},\Gamma)} = n_i^{(\mathcal{T})} \int_0^1 \int_0^1 f_{j_1j_2\dots j_R}(\mathbf{m}(\xi, \eta)) \left| \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \eta} \right| \, d\xi \, d\eta. \quad (\text{B.9})$$

Hierbei stellt $n_i^{(\mathcal{T})}$ den i -Anteil des normierten Normalenvektors des Dreiecks \mathcal{T} dar, welcher über den gesamten Parameterbereich von ξ und η konstant ist. Es kann gezeigt werden, dass der Betrag des Kreuzproduktes zwischen den Ableitungen der Parametrisierung \mathbf{m} der Parallelogramm-Fläche entspricht, welches von den Vektoren $\Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\lambda)}$ und $\Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\kappa)}$ aufgespannt wird. Dementsprechend lässt es sich durch die Fläche des Dreiecks $|\mathcal{T}|$ ausdrücken

$$\left| \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \eta} \right| = \eta \left| \Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\lambda)} \times \left(\Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\kappa)} - \Delta \mathbf{x}^{(\Gamma\lambda)} \right) \right| = 2\eta |\mathcal{T}|. \quad (\text{B.10})$$

Somit reduziert sich die Berechnung des Flächenmoments auf den Ausdruck

$$\mathcal{S}_{i,j_1 j_2 \dots j_k}^{(\mathcal{T}, \Gamma)} = 2|\mathcal{T}|n_i^{(\mathcal{T})} \int_0^1 \int_0^1 \eta f_{j_1 j_2 \dots j_k}(\mathbf{m}(\xi, \eta)) \, d\xi \, d\eta, \quad (\text{B.11})$$

der sich für \mathcal{T} analytisch berechnet lässt. Die Momente mit Rang null stellen den Normalenvektor $\mathcal{S}_i^{(\mathcal{T})}$ dar, dessen Länge $|A_{\alpha\beta}|$ entspricht. Die Teil-Flächenmomente mit Rang eins und zwei lassen sich jeweils berechnen durch

$$\mathcal{S}_{i,j}^{(\mathcal{T}, \Gamma)} = \frac{1}{3}|\mathcal{T}|n_i^{(\mathcal{T})} \left(\Delta x_j^{(\Gamma\lambda)} + \Delta x_j^{(\Gamma\kappa)} \right), \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{i,jk}^{(\mathcal{T}, \Gamma)} = \frac{1}{12}|\mathcal{T}|n_i^{(\mathcal{T})} & \left(2\Delta x_j^{(\Gamma\lambda)} \Delta x_k^{(\Gamma\lambda)} + \Delta x_j^{(\Gamma\lambda)} \Delta x_k^{(\Gamma\kappa)} \right. \\ & \left. + \Delta x_j^{(\Gamma\kappa)} \Delta x_k^{(\Gamma\lambda)} + 2\Delta x_j^{(\Gamma\kappa)} \Delta x_k^{(\Gamma\kappa)} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

B.3 Rotation geometrischer Momente

Für rotatorische periodische Randbedingungen ist es notwendig geometrische Momente mit einer Rotationsmatrix \mathbf{R} zu transformieren. Diese Operation ist trivial für Volumenmomente mit Rang eins und zwei. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie eine solche Rotation für Flächenmomente $\mathcal{S}_{i,jk}^{(\alpha\beta)}$ mit Rang zwei definiert ist. Die Fläche $A_{\alpha\beta}$ soll an der Rotationsachse $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]^T$ mit einem Winkel φ rotiert werden. Die Rotationsmatrix \mathbf{R} lautet [43]

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi) + a_1^2(1 - \cos(\varphi)) & a_1 a_2(1 - \cos(\varphi)) - a_3 \sin(\varphi) & a_1 a_3(1 - \cos(\varphi)) + a_2 \sin(\varphi) \\ a_1 a_2(1 - \cos(\varphi)) + a_3 \sin(\varphi) & \cos(\varphi) + a_2^2(1 - \cos(\varphi)) & a_2 a_3(1 - \cos(\varphi)) - a_1 \sin(\varphi) \\ a_1 a_3(1 - \cos(\varphi)) - a_2 \sin(\varphi) & a_2 a_3(1 - \cos(\varphi)) + a_1 \sin(\varphi) & \cos(\varphi) + a_3^2(1 - \cos(\varphi)) \end{bmatrix} \quad (\text{B.14})$$

Alle Punkte auf der Fläche werden nun mittels \mathbf{R} transformiert

$$\mathbf{x}' = \mathbf{R}\mathbf{x}, \quad (\text{B.15})$$

wobei der Strich die Koordinate eines rotierten Punktes \mathbf{x} markiert. Es gilt nun eine Berechnungsvorschrift für das Moment der um \mathbf{a} rotierte Fläche zu finden. Hierfür wird die Rotationsoperation auf die Parametrisierungsfunktion $\mathbf{m}(\xi, \eta)$ angewandt

$$\mathbf{m}'(\xi, \eta) = (1 - \xi)\eta \Delta \mathbf{x}'^{(\Gamma\lambda)} + \xi\eta \Delta \mathbf{x}'^{(\Gamma\kappa)} + \mathbf{x}'_{\Gamma}, \quad (\text{B.16})$$

mit den transformierten Distanzvektoren $\Delta \mathbf{x}'^{(\Gamma\lambda)} = \mathbf{x}'_{\lambda} - \mathbf{x}'_{\Gamma}$ und $\Delta \mathbf{x}'^{(\Gamma\kappa)} = \mathbf{x}'_{\kappa} - \mathbf{x}'_{\Gamma}$. Es kann nun gezeigt werden, dass sich $f_{jk}(\mathbf{m}'(\xi, \eta))$ in Form einer linearen Abbildung mit den Rotationsmatrizen aus seiner ursprünglichen Form darstellen lässt

$$f_{jk}(\mathbf{m}'(\xi, \eta)) = (m'_j - x'_{j,\Gamma}) (m'_k - x'_{k,\Gamma}) = (R_{jq} R_{kr}) f_{qr}(\mathbf{m}(\xi, \eta)). \quad (\text{B.17})$$

Mit der rotierten Flächennormalen $\mathbf{n}' = \mathbf{R}\mathbf{n}$ lässt sich damit das rotierte Flächenmoment $\mathcal{S}_{i,jk}^{(\alpha\beta,\Gamma)}$ mit Rang drei darstellen durch

$$\mathcal{S}'_{i,jk}^{(\alpha\beta,\Gamma)} = (R_{ip}R_{jq}R_{kr})\mathcal{S}_{p,qr}^{(\alpha\beta)}. \quad (\text{B.18})$$

Analog lassen sich die folgenden Beziehungen für rotierte Momente mit geringerem Rang herleiten:

$$\mathcal{S}'_{i,j}^{(\alpha\beta,\Gamma)} = (R_{ip}R_{jq})\mathcal{S}_{p,q}^{(\alpha\beta,\Gamma)}, \quad \text{und} \quad \mathcal{S}'_i^{(\alpha\beta)} = R_{ip}\mathcal{S}_p^{(\alpha\beta)}. \quad (\text{B.19})$$

Die gezeigten Rotationsregeln lassen sich ebenfalls auf geometrische Volumenmomente anwenden.

C Zeitlicher Diskretisierungsfehler der Projektionsmethode

Im Folgenden soll gezeigt werden, wie sich die Anzahl der Subiteration N_{it} der in Kapitel 3.4 dargestellten Projektionsmethode auf den zeitlichen Diskretisierungsfehler auswirkt. Die Lösung der Transportgleichungen (3.98) und (3.102) erfolgt durch ein Crank-Nicolson-Schema, durch welches ein zeitlicher Fehler zweiter Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ eingebracht wird. Dies ist beispielsweise anhand Abbildung C.1 zu erkennen, welche die Fehlerkonvergenz für den Testfall des konvektiven Transport einer Feldgröße $\phi(x,t)$ aus Kapitel 4.1.4 mit einer kontinuierlichen Startlösung und einer sukzessiven Verfeinerung des Zeitschrittes darstellt. Die Startlösung ist dabei definiert durch

$$\phi(x, 0) = A \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{R^2} \right], \quad (\text{C.1})$$

mit $A = 1,0$, $x_0 = 0,25L$ und $R = 0,05L$. Der Fehler zweiter Ordnung lässt sich für diesen Testfall aufgrund der konstanten Hintergrundgeschwindigkeit U mit nur einer Iteration ($N_{it} = 1$) realisieren. Wenn dies nicht erfüllt ist oder die Dichte im Strömungsfeld variiert, muss der Projektionsschritt mit mindestens zwei Subiterationen ($N_{it} = 2$) durchgeführt werden, um eine zweite zeitliche Fehlerordnung zu erhalten. Dies ist in Abbildung C.2 anhand der zeitlichen Fehlerkonvergenz für den Testfall des pseudoisotropen Wirbels aus Kapitel 4.1.5 dargestellt. Für die Ergebnisse werden die

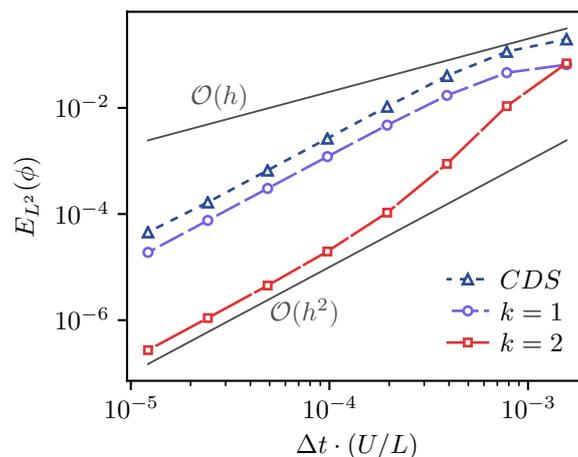


Abbildung C.1: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für die Konvektion einer Feldgröße ϕ unter sukzessiver Verfeinerung des Zeitschritts.

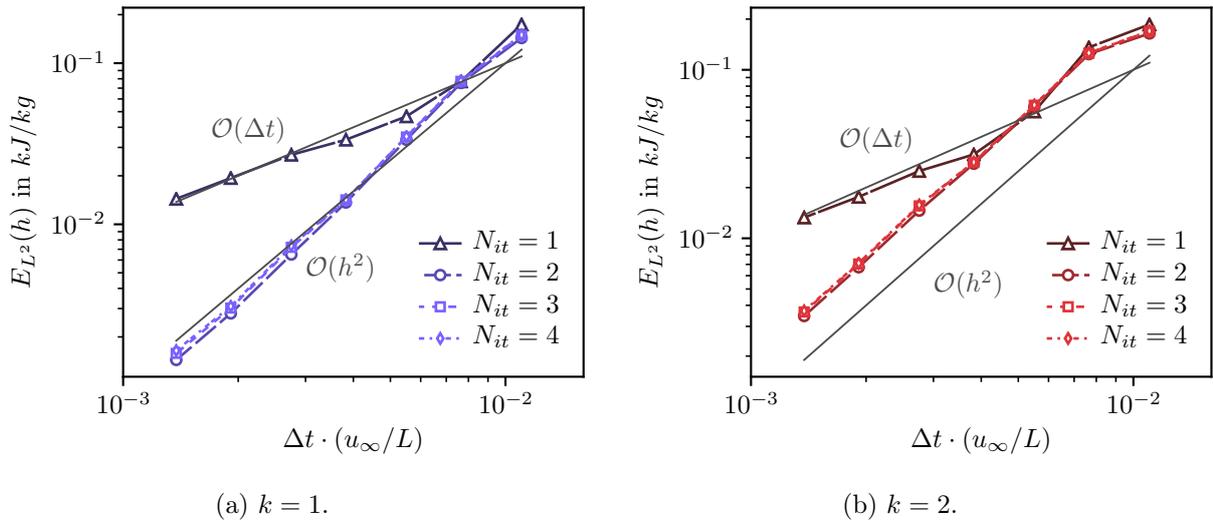


Abbildung C.2: Konvergenz der L^2 -Fehlernorm für den konvektiven Transport eines pseudoisotropen Wirbels unter sukzessiver Verfeinerung des Zeitschritts.

gleichen Parameter wie in Kapitel 4.1.5 gewählt. Lediglich die Hintergrundgeschwindigkeit wird auf $u_\infty = 25 \text{ m/s}$ reduziert, um den zeitlichen Fehler gegenüber dem räumlichen Fehler in den Vordergrund treten zu lassen. Für die beiden k -exakten Verfahren ist zu erkennen, dass sich für den Projektionsschritt mit nur einer Iteration ein zeitlicher Fehler erster Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t)$ manifestiert. Dieser entstammt der sequentiellen Behandlung der Transportgleichungen mit variabler Dichte. Ab $N_{it} = 2$ stellt sich hingegen eine zweite Ordnung ein. Eine weitere Erhöhung von N_{it} hat hingegen keinen wesentlichen Einfluss auf die Genauigkeit der beiden Verfahren. Dieses Verhalten wird auch in den Arbeit von Pierce [190] und Shunn et al. [226] beschrieben. Dort wird außerdem darauf hingewiesen, dass sich mehr Iterationen bei hohen Dichteverhältnissen stabilisierend auf das Lösungsverfahren auswirken. In Abbildung C.2 ist zu erkennen, dass das 2-exakte Verfahren über einen größeren zeitlichen Fehler verfügt als das 1-exakte Verfahren. Dies könnte mit dem Ansatz der verzögerten Korrektur in Zusammenhang stehen.

D Flussberechnung mit konventionellen Diskretisierungsverfahren

In diesem Abschnitt werden die in **ThetaCOM** implementierten konventionellen Verfahren zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse vorgestellt. Alle Methoden haben gemeinsam, dass der konvektive Fluss auf einer Fläche $A_{\alpha\beta}$ einer transportierten Feldgröße ϕ approximiert wird durch

$$\iint_{A_{\alpha\beta}} (\rho u_i \phi) n_i dA \approx \dot{m}^{(\alpha\beta)} \phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma}. \quad (\text{D.1})$$

Im Gegensatz zu den k -exakten Verfahren wird das Oberflächenintegral der Flussfunktion ohne höhere Oberflächenmomente approximiert. Der Massenfluss $\dot{m}^{(\alpha\beta)}$ über der Oberfläche $A_{\alpha\beta}$ lässt sich dadurch vereinfacht berechnen durch

$$\dot{m}^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} (\bar{\rho}_\alpha \bar{u}_{i,\alpha} + \bar{\rho}_\beta \bar{u}_{i,\beta}) \mathcal{S}_i^{(\alpha\beta)}. \quad (\text{D.2})$$

Diese Formulierung entspricht einer 0-exakten Rekonstruktion und verursacht auf verzerrten Rechengittern einen räumlichen Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(h)$. Dieser Fehler tritt in den Hintergrund, wenn die räumliche Variation von u_i und ρ klein gegenüber der transportierten Größe ϕ ist und der konvektive Fluss somit nur eine geringe Nichtlinearität aufweist. Die Approximation des Wertes $\phi|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ an der Elementoberfläche $A_{\alpha\beta}$ erfolgt über die folgende parametrisierte Gleichung:

$$\phi \Big|_{\mathbf{x}_\Gamma} \approx \bar{\phi}_u + \frac{1}{2} \psi_u^{(VK)} \left[a (\bar{\phi}_d - \bar{\phi}_u) + b \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_u}^{(0)} (x_{i,d} - x_{i,u}) + c \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \Big|_{\mathbf{x}_d}^{(0)} (x_{i,d} - x_{i,u}) \right]. \quad (\text{D.3})$$

Die Größe $\psi_u^{(VK)}$ stellt die Limiterfunktion nach Venkatakrishnan [245] dar, welche im Element auf der Aufwindseite berechnet wird. Ihre Berechnung erfolgt analog zum Limitierungsverfahren nach Barth und Jespersen in Gleichung (3.50), wobei eine veränderte Minimumfunktion $\widetilde{\min}(1, y)$ verwendet wird. Diese ist definiert durch

$$\widetilde{\min}(1, y) = \frac{y^2 + 2y}{y^2 + y + 2} \quad (\text{D.4})$$

und stellt somit im Vergleich zu Gleichung (3.51) eine differenzierbare Funktion dar. Letzteres wurde von Venkatakrishnan als Mittel zur Konvergenzbeschleunigung von iterativen Lösern bei stationären Probleme identifiziert [178, 245]. Mit Gleichung (D.3) lassen sich über die drei Parameter a , b und c verschiedene Diskretisierungsverfahren realisieren, welche in Tabelle D.1 dargestellt sind.

Tabelle D.1: Parameter für die Approximation von $\phi|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ in Gleichung (D.3) mit verschiedenen konventionellen Diskretisierungsschemata.

Schema	a	b	c
UDS	0	0	0
CDS	1	0	0
LUDS	0	1	0
QUDS	1/2	1/2	0
LD2	1	9/25	-9/25
4TH	1	1/3	-1/3

Das *Upwind Discretization Scheme* (UDS) ist ein Verfahren erster Ordnung. Es kennzeichnet sich durch eine hohe Stabilität, weist allerdings auch eine sehr hohe numerische Dissipation auf [247]. Für das CDS geht der Oberflächenwert $\phi|_{\mathbf{x}_\Gamma}$ als arithmetisches Mittel aus den Mittelwerten der beiden anliegenden Elemente hervor. Dies führt auf einem kartesischen Rechengitter zu einer zweiten räumlichen Fehlerordnung. Das Verfahren neigt allerdings zu unphysikalischen Oszillationen, wenn Gradienten der Lösung nicht ausreichend aufgelöst werden. Des Weiteren verfügt das Verfahren über keinerlei numerische Dissipation [81] und neigt daher zur instabilen Approximation des Transports chemischer Spezies, welche sich in Flammennähe durch sehr große Gradienten kennzeichnen. Das *Linear Upwind Discretization Scheme* (LUDS) [201] wird auch als Aufwindverfahren zweiter Ordnung bezeichnet [149]. Es hat seine Ursprünge in der Diskretisierung auf strukturierten Rechengittern, wobei der Wert an der Oberfläche linear aus den beiden stromaufwärts gelegenen Elementen rekonstruiert wird. Das QUDS-Verfahren¹ geht zurück auf die Arbeit von Leonard [138]. Hierbei erfolgt eine quadratische Rekonstruktion durch zwei stromaufwärts und ein stromabwärts gelegenes Element. Mit dem QUDS-Verfahren lässt sich der Wert auf der Oberfläche theoretisch auf einem kartesischen Gitter mit einer dritten Ordnung rekonstruieren. Allerdings nur, wenn dafür die Punktwerte an den Mittelpunkten der Elemente verwendet werden und nicht die volumetrischen Mittelwerte wie in Gleichung (D.3) [175]. Tabelle D.1 führt außerdem noch die beiden weiteren Verfahren LD2 und 4TH auf, welche in der Arbeit von Löwe et al. [146] beschrieben werden. Das 4TH-Schema rekonstruiert den Oberflächenwert so, dass ein linearer konvektiver Operator auf einem kartesischen Gitter mit einer zentralen vierten Ordnung approximiert wird. Dies wird durch eine Richardson Extrapolation bewerkstelligt, was ursprünglich in der Arbeit von Kok [130] auf strukturierten Gittern gezeigt wurde. Das LD2-Verfahren steht für *Low-Dispersion-Low-Dissipation Scheme*. Hierbei wurden die Koeffizienten b und c des 4TH-Verfahrens von Löwe et al. so angepasst, dass der dispersive Fehler des Verfahrens minimiert wird. Dadurch reduziert sich allerdings die räumliche Genauigkeit des konvektiven Operators auf eine zweite Ordnung. Ein ähnlicher Ansatz wurde beispielsweise auch von Tam und Webb [232] für das *Dispersion-Relation-Preserving* Finite-Differenzen-Schema verwendet, um eine Methode vierter Ordnung mit sehr guten dispersiven Eigenschaften zu realisieren.

¹Dieses Verfahren wird in der Literatur auch mit dem Namen *Quadratic Upwind Interpolation for Convection Kinematics* (QUICK) bezeichnet.

E Herleitung zum Testfall des konvektiven Transports eines pseudoisentropen Wirbels

Der Testfall des konvektiven Transports eines isentropen Wirbels wurde erstmals in der Arbeit von Shu [225] dargestellt und wird häufig eingesetzt, um die Genauigkeit des konvektiven Operators von Diskretisierungsverfahren hoher Ordnung zu verifizieren [110, 229, 258, 266]. Da er jedoch für die kompressiblen Euler-Gleichungen¹ und entsprechend hohe Mach-Zahlen formuliert wurde, ist er nicht unmittelbar zur Verifikation eines Strömungslösers für den Bereich niedriger Mach-Zahlen geeignet. Im Folgenden soll jedoch dargestellt werden, wie sich der Testfall für die Beschreibung eines pseudoisentropen Wirbels verändern lässt, um somit auch den Grenzfall niedriger Mach-Zahlen abzubilden. Diese Herleitung ist beispielsweise auch in der Arbeit von Gendre et al. [84] aufgeführt. Ein umfangreicher Überblick zur Herleitung und zu Fallstricken des kompressiblen Testfalls ist außerdem in der Arbeit von Spiegel et al. [229] zu finden. Startpunkt stellt die analytische Lösung der Euler-Gleichungen für einen isentropen Wirbel dar. Jede Feldgröße ϕ wird dazu in einen konstanten und einen dynamischen Anteil zerlegt, welche in Anlehnung an die in Abschnitt A beschriebene Aufteilung des Druckes mit ϕ_0 und ϕ_d bezeichnet werden. Die Lösung des isentropen Wirbels lässt sich mit dem jeweils dynamischen Anteil des Geschwindigkeitsfeldes $\mathbf{u}_d(\mathbf{x})$ und der Temperatur $T_d(\mathbf{x})$ darstellen zu

$$u_{1,d}(\mathbf{x}) = -a_0 \left(\frac{x_2}{R} \right) P(\mathbf{x}), \quad (\text{E.1a})$$

$$u_{2,d}(\mathbf{x}) = a_0 \left(\frac{x_1}{R} \right) P(\mathbf{x}), \quad (\text{E.1b})$$

$$T_d(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} T_0 (\gamma - 1) P^2(\mathbf{x}). \quad (\text{E.1c})$$

Hierbei stellt $r^2 = x_1^2 + x_2^2$ die radiale Koordinate und R die Größenskale des Wirbels dar. Die Größen a_0 und T_0 bezeichnen die Schallgeschwindigkeit und die Temperatur der uniformen Hintergrundströmung. Die Störfunktion $P(\mathbf{x})$ wird durch eine Gaußsche Funktion der Form

$$P(\mathbf{x}) = \kappa \exp \left(-\frac{r^2}{2R^2} \right) \quad (\text{E.2})$$

definiert, wobei der Parameter κ das Maß der Störung und somit die Wirbelstärke vorgibt. Das Fluid wird als perfektes Gas behandelt. Somit lässt sich der thermodynamische Zustand durch

¹Die Euler-Gleichungen stellen einen Spezialfall der in Gleichung (A.1) beschriebenen kompressiblen Erhaltungsgleichungen für ein reibungsfreies Fluid dar [73].

das allgemeine Gasgesetz $p = R_u \rho T / M$ beschreiben und es gilt die Relation $R_u / M = c_p - c_v$. Das allgemeine Gasgesetz ist ebenfalls für die konstanten Anteile $p_0 = R_u \rho_0 T_0 / M$ gültig. Unter der Annahme eines isentropen Wirbels lassen sich Zustandsänderungen in der Strömung durch die folgenden adiabatischen Beziehungen beschreiben

$$\left(\frac{p}{p_0}\right) = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\gamma/(\gamma-1)}, \quad \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right) = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/(\gamma-1)}. \quad (\text{E.3})$$

Hierbei stellt $\gamma = c_p / c_v$ den Isentropenexponent und ρ die Dichte dar. Mit diesen Relationen lassen sich Druck und Dichte darstellen durch

$$p = p_0 \left(1 + \frac{T_d}{T_0}\right)^{\gamma/(\gamma-1)}, \quad \rho = \rho_0 \left(1 + \frac{T_d}{T_0}\right)^{1/(\gamma-1)}. \quad (\text{E.4})$$

Über die Gleichungen (E.1) und (E.4) lässt sich die analytische Lösung des Problems als eine translation des Wirbels in Richtung des konstanten Geschwindigkeitsanteils \mathbf{u}_0 darstellen. Wie in Abschnitt A bereits dargestellt wurde, kann der dynamische Druckanteil für kleine Mach-Zahlen im idealen Gasgesetz vernachlässigt werden:

$$p_0 = \frac{\rho R_u T}{M}. \quad (\text{E.5})$$

Durch Einsetzen der Dichte $\rho = \rho_0 + \rho_d$ und der Temperatur $T = T_0 + T_d$ in diese Gleichung wird offensichtlich, dass diese Relation zunehmend den thermodynamischen Zustand falsch beschreibt, wenn die dynamischen Anteile ansteigen

$$p_0 = \frac{R_u}{M} (\rho_0 T_0 + \rho_d T_0 + \rho_0 T_d + \rho_d T_d). \quad (\text{E.6})$$

Es gilt daher eine Lösung für ρ , T und p zu finden, durch welche die Relation (E.5) erhalten bleibt und mit welcher gleichzeitig der Fehler in den Euler-Gleichungen minimiert wird. Hierfür wird eine Taylor-Entwicklung der Feldgrößen p und ρ durchgeführt, wobei das Temperaturverhältnis $\Theta := (T_d / T_0)$ als Variable agiert. Die Taylor-Entwicklung des Drucks p lässt sich damit ausdrücken durch

$$p = p|_{\Theta=0} + \Theta \left. \frac{\partial p}{\partial \Theta} \right|_{\Theta=0} + \frac{1}{2} \Theta^2 \left. \frac{\partial^2 p}{\partial \Theta^2} \right|_{\Theta=0} + \dots + \mathcal{O}(\kappa^{2k} p_0). \quad (\text{E.7})$$

Der Term $\mathcal{O}(\kappa^{2k} p_0)$ kennzeichnet den Fehler in den Euler-Gleichungen bei der Vernachlässigung des k -ten Glieds in der Taylorreihe des dynamischen Druckanteils. Er resultiert aus der Beziehung $\Theta^k \propto \kappa^{2k}$, welche sich aus der Definition der Temperatur-Perturbation in Gleichung (E.1) ergibt. Für den Druck und die Dichte lassen sich die Koeffizienten der Taylorreihe durch Ableiten der Gleichungen (E.4) und Auswerten am Punkt $\Theta = 0$ bestimmen. Für den Testfall in dieser Arbeit werden die Taylorreihen beider Größen nach dem dritten Glied abgebrochen, sodass folgende Koeffizienten

berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned}
 p|_{\Theta=0} &= p_0, & \rho|_{\Theta=0} &= \rho_0, \\
 \left. \frac{\partial p}{\partial \Theta} \right|_{\Theta=0} &= \frac{\gamma}{\gamma-1} p_0, & \left. \frac{\partial \rho}{\partial \Theta} \right|_{\Theta=0} &= \frac{1}{\gamma-1} \rho_0, \\
 \left. \frac{\partial^2 p}{\partial \Theta^2} \right|_{\Theta=0} &= \frac{\gamma}{(\gamma-1)^2} p_0, & \left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial \Theta^2} \right|_{\Theta=0} &= -\frac{\gamma-2}{(\gamma-1)^2} \rho_0, \\
 \left. \frac{\partial^3 p}{\partial \Theta^3} \right|_{\Theta=0} &= -\frac{\gamma(\gamma-2)}{(\gamma-1)^3} p_0, & \left. \frac{\partial^3 \rho}{\partial \Theta^3} \right|_{\Theta=0} &= \frac{(\gamma-2)(2\gamma-3)}{(\gamma-1)^3} \rho_0.
 \end{aligned} \tag{E.8}$$

Die Koeffizienten in Gleichung (E.8) und das Temperaturverhältnis Θ werden schließlich in die Taylor-Polynome des Drucks und der Dichte eingesetzt. Zusammen mit dem Geschwindigkeitsfeld aus Gleichung (E.1) ergeben sich dadurch folgende Startbedingung für den Testfall des pseudoisotropen Wirbeltransports:

$$u_1(\mathbf{x}) = u_{1,0} - a_0 \left(\frac{x_2}{R} \right) P(\mathbf{x}), \tag{E.9a}$$

$$u_2(\mathbf{x}) = u_{2,0} + a_0 \left(\frac{x_1}{R} \right) P(\mathbf{x}), \tag{E.9b}$$

$$p(\mathbf{x}) = p_0 - \frac{1}{2} \gamma p_0 \left[P^2(\mathbf{x}) - \frac{1}{4} P^4(\mathbf{x}) - \frac{1}{24} (\gamma-2) P^6(\mathbf{x}) \right], \tag{E.9c}$$

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_0 - \frac{1}{2} \rho_0 \left[P^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{4} (\gamma-2) P^4(\mathbf{x}) + \frac{1}{24} (\gamma-2) (2\gamma-3) P^6(\mathbf{x}) \right]. \tag{E.9d}$$

Literaturverzeichnis

- [1] ABGRALL, R.: On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes: Analysis and implementation. In: *Journal of Computational Physics* 114 (1994), Nr. 1, S. 45–58. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1994.1148>
- [2] ABGRALL, R.; LARAT, A. ; RICCHIUTO, M.: Construction of very high order residual distribution schemes for steady inviscid flow problems on hybrid unstructured meshes. In: *Journal of Computational Physics* 230 (2011), Nr. 11, S. 4103–4136. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2010.07.035>
- [3] ALMGREN, A. S.; BELL, J. B.; COLELLA, P.; HOWELL, L. H. ; WELCOME, M. L.: A conservative adaptive projection method for the variable density incompressible Navier-Stokes equations. In: *Journal of Computational Physics* 142 (1998), Nr. 1, S. 1–46. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.5890>
- [4] ANDERSON, D.; TANNEHILL, J. C. ; PLETCHER, R. H.: *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Taylor & Francis, 2016. DOI: <https://dx.doi.org/10.1201/9781351124027>
- [5] ANTONIADIS, A. F.; DRIKAKIS, D.; FARMAKIS, P. S.; FU, L.; KOKKINAKIS, I.; NOGUEIRA, X.; SILVA, P. A.; SKOTE, M.; TITAREV, V. ; TSOUTSANIS, P.: UCNS3D: An open-source high-order finite-volume unstructured CFD solver. In: *Computer Physics Communications* 279 (2022), 108453. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108453>
- [6] ANTONIADIS, A. F.; TSOUTSANIS, P. ; DRIKAKIS, D.: Assessment of high-order finite volume methods on unstructured meshes for RANS solutions of aeronautical configurations. In: *Computers & Fluids* 146 (2017), S. 86–104. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2017.01.002>
- [7] BARLOW, R.: Proceedings of the international workshop on measurement and computation of turbulent nonpremixed flames / Sandia National Laboratories (SNL-CA), Livermore, CA (United States). 1996. Forschungsbericht
- [8] BARLOW, R.; KARPETIS, A.; FRANK, J. ; CHEN, J.-Y.: Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames. In: *Combustion and Flame* 127 (2001), Nr. 3, S. 2102–2118. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180\(01\)00313-3](https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180(01)00313-3)
- [9] BARTH, T.; FREDERICKSON, P.: Higher order solution of the Euler equations on unstructured grids using quadratic reconstruction. In: *28th Aerospace Sciences Meeting, AIAA-90-0013*, 1990. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.1990-13>

- [10] BARTH, T.; JESPERSEN, D.: The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. In: *27th Aerospace Sciences Meeting, AIAA-89-0366*, 1989. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.1989-366>
- [11] BARTH, T.; OHLBERGER, M.: Finite volume methods: Foundation and analysis. In: *Encyclopedia of Computational Mechanics* (2004). DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/9781119176817.ecm2010>
- [12] BARTH, T. J.: Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for the Euler and Navier-Stokes equations. In: *AGARD, Special Course on Unstructured Grid Methods for Advection Dominated Flows* (1992)
- [13] BASSI, F.; CRIVELLINI, A.; DI PIETRO, D. A. ; REBAY, S.: An implicit high-order discontinuous Galerkin method for steady and unsteady incompressible flows. In: *Computers & Fluids* 36 (2007), Nr. 10, S. 1529–1546. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2007.03.012>
- [14] BEALE, R.; JACKSON, T.: *Neural computing - An introduction*. Institute of Physics Publishing, 1990. DOI: https://dx.doi.org/10.1007/978-1-4471-0395-0_4
- [15] BECK, A. D.; ZEIFANG, J.; SCHWARZ, A. ; FLAD, D. G.: A neural network based shock detection and localization approach for discontinuous Galerkin methods. In: *Journal of Computational Physics* 423 (2020), 109824. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109824>
- [16] BELL, J. B.; MARCUS, D. L.: A second-order projection method for variable-density flows. In: *Journal of Computational Physics* 101 (1992), Nr. 2, S. 334–348. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90011-M](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90011-M)
- [17] BERNARD, M.; LARTIGUE, G.; BALARAC, G.; MOUREAU, V. ; PUIGT, G.: A framework to perform high-order deconvolution for finite-volume method on simplicial meshes. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 92 (2020), Nr. 11, S. 1551–1583. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.4839>
- [18] BIJL, H.; WESSELING, P.: A unified method for computing incompressible and compressible flows in boundary-fitted coordinates. In: *Journal of Computational Physics* 141 (1998), Nr. 2, S. 153–173. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.5914>
- [19] BISHOP, C. M.: *Neural networks for pattern recognition*. Clarendon Press, 1995. DOI: <https://dx.doi.org/10.1093/oso/9780198538493.001.0001>
- [20] BLACHA, T.: *Effiziente Rußmodellierung in laminaren und turbulenten Flammen unterschiedlicher Brennstoffe*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2012. DOI: <https://dx.doi.org/10.18419/opus-3891>
- [21] BLACHA, T.; DI DOMENICO, M.; GERLINGER, P. ; AIGNER, M.: Soot predictions in premixed and non-premixed laminar flames using a sectional approach for PAHs and soot. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), Nr. 1, S. 181–193. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.07.006>

-
- [22] BLAZEK, J.: *Computational fluid dynamics: Principles and applications*. Butterworth-Heinemann, 2015. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/C2013-0-19038-1>
- [23] BOGEY, C.; BAILLY, C.: Turbulence and energy budget in a self-preserving round jet: direct evaluation using large eddy simulation. In: *Journal of Fluid Mechanics* 627 (2009), S. 129–160. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112009005801>
- [24] BOTELLA, O.; PEYRET, R.: Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. In: *Computers & Fluids* 27 (1998), Nr. 4, S. 421–433. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930\(98\)00002-4](https://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930(98)00002-4)
- [25] BOTTOU, L.; BOUSQUET, O.: The tradeoffs of large scale learning. In: *Advances in Neural Information Processing Systems* 20 (2007). DOI: <https://dx.doi.org/10.7551/mitpress/8996.003.0015>
- [26] BOUSSINESQ, J.: Theorie de l'écoulement tourbillant. In: *Mémoires de l'Académie royale des sciences (Paris)* 23 (1877), S. 46–50
- [27] BRÄUNLING, W. J.: *Flugzeugtriebwerke: Grundlagen, Aero-Thermodynamik, ideale und reale Kreisprozesse, Thermische Turbomaschinen, Komponenten, Emissionen und Systeme*. Springer-Verlag, 2015. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-34539-5>
- [28] BRENNER, P.: *Towards rather comprehensive methods for finite volume methods*. Oktober 2010. DOI: <https://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.29412.53127>
- [29] BRUNEAU, C.-H.; SAAD, M.: The 2d lid-driven cavity problem revisited. In: *Computers & Fluids* 35 (2006), Nr. 3, S. 326–348. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2004.12.004>
- [30] BRUNO, O. P.; HESTHAVEN, J. S. ; LEIBOVICI, D. V.: FC-based shock-dynamics solver with neural-network localized artificial-viscosity assignment. In: *Journal of Computational Physics: X* 15 (2022), 100110. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcpx.2022.100110>
- [31] CANT, R. S.; MASTORAKOS, E.: *An introduction to turbulent reacting flows*. Imperial College Press, 2008. DOI: <https://dx.doi.org/10.1142/p498>
- [32] CARETTO, L.; GOSMAN, A.; PATANKAR, S. ; SPALDING, D.: Two calculation procedures for steady, three-dimensional flows with recirculation. In: *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics* Springer, 1973. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/BFb0112677>, S. 60–68
- [33] CHAREST, M. R.; CANFIELD, T. R.; MORGAN, N. R.; WALTZ, J. ; WOHLBIER, J. G.: A high-order vertex-based central ENO finite-volume scheme for three-dimensional compressible flows. In: *Computers & Fluids* 114 (2015), S. 172–192. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2015.03.001>
- [34] CHAREST, M. R.; GROTH, C. P. ; GAUTHIER, P. Q.: A high-order central ENO finite-volume scheme for three-dimensional low-speed viscous flows on unstructured mesh. In:

- Communications in Computational Physics* 17 (2015), Nr. 3, S. 615–656. DOI: <https://dx.doi.org/10.4208/cicp.091013.281114a>
- [35] CHENG, T.-C.; FRUECHTEL, G.; NEUBER, A.; LIPP, F.; HASSEL, E. P. ; JANICKA, J.: Experimental data base for numerical simulations of turbulent diffusion flames. In: *Forschung im Ingenieurwesen* 61 (1995), S. 165–171. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/BF02628793>
- [36] CHORIN, A. J.: Numerical solution of the Navier-Stokes equations. In: *Mathematics of Computation* 22 (1968), Nr. 104, S. 745–762. DOI: <https://dx.doi.org/10.1090/S0025-5718-1968-0242392-2>
- [37] CLAIN, S.; DIOT, S. ; LOUBÈRE, R.: A high-order finite volume method for systems of conservation laws Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD). In: *Journal of Computational Physics* 230 (2011), Nr. 10, S. 4028–4050. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2011.02.026>
- [38] COCKBURN, B.; HOU, S. ; SHU, C.-W.: The Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws. IV. The multidimensional case. In: *Mathematics of Computation* 54 (1990), Nr. 190, S. 545–581. DOI: <https://dx.doi.org/10.1090/S0025-5718-1990-1010597-0>
- [39] COCKBURN, B.; LIN, S.-Y. ; SHU, C.-W.: TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws III: One-dimensional systems. In: *Journal of Computational Physics* 84 (1989), Nr. 1, S. 90–113. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90183-6a](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(89)90183-6a)
- [40] COCKBURN, B.; SHU, C.-W.: TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws. II. General framework. In: *Mathematics of Computation* 52 (1989), Nr. 186, S. 411–435. DOI: <https://dx.doi.org/10.1090/S0025-5718-1989-0983311-4>
- [41] COCKBURN, B.; SHU, C.-W.: The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V: Multidimensional systems. In: *Journal of Computational Physics* 141 (1998), Nr. 2, S. 199–224. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.5892>
- [42] COFFEE, T.; HEIMERL, J.: Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames. In: *Combustion and Flame* 43 (1981), S. 273–289. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0010-2180\(81\)90027-4](https://dx.doi.org/10.1016/0010-2180(81)90027-4)
- [43] COLE, I. R.: *Modelling CPV*, Loughborough University, Dissertation, 2015
- [44] COMTE-BELLOT, G.; CORRSIN, S.: Simple Eulerian time correlation of full-and narrow-band velocity signals in grid-generated, ‘isotropic’ turbulence. In: *Journal of Fluid Mechanics* 48 (1971), Nr. 2, S. 273–337. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112071001599>
- [45] COOK, A. W.; RILEY, J. J.: Direct numerical simulation of a turbulent reactive plume on a parallel computer. In: *Journal of Computational Physics* 129 (1996), Nr. 2, S. 263–283. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1996.0249>

- [46] CORREA, S. M.: A review of NO_x formation under gas-turbine combustion conditions. In: *Combustion Science and Technology* 87 (1993), Nr. 1-6, S. 329–362. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102209208947221>
- [47] CRANK, J.; NICOLSON, P.: A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* Bd. 43 Cambridge University Press, 1947. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0305004100023197>, S. 50–67
- [48] DAWKINS, P.: *Calculus III - Surface integrals*. <http://tutorial.math.lamar.edu/Classes/CalcIII/SurfaceIntegrals.aspx>, . Besucht am 17.5.2019
- [49] DEMIRDŽIĆ, I.: On the discretization of the diffusion term in finite-volume continuum mechanics. In: *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 68 (2015), Nr. 1, S. 1–10. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/10407790.2014.985992>
- [50] DEMIRDŽIĆ, I.; MUZAFERIJA, S.: Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 125 (1995), Nr. 1-4, S. 235–255. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(95\)00800-G](https://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(95)00800-G)
- [51] DESJARDINS, O.; BLANQUART, G.; BALARAC, G. ; PITSCH, H.: High order conservative finite difference scheme for variable density low Mach number turbulent flows. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), Nr. 15, S. 7125–7159. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.03.027>
- [52] DI DOMENICO, M.: *Numerical simulations of soot formation in turbulent flows*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2008. DOI: <https://dx.doi.org/10.18419/opus-6678>
- [53] DI DOMENICO, M.; GERLINGER, P. ; AIGNER, M.: Development and validation of a new soot formation model for gas turbine combustor simulations. In: *Combustion and Flame* 157 (2010), Nr. 2, S. 246–258. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.10.015>
- [54] DISCACCIATI, N.; HESTHAVEN, J. S. ; RAY, D.: Controlling oscillations in high-order Discontinuous Galerkin schemes using artificial viscosity tuned by neural networks. In: *Journal of Computational Physics* 409 (2020), 109304. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109304>
- [55] DITTMANN, T.; FIOLITAKIS, A.; GERLINGER, P. M. ; AIGNER, M.: Simulation of a piloted turbulent sooting jet-flame using a transported-PDF and a sectional soot modeling approach. In: *AIAA Scitech 2019 Forum, AIAA-2019-0445*, 2019. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2019-0445>
- [56] DUCROS, F.; NICOUD, F. ; POINSOT, T.: Wall-adapting local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries. In: *Numerical Methods for Fluid Dynamics VI* (1998), S. 293–299

- [57] DUMBSER, M.; KÄSER, M.: Arbitrary high order non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for linear hyperbolic systems. In: *Journal of Computational Physics* 221 (2007), Nr. 2, S. 693–723. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.06.043>
- [58] DUMBSER, M.; KÄSER, M.; TITAREV, V. A. ; TORO, E. F.: Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems. In: *Journal of Computational Physics* 226 (2007), Nr. 1, S. 204–243. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2007.04.004a>
- [59] DUSCHEK, A.; HOCHRAINER, A.: *Tensorrechnung in analytischer Darstellung*. Springer, 1965
- [60] D'AUSILIO, A.; STANKOVIC, I. ; MERCI, B.: Numerical study on the importance of the turbulent inlet boundary condition and differential diffusion in a turbulent H₂/N₂/air jet diffusion flame. In: *Combustion Science and Technology* 191 (2019), Nr. 1, S. 109–125. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102202.2018.1452402>
- [61] EBERLE, C.: *Ein effizienter Sektionalansatz zur Modellierung von PAHs und nicht sphärischen Rußpartikeln unter technisch relevanten Verbrennungsbedingungen*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2020. DOI: <https://dx.doi.org/10.18419/opus-10912>
- [62] EBERLE, C.; GERLINGER, P. ; AIGNER, M.: A sectional PAH model with reversible PAH chemistry for CFD soot simulations. In: *Combustion and Flame* 179 (2017), S. 63–73. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.01.019>
- [63] EBERLE, C.; GERLINGER, P.; GEIGLE, K. P. ; AIGNER, M.: Toward finite-rate chemistry large-eddy simulations of sooting swirl flames. In: *Combustion Science and Technology* 190 (2018), Nr. 7, S. 1194–1217. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102202.2018.1443444>
- [64] ECKEL, G.; GROHMANN, J.; CANTU, L.; SLAVINSKAYA, N.; KATHROTIA, T.; RACHNER, M.; LE CLERCQ, P.; MEIER, W. ; AIGNER, M.: LES of a swirl-stabilized kerosene spray flame with a multi-component vaporization model and detailed chemistry. In: *Combustion and Flame* 207 (2019), S. 134–152. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.05.011>
- [65] ECKEL, G.; LE CLERCQ, P.; KATHROTIA, T.; SAENGER, A.; FLECK, S.; MANCINI, M.; KOLB, T. ; AIGNER, M.: Entrained flow gasification. Part 3: Insight into the injector near-field by large eddy simulation with detailed chemistry. In: *Fuel* 223 (2018), S. 164–178. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2018.02.176>
- [66] EGGELS, J.; UNGER, F.; WEISS, M.; WESTERWEEL, J.; ADRIAN, R. J.; FRIEDRICH, R. ; NIEUWSTADT, F.: Fully developed turbulent pipe flow: A comparison between direct numerical simulation and experiment. In: *Journal of Fluid Mechanics* 268 (1994), S. 175–210. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S002211209400131X>
- [67] EICHENBERGER, D.; ROBERTS, W.: Effect of unsteady stretch on spark-ignited flame kernel survival. In: *Combustion and Flame* 118 (1999), Nr. 3, S. 469–478. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180\(98\)00169-2](https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180(98)00169-2)

- [68] EIGENTLER, F.; GERLINGER, P.: A detailed PAH and soot model for complex fuels in CFD applications. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 109 (2022), Nr. 1, S. 225–251. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/s10494-022-00319-9>
- [69] EKATERINARIS, J. A.: High-order accurate, low numerical diffusion methods for aerodynamics. In: *Progress in Aerospace Sciences* 41 (2005), Nr. 3-4, S. 192–300. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.paerosci.2005.03.003>
- [70] EMMI, Y.; FIOLITAKIS, A.; AIGNER, M.; GENIN, F. ; SYED, K.: A new model approach for convective wall heat losses in DQMOM-IEM simulations for turbulent reactive flows. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 141 (2019), Nr. 5, 051001. DOI: <https://dx.doi.org/10.1115/1.4041726>
- [71] ENDERLE, B.; RAUCH, B.; GRIMM, F.; ECKEL, G. ; AIGNER, M.: Non-intrusive uncertainty quantification in the simulation of turbulent spray combustion using polynomial chaos expansion: A case study. In: *Combustion and Flame* 213 (2020), S. 26–38. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.11.021>
- [72] FAVRE, A.: Equations des gaz turbulents compressibles. In: *Journal de Mecanique* 4 (1965), Nr. 3
- [73] FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. ; STREET, R. L.: *Computational methods for fluid dynamics*. Bd. 3. Springer, 2002. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-56026-2>
- [74] FILOSA, A.: *Numerical investigation of thermo-acoustic instabilities using detailed chemistry approaches*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2016. DOI: <https://dx.doi.org/10.18419/opus-9120>
- [75] FIOLITAKIS, A.: *Numerische Berechnung von Stickoxiden in turbulenten Flammen mit Transportgleichungs-PDF-Verfahren*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2014. DOI: <https://dx.doi.org/10.18419/opus-3942>
- [76] FIOLITAKIS, A.; ARNDT, C.: Transported PDF simulation of auto-ignition of a turbulent methane jet in a hot, vitiated coflow. In: *Combustion Theory and Modelling* 24 (2020), Nr. 2, S. 326–361. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/13647830.2019.1682197>
- [77] FIOLITAKIS, A.; ESS, P. R.; GERLINGER, P. ; AIGNER, M.: Modeling of heat transfer and differential diffusion in transported PDF methods. In: *Combustion and Flame* 161 (2014), Nr. 8, S. 2107–2119. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2014.01.021>
- [78] FORKEL, H.; JANICKA, J.: Large-eddy simulation of a turbulent hydrogen diffusion flame. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 65 (2000), S. 163–175. DOI: <https://dx.doi.org/10.1023/A:1011497715385>
- [79] FRENKLACH, M.; WANG, H.; GOLDENBERG, M.; SMITH, G.; GOLDEN, D.; BOWMAN, C.; HANSON, R.; GARDINER, W. ; LISSIANSKI, V.: GRI-Mech - An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion / Gas Research Institute. 1995. Forschungsbericht. Technical Report No. GRI-95/0058

- [80] FRIEDRICH, O.: Weighted essentially non-oscillatory schemes for the interpolation of mean values on unstructured grids. In: *Journal of Computational Physics* 144 (1998), Nr. 1, S. 194–212. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.5988>
- [81] FROEHLICH, J.: *Large eddy simulation turbulenter Stroemungen*. Bd. 1. Springer, 2006. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/978-3-8351-9051-1>
- [82] FUKAGATA, K.; KASAGI, N.: Highly energy-conservative finite difference method for the cylindrical coordinate system. In: *Journal of Computational Physics* 181 (2002), Nr. 2, S. 478–498. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7138>
- [83] GASSNER, G. J.; LÖRCHER, F.; MUNZ, C.-D. ; HESTHAVEN, J. S.: Polymorphic nodal elements and their application in discontinuous Galerkin methods. In: *Journal of Computational Physics* 228 (2009), Nr. 5, S. 1573–1590. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.11.012>
- [84] GENDRE, F.; RICOT, D.; FRITZ, G. ; SAGAUT, P.: Grid refinement for aeroacoustics in the lattice Boltzmann method: A directional splitting approach. In: *Physical Review E* 96 (2017), Nr. 2, 023311. DOI: <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.96.023311>
- [85] GERLINGER, P.: Investigation of an assumed PDF approach for finite-rate chemistry. In: *Combustion Science and Technology* 175 (2003), Nr. 5, S. 841–872. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102200302410>
- [86] GERLINGER, P.: *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Springer-Verlag, 2005. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/3-540-27535-5>
- [87] GHIA, U.; GHIA, K. N. ; SHIN, C.: High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. In: *Journal of Computational Physics* 48 (1982), Nr. 3, S. 387–411. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(82\)90058-4](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(82)90058-4)
- [88] GICQUEL, L. Y.; STAFFELBACH, G. ; POINSOT, T.: Large eddy simulations of gaseous flames in gas turbine combustion chambers. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 38 (2012), Nr. 6, S. 782–817. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.pecs.2012.04.004>
- [89] GIRIMAJI, S.: Assumed β -pdf model for turbulent mixing: Validation and extension to multiple scalar mixing. In: *Combustion Science and Technology* 78 (1991), Nr. 4-6, S. 177–196. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102209108951748>
- [90] GODUNOV, S.: A finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. In: *Matematicheskii Sbornik* 47 (1959), Nr. 89-3, S. 271–306
- [91] GOHIL, T. B.; SAHA, A. K. ; MURALIDHAR, K.: Large eddy simulation of a free circular jet. In: *Journal of Fluids Engineering* 136 (2014), Nr. 5. DOI: <https://dx.doi.org/10.1115/1.4026563>
- [92] GORDON, S.; MCBRIDE, B. J.: Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouguet

- detonations. Scientific and Technical Information Office, National Aeronautics and Space Administration, 1976. Forschungsbericht
- [93] GOTTLIEB, D.; SHU, C.-W.: On the Gibbs phenomenon and its resolution. In: *SIAM Review* 39 (1997), Nr. 4, S. 644–668. DOI: <https://dx.doi.org/10.1137/S0036144596301390>
- [94] GRADER, M.; EBERLE, C. ; GERLINGER, P.: Large-eddy simulation and analysis of a sooting lifted turbulent jet flame. In: *Combustion and Flame* 215 (2020), S. 458–470. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.01.042>
- [95] GRADER, M.; YIN, Z.; GEIGLE, K. P. ; GERLINGER, P.: Influence of flow field dynamics on soot evolution in an aero-engine model combustor. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (2021), Nr. 4, S. 6421–6429. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2020.05.019>
- [96] GRIMM, F.; OHNO, D.; NOLL, B.; AIGNER, M.; EWERT, R. ; DIERKE, J.: Broadband combustion noise simulation of the PRECCINSTA burner based on stochastic sound sources. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 139 (2017), Nr. 1. DOI: <https://dx.doi.org/10.1115/1.4034236>
- [97] GRIMM, F.; REICHLING, G.; EWERT, R.; DIERKE, J.; NOLL, B. ; AIGNER, M.: Stochastic and direct combustion noise simulation of a gas turbine model combustor. In: *Acta Acustica united with Acustica* 103 (2017), Nr. 2, S. 262–275. DOI: <https://dx.doi.org/10.3813/AAA.919055>
- [98] GRIMM, F.; SETZWEIN, F.; WERNER, S.; STÖHR, M.; DIERKE, J.; EWERT, R.; NOLL, B. ; AIGNER, M.: Combustion noise dependency on thermal load and global equivalence ratio in a swirl-stabilized combustor. In: *AIAA Scitech 2019 Forum, AIAA-2019-1582*, 2019. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2019-1582>
- [99] GROSSHANDLER, W. L.: RADCAL: A narrow band model for radiation. In: *Calculations in a Combustion Environment, NIST Technical Note 1402* (1993). DOI: <https://dx.doi.org/10.6028/nist.tn.1402>
- [100] GUILLARD, H.; NKONGA, B.: On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit: A review. In: *Handbook of Numerical Analysis* 18 (2017), S. 203–231. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/bs.hna.2016.09.002>
- [101] GUILLARD, H.; VIOZAT, C.: On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit. In: *Computers & Fluids* 28 (1999), Nr. 1, S. 63–86. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930\(98\)00017-6](https://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930(98)00017-6)
- [102] GUTKNECHT, M. H.: A brief introduction to Krylov space methods for solving linear systems. In: *Frontiers of Computational Science: Proceedings of the International Symposium on Frontiers of Computational Science 2005* Springer, 2007. DOI: https://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-46375-7_5, S. 53–62
- [103] HAGA, T.; GAO, H. ; WANG, Z. J.: A high-order unifying discontinuous formulation for the Navier-Stokes equations on 3d mixed grids. In: *Mathematical Modelling of Natural Phenomena* 6 (2011), Nr. 3, S. 28–56. DOI: <https://dx.doi.org/10.1051/mmnp/20116302>

- [104] HAGAN, M. T.; MENHAJ, M. B.: Training feedforward networks with the Marquardt algorithm. In: *IEEE Transactions on Neural Networks* 5 (1994), Nr. 6, S. 989–993. DOI: <https://dx.doi.org/10.1109/72.329697>
- [105] HAIDER, F.; BERTIER, N.; COURBET, B.; VUILLOT, F. ; CROISILLE, J.: *Application of a high order finite volume scheme on unstructured grids to fluid dynamics and aerothermochemistry*. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01111360>. Januar 2015. HAL ID: hal-01111360
- [106] HAIDER, F.; BRENNER, P.; COURBET, B. ; CROISILLE, J. P.: Efficient implementation of high order reconstruction in finite volume methods. In: *Finite Volumes for Complex Applications VI - Problems and Perspectives, Springer Proceedings in Mathematics* 4 (2011), S. 553–560. DOI: https://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-20671-9_58
- [107] HAIDER, F.: *Discrétisation en maillage non structuré général et applications LES*, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, Dissertation, 2009
- [108] HAIDER, F.; BRENNER, P.; COURBET, B. ; CROISILLE, J.-P.: Parallel implementation of k-exact finite volume reconstruction on unstructured grids. In: *High Order Nonlinear Numerical Schemes for Evolutionary PDEs*. Springer, 2014, S. 59–75
- [109] HAYKIN, S.: *Neural networks: A comprehensive foundation*. Prentice Hall, 1995
- [110] HESTHAVEN, J. S.; WARBURTON, T.: *Nodal discontinuous Galerkin methods: Algorithms, analysis, and applications*. Springer Science & Business Media, 2007. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-72067-8>
- [111] HIRSCH, C.: *Numerical computation of internal and external flows: Computational methods for inviscid and viscous flows, Vol. 1 and 2*. John Wiley & Sons, Chichester, New York, 1990. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/B978-0-7506-6594-0.X5037-1>
- [112] HUSSEIN, H. J.; CAPP, S. P. ; GEORGE, W. K.: Velocity measurements in a high-Reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. In: *Journal of Fluid Mechanics* 258 (1994), S. 31–75. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S002211209400323X>
- [113] HYDE, R.: *Write great code, Volume 1: Understanding the machine*. No Starch Press, 2004
- [114] ISSA, R. I.; GOSMAN, A. ; WATKINS, A.: The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme. In: *Journal of Computational Physics* 62 (1986), Nr. 1, S. 66–82. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90100-2](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(86)90100-2)
- [115] IVANOVA, E. M.; NOLL, B. E. ; AIGNER, M.: A numerical study on the turbulent Schmidt numbers in a jet in crossflow. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 135 (2013), Nr. 1. DOI: <https://dx.doi.org/10.1115/1.4007374>
- [116] JAMESON, A.: *Computational fluid dynamics: Past, present and future*. http://aero-comlab.stanford.edu/Papers/CFD_Past%2cPresent%2cFuture-SciTech2015.pdf, 2015. Besucht am 13.4.2023

-
- [117] JAMESON, A.; BAKER, T. ; WEATHERILL, N.: Calculation of inviscid transonic flow over a complete aircraft. In: *24th Aerospace Sciences Meeting, AIAA-86-0103*, 1986. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.1986-103>
- [118] JAMESON, A.; SCHMIDT, W. ; TURKEL, E.: Numerical solution of the Euler equations by finite volume methods using Runge Kutta time stepping schemes. In: *14th Fluid and Plasma Dynamics Conference, AIAA-81-1259*, 1981. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.1981-1259>
- [119] JANICKA, J.; SADIKI, A.: Large eddy simulation of turbulent combustion systems. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), Nr. 1, S. 537–547. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.279>
- [120] JASAK, H.: *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows.*, Imperial College London, Dissertation, 1996
- [121] JEONG, J.; HUSSAIN, F.: On the identification of a vortex. In: *Journal of Fluid Mechanics* 285 (1995), S. 69–94. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112095000462>
- [122] JIANG, G.-S.; SHU, C.-W.: Efficient implementation of weighted ENO schemes. In: *Journal of Computational Physics* 126 (1996), Nr. 1, S. 202–228. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1996.0130>
- [123] JOHNSON, T.; PATEL, V.: Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300. In: *Journal of Fluid Mechanics* 378 (1999), S. 19–70. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112098003206>
- [124] KADIOGLU, S. Y.; KLEIN, R. ; MINION, M. L.: A fourth-order auxiliary variable projection method for zero-Mach number gas dynamics. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), Nr. 3, S. 2012–2043. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2007.10.008>
- [125] KHOSLA, P.; RUBIN, S.: A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. In: *Computers & Fluids* 2 (1974), Nr. 2, S. 207–209. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0045-7930\(74\)90014-0](https://dx.doi.org/10.1016/0045-7930(74)90014-0)
- [126] KIM, J.; CHOI, H.: Large eddy simulation of a circular jet: effect of inflow conditions on the near field. In: *Journal of Fluid Mechanics* 620 (2009), S. 383–411. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112008004722>
- [127] KIM, J.; KIM, D. ; CHOI, H.: An immersed-boundary finite-volume method for simulations of flow in complex geometries. In: *Journal of Computational Physics* 171 (2001), Nr. 1, S. 132–150. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.2001.6778>
- [128] KINGMA, D. P.; BA, J.: Adam: A method for stochastic optimization. In: *arXiv preprint arXiv:1412.6980* (2014). DOI: <https://dx.doi.org/10.48550/arXiv.1412.6980>
- [129] KNIKKER, R.: A comparative study of high-order variable-property segregated algorithms for unsteady low Mach number flows. In: *International journal for numerical methods in fluids* 66 (2011), Nr. 4, S. 403–427. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.2261>

- [130] KOK, J.: A high-order low-dispersion symmetry-preserving finite-volume method for compressible flow on curvilinear grids. In: *Journal of Computational Physics* 228 (2009), Nr. 18, S. 6811–6832. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2009.06.015>
- [131] KOLERA-GOKULA, H.; ECHEKKI, T.: Direct numerical simulation of premixed flame kernel–vortex interactions in hydrogen–air mixtures. In: *Combustion and Flame* 146 (2006), Nr. 1-2, S. 155–167. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2006.04.002>
- [132] KOSSACZKÁ, T.; EHRHARDT, M. ; GÜNTHER, M.: Enhanced fifth order WENO shock-capturing schemes with deep learning. In: *Results in Applied Mathematics* 12 (2021), 100201. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.rinam.2021.100201>
- [133] KUZMIN, D.: On the design of general-purpose flux limiters for finite element schemes. I. Scalar convection. In: *Journal of Computational Physics* 219 (2006), Nr. 2, S. 513–531. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.03.034>
- [134] LAMBALLAIS, E.; FORTUNÉ, V. ; LAIZET, S.: Straightforward high-order numerical dissipation via the viscous term for direct and large eddy simulation. In: *Journal of Computational Physics* 230 (2011), Nr. 9, S. 3270–3275. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2011.01.040>
- [135] LAMBERT, M.; KESSER, R.; DI DOMENICO, M. ; NOLL, B.: *The DLR THETA code, the incompressible brother of TAU, an overview.* https://elib.dlr.de/71306/1/Lambert_THETA-TAU-UM-BS-2011-19-10.pdf, 2011. Besucht am 14.5.2023
- [136] LAX, P. D.: Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. In: *Communications on Pure and Applied Mathematics* 7 (1954), Nr. 1, S. 159–193. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/cpa.3160070112>
- [137] LELE, S. K.: Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. In: *Journal of Computational Physics* 103 (1992), Nr. 1, S. 16–42. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-R](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-R)
- [138] LEONARD, B. P.: A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 19 (1979), Nr. 1, S. 59–98. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(79\)90034-3](https://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(79)90034-3)
- [139] LESSANI, B.; PAPALEXANDRIS, M. V.: Time-accurate calculation of variable density flows with strong temperature gradients and combustion. In: *Journal of Computational Physics* 212 (2006), Nr. 1, S. 218–246. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.07.001>
- [140] LEVENBERG, K.: A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. In: *Quarterly of Applied Mathematics* 2 (1944), Nr. 2, S. 164–168
- [141] LI, W.; REN, Y.-X.: High-order k-exact WENO finite volume schemes for solving gas dynamic Euler equations on unstructured grids. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 70 (2012), Nr. 6, S. 742–763. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.2710>

- [142] LIPARI, G.; STANSBY, P. K.: Review of experimental data on incompressible turbulent round jets. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 87 (2011), Nr. 1, S. 79–114. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/s10494-011-9330-7>
- [143] LIU, X.-D.; OSHER, S.; CHAN, T.: Weighted essentially non-oscillatory schemes. In: *Journal of Computational Physics* 115 (1994), Nr. 1, S. 200–212. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1994.1187>
- [144] LOPPI, N. A.; WITHERDEN, F. D.; JAMESON, A.; VINCENT, P. E.: A high-order cross-platform incompressible Navier–Stokes solver via artificial compressibility with application to a turbulent jet. In: *Computer Physics Communications* 233 (2018), S. 193–205. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2018.06.016>
- [145] LOURIER, J.-M.; STÖHR, M.; NOLL, B.; WERNER, S.; FIOLITAKIS, A.: Scale adaptive simulation of a thermoacoustic instability in a partially premixed lean swirl combustor. In: *Combustion and Flame* 183 (2017), S. 343–357. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.02.024>
- [146] LÖWE, J.; PROBST, A.; KNOPP, T.; KESSLER, R.: Low-dissipation low-dispersion second-order scheme for unstructured finite volume flow solvers. In: *AIAA Journal* 54 (2016), Nr. 10, S. 2961–2971. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/1.J054956>
- [147] MACART, J. F.; MUELLER, M. E.: Semi-implicit iterative methods for low Mach number turbulent reacting flows: Operator splitting versus approximate factorization. In: *Journal of Computational Physics* 326 (2016), S. 569–595. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2016.09.016>
- [148] MAJDA, A.; SETHIAN, J.: The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. In: *Combustion Science and Technology* 42 (1985), Nr. 3-4, S. 185–205. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102208508960376>
- [149] MALIN, M.; WATERSON, N.: Schemes for convection discretisation in Phoenix. In: *Phoenix Journal of Computational Fluid Dynamics and its Applications* 12 (1999), S. 173–201
- [150] MARAGKOS, G.; RAUWOENS, P.; MERCI, B.: Assessment of a methodology to include differential diffusion in numerical simulations of a turbulent flame. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 40 (2015), Nr. 2, S. 1212–1228. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.11.048>
- [151] MARQUARDT, D. W.: An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. In: *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* 11 (1963), Nr. 2, S. 431–441. DOI: <https://dx.doi.org/10.1137/0111030>
- [152] MARY, I.; SAGAUT, P.: Large eddy simulation of flow around an airfoil near stall. In: *AIAA Journal* 40 (2002), Nr. 6, S. 1139–1145. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/2.1763a>
- [153] MATHUR, S.; MURTHY, J.: A pressure-based method for unstructured meshes. In: *Numerical Heat Transfer* 31 (1997), Nr. 2, S. 195–215. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/10407799708915105>

- [154] MAUSS, F.: *Entwicklung eines kinetischen Modells der Rußbildung mit schneller Polymerisation*, RWTH Aachen, Dissertation, 1998
- [155] MEASUREMENT, I. W.; TURBULENT NONPREMIXED FLAMES (TNF), C. of: *Radiation models*. <https://tnfworkshop.org/radiation>. Besucht am 2.6.2022
- [156] MEIER, W.; PRUCKER, S.; CAO, M.-H. ; STRICKER, W.: Characterization of turbulent H₂/N₂/Air jet diffusion flames by single-pulse spontaneous raman scattering. In: *Combustion Science and Technology* 118 (1996), Nr. 4-6, S. 293–312. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102209608951983>
- [157] MENASRIA, A.; BRENNER, P.; CINNELLA, P. ; PONT, G.: Toward an improved wall treatment for multiple-correction k-exact schemes. In: *2018 Fluid Dynamics Conference, AIAA 2018-4164*, 2018. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2018-4164>
- [158] MICHALAK, C.; OLLIVIER-GOOCH, C.: Accuracy preserving limiter for the high-order accurate solution of the Euler equations. In: *Journal of Computational Physics* 228 (2009), Nr. 23, S. 8693–8711. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2009.08.021>
- [159] MICHALAK, K.; OLLIVIER-GOOCH, C.: Limiters for unstructured higher-order accurate solutions of the Euler equations. In: *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA-2008-776*, 2008. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2008-776>
- [160] MOE, S. A.; ROSSMANITH, J. A. ; SEAL, D. C.: A simple and effective high-order shock-capturing limiter for discontinuous Galerkin methods. In: *arXiv preprint arXiv:1507.03024* (2015). DOI: <https://dx.doi.org/10.48550/arXiv.1507.03024>
- [161] MORINISHI, Y.; LUND, T. S.; VASILYEV, O. V. ; MOIN, P.: Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow. In: *Journal of Computational Physics* 143 (1998), Nr. 1, S. 90–124. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.5962>
- [162] MOTHEAU, E.; ABRAHAM, J.: A high-order numerical algorithm for DNS of low-Mach-number reactive flows with detailed chemistry and quasi-spectral accuracy. In: *Journal of Computational Physics* 313 (2016), S. 430–454. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2016.02.059>
- [163] MÜLLER, U.: *Der Einfluß von Strahlungsverlusten auf die thermische NO-Bildung in laminaren CO-H₂-Diffusionsflammen*, RWTH Aachen, Dissertation, 1989. Magisterarbeit
- [164] MUNZ, C.-D.; ROLLER, S.; KLEIN, R. ; GERATZ, K. J.: The extension of incompressible flow solvers to the weakly compressible regime. In: *Computers & Fluids* 32 (2003), Nr. 2, S. 173–196. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930\(02\)00010-5](https://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930(02)00010-5)
- [165] MUZAFERIJA, S.; GOSMAN, D.: Finite-volume CFD procedure and adaptive error control strategy for grids of arbitrary topology. In: *Journal of Computational physics* 138 (1997), Nr. 2, S. 766–787. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1997.5853>
- [166] NAJM, H. N.; WYCKOFF, P. S. ; KNIO, O. M.: A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: I. Stiff chemistry. In: *Journal of Computational Physics* 143 (1998), Nr. 2, S. 381–402. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1997.5856>

- [167] NEJAT, A.; OLLIVIER-GOOCH, C.: A high-order accurate unstructured finite volume Newton-Krylov algorithm for inviscid compressible flows. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), Nr. 4, S. 2582–2609. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2007.11.011>
- [168] NESSYAHU, H.; TADMOR, E.: Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws. In: *Journal of Computational Physics* 87 (1990), Nr. 2, S. 408–463. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(90\)90260-8](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(90)90260-8)
- [169] NEUBER, A.; KRIEGER, G.; TACKE, M.; HASSEL, E. ; JANICKA, J.: Finite rate chemistry and NO molefraction in non-premixed turbulent flames. In: *Combustion and Flame* 113 (1998), Nr. 1-2, S. 198–211. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180\(97\)00210-1](https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00210-1)
- [170] NICLOUD, F.: Conservative high-order finite-difference schemes for low-Mach number flows. In: *Journal of Computational Physics* 158 (2000), Nr. 1, S. 71–97. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6408>
- [171] NISHIKAWA, H.: A first-order system approach for diffusion equation. I: Second-order residual-distribution schemes. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2007), Nr. 1, S. 315–352. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2007.07.029>
- [172] NISHIKAWA, H.: First-, second-, and third-order finite-volume schemes for diffusion. In: *Journal of Computational Physics* 256 (2014), S. 791–805. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2013.09.024>
- [173] NISHIKAWA, H.: A face-area-weighted 'centroid' formula for finite-volume method that improves skewness and convergence on triangular grids. In: *Journal of Computational Physics* 401 (2020), 109001. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2019.109001>
- [174] NISHIKAWA, H.: A hyperbolic Poisson solver for tetrahedral grids. In: *Journal of Computational Physics* (2020), 109358. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109358>
- [175] NISHIKAWA, H.: The QUICK scheme is a third-order finite-volume scheme with point-valued numerical solutions. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 93 (2021), Nr. 7, S. 2311–2338. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.4975>
- [176] NISHIKAWA, H.: A truncation error analysis of third-order MUSCL scheme for nonlinear conservation laws. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 93 (2021), Nr. 4, S. 1031–1052. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.4918>
- [177] NISHIKAWA, H.: A flux correction for finite-volume discretizations: Achieving second-order accuracy on arbitrary polyhedral grids. In: *Journal of Computational Physics* 468 (2022), 111481. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111481>
- [178] NISHIKAWA, H.: New unstructured-grid limiter functions. In: *AIAA Scitech 2022 Forum, AIAA-2022-1374*, 2022. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2022-1374>
- [179] Ó CONAIRE, M.; CURRAN, H. J.; SIMMIE, J. M.; PITZ, W. J. ; WESTBROOK, C. K.: A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. In: *International Journal of Chemical Kinetics* 36 (2004), Nr. 11, S. 603–622. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/kin.20036>

- [180] OLLIVIER-GOOCH, C.; NEJAT, A. ; MICHALAK, K.: Obtaining and verifying high-order unstructured finite volume solutions to the Euler equations. In: *AIAA Journal* 47 (2009), Nr. 9, S. 2105–2120. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/1.40585>
- [181] OLLIVIER-GOOCH, C.; VAN ALTENA, M.: A high-order-accurate unstructured mesh finite-volume scheme for the advection-diffusion equation. In: *Journal of Computational Physics* 181 (2002), Nr. 2, S. 729–752. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7159>
- [182] OLLIVIER-GOOCH, C. F.: Quasi-ENO schemes for unstructured meshes based on unlimited data-dependent least-squares reconstruction. In: *Journal of Computational Physics* 133 (1997), Nr. 1, S. 6–17. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1996.5584>
- [183] OLSSON, M.; FUCHS, L.: Large eddy simulation of the proximal region of a spatially developing circular jet. In: *Physics of Fluids* 8 (1996), Nr. 8, S. 2125–2137. DOI: <https://dx.doi.org/10.1063/1.868987>
- [184] OSEEN, C.: Über die Wirbelbewegung in einer reibenden Flüssigkeit. In: *Arkiv för Matematik, Astronomi och Fysik* 7 (1912)
- [185] PANCHAPAKESAN, N. R.; LUMLEY, J. L.: Turbulence measurements in axisymmetric jets of air and helium. Part 1. Air jet. In: *Journal of Fluid Mechanics* 246 (1993), S. 197–223. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112093000096>
- [186] PANJWANI, B.; ERTESVAG, A.; GRUBER, A. ; RIAN, K.: Turbulence combustion closure model based on the eddy dissipation concept for large eddy simulation. In: *Advances in Fluid Mechanics VIII* 69 (2010), S. 27–38. DOI: <https://dx.doi.org/10.2495/AFM100031>
- [187] PASZKE, A.; GROSS, S.; MASSA, F.; LERER, A.; BRADBURY, J.; CHANAN, G.; KILLEEN, T.; LIN, Z.; GIMELSHEIN, N.; ANTIGA, L. u. a.: Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In: *Advances in Neural Information Processing Systems* 32 (2019)
- [188] PATTLE, R.: Diffusion from an instantaneous point source with a concentration-dependent coefficient. In: *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* 12 (1959), Nr. 4, S. 407–409. DOI: <https://dx.doi.org/10.1093/qjmam/12.4.407>
- [189] PEMBER, R. B.; HOWELL, L. H.; BELL, J. B.; COLELLA, P.; CRUTCHFIELD, W. Y.; FIVELAND, W. ; JESSEE, J.: An adaptive projection method for unsteady, low-Mach number combustion. In: *Combustion Science and Technology* 140 (1998), Nr. 1-6, S. 123–168. DOI: <https://dx.doi.org/10.1080/00102209808915770>
- [190] PIERCE, C. D.: *Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion*, Stanford University, Dissertation, 2001
- [191] PIERCE, C. D.; MOIN, P.: Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. In: *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004), S. 73–97. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112004008213>

-
- [192] PITSCH, H.: Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames. In: *Combustion and Flame* 123 (2000), Nr. 3, S. 358–374. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180\(00\)00135-8](https://dx.doi.org/10.1016/S0010-2180(00)00135-8)
- [193] PITSCH, H.: Large-eddy simulation of turbulent combustion. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 38 (2006), S. 453–482. DOI: <https://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.38.050304.092133>
- [194] PITSCH, H.; CHEN, M. ; PETERS, N.: Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In: *Symposium (international) on Combustion* Bd. 27 Elsevier, 1998. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(98\)80506-7](https://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(98)80506-7), S. 1057–1064
- [195] PLETCHER, R.; CHEN, K.-H.: On solving the compressible Navier-Stokes equations for unsteady flows at very low Mach numbers. In: *11th Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA-93-3368-CP*, 1993. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.1993-3368>
- [196] PONT, G.: *Self adaptive turbulence models for unsteady compressible flows*, Ecole nationale supérieure d'arts et métiers-ENSAM, Dissertation, 2015
- [197] PONT, G.; BRENNER, P.; CINNELLA, P.; MAUGARS, B. ; ROBINET, J.-C.: Multiple-correction hybrid k-exact schemes for high-order compressible RANS-LES simulations on fully unstructured grids. In: *Journal of Computational Physics* 350 (2017), S. 45–83. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2017.08.036>
- [198] POPE, S. B.: *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/CB09780511840531>
- [199] POZO, J. M.; VILLA-URIOL, M.-C. ; FRANGI, A. F.: Efficient 3d geometric and zernike moments computation from unstructured surface meshes. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 33 (2011), Nr. 3, S. 471–484. DOI: <https://dx.doi.org/10.1109/TPAMI.2010.139>
- [200] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T. ; FLANNERY, B. P.: *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007
- [201] PRICE, H. S.; VARGA, R. S. ; WARREN, J. E.: Application of oscillation matrices to diffusion-convection equations. In: *Journal of Mathematical Physics* 45 (1966), Nr. 1-4, S. 301–311. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/sapm1966451301>
- [202] PRIDY, K. L.; KELLER, P. E.: *Artificial neural networks: An introduction*. Bd. 68. SPIE press, 2005. DOI: <https://dx.doi.org/10.1117/3.633187>
- [203] PRIES, M.; FIOLITAKIS, A. ; GERLINGER, P.: Numerical investigation of a high momentum jet flame at elevated pressure: a quantitative validation with detailed experimental data. In: *Journal of the Global Power and Propulsion Society* 4 (2020), S. 264–273. DOI: <https://dx.doi.org/10.33737/jgpps/130031>

- [204] RAY, D.; HESTHAVEN, J. S.: An artificial neural network as a troubled-cell indicator. In: *Journal of Computational Physics* 367 (2018), S. 166–191. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2018.04.029>
- [205] REYNOLDS, O.: On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A* (1895), Nr. 186, S. 123–164
- [206] RICHARDS, A.; SAAD, T. ; SUTHERLAND, J. C.: A fast turbulence generator using graphics Processing Units. In: *2018 Fluid Dynamics Conference, AIAA 2018-3559*, 2018. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2018-3559>
- [207] RUNCHAL, A. K.; RAO, M. M.: CFD of the future: Year 2025 and beyond. In: *50 Years of CFD in Engineering Sciences: A Commemorative Volume in Memory of D. Brian Spalding* (2020), S. 779–795. DOI: https://dx.doi.org/10.1007/978-981-15-2670-1_22
- [208] RUOFF, S.; ECKEL, G.; LE CLERCQ, P. ; AIGNER, M.: Numerical Prediction of a Lean Blow-Out Event of a Lab-Scale, Swirl-Stabilized Spray Flame. In: *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air, GT2022-81339, V03AT04A036* American Society of Mechanical Engineers, 2022. DOI: <https://dx.doi.org/10.1115/GT2022-81339>
- [209] SAAD, T.; CLINE, D.; STOLL, R. ; SUTHERLAND, J. C.: Scalable tools for generating synthetic isotropic turbulence with arbitrary spectra. In: *AIAA Journal* 55 (2017), Nr. 1, S. 327–331. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/1.J055230>
- [210] SAAD, T.; SUTHERLAND, J. C.: Comment on “Diffusion by a random velocity field” [Phys. Fluids 13, 22 (1970)]. In: *Physics of Fluids* 28 (2016), Nr. 11, 119101. DOI: <https://dx.doi.org/10.1063/1.4968528>
- [211] SAAD, Y.: A flexible inner-outer preconditioned GMRES algorithm. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 14 (1993), Nr. 2, S. 461–469. DOI: <https://dx.doi.org/10.1137/0914028>
- [212] SAGAUT, P.: *Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2005. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/b137536>
- [213] SARKAR, S.: Large eddy simulation of flows of engineering interest: A Review. In: *50 Years of CFD in Engineering Sciences: A Commemorative Volume in Memory of D. Brian Spalding* (2020), S. 363–400. DOI: https://dx.doi.org/10.1007/978-981-15-2670-1_11
- [214] SAVARD, B.; XUAN, Y.; BOBBITT, B. ; BLANQUART, G.: A computationally-efficient, semi-implicit, iterative method for the time-integration of reacting flows with stiff chemistry. In: *Journal of Computational Physics* 295 (2015), S. 740–769. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.04.018>
- [215] SCHÄFER, M.; TUREK, S.; DURST, F.; KRAUSE, E. ; RANNACHER, R.: Benchmark computations of laminar flow around a cylinder. 1996. DOI: https://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-89849-4_39. In: *Flow Simulation with High-Performance Computers II*. Springer, 1996, S. 547–566

-
- [216] SCHLICHTING, H.; GERSTEN, K.: *Grenzschicht-Theorie*. Springer, 2006. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/3-540-32985-4>
- [217] SCHWAMBORN, D.; GERHOLD, T. ; HEINRICH, R.: The DLR TAU-code: Recent applications in research and industry. In: *European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CDF 2006*, 2006
- [218] SCHWANDER, L.; RAY, D. ; HESTHAVEN, J. S.: Controlling oscillations in spectral methods by local artificial viscosity governed by neural networks. In: *Journal of Computational Physics* 431 (2021), 110144. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110144>
- [219] SCHWÄRZLE, A.; MONZ, T. O.; HUBER, A. ; AIGNER, M.: Detailed examination of a modified two-stage micro gas turbine combustor. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 140 (2018), Nr. 2. DOI: <https://dx.doi.org/10.1115/1.4037749>
- [220] SETZWEIN, F.; ESS, P. ; GERLINGER, P.: Large-eddy simulation of spray flames in the DLR generic single sector combustor. In: *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum, AIAA-2019-3865*, 2019. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2019-3865>
- [221] SETZWEIN, F.; ESS, P. ; GERLINGER, P.: High-order k-exact finite volume scheme for vertex-centered unstructured grids. In: *AIAA Scitech 2020 Forum, AIAA-2020-1785*, 2020. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2020-1785>
- [222] SETZWEIN, F.; ESS, P. ; GERLINGER, P.: An implicit high-order k-exact finite-volume approach on vertex-centered unstructured grids for incompressible flows. In: *Journal of Computational Physics* 446 (2021), 110629. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110629>
- [223] SETZWEIN, F.; ESS, P. ; GERLINGER, P.: Adaptive numerical dissipation control for high-order k-exact reconstruction schemes on vertex-centered unstructured grids using artificial neural networks. In: *Journal of Computational Physics* 471 (2022), 111633. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111633>
- [224] SETZWEIN, F.; SPRAUL, M.; ESS, P. ; GERLINGER, P. M.: On the structure of correction matrices for a k-exact high-order finite-volume scheme on vertex-centered unstructured grids. In: *AIAA Scitech 2021 Forum, AIAA-2021-1548*, 2021. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2021-1548>
- [225] SHU, C.-W.: Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. 1998. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/BFb0096355>. In: *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*. Springer, 1998, S. 325–432
- [226] SHUNN, L.; HAM, F.: Method of manufactured solutions applied to variable-density flow solvers. In: *Annual Research Briefs-2007, Center for Turbulence Research* (2007), S. 155–168
- [227] SHUNN, L.; HAM, F. ; MOIN, P.: Verification of variable-density flow solvers using manufactured solutions. In: *Journal of Computational Physics* 231 (2012), Nr. 9, S. 3801–3827. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.01.027>

- [228] SMAGORINSKY, J.: General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment. In: *Monthly weather review* 91 (1963), Nr. 3, S. 99–164. DOI: [https://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(1963\)091%3C0099:GCEWTP%3E2.3.CO;2](https://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091%3C0099:GCEWTP%3E2.3.CO;2)
- [229] SPIEGEL, S. C.; HUYNH, H. ; DEBONIS, J. R.: A survey of the isentropic Euler vortex problem using high-order methods. In: *22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA-2015-2444*, 2015. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.2015-2444>
- [230] STEVENS, B.; COLONIUS, T.: Enhancement of shock-capturing methods via machine learning. In: *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 34 (2020), S. 483–496. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/s00162-020-00531-1>
- [231] SWANSON, R. C.; TURKEL, E.: On central-difference and upwind schemes. In: *Journal of Computational Physics* 101 (1992), Nr. 2, S. 292–306. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90007-L](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(92)90007-L)
- [232] TAM, C. K.; WEBB, J. C.: Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics. In: *Journal of Computational Physics* 107 (1993), Nr. 2, S. 262–281. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1993.1142>
- [233] TEMAM, R.: Sur l'approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires (II). In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 33 (1969), Nr. 5, S. 377–385. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/BF00247696>
- [234] THOMAS, J. L.; DISKIN, B. ; NISHIKAWA, H.: A critical study of agglomerated multigrid methods for diffusion on highly-stretched grids. In: *Computers & Fluids* 41 (2011), Nr. 1, S. 82–93. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.09.023>
- [235] TIEN, C.; LEE, S.: Flame radiation. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 8 (1982), Nr. 1, S. 41–59. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0360-1285\(82\)90008-9](https://dx.doi.org/10.1016/0360-1285(82)90008-9)
- [236] TITAREV, V.; TSOUTSANIS, P. ; DRIKAKIS, D.: WENO schemes for mixed-element unstructured meshes. In: *Communications in Computational Physics* 8 (2010), Nr. 3, 585. DOI: <https://dx.doi.org/10.4208/cicp.040909.080110a>
- [237] TOMBOULIDES, A.; ORSZAG, S. ; KARNIADAKIS, G.: Direct and large-eddy simulations of axisymmetric wakes. In: *31st Aerospace Sciences Meeting, AIAA-93-0546*, 1993. DOI: <https://dx.doi.org/10.2514/6.1993-546>
- [238] TSOUTSANIS, P.: Extended bounds limiter for high-order finite-volume schemes on unstructured meshes. In: *Journal of Computational Physics* 362 (2018), S. 69–94. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2018.02.009>
- [239] TSOUTSANIS, P.; ANTONIADIS, A. F. ; DRIKAKIS, D.: WENO schemes on arbitrary unstructured meshes for laminar, transitional and turbulent flows. In: *Journal of Computational Physics* 256 (2014), S. 254–276. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2013.09.002>

- [240] TSOUTSANIS, P.; TITAREV, V. A. ; DRIKAKIS, D.: WENO schemes on arbitrary mixed-element unstructured meshes in three space dimensions. In: *Journal of Computational Physics* 230 (2011), Nr. 4, S. 1585–1601. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2010.11.023>
- [241] TU, S.; ALIABADI, S.: Development of a hybrid finite volume/element solver for incompressible flows. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 55 (2007), Nr. 2, S. 177–203. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.1454>
- [242] TURNS, S. R.: *Introduction to combustion: Concepts and applications*. McGraw-Hill Higher Education, 2011
- [243] VAN LEER, B.: Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method. In: *Journal of Computational Physics* 32 (1979), Nr. 1, S. 101–136. DOI: [https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(79\)90145-1](https://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(79)90145-1)
- [244] VASUDEO, N.; ECHEKKI, T.; DAY, M. S. ; BELL, J. B.: The regime diagram for premixed flame kernel-vortex interactions—Revisited. In: *Physics of Fluids* 22 (2010), Nr. 4, 043602. DOI: <https://dx.doi.org/10.1063/1.3372167>
- [245] VENKATAKRISHNAN, V.: Convergence to steady state solutions of the Euler equations on unstructured grids with limiters. In: *Journal of Computational Physics* 118 (1995), Nr. 1, S. 120–130. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1995.1084>
- [246] VENTOSA-MOLINA, J.; CHIVA, J.; LEHMKUHL, O.; MUELA, J.; PÉREZ-SEGARRA, C. D. ; OLIVA, A.: Numerical analysis of conservative unstructured discretisations for low Mach flows. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 84 (2017), Nr. 6, S. 309–334. DOI: <https://dx.doi.org/10.1002/flid.4350>
- [247] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W.: *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. Pearson Education, 2007
- [248] VICHNEVETSKY, R.; BOWLES, J. B.: *Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations*. Siam, 1982
- [249] VIRTANEN, P.; GOMMERS, R.; OLIPHANT, T. E.; HABERLAND, M.; REDDY, T.; COURNAPEAU, D.; BUROVSKI, E.; PETERSON, P.; WECKESSER, W.; BRIGHT, J.; VAN DER WALT, S. J.; BRETT, M.; WILSON, J.; MILLMAN, K. J.; MAYOROV, N.; NELSON, A. R. J.; JONES, E.; KERN, R.; LARSON, E.; CAREY, C. J.; POLAT, İ.; FENG, Y.; MOORE, E. W.; VANDERPLAS, J.; LAXALDE, D.; PERKTOLD, J.; CIMRMAN, R.; HENRIKSEN, I.; QUINTERO, E. A.; HARRIS, C. R.; ARCHIBALD, A. M.; RIBEIRO, A. H.; PEDREGOSA, F.; VAN MULBREGT, P. ; SCI-PY 1.0 CONTRIBUTORS: SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python. In: *Nature Methods* 17 (2020), S. 261–272. DOI: <https://dx.doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>
- [250] VORST, H. A. d.: Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. In: *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 13 (1992), Nr. 2, S. 631–644. DOI: <https://dx.doi.org/10.1137/0913035>

- [251] WANG, Q.; REN, Y.-X. ; LI, W.: Compact high order finite volume method on unstructured grids I: Basic formulations and one-dimensional schemes. In: *Journal of Computational Physics* 314 (2016), S. 863–882. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2016.01.036>
- [252] WANG, Q.; REN, Y.-X. ; LI, W.: Compact high order finite volume method on unstructured grids II: Extension to two-dimensional Euler equations. In: *Journal of Computational Physics* 314 (2016), S. 883–908. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2016.03.048>
- [253] WANG, Q.; REN, Y.-X.; PAN, J. ; LI, W.: Compact high order finite volume method on unstructured grids III: Variational reconstruction. In: *Journal of Computational Physics* 337 (2017), S. 1–26. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2017.02.031>
- [254] WANG, Z. J.: Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids: Basic formulation. In: *Journal of Computational Physics* 178 (2002), Nr. 1, S. 210–251. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7041>
- [255] WANG, Z. J.: High-order methods for the Euler and Navier-Stokes equations on unstructured grids. In: *Progress in Aerospace Sciences* 43 (2007), Nr. 1-3, S. 1–41. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.paerosci.2007.05.001>
- [256] WANG, Z. J.; LIU, Y.: Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids III: One dimensional systems and partition optimization. In: *Journal of Scientific Computing* 20 (2004), Nr. 1, S. 137–157. DOI: <https://dx.doi.org/10.1023/A:1025896119548>
- [257] WANG, Z. J.; LIU, Y. ; KWAK, D.: Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids II: Extension to two dimensional scalar equation. In: *Journal of Computational Physics* 179 (2002), Nr. 2, S. 665–697. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7082>
- [258] WANG, Z. J.; LIU, Y.; MAY, G. ; JAMESON, A.: Spectral difference method for unstructured grids II: Extension to the Euler equations. In: *Journal of Scientific Computing* 32 (2007), Nr. 1, S. 45–71. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/s10915-006-9113-9>
- [259] WANG, Z. J.; ZHANG, L. ; LIU, Y.: Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids IV: Extension to two-dimensional systems. In: *Journal of Computational Physics* 194 (2004), Nr. 2, S. 716–741. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2003.09.012>
- [260] WANG, Z.: A fast nested multi-grid viscous flow solver for adaptive cartesian/quad grids. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 33 (2000), Nr. 5, S. 657–680. DOI: [https://dx.doi.org/10.1002/1097-0363\(20000715\)33:5%3C657::AID-FLD24%3E3.0.CO;2-G](https://dx.doi.org/10.1002/1097-0363(20000715)33:5%3C657::AID-FLD24%3E3.0.CO;2-G)
- [261] WARNATZ, J.; MAAS, U. ; DIBBLE, R. W.: *Combustion*. Springer, 2006. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-45363-5>
- [262] WATT, J.; BORHANI, R. ; KATSAGGELOS, A. K.: *Machine learning refined: Foundations, algorithms, and applications*. Cambridge University Press, 2020. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/9781108690935>

-
- [263] WESSELING, P.: *Principles of computational fluid dynamics*. Bd. 29. Springer Science & Business Media, 2009. DOI: <https://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-05146-3>
- [264] WYGNANSKI, I.; FIEDLER, H.: Some measurements in the self-preserving jet. In: *Journal of Fluid Mechanics* 38 (1969), Nr. 3, S. 577–612. DOI: <https://dx.doi.org/10.1017/S0022112069000358>
- [265] XIE, B.; LI, S.; IKEBATA, A. ; XIAO, F.: A multi-moment finite volume method for incompressible Navier-Stokes equations on unstructured grids: Volume-average/point-value formulation. In: *Journal of Computational Physics* 277 (2014), S. 138–162. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2014.08.011>
- [266] YEE, H. C.; SANDHAM, N. D. ; DJOMEHRI, M. J.: Low-dissipative high-order shock-capturing methods using characteristic-based filters. In: *Journal of Computational Physics* 150 (1999), Nr. 1, S. 199–238. DOI: <https://dx.doi.org/10.1006/jcph.1998.6177>
- [267] YU, H.; WILAMOWSKI, B. M.: Levenberg-Marquardt training. In: *Intelligent Systems*. CRC Press, 2018, S. 12–1
- [268] YU, J.; HESTHAVEN, J. S. ; YAN, C.: A data-driven shock capturing approach for discontinuous Galekin methods. 2018. Forschungsbericht
- [269] YU, R.; YU, J. ; BAI, X.-S.: An improved high-order scheme for DNS of low Mach number turbulent reacting flows based on stiff chemistry solver. In: *Journal of Computational Physics* 231 (2012), Nr. 16, S. 5504–5521. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.05.006>
- [270] ZHANG, Y.-S.; REN, Y.-X. ; WANG, Q.: Compact high order finite volume method on unstructured grids IV: Explicit multi-step reconstruction schemes on compact stencil. In: *Journal of Computational Physics* 396 (2019), S. 161–192. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2019.06.054>

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Florian Setzwein
Geburtsdatum	3. April 1991
Geburtsort	Bad Dürkheim
Staatsangehörigkeit	Deutsch

Schulausbildung

1997-2001	Valentin-Ostertag-Schule Bad Dürkheim
2001-2010	Werner-Heisenberg-Gymnasium Bad Dürkheim

Studium

2010	Vorpraktikum, BASF SE
2010-2013	Bachelorstudiengang Maschinenbau, Universität Stuttgart
2014	Auslandssemester, Nanyang Technological University, Singapur
2014	Studienpraktikum, KSB AG
2014-2017	Masterstudiengang Maschinenbau, Universität Stuttgart

Berufliche Tätigkeit

seit 2017	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Deutschen Zentrum für Luft und Raumfahrttechnik in Stuttgart (Institut für Verbrennungstechnik) mit Möglichkeit zur Promotion an der Universität Stuttgart
-----------	---