## Vorwort

Die vorgelegte Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Hermann–Föttinger–Institut für Strömungsmechnik der Technischen Universität Berlin.

Besondere Dank gilt allen denjenigen, die mir bei der Durchführung dieser Arbeit behilflich waren.

Allen voran möchte ich mich bei meinem Doktorvater Professor Dr.–Ing. Frank Thiele bedanken, der es mir ermöglichte, diese Arbeit anzufertigen und durch seine langjährige, menschliche und wissenschaftliche Unterstützung wesentlich zum Gelingen beigetragen hat. Vielen Dank auch an Herrn Dr.–Ing. Werner Haase für die Übernahme des Berichterstatters. Für die Übernahme des Vorsitzes danke ich Herrn Prof. Dr.–Ing. Heinrich Schoop.

Mein besonderer Dank gilt meinem Arbeitskollege Thomas Rung für viele wissenschaftlichen Disskusionen, die zur Bereicherung meiner Fachkenntnisse und zu neuen Ideen führten.

Herrn Stefan Schmidt danke ich herzlich für die Durchführung der Rechnungen auf dem Massiv–Parallelrechner und für die Bereitschaft, das Simulationsprogramm bereits in der Frühphase dieser Arbeit für seine DNS– und LES–Rechnungen zu übernehmen und zu modifizieren.

Mein besonderer Dank gilt Frau Sabrina Nordt, Herrn Stefan Schmidt und Herrn Martin Franke für das sorgfältige Korrekturlesen dieser Arbeit.

Meiner Frau Xiaolan und meinem Sohn Zhichen, die für lange Zeit auf mich verzichten mußten, möchte ich für ihre Liebe, Geduld und ihr Vertrauen die tiefste Bewunderung und den tiefsten Dank aussprechen. Ihnen ist diese Arbeit gewidmet.

Leiping Xue

# Inhaltsverzeichnis

# Kapitel 1

# Einleitung

## 1.1 Problemstellung

Komplexe Strömungsphänomene treten in vielen ingenieurtechnischen Anwendungen auf. In der Vergangenheit wurden neben theoretischen Methoden, die auf Vereinfachung der Grundgleichungen basieren, hauptsächlich experimentelle Untersuchungen eingesetzt, um zu einem besseren Verständnis der Strömungsphänomene zu gelangen. Als Ergänzung und Alternative zu Theorie und Experiment hat sich in den letzten Jahrzehnten die numerische Strömungssimulation entwickelt. Die Anwendungsgebiete der Simulationsverfahren umfassen unter anderem strömungsphysikalische Grundlagenuntersuchungen, Unterstützung des Entwurfs im Ingenieurbereich, Steuerungen von verfahrenstechnischen Prozessen sowie Wettervorhersagen.
Ingenieurtechnische Problemstellungen sind meistens sowohl mit komplexen dreidimensionalen Geometrien als auch mit komplexen turbulenten Austauschmechanismen verbunden. Eine genaue numerische Simulation verlangt in jedem Fall den Einsatz von sehr feinen Rechengitter und höherwertigen Turbulenzmodelle. Dabei entstehen zwangsläufig große Systeme gekoppelter diskreter Gleichungen. Die effiziente Lösung derartiger Gleichungsysteme, die durch große Datenmengen und aufwendige Rechenoperationen gekennzeichnet ist, läßt sich nur auf Hochleistungsrechnern unter Verwendung von speziellen numerischen Algorithmen und Konvergenzbeschleunigungstechniken realisieren, wobei die numerischen Lösungsverfahren an die Rechnerarchitektur angepaßt werden müssen.
Die schnelle Entwicklung der Computertechnologie zielt auf immer leistungsfähigere Rechner mit größeren Speicherkapazitäten. Zukunftsweisende Hochleistungsrechner verwenden eine Multiprozessorarchitektur mit verteilten Arbeitsspeichern, die in ihrer Gesamtleistung praktisch unbegrenzt erweiterbar sind. Die Ausnutzung der verfügbaren Gesamtleistung setzt jedoch eine problemspezifische Parallelisierung der Rechenprogramme voraus. Durch hohe Datenübertragungsgeschwindigkeit und verbesserte Netzwerktopologie erlauben derartige Rechner in zunehmenden Maße auch die Strömungssimulation mit mehreren Millionen Gitterpunkten.

Moderne numerische Verfahren zur Simulation von Strömungsproblemen beinhalten sowohl effiziente Lösungsalgorithmen als auch höherwertige Turbulenzmodelle im Rahmen einer an Hochleistungsrechnern und neuen Datenkommunikationstechniken angepaßten Prozedur. Dies erfordert grundlegende Veränderungen der bisher verwendeten Lösungsstrategien, die in den folgenden Ausführungen entwickelt und programmtechnisch umgesetzt werden sollen.

## 1.2 Stand der Forschung und Technik

**Verfahren für kompressible und inkompressible Strömungen**

Allgemein einsetzbare numerische Simulationsverfahren müssen sowohl für kompressible als auch für inkompressible Strömungen anwendbar sein. Die traditionellen Vorgehensweisen bei der Simulation dieser Strömungsarten unterscheiden sich jedoch sehr stark. Für kompressible Strömungen dient in der Regel die Dichte als Basisvariable (dichtebasierte Verfahren), während der Druck aus der thermischen Zustandsgleichung gewonnen wird. Die instationären strömungsmechanischen Bilanzgleichungen werden meistens sowohl für die Berechnung von stationären als auch instationären Strömungen mit expliziten Verfahren (z.B. Runge–Kutta–Verfahren) zeitlich integriert (Warming & Beam 1976, Jameson, Schmidt & Turkel 1981, MacComack 1982). Die Verwendung dieser Verfahren bei schwach kompressiblen Strömungen ist mit großen Konvegenzproblemen (Ferziger & Perić 1997) verbunden. Bei derartigen Strömungen hängt der Druck nur geringfügig von der Dichte ab, gleichzeitig tritt mit abnehmender Machzahl eine starke Druck–Geschwindigkeit–Kopplung auf. Die für schwach kompressible Strömungen dominante Druck–Geschwindigkeit–Abhängigkeit kann bei den dichtebasierten Verfahren nicht implizit berücksichtigt werden, da der Druck verfahrensbedingt nicht als Lösungsvariable zur Verfügung steht.

Für die Simulation schwach kompressibler und inkompressibler Strömungen wird aus Effizienzgründen häufig die implizite Druck–Geschwindigkeit–Kopplung eingeführt, und der Druck ersetzt die als konstant betrachtete Dichte als Basisvariable. Die grundlegende Rechenvorschrift definierten Patankar & Spalding (1972) mit dem SIMPLE–Verfahren (Semi–Implicit Method for Pressure Linked Equations). Hierin wird eine implizite Druckkorrekturgleichung durch Kombination von Massen– und Impulsbilanz gewonnen. Um eine Druck–Geschwindigkeit–Entkopplung und die damit verbundenen Oszillationen in der Lösung zu vermeiden, erforderte der Einsatz der Druckkorrekturverfahren ursprünglich eine Gitteranordnung mit versetzter Variablenspeicherung von Geschwindigkeiten und Druck. Diese Anforderung schränkt die Anwendungsmöglichkeit des Verfahrens vor allem auf komplexe dreidimensionale Geometrien stark ein. Rhie & Chow (1983) entwickelten das Druckkorrekturverfahren so weiter, daß es auch bei nichtversetzter Variablenspeicherung eingesetzt werden kann. Nach dem Prinzip von Rhie & Chow wird bei der Massenflußbestimmung zu dem linear interpolierten Term eine druckabhängige Größe zusätzlich eingefügt, die eine Art Kompensation des möglicherweise oszillierenden Druckfeldes darstellt.

Druckkorrekturverfahren zur Lösung der inkompressiblen Strömung sind heutzutage ausgereift und so weit entwickelt, daß sie stabil auf körperangepaßten Gittern mit einheitlicher Variablenanordnung arbeiten.

Gegenwärtig in der Entwicklung befindliche Verfahren versuchen, sowohl kompressible als auch inkompressible Strömungen effektiv nach einem gemeinsamen Grundkonzept zu lösen. Die dichtebasierten Verfahren werden derart erweitert, daß sie sich durch Einführung von künstlicher Kompressibilität auch für die Berechnung schwachkompressibler und inkompressibler Strömungen einsetzen lassen. Pionierarbeit leisteten hier Chorin (1967) und weitergehend z.B. Rizzi & Eriksson (1985) und Soh (1987). Die dabei eingeführte Pseudozeit schränkte aber die Anwendung derartiger Verfahren auf stationäre Strömungen ein (Hirsch 1990). In Verbindung mit Prekonditionierungstechniken und der Dual–Time Methode (Jameson 1991) läßt sich zwar die Effektivität von dichtebasierten Verfahren für kompressible einschließlich schwach kompressibler instationärer Strömungen steigern, für inkompressible instationäre Strömungen werden sie jedoch aufgrund der schlechten Konvergenzeigenschaften kaum eingesetzt.

Eine vielversprechende Vorgehensweise, die auch in dieser Arbeit gewählt wird, liegt in der Erweiterung der Druckkorrekturverfahren auf kompressible Strömungen. Dabei wird die ursprünglich elliptische Druckkorrekturgleichung um einen hyperbolischen Einflußterm infolge der Dichteänderung erweitert. Zahlreiche Arbeiten (Issa und Lockwood 1977; Karki & Patankar 1989; Van Doormaal u. a. 1987; Demirdžić 1993) zeigten, daß das erweiterte Druckkorrekturverfahren auch für die Simulation von kompressiblen Strömungen effektiv und stabil eingesetzt werden kann. Dabei muß in erster Linie auf die strömungstypabhängige (Überschall oder Unterschall) Einarbeitung der Randbedingungen geachtet werden.

**Turbulenzmodelle**

Turbulente Strömungen sind durch instationäre, dreidimensionale und stochastische Schwankungsbewegungen gekennzeichnet. Die Beschreibung der turbulenten Phänomene kann in verschiedener Weise erfolgen. Die Direkte Numerische Simulation (DNS) beruht auf grundlegenden physikalischen Axiomen und Stoffgesetzen, d.h. die Bilanzgleichungen werden ohne zusätzliche Schließungsannahmen gelöst. Im Gegensatz dazu basiert die Large Eddy Simulation (LES) auf räumlich gefilterten Bilanzgleichungen. Die herausgefilterte Feinstruktur der Strömungsbewegung wird nicht direkt aufgelöst. Zur Schließung der Feinstrukturbewegungen wird ein sogenanntes „Sub–Grid–Scale“ Modell (z.B. nach Smagorinsky 1963) verwendet. Direkte Numerische Simulation und Large Eddy Simulation sind zur Zeit wegen des damit verbundenen Rechenaufwands nur für eine begrenzte Auswahl von Strömungen bei kleinen bis mittleren Reynoldszahlen (DNS: $Re < 10^4$; LES: $Re < 10^5$) anwendbar und für ingenieurtechnische Anwendungen daher praktisch unbedeutend. Technisch relevante Simulationen finden fast ausnahmslos auf der Grundlage von empirischen und heuristischen Turbulenzmodellen statt. Die Ausgangsgleichungen der Strömungssimulation mit Turbulenzmodellen bilden die Ensemble–gemittelten Navier–Stokes–Gleichungen, die sogenannten Reynoldsschen Gleichungen (Reynolds 1895). Neben den gemittelten Geschwindigkeiten treten in diesen Gleichungen Korrelationsterme zweiter Ordnung der Geschwindigkeitsschwankungen – die sogenannten Reynoldsspannungen – auf, die mit Hilfe des Turbulenzmodells auf die gemittelten Impulsgrößen und eventuell auftretende Modellparameter zurückgeführt werden. Der Ansatz von Boussinesq (1877), der durch Einführung der sogenannten Wirbelviskosität eine Analogie zwischen dem molekularen und dem turbulenten Austauschvorgang herstellt, ermöglichte einen ersten Zugang zur Beschreibung turbulenter Strömungen. Strömungssimulationen mit darauf basierenden Turbulenzmodellen, zu denen algebraische Modelle sowie Halb–, Ein– oder Zweigleichungsmodelle gehören, sind die Standardmodelle für derzeitige ingenieurtechnische Anwendungen. Die bekanntesten Varianten davon sind das algebraische Modell von Baldwin & Lomax (1978), das $k$–Eingleichungsmodell (Wolfshtein 1967), das $k-\varepsilon$ Modell (Jones & Launder 1972) und das $k-\omega$ Modell (Wilcox & Rubesin 1980). Wegen der angenommenen linearen Abhängigkeit zwischen Reynoldsspannungen („Stress“) und Geschwindigkeitsgradienten („Strain“) werden sie auch lineare Wirbelviskositätsmodelle („Eddy Viscosity Model“, EVM) genannt.

Obwohl die lineare Stress–Strain–Beziehung eine wichtige Annahme bei der Turbulenzmodellierung darstellt, ist sie nicht allgemeingültig. Aufgrund der beschränkten Möglichkeit, Anisotropiezustände der Reynoldsspannungen wiederzugeben, liefern lineare Wirbelviskositätsmodelle bei komplexer dreidimensionaler Strömung mit stark gekrümmten Stromlinien keine befriedigenden Ergebnisse.

Alternativ zum Wirbelviskositätsprinzip können die Reynoldsspannungen auch aus der Lösung halbempirischer Transportgleichungen („Reynoldsspannungsmodelle“, RSM, Launder, Reece & Rodi 1975) bestimmt werden. Diese Vorgehensweise ist zwar wesentlich genauer, wird aufgrund des damit verbundenen Rechnenzeit– und Speicherbedarfs sowie numerischer Probleme in praxisnahen Anwendungen jedoch kaum eingesetzt.

Ein Kompromiß zwischen den einfachen linearen EVM und den sehr aufwendigen impliziten RSM ist die explizite Formulierung der Reynoldsspannungen im Rahmen der algebraischen Spannungsmodelle. Die Technik der expliziten algebraischen Spannungsmodellierung (ASM) wird in jüngster Zeit vermehrt zur Herleitung der Stress–Strain–Beziehung eingesetzt. Ihnen liegt eine polynominale Abhängigkeit der Reynoldsspannungen von den Geschwindigkeitsgradienten zugrunde. Hierbei werden die impliziten Reynoldsspannungs-Transportgleichungen unter der Annahme homogener Turbulenzstruktur zunächst in algebraische Beziehungen überführt. Ausgehend von diesen nach wie vor impliziten Beziehungen für die Reynoldsspannungen kann durch darstellungstheoretische Überlegungen ein explizites, algebraisches Spannungsmodell in Gestalt eines nichtlinearen EVM (Gatski & Speziale 1993) formuliert werden. Das explizite ASM liefert in vielen Fällen bessere Ergebnisse als das lineare EVM. Der größte Vorteil dieser Vorgehensweise gegenüber impliziten RSM liegt in ihrer einfachen Handhabung bei der Implementierung und dem nur leicht erhöhten Rechenzeitbedarf gegenüber linearen EVM. Algebraische Spannungsmodelle können dadurch in der nahen Zukunft für ingenieurtechnische Strömungsprobleme breite Anwendung finden.

**Numerische Genauigkeit**

Während die Genauigkeit der physikalischen Modellbildung entscheidend vom verwendeten Turlenzmodell bestimmt wird, beeinflußt das Approximationsschema zur Berechnung des Konvektionsflusses maßgeblich die numerische Genauigkeit. Durch den Einsatz spezieller Konvektionsschemata werden Oszillationen der numerischen Lösung vermieden und gleichzeitig die numerische Diffusion minimiert. Derartige Konvektionsschemata wurden zunächst im Zusammenhang mit dichtebasierten Verfahren konzipiert (Lax & Wendroff 1964, Warming & Beam 1976). Die Verwendung moderner Upwind–Schemata höherer Ordnung nach dem Monotonie gewährleistenden TVD–Prinzip (Van Leer 1979, Harten 1983, Osher 1985) setzt sich neuerdings auch im Zusammenhang mit Druckkorrekturverfahren immer mehr durch. Hiermit läßt sich eine effiziente Steigerung der numerischen Genauigkeit erzielen.

**Numerische Effizienz**

Für ingenieurtechnische Anwendungen mit großer Gitterpunktanzahl führen finite Approximationen der strömungsmechnischen Bilanzgleichungen zu großen Gleichungssystemen, die stark nichtlinearen Charakter aufweisen. Solche Gleichungsysteme können numerisch nur mit iterativen Verfahren gelöst werden. Zur Konvergenzbeschleunigung von iterativen Lösungsverfahren ist die Mehrgittermethode eine wirkungsvolle Technik. Anfänglich wurde diese Methode für Einzelelemente des SIMPLE–Verfahrens, z.B. die Druckkorrekturgleichung, eingesetzt (Lonsdale & Walsh 1984). Die dabei erzielte Konvergenzbeschleunigung um den Faktor 2 rechtfertigt aber nicht den sehr hohen Implementierungsaufwand. Sivaloganathan & Shaw (1987) untersuchten die Anwendbarkeit der Mehrgittermethode auf das SIMPLE–Verfahren als Gesamtverfahren. Weitere, umfangreiche Untersuchungen (Perić, Rüger & Scheuerer 1989, Orth 1991, Lien & Leschziner 1994b, Lilek, Muzaferija & Perić 1997, Yan, Xue, Rung & Thiele 1998) bestätigen diese Vorgehensweise durch den erzielten Beschleunigungsfaktor bis zu 100 gegenüber Eingitterrechnungen. Allerdings sind die meisten Untersuchungen für laminarer Strömungen durchgeführt worden. Eine allgemeine Implementierung der Mehrgittermethode für turbulente Strömungen im Zusammenhang mit Druckkorrekturverfahren, vor allem für die Lösung der Turbulenzvariablen, ist derzeit nicht bekannt.

Die Lösung linearisierter algebraischer Gleichungsysteme für einzelne Variablen beansprucht beim Programmablauf die meiste Rechenzeit. Effiziente Gleichungslöser können maßgeblich zur Steigerung der Gesamteffizienz beitragen. Für Koeffizientenmatrizen auf strukturierten Gitter hat sich der SIP–Löser (Stone 1968) als sehr wirkunsvoll erwiesen (Schönung 1990). Für unstrukturierte Gitter können eine Reihe von CG („Conjugate Gradients")–basierten Lösungsalgorithmen, z.B. BI–CGSTAB (Van den Vorst 1992) Anwendung finden.

**Erfassung von komplexen Geometrien**

Neben Genauigkeit und Schnelligkeit des numerischen Simulationsverfahrens wird ein möglichst einfaches Erfassungskonzept für komplexen Geometrien verlangt. Der traditionelle Weg, die Generierung von strukturierten Gittern, erweist sich immer mehr als zeit– und kostenintensiver Arbeitsschritt im gesamten Simulationsprozeß. Automatisch generierbare unstrukturierte Gitter, wie sie bei strukturmechanischen Simulationen eingesetzt werden, genügen in vielerlei Hinsicht nicht den Genauigkeitsanforderungen, wie sie von numerischen Verfahren gestellt werden. Der Hauptgrund, der gegen einen Einsatz von unstrukturierten Gittern spricht, liegt in der mangelhaften Approximationsgenauigkeit von turbulenten Austauschsmechanismen im körpernahen Bereich (Thompson 1996). In technischen Anwendungen werden derzeit körperangepaßte strukturierte Multiblockgitter generiert. In der fortgeschrittenen Variante sind sowohl beliebige Gitterblockanordnungen als auch unstrukurierte Verbindungen zwischen zwei Gitterblöcken möglich. Einerseits läßt sich damit eine Übertragung der im Körpernahbereich extrem verdichteten Gitterlinien ins Fernfeld verhindern, andererseits kann der Generierungsaufwand zur Gewährleistung gleichbleibender Gitterqualität stark reduziert werden. Dies verlangt algorithmische und datenstrukturelle Anpassungen der bestehenden Simulationsprogramme sowie eine spezielle Entwicklung von neuen finiten Approximationstechniken. Zukünftige Entwicklungen konzentrieren sich auf hybride Rechengitter, wobei in körpernahen Gebieten strukturierte oder semistrukturierte und in Fernfeldern unstrukturierte Gitter eingesetzt werden. Dabei sollen auch die mit strukturierten Gittern verbundenen Vorteile (z.B. effizienter Gleichungslöser und vergleichsweise moderater Speicherbedarf) ausgenutzt werden, was zu hybriden Simulationsverfahren führt.

**Parallele Effizienz**

Alle oben genannten Turbulenzmodelle, numerischen Methoden und effizienten Lösungstechniken sind in vielen Simulationsprogrammen für Einprozessormaschinen vorwiegend für zweidimensionale Probleme implementiert und validiert worden. Einzelne Komponenten wurden auch auf ihre Paralleleffizienz hin untersucht und gegebenfalls verbessert. Im Prinzip sollten alle Module der Prozedur ihre Funktionalität bei parallelem Simulationsablauf von komplexen dreidimensionalen Strömungen beibehalten. Die Umsetzung in ein effizientes Simulationsprogramm für Parallelrechner erfordert jedoch eine der Rechnerarchitektur angepaßte Implementierung.

Die schnelle Entwicklung der Computertechnologie äußert sich nicht nur in der Steigerung der Rechengeschwindigkeit und Speicherkapazität des einzelnen Rechners. Sie äußert sich auch in der erhöhten Datenübertragungsgeschwindigkeit und in der Verbesserung der Netzwerktopologie für Mehrprozessormaschinen. Bei Mehrprozessormaschinen geht die speichertechnische Entwicklung in zwei Richtungen: Maschinen mit gemeinsam Arbeitsspeicher (Shared Memory, SM) und Maschinen mit verteiltem Arbeitsspeicher (Distributed Memory, DM), der einzelnen Prozessoren zugeordnet ist. Dabei benutzen SM–Architekturen in der Regel Vektorprozessoren, während massiv parallele DM–Rechner auf vergleichsweise billige Standardprozessoren zurückgreifen. Dennoch liegt die momentane Maximalleistung von SM–Maschinen (CRAY T932 oder NEC SX–4/32 mit jeweilts 32 Prozessoren) bei ca. 60 Gigaflop/s, die einer DM–Maschine (Intel ASCI Option Red mit 9152 PentiumII Prozessoren) hingegen bei 1.8 Teraflop/s (Dongarra 1998). Aufgrund der extrem aufwendigen Speicherverwaltung ist die Anzahl von integrierbaren Prozessoren und die Speicherkapazität in einer SM–Maschine begrenzt. Eine weitere Erhöhung der Gesamtleistung kann nur durch eine Leistungssteigerung der Einzelprozessoren erreicht werden, welche aber langsam an ihre physikalische Grenze gelangt. Im Gegensatz dazu ist die Gesamtleistung von DM–Maschinen praktisch beliebig erweiterbar. Durch die große Bandbreite der Datenübertragung (z. B. CRAY–T3E im Bereich von GigaByte/s) und durch die 3D–Torus Netzwerktopologie läßt sich diese Leistung für die Lösung vieler ingenieurtechnischer Probleme nutzen. Aufgrund der Problemvielfalt kann jedoch eine Automatisierung der programmseitigen Anpassung an die Multiprozessor–Rechnerarchitektur, auch Parallelisierung genannt, nicht realisiert werden.

Zur Ausschöpfung des Leistungspotentials von Parallelrechnern sind bei der Parallelisierung zwei Punkte von entscheidener Bedeutung. Zum einen ist auf die gleichmäßige Verteilung der Arbeiten auf die beteiligten Prozessoren zu achten. Zum anderen sollten Lösungsstrategien verwendet werden, die keinen übermäßigen Zeitaufwand für die Datenübertragung zwischen den Einzelprozessoren verursachen.

In der numerischen Strömungssimulation haben sich zwei Parallelisierungsstrategien entwickelt, die als zeitbezogene Parallelisierung und als raumbezogene Parallelisierung bezeichnet werden. Bei der zeitbezogenen Parallelisierung zur Lösung von instationären Problemen werden die iterativen Rechenoperationen verschiedener Zeitschritte iterationsversetzt auf verschiedenen Rechenprozessoren ausgeführt. Diese Methode hat den entscheidenden Nachteil, daß die Datenmenge auf jeder Prozessoreinheit (PE: Einheit aus dem Rechenprozessor und dem ihm zugeordneten Speicher) der Dimension des zu lösenden Gesamtproblems entspricht. Somit ist die lösbare Problemgröße durch die Kapazität des jedem Prozessor zugeordneten Speichers begrenzt. Ein weiterer Nachteil ergibt sich aus der, durch den Rechenprozeß bedingten, kompletten Übertragung des gesamten Lösungsfeldes nach jedem Iterationsschritt. Aufgrund der damit verbundenen langen Datenübertragungszeiten empfiehlt sich diese Methode nicht zur Simulation großer Probleme.

Die raumbezogene Strategie stellt heutzutage die Standardtechnik der Parallelisierung dar. Hierbei wird das Rechengebiet („computational domain“) in etwa gleichgroße zusammenhängende Gebiete unterteilt. Dieser Vorgang wird Gebietszerlegung („domain decomposition“) genannt. Jeder Prozessor bearbeitet eine dieser Gruppen, womit die lösbare Problemgröße nur durch die gesamte Speicherkapazität aller beteiligten Prozessoren begrenzt ist. Die Datenmenge, die bei dieser Strategie zur Übertragung anfällt, ist proportional zur Anzahl der bei der Gebietszerlegung entstandenen Trennungsflächen. Bei einem dreidimensionalen Problem ist das eine relativ große Datenmenge, die sich ohne deutliche Einbußen in der Gesamtleistung nur durch eine effiziente Datenkommunikationstechnik verarbeiten läßt.

## 1.3 Zielsetzung

Entsprechend dem oben dargestellten Stand der Forschung, in dem auch die Anforderungen für Weiterentwicklungen von Simulationsverfahren formuliert sind, soll in dieser Arbeit ein effizienter paralleler Lösungsalgorithmus zur dreidimensionalen Simulation komplexer turbulenter Strömungen entwickelt werden.
Als Grundlage zur Berechnung von sowohl inkompressiblen als auch kompressiblen Strömungen dient das erweiterte SIMPLE–Druckkorrekturverfahren auf Basis der Finite–Volumen–Approximation.
Die genauere Erfassung der turbulenten Strömungsvorgänge erfolgt mit höherwertigen Turbulenzmodellen, für die das Lösungsverfahren entsprechend modifiziert wird. Höherwertige Konvektionsschemata sind die Grundlage zur Verbessung der numerischen Genauigkeit der Simulation.
Um komplexe Geometrien bei der Simulation von Strömungen zu erfassen, beruht das Lösungskonzept auf strukturierten Multiblockgittern mit beliebiger Blockanordnung und unstrukturierten Blockverbindungsflächen. Daneben werden auch Lösungsansätze im Hinblick auf zukünftige Erweiterungen in Bezug auf hybride Gitter diskutiert.
Bewährte Konvergenzbeschleunigungstechniken für Einblockgitter sollen auf ihre Einsatzmöglichkeit und Effizienz bei Multiblockgittern geprüft und gegebenfalls modifiziert werden.
Als Grundkonzept der Parallelisierung des Simulationsverfahrens dient die Gebietszerlegung durch strukturierte Multiblockgitter. Für Parallelrechner, die auf Multiprozessorarchitektur mit verteiltem Arbeitsspeicher aufbauen, sollen effiziente und flexibel einsetzbare Datenkommunikationstechniken entwickelt werden. Bei der Neukonzeption und der programmtechnischen Umsetzung aller relevanten numerischen Approximations– und Konvergenzbeschleunigungstechniken soll die spezielle Rechnerarchitektur der Multiprozessormaschinen ausgenutzt werden.
Im Hinblick auf zukünftige Weiterentwicklungen, insbesondere auf hybride Gitter, wird das Simulationsverfahren als offenes System konstruiert und dafür eine einheitliche und übersichtliche Datenstruktur geschaffen.
Mit dem unter diesen Gesichtspunkten neuentwickelten Simulationsprogramm sollen unterschiedliche Strömungen berechnet und mit experimentellen Daten verglichen werden. Die Effizienz des numerischen Lösungsalgorithmus wird im Vergleich zu bekannten Untersuchungen anderer Simulationsverfahren dargestellt.

# Kapitel 2

# Grundgleichungen

## 2.1 Strömungsmechanische Bilanzgleichungen

Die Strömung eines Fluids wird mathematisch durch die differentiellen Bilanzgleichungen in Zeit $t$ und Raum $\underline{x}$ für Masse, Impuls und Energie beschrieben. In ihrer konservativen Form lauten sie:

– Massenbilanz (Kontinuitätsgleichung für die Dichte $\rho$):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) = 0 \ , \tag{2.1}$$

– Impulsbilanz (Navier–Stokes–Gleichungen für den Geschwindigkeitsvektor $\underline{u}$):

$$\frac{\partial (\rho \underline{u})}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho \underline{u} \ \underline{u} - \underline{\underline{\pi}} \right) = \underline{s}_u \ , \tag{2.2}$$

– Energiebilanz (Formulierung für die Enthalpie $h$):

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \rho \underline{u} \ h + \underline{q} \right) = s_h \ . \tag{2.3}$$

Für ein Newton'sches Fluid lautet der Spannungstensor

$$\underline{\underline{\pi}} = -p\underline{\underline{I}} + 2\mu \underline{\underline{S}} - \frac{2}{3}\mu \left( \nabla \cdot \underline{u} \right) \underline{\underline{I}} \tag{2.4}$$

mit dem Einheitstensor $\underline{\underline{I}}$ und dem Deformationsgeschwindigkeitstensor

$$\underline{\underline{S}} = \frac{1}{2}(\nabla \underline{u} + \nabla^T \underline{u}) \ , \tag{2.5}$$

wobei $p$ den Druck und $\mu$ die dynamische Viskosität bezeichnen. Der Term $\underline{s}_u$ ist die Volumenkraftdichte und beinhaltet z.B. die Wirkung der Schwerkraft.
Für die Wärmestromdichte $\underline{q}$ verwendet man den Fourierschen Ansatz

$$\underline{q} = -\lambda \nabla T \ .$$

Die Wärmeleitfähigkeit $\lambda$ ist eine vom thermodynamischen Zustand abhängige Stoffgröße. Für thermisch und kalorisch ideale Stoffe mit der spezifischen Gaskonstante $R$, dem konstanten Isentropenexponent $\kappa$ und der konstanten isobaren Wärmekapazität $c_p$ gelten die Zustandsgleichungen

$$p = \rho R T \quad \text{und} \quad h = c_p T \quad \text{mit} \quad c_p = \frac{\kappa R}{\kappa - 1} \ .$$

Die Wärmestromdichte läßt sich durch

$$\underline{q} = -\frac{\mu}{Pr} \nabla h \tag{2.6}$$

darstellen, wobei die sogenannte Prandtlzahl

$$Pr = \frac{\mu \ c_p}{\lambda}$$

bei Gasen in weiten Teilen des technisch interessanten Temperaturbereichs ($Pr = 0.67 \sim 0.76$ für $100K < T < 1000K$) annährend konstant eingesetzt werden kann. Die dynamische Viskosität $\mu$ kann bei Gasen durch die halbempirische Formel von Sutherland (1893)

$$\frac{\mu}{\mu_b} = \frac{T_b + T_S}{T + T_S} \left( \frac{T}{T_b} \right)^{1.5} \tag{2.7}$$

mit den Stoffgrößen $\mu_b$, $T_b$ und $T_S$ vorgegeben werden. Der Quellterm $s_h$ für die Enthalpie lautet:

$$s_h = (\underline{\underline{\pi}} + p\underline{\underline{I}}) \cdot \cdot \underline{\underline{S}} + \frac{\partial p}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla p + w_h \ . \tag{2.8}$$

In der Größe $w_h$ sind volumenspezifische Wärmequellen, z.B. durch die Wärmestrahlung, zusammengefaßt.

Eine Alternative zur Energiebilanzgleichung (2.3) ist die Bernoullische Gleichung der Gasdynamik (Schade & Kunz 1980). Die in dieser Arbeit verwendete Formulierung für ein ideales Gas läßt sich ohne Berücksichtigung von Volumenkräften und Wärmequellen wie folgt darstellen:

$$H_0 = \frac{\kappa}{\kappa - 1} \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \underline{u} \cdot \underline{u} = \text{konstant} \ . \tag{2.9}$$

Bei kleinerer und mittlerer Machzahl ($Ma < 1.5$) und ohne externe Wärmezufuhr hat sich diese Approximation bewährt (Lien 1992), sofern keine starke Stromlinienkrümmung vorliegt.

## 2.2 Behandlung turbulenter Strömungen

Die meisten technisch relevanten Strömungen sind turbulent, wobei sehr hohe Rynoldszahlen auftreten können. Die Direkte Numerische Simulation (DNS) und die Large Eddy Simulation (LES), deren Anwendungsbereich sich gegenwärtig auf kleinere bis mittlere $Re$–Zahlen (DNS: $Re < 10^4$; LES: $Re < 10^5$) beschränkt, sind zur Berechnung derartiger Strömungen nicht geeignet. In der Praxis hat sich eine Vorgehensweise durchgesetzt, bei der die Bilanzgleichungen auf der Basis der Ensemble-gemittelten Variablen gelöst werden. Die mit stochastischen Schwankungen behafteten Geschwindigkeiten $\underline{u}$ werden zunächst in ihre Ensemble–Mittelungen $\overline{\underline{u}}$ und in ihre Schwankungsanteile $\underline{u}'$ zerlegt:

$$\underline{u} = \overline{\underline{u}} + \underline{u}' \ .$$

Die aus der Impulsbilanz (Navier–Stokes–Gleichungen) gewonnenen Reynoldsschen Gleichungen (Reynolds 1895) lauten dann:

$$\frac{\partial\,(\rho\;\overline{\underline{u}})}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho\;\overline{\underline{u}}\;\overline{\underline{u}} + \rho\;\overline{\underline{u}'\underline{u}'} - \overline{\underline{\underline{\pi}}}\right) = \underline{s}_u \text{ mit } \overline{\underline{\underline{\pi}}} = \left[-\overline{p} + \frac{2}{3}(\nabla\cdot\overline{\underline{u}})\right]\underline{\underline{I}} + \mu(\nabla\overline{\underline{u}} + \nabla^T\overline{\underline{u}}). \quad (2.10)$$

Die daraus zu berechnenden Variablen der Reynoldsschen Gleichungen sind nicht mehr die mit stochastischen Schwankungen behafteten physikalischen Geschwindigkeiten $\underline{u}$, sondern ihre Mittelwerte $\overline{\underline{u}}$.

Die Gleichungen (2.10) gelten nur für inkompressible Strömungen. Eine formal identische Darstellung kann man mit der dichtegewichteten Mittelung (Favre 1965)

$$\widetilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}}$$

für kompressible Strömungen gewinnen, wenn in die Reynoldsschen Gleichungen anstelle der Ensemble–gemittelten Geschwindigkeiten $\overline{\underline{u}}$ die dichtegewichteten Geschwindigkeiten $\widetilde{\underline{u}}$ eingesetzt werden und die Dichte $\rho$ durch ihren Ensemble–Mittelwert $\overline{\rho}$ ersetzt wird. Hierbei ändert sich auch die Definition der Schwankungsgeschwindigkeiten:

$$\underline{u}' = \underline{u} - \widetilde{\underline{u}} \ .$$

In allen weiteren Gleichungen werden alle Mittelwerte der Strömungsvariablen ohne Querbalken ( ¯ ) bzw. Tilde ( ˜ ) dargestellt, da eine Verwechslungsgefahr nicht besteht.

Wegen der Nichtlinearität der Navier–Stokes–Gleichungen treten bei der Mittelung zusätzliche Korrelationen der Geschwindigkeitsschwankungen von zweiter Ordnung auf, die durch Schließungsannahmen aus der Turbulenzmodellierung auf die gemittelten Größen zurückgeführt werden müssen. Da diese Terme wie eine Spannung auf das Fluid wirken, werden diese auch Reynoldsspannungen ($\underline{\underline{\tau}}_t$) genannt. Die bekannten Turbulenzmodelle können in zwei Gruppen eingeteilt werden. Die erste Gruppe basiert, dem Ansatz von Boussinesq (1877) folgend, auf der scheinbaren Ähnlichkeit der molekularen und der turbulenten Austauschmechanismen. Bei der anderen Gruppe der Turbulenzmodelle werden halbempirische Transportgleichungen für die Reynoldsspannungen gelöst. Eine Zusammenfassung über die in der Anwendung eingesetzten Turbulenzmodelle findet sich z.B. bei Wilcox (1993).

**Wirbelviskositätsmodell** („Eddy Viscosity Model“, EVM)

Analog zur molekularen Viskosität wird beim Boussinesq–Ansatz eine Wirbelviskosität $\mu_t$ in

Verbindung mit einer charakteristischen Geschwindigkeit der turbulenten Fluktuationsbewegung $v_m$ und einem mittleren Mischungweg $l_m$ der Turbulenzballen eingeführt:

$$\mu_t \propto \rho v_m l_m \ . \tag{2.11}$$

Der Reynoldsspannungstensor $\underline{\underline{\tau}}_t$ läßt sich somit durch

$$\underline{\underline{\tau}}_t = -\rho\overline{\underline{u}'\underline{u}'} = -\frac{2}{3}\rho k\underline{\underline{I}} + 2\mu_t\underline{\underline{S}} - \frac{2}{3}\mu_t\left(\nabla\cdot\underline{u}\right)\underline{\underline{I}} \tag{2.12}$$

approximieren, wobei sich die turbulente kinetische Energie

$$k = \frac{1}{2}\overline{\underline{u}'\cdot\underline{u}'} \tag{2.13}$$

proportional zur charakteristischen Fluktuationsgeschwindigkeit $k \propto v_m^2$ verhält. Die Modellierung reduziert sich demnach auf die Bestimmung der Größen $l_m$ und $v_m$. Man klassifiziert die Wirbelviskositätsmodelle in folgende Untergruppen:

1) Algebraische Modelle:

   Die Größen $v_m$ und $l_m$ werden im direkten Zusammenhang mit den gemittelten lokalen Strömungsvariablen analytisch dargestellt. Die bekanntesten Vertreter sind die Modelle von Cebeci & Smith (1974) und Baldwin & Lomax (1978). Wegen ihrer einfachen Implementierung wurden sie zuerst für strömungsmechanische Berechnungen eingesetzt. Der Nachteil dieser analytischen Ansätze ist ihre lokale Betrachtungsweise, wobei der Transporteffekt völlig vernachlässigt wird.

2) Eingleichungsmodelle:

   Hierbei wird der Transporteffekt durch die Lösung einer Bilanzgleichung z.B. für die turbulente kinetische Energie $k$,

$$\frac{\partial\rho k}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho\underline{u}k\right) - \nabla\cdot\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right] = P - \rho\varepsilon \ , \tag{2.14}$$

   die sich aus den Reynoldsschen Gleichungen unter Beachtung der scheinbaren Ähnlichkeit der molekularen und turbulenten Austauschmechanismen herleiten läßt, teilweise berücksichtigt. Der Mischungsweg $l_m$ wird z.B. in Abhängigkeit von geometrischen Größen bestimmt (Wolfshtein 1967).

   Die rechte Seite der Gleichung (2.14) enthält die turbulente Produktion

$$P = \underline{\underline{\tau}}_t \cdot\cdot\nabla\underline{u} = \left[-\frac{2}{3}\rho k\underline{\underline{I}} + 2\mu_t\underline{\underline{S}} + \mu_t\left(\nabla\cdot\underline{u}\right)\underline{\underline{I}}\right]\cdot\cdot\nabla\underline{u}$$

   und die turbulente Dissipation

$$\rho\varepsilon = \mu\overline{\nabla\underline{u}'\cdot\cdot\nabla\underline{u}'} \ ,$$

die die Umwandlung der turbulenten kinetische Energie in thermische Energie infolge der Zähigkeit beschreibt. Die Dissipationsrate $\varepsilon$ wird im Rahmen eines Eingleichungsmodells auf die Größen $k$ und $l_m$ zurückgeführt.

3) Zweigleichungsmodelle:
Hier werden für zwei Turbulenzgrößen, die aus exponentieller Kombination von $v_m$ und $l_m$ gebildet werden, Transportgleichungen gelöst. Da nach dem Boussinesq–Ansatz die turbulenten Austauschmechanismen von zwei Größen ($v_m$ und $l_m$) abhängen, bildet ein Zweigleichungsmodell das einfachste Komplettsystem, um diesen Vorgang zu erfassen. Die Dissipationrate $\varepsilon$ (Jones & Launder 1972) oder die spezifische Dissipationrate $\omega \propto \varepsilon/k$ (Wilcox & Rubesin 1980) wird im allgemeinen als zweite Variable in Verbindung mit der $k$–Gleichung im Rahmen eines Zweigleichungsmodells verwendet. Beide Variablen beinhalten zweite Korrelationen der Geschwindigkeitsschwankungen. Die dafür aus den Reynoldsschen Gleichungen hergeleiteten Transportgleichungen enthalten zwangsläufig Korrelationen höherer Ordnung. Aus der Analyse der Einzelterme in diesen Gleichungen und aus der Dimensionsanalyse

$$k \propto v_m^2 \ , \ \varepsilon \propto v_m^3 \ l_m^{-1} \ , \ \omega \propto v_m \ l_m^{-1} \tag{2.15}$$

läßt sich eine Basisgleichung für die zweite Variable aufstellen:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \right) \nabla \phi \right] = C_{\phi 1} \frac{\phi}{k} P - C_{\phi 2} \rho \phi \omega \ . \tag{2.16}$$

Auf der linken Seite dieser Gleichung ist die zeitliche Änderung, die Konvektion und die molekulare und turbulente Diffusion der Größe $\phi$ zusammengefaßt. Der erste Term der rechten Seite ist die Produktion, und der zweite Term stellt die Dissipation von $\phi$ dar. Die Modellkoeffizienten $\sigma_\phi$ , $C_{\phi 1}$ und $C_{\phi 2}$ lassen sich aus theoretischen Überlegungen und experimentellen Ergebnissen gewinnen.

**Reynoldsspanungsmodell** („Reynolds Stress Model“, RSM)
Komplexe dreidimensionale Strömungen sind durch stark anisotropische Spannungszustände gekennzeichnet. Diese Anisotropiezustände können mit den oben beschriebenen Wirbelviskositätsmodellen entsprechend dem Ansatz nicht erfaßt werden. Die zweite Gruppe der Turbulenzmodelle, die Reynoldsspanungsmodelle (Launder u. a., 1975), können die Anisotropie des Spannungstensors ohne Korrektur wiedergeben, da für jede Komponente eine separate Transportgleichung zur Verfügung steht. Der große Rechenaufwand impliziter RSM läßt sich durch eine Vereinfachung zu expliziten algebraischen Reynoldsspannungsmodellen („Algebraic Stress Model“, ASM) erheblich reduzieren, wobei die Güte der Modellierung weitgehend erhalten bleibt.

In dieser Arbeit werden zwei explizite algebraische Reynoldsspannungsmodelle zur Berechnung turbulenter Strömungen verwendet. Drei lineare Wirbelviskositätsmodelle, das Wolfshtein $k$–Modell, das LLR $k$–$\omega$–Modell und das Standard $k$–$\varepsilon$–Modell mit einer „Low–Re–number" (im folgenden mit LRe abgekürzt)–Modifikation sind zu Vergleichszwecken ebenfalls im Programm integriert.
Die programmtechnische Umsetzung eines ASM erfordert erweiterte Datenspeicherfelder zur Erfassung des nichtlinearen Anteils der Reynoldsspannungen. Eine Modifikation des Druckkorrekturverfahrens ist zur Vermeidung der Entkopplungsgefahr zwischen Reynoldsspannungen und Geschwindigkeiten ebenfalls notwendig. Das Simulationsprogramm ist deshalb so konzipiert, daß alle notwendigen Programmstrukturen und Datenspeicherfelder für die strukturelle Umsetzung der algebraischen Spannungsmodelle bereitgestellt werden. Damit ist auch gleichzeitig eine Grundlage für die impliziten Reynoldsspannungsmodelle geschaffen.
Im folgenden werden die implementierten Turbulenzmodelle kurz dargestellt.

### 2.2.1 Wolfsthein $k$–Modell

Das Modell ist ein einfaches Eingleichungsmodell und eignet sich für die Beschreibung von wandnahen Strömungen. Es wird oft in Verbindung mit dem Standard $k$–$\varepsilon$ Modell im sogenannten Zweischichtenmodell bei wandgebundenen Strömungen eingesetzt. In dieser Arbeit dient das Modell zur Beschaffung einer Startlösung für die komplexeren Turbulenzmodelle.
Die in der $k$-Gleichung (2.14) auftretende Wirbelzähigkeit $\mu_t$ und Disspationsrate $\varepsilon$ werden durch Dimensionsanalyse auf die turbulente kinetische Energie $k$ und den Wandnormalenabstand $l_n$ als turbulentes Längenmaß zurückgeführt. Nach Wolfshtein (1967) ergeben sich damit folgende Koeffizienten:

$$\mu_t = C_\mu \rho k^{1/2} l_\mu \ ; \quad C_\mu = 0.09 \ , \quad l_\mu = C_l \ l_n \left[1 - \exp\left(-0.016 \frac{l_n k^{1/2}}{\nu}\right)\right] \ ; \quad \sigma_k = 1.0 \tag{2.17}$$

und

$$\varepsilon = k^{3/2} l_\varepsilon^{-1} \ , \quad l_\varepsilon = C_l \ l_n \left[1 - \exp\left(-0.263 \frac{l_n k^{1/2}}{\nu}\right)\right] \ , \quad C_l = \kappa C_\mu^{-3/4} \ , \ \kappa = 0.41 \ .$$

Die Größen $l_\mu$ und $l_\varepsilon$ sind im Prinzip proportional zum Wandnormalenabstand $l_n$ und werden jeweils mit einem Dämpfungsfaktor modifiziert, der dem von Van Driest (1956) vorgeschlagenen Dämpfungsfaktor entspricht. Die turbulente kinetische Schwankungsenergie $k$ verhält sich zur Wand hin proportional zu $l_n^2$.

### 2.2.2 LLR $k$–$\omega$–Modell

Das $k$–$\omega$–Modell wurde ursprünglich von Kolmogorov (1942) als erstes Zweigleichungsmodell entwickelt. Neben der turbulenten kinetischen Energie $k$ wird zusätzlich die spezifische Dissipationsrate $\omega$ als Feldvariable mit einer eigenen Transportgleichung bestimmt. Der Hauptvorteil dieses Modells liegt darin, daß es eine analytisch richtige Lösung für die Grenzschichtströmung bis in die zähe Unterschicht hinein liefert (Wilcox & Rubesin 1980). Die modifizierte LLR („Local Linear Realizable")–Formulierung von Rung & Thiele (1996) berücksichtigt darüber hinaus den Einfluß der Stromlinienkrümmung und das Realizability–Prinzip zur Gewährleistung physikalischer Plausibilität durch die von Turbulenzvariablen und Geschwindigkeitsgradienten abhängigen Modellkoeffizienten. Dieses Modell hat sich bei Simulationen von zweidimensionalen und rotationssymmetrischen Strömungen bewährt und wird in der vorliegenden Arbeit für dreidimensinale Strömungen implementiert. Die LLR $k$–$\omega$ Modellgleichungen lauten:

– Wirbelzähigkeit:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k}{\omega} \ . \tag{2.18}$$

– Turbulente kinetische Energie (2.14):

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} k) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] = P - C_k \rho \omega k \ .$$

– Spezifische turbulente Dissipationsrate:

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \omega) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] = C_{\omega 1} \frac{\omega}{k} P - C_{\omega 2} \rho \omega^2 \ . \tag{2.19}$$

Die Modellkoeffizienten sind:

$$\sigma_k = 2 \ , \ \sigma_\omega = 2 \tag{2.20}$$

$$C_k = \frac{0.83/3 + R_k}{1 + R_k} \ , \ R_k = A^* Q_t^5 + (1 - A^*)\, Q_t \ , \ A^* = \tanh(4 Q_t) \ , \ Q_t = \left( \frac{Re_T}{100} \right)^{1/2} \ ;$$

$$C_{\omega 1} = C_\mu^{-1/2} f_1 \left( C_1 - C_\mu \tilde{S} \right) \ , \ f_1 = \frac{1/90 + (Re_T/70)^2}{1 + (Re_T/70)^2} \ , \ C_1 = \max\left( 0.43, \frac{\tilde{S}}{\tilde{S} + 4.256} \right) \ ,$$

$$C_{\omega 2} = \frac{1.83}{1 + \sqrt{C_\mu \mu / (\mu + \mu_t)}} - 1 \ , \ Re_T = \frac{\rho k}{\mu \omega} \ ;$$

$$C_\mu = \frac{f_\mu}{(B_s + A_s)\, \tilde{U}} \ , \ \tilde{U} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{S^2 + \Omega^2}{2}} \ , \ f_\mu = \frac{1/80 + R_\mu}{1 + R_\mu} \ , \ R_\mu = (Re_T/70)^\alpha \ ,$$

$$A_s = 2.12, \ B_s = \max\left( \frac{C^*}{\tilde{U}}, \frac{109}{80 + \tilde{S}^2} \right) \ , \ C^* = 8.0 - 4.1 \tanh\left( \frac{\tilde{S}}{1.8} \right) \ , \ \tilde{S} = S/\omega \ ,$$

$$\alpha = 0.5 + 1.6 \left( 3\Phi^2 - 2\Phi^3 \right) \ , \ \Phi = \min\left[ 1, \max\left( 0, \frac{Re_T}{150} \right) \right] \ ;$$

mit der Deformationsgeschwindigkeit $\underline{\underline{S}}$, dem Drehtensor $\underline{\underline{\Omega}}$ und ihren Invarianten $S$ bzw. $\Omega$

$$\underline{\underline{S}} = \frac{1}{2} \left( \nabla^T \underline{u} + \nabla \underline{u} \right) \ , \ S = \sqrt{2 \underline{\underline{S}} \cdot \cdot \underline{\underline{S}}} \ ; \ \ \underline{\underline{\Omega}} = \frac{1}{2} \left( \nabla^T \underline{u} - \nabla \underline{u} \right) \ , \ \Omega = \sqrt{2 \underline{\underline{\Omega}} \cdot \cdot \underline{\underline{\Omega}}} \ .$$

An der Wand ist die Größe $\omega$ nicht definiert; in der numerischen Berechnung wird deshalb ihr Wert in der wandnächsten Gitterzelle ($wn$) in Abhängigkeit von der lokalen turbulenten kinetischen Energie $k_{wn}$ vorgegeben:

$$\omega_{wn} = \frac{k_{wn}^{1/2}}{C_l l_n} \ . \tag{2.21}$$

Dieser Wert läßt sich auch ohne Abhängigkeit von $k_{wn}$ durch

$$\omega_{wn} = \frac{6\nu}{0.83 l_n^2} \tag{2.22}$$

bestimmen, wenn sich die wandnächste Gitterzelle innerhalb der zähen Unterschicht befindet.

### 2.2.3 $k$–$\varepsilon$–Modell

Für das am meisten verbreitete $k$–$\varepsilon$–Modell existieren zahlreiche Modifikationen, die sogenannte Low–Re–number (LRe)–Effekte berücksichtigen. Der Grund liegt darin, daß es hier im Gegensatz zum $k$–$\omega$–Modell keine konsistente analytische Lösung in der zähen Unterschicht wandgebundener Strömungen gibt. Um dies dennoch zu erreichen, werden die sogenannten LRe–Modifikationen durch Einsatz von Dämpfungsfunktionen vorgenommen.
Das Standard $k$–$\varepsilon$–Modell (Jones & Launder 1972) läutet:

– Wirbelzähigkeit:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \ . \tag{2.23}$$

– Turbulente kinetische Energie (2.14):

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} k) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] = P - C_k \rho \varepsilon \ .$$

– Turbulente Dissipationsrate:

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \varepsilon) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \ . \tag{2.24}$$

Die Modellkoeffizienten werden wie folgt angegeben:

$$\sigma_k = 1.0 \ , \ \sigma_\varepsilon = 1.3 \ , \ \ C_\mu = 0.09 \ , \ C_k = 1 \ , \ C_{\varepsilon 1} = 1.44 \ , \ C_{\varepsilon 2} = 1.92 \ . \tag{2.25}$$

Bei der LRe–Modifikation werden sie mit Dämpfungsfaktoren multipliziert, z.B. nach dem Vorschlag von Lien & Leschziner (1993, LL Low–Re–number–Modifikation):

$$C_\mu^{LRe} = C_\mu f_\mu \ , \ C_k^{LRe} = C_k f_k \ , \ C_{\varepsilon 1}^{LRe} = C_{\varepsilon 1} f_{\varepsilon 1} \ , \ C_{\varepsilon 2}^{LRe} = C_{\varepsilon 2} f_{\varepsilon 2} \ , \tag{2.26}$$

mit

$$f_\mu = \frac{l_\mu}{l_\varepsilon} \ , \ f_k = \frac{8/18 + (0.011 Re_T)^2}{1 + (0.011 Re_T)^2} \ , \ Re_T = \frac{k^2}{\nu \varepsilon} \ \ , \ Re_l = \frac{l_n k^{1/2}}{\nu} \ ,$$

$$l_\mu = C_l l_n \left[1 - \exp\left(-0.018 Re_l\right)\right] \ , \ l_\varepsilon = C_l l_n \left[1 - \exp\left(-0.263 Re_l\right)\right] \ ,$$

und

$$f_{\varepsilon 1} = 1 + \frac{P'}{P} \ , \ P' = \frac{\rho C_{\varepsilon 2}^{LRe} k^{3/2}}{C_{\varepsilon 1} l_\varepsilon} f_P \ , \ f_{\varepsilon 2} = 1 - 0.3 \exp\left(-Re_T^2\right) \ , \ f_P = \exp\left(-0.00222 Re_l^2\right) \ .$$

Da die Größe $\varepsilon$ an der Wand ebenfalls nicht definiert ist, wird sie bei der numerischen Berechnung in der wandnächsten Gitterzelle zur turbulenten kinetischen Energie $k_{wn}$ in Beziehung gesetzt:

$$\varepsilon_{wn} = \frac{k_{wn}^{3/2}}{C_l l_n} \ ; \tag{2.27}$$

bzw. bei der LRe Modifikation:

$$\varepsilon_{wn} = \frac{2\nu k_{wn}}{l_n} \ . \tag{2.28}$$

Im folgenden wird ein Turbulenzmodell ohne LRe–Modifikation mit „High–Re“ (HRe)–Formulierung und ein Turbulenzmodell mit LRe–Modifikation mit LRe–Formulierung bezeichnet. Die HRe–Formulierung wird eingesetzt, wenn sich der wandnächste Gitterpunkt außerhalb der zähen Unterschicht befindet. Die angegebenen Randbedingungen für die HRe–Formulierung ($\omega$: Gl. 2.21; $\varepsilon$: Gl. 2.27) setzen die Gültigkeit des logarithmischen Wandgesetzes voraus und werden HRe–Hypothese genannt. Die Anforderungen an Rechengitter im Zusammenhang mit der Wandrandbedingung werden im Kapitel 3.6.3 genauer dargestellt.

### 2.2.4 Algebraische Spannungsmodelle

Die drei im vorhergehenden Abschnitt vorgestellten Turbulenzmodelle basieren auf der scheinbaren Ähnlichkeit der molekularen und turbulenten Austauschmechanismen. Dabei unterliegt die sogenannte Reynoldsspannung einer linearen Proportionalität zur Deformationsgeschwindigkeit $\underline{\underline{S}}$:

$$\underline{\underline{\tau}}_t = -\overline{\rho \underline{u}' \underline{u}'} = 2\mu_t \underline{\underline{S}} - \frac{2}{3}(\rho k + \mu_t \nabla \cdot \underline{u}) \underline{\underline{I}} \ .$$

Diese lineare Stress–Strain–Beziehung ist aber nicht allgemeingültig. Vor allem in Strömungen mit stark gekrümmten Stromlinien, zum Beispiel bei komplexen dreidimensionalen Strömungen, können starke anisotrope Reynoldsspannungszustände damit nicht beschrieben werden.

Ein Kompromiß zwischen den einfachen linearen EVM und der aufwendigen impliziten Lösung der Reynoldsspannungen (RSM) stellt die in jüngster Zeit vermehrt eingesetzte Technik der expliziten algebraischen Spannungsmodellierung (ASM) dar. Aus den impliziten Transportgleichungen der Reynoldsspannungen kann unter der Annahme homogener Turbulenzstruktur durch darstellungstheoretische Überlegungen ein explizites, algebraisches Spannungsmodell in Gestalt eines nichtlinearen EVM formuliert werden. In dieser Arbeit wird exemplarisch das „Realizable Quadratic Eddy Viscosity Model“ (RQEVM, Rung, Thiele & Fu 1998) untersucht. Dieses Modell stellt ein explizites ASM dar, welches zusätzlich noch die Realizability–Bedingungen zur Gewährleistung physikalischer Plausibilität erfüllt. Zur linearen Abhängigkeit der Reynoldsschen Spannungen von den Geschwindigkeitsgradienten treten noch Terme höherer Ordnung hinzu

$$\underline{\underline{\tau}}_t = -\overline{\rho \underline{u}'\underline{u}'} = \underbrace{2\mu_t \underline{\underline{S}} - \frac{2}{3}(\rho k + \mu_t \nabla \cdot \underline{u})\underline{\underline{I}}}_{lin.\ Term} + \underbrace{2\mu_t \underline{\underline{B}}}_{quad.\ Term} \tag{2.29}$$

mit

$$\underline{\underline{B}} = \beta_2 \frac{k}{\varepsilon} \underline{\underline{T2}} - \beta_3 \frac{k}{\varepsilon} \underline{\underline{T3}} ,$$

wobei $\underline{\underline{T2}}$ und $\underline{\underline{T3}}$ quadratische Terme der Geschwindigkeitsgradienten bzw. der Deformationsgeschwindigkeit $\underline{\underline{S}}$ und des Drehtensors $\underline{\underline{\Omega}}$ sind:

$$\underline{\underline{T2}} = \underline{\underline{S}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{S}} , \quad \underline{\underline{T3}} = \underline{\underline{S}} \cdot \underline{\underline{S}} - \frac{1}{3}(\underline{\underline{S}} \cdot\cdot \underline{\underline{S}})\underline{\underline{I}} .$$

Der Proportionalitätsfaktor $C_\mu$ zwischen der Wirbelviskosität und den Turbulenzvariablen wird wie beim LLR $k$–$\omega$–Modell nicht konstant gehalten und in Abhängigkeit von Geschwindigkeitsgradienten bestimmt:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} , \; C_\mu = \frac{\beta_1}{1 - 2/3\ \eta^2 + 2\xi^2} , \; \eta^2 = \frac{\left(\beta_3 \tilde{S}\right)^2}{8} , \; \xi^2 = \frac{\left(\beta_2 \tilde{\Omega}\right)^2}{2} . \tag{2.30}$$

$\tilde{S}$ und $\tilde{\Omega}$ sind mit den Turbulenzvariablen normierte Invarianten von Deformationsgeschwindigkeit $\underline{\underline{S}}$ bzw. Drehtensor $\underline{\underline{\Omega}}$:

$$\tilde{S} = \frac{S}{\varepsilon/k} , \quad \tilde{\Omega} = \frac{\Omega}{\varepsilon/k} .$$

Die Modellkoeffizienten werden wie folgt angegeben:

$$\beta_1 = \frac{1}{g}\left(\frac{2}{3} - \frac{C_2}{2}\right) , \; \beta_2 = \frac{1}{g}\left(1 - \frac{C_4}{2}\right) , \; \beta_3 = \frac{1}{g}(2 - C_3) ,$$

$$g = f_g(C_1 - 1) + \frac{\tilde{S}^2}{4 + 1.83\sqrt{0.2\tilde{S}^2 + 0.8\tilde{\Omega}^2}} , \; f_g = 1 + .95\left\{1 - \tanh\left[\left(\frac{\tilde{S}}{2.15}\right)^2\right]\right\}$$

$$C_1 = 2.6 , \; C_2 = 0.41 , \; C_3 = 1.25 , \; C_4 = 0.45 .$$

Die quadratische Stress–Strain–Beziehung (2.29) ist in Verbindung mit dem Standard $k$–$\varepsilon$–Modell und dem LLR $k$–$\omega$–Modell implementiert. Beim $k$–$\varepsilon$–Modell wird hierzu der Koeffizient $C_{\varepsilon 2} = 1.83$ (statt 1.92) eingesetzt. Beim LLR $k$–$\omega$–Modell ist der Normierungsfaktor für $S$ und $\Omega$ die zu $\varepsilon/k$ adäquate Größe $\omega$. Der Koeffizient $C_\mu$ bestimmt sich aus der Gleichung (2.30).
Im Zusammenhang mit LRe–Formulierungen wird $C_\mu$ zusätzlich mit dem Dämpfungsfaktor $f_\mu$ aus der Gl. (2.25) multipliziert.
Der nichtlineare Anteil der Reynolsspannungen wird im folgenden mit

$$\underline{\underline{\tau}}_{tn} = 2\mu_t \underline{\underline{B}}$$

bezeichnet. Die Index $tn$ bedeutet „turbulent – nichtlinear“.

## 2.3 Zusammenfassung der Ausgangsgleichungen des numerischen Verfahrens

Die Simulation dreidimensionaler, stationärer oder instationärer, laminarer oder turbulenter, inkompressibler oder kompressibler Strömungen beruht, entsprechend obiger Herleitung, auf folgenden Ausgangsgleichungen:

- Massenbilanz (Gl. 2.1):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) = 0$$

- Impulsbilanz:

$$\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}\ \underline{u}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\pi}}_g + \underline{s}_s \ , \tag{2.31}$$

  mit der zusammengefaßten viskosen und Reynoldsschen Spannungen

$$\underline{\underline{\pi}}_g = 2\mu_g \underline{\underline{S}} - \left[ p_g + \frac{2}{3}\mu_g (\nabla \cdot \underline{u}) \right] \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_{tn} \ , \ \mu_g = \mu + \mu_t \ , \ p_g = p + \frac{2}{3}\rho k$$

  Der Index $g$ in $\underline{\underline{\pi}}_g$, $\mu_g$ und $p_g$ bedeutet hier „gesamt“.

- Skalare Transportgleichung für die Turbulenzvariable $\phi = k, \varepsilon, \omega$:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \right) \nabla \phi \right] = C_{\phi 1} \frac{\phi}{k} P - C_{\phi 2} \rho \omega \phi \ , \tag{2.32}$$

  mit der turbulenten Produktion:

$$P = \underline{\underline{\tau}}_t \cdot \cdot \underline{\underline{S}} \ , \quad \underline{\underline{\tau}}_t = 2\mu_t \underline{\underline{S}} - \frac{2}{3}(\rho k + \mu_t \nabla \cdot \underline{u}) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_{tn} \ .$$

- Die Energiebilanzgleichung für turbulente Strömungen lautet:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} h) - \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \nabla h \right] = \left( \underline{\underline{\pi}} + p\underline{\underline{I}} \right) \cdot \cdot \underline{\underline{S}} + \frac{\partial p}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla p + \rho \varepsilon \ . \tag{2.33}$$

  Hierbei ist der Energieaustausch infolge der turbulenten Schwankungsbewegung analog des turbulenten Impulsaustauschs mit einem „turbulenten“ Diffusionterm modelliert. Die darin vorkommende sogenannte turbulente Prandtlzahl $Pr_t$ ist im allgemeinen nicht konstant. Sie liegt z.B. für eine Grenzschichtströmung bei 1.5 an der Wand und $0.6 \sim 0.7$ (Wilcox 1993) am Grenzschichtaußenrand. In der numerischen Berechnung wird sie nährungsweise mit 0.9 konstant gehalten. Bei kleiner bis mitterer Machzahl und adiabater Wand kann auch statt der Bilanzgleichung (2.33) die Bernoullische Gleichung der Gasdynamik verwendet werden:

$$H_0 = \frac{\kappa}{\kappa - 1} RT + \frac{1}{2} \underline{u} \cdot \underline{u} = \text{konstant} \ . \tag{2.34}$$

Die Lösungsvariablen sind bei turbulenten Strömungen entweder die Ensemble–Mittelwerte ($\rho$ und $p$) oder die dichtegewichteten Mittelwerte ($\underline{u}$, $k$, $\varepsilon$, $\omega$ und $h$).

# Kapitel 3

# Numerische Methoden

Für die hier vorgestellten numerischen Simulation inkompressibler und kompressibler Strömungen dient das erweiterte SIMPLE–Druckkorrekturverfahren auf Basis der Finite–Volumen–Methode (FVM) mit zellzentrierter Variablenanordnung als Grundlage. Der Vorteil der FVM ist ihr konservativer Charakter. Die Erfüllung der integralen Form der Bilanzgleichungen für jedes finite Bilanzvolumen garantiert automatisch die globale Erfüllung der Gesamtbilanz für das Rechengebiet. Deswegen hat sich diese Methode in der numerischen Thermo– und Fluiddynamik weitgehend durchgesetzt.
Bei der Auswahl der numerischen Approximations– und Konvergenzbeschleunigungstechniken stehen folgende Überlegungen im Vordergrund:

1) Allgemeingültigkeit der Finiten Approximation für verschiedene Gitterarten:
Die Erzeugung von Gittern zur Strömungssimulation um komplexe Geometrien ist extrem aufwendig und erfordert große Erfahrungen der Anwender. Um den Gittergenerierungsaufwand zu reduzieren und eine effiziente Gitterpunktverteilung zu erreichen, soll das in dieser Arbeit zu realisierende Simulationsprogramm Multiblockgitter mit unstrukturierten Blockverbindungsflächen (hängenden Knoten) verarbeiten können. Eine allgemeine Formulierung der Diskretisierung für unstrukturierte Gitter kann sowohl für Blockverbindungsflächen als auch für strukturierte Kontrollflächen innerhalb eines einzelnen Gitterblocks eingesetzt werden, da strukturierte Gitter eigentlich eine Untermenge von unstrukturierten Gittern bilden. Derartige Formulierungen bieten auch eine zukünftige Perspektive für die Verwendung von hybriden Gittern.

2) Berücksichtigung von höherwertigen Turbulenzmodellen:
Um eine Entkopplung zwischen Geschwindigkeiten und Reynoldsspannungen zu vermeiden, müssen sowohl bei expliziten algebraischen Spannungsmodellen (ASM) als auch bei impliziten Reynoldsspannungsmodellen (RSM) Modifikationen im Druckkorrekturverfahren vorgenommen werden. Im Gegensatz zu linearen Wirbelviskositätsmodellen, bei denen die

Reynoldsspannungsterme in der Impulsbilanz die Geschwindigkeitsgradienten bereits implizit enthalten, bedürfen die algebraischen Spannungsmodelle eines zusätzlichen Rechenaufwands zur Bestimmung dieser Geschwindigkeitsgradienten.

3) Numerische Genauigkeit des Verfahrens:
Neben der Güte der eingesetzten Turbulenzmodelle wird die Simulationsgenauigkeit maßgeblich vom verwendeten Konvektionsschema beeinflußt. In den meisten SIMPLE–Lösungsalgorithmen wird das Flux–Blending–Schema (FBS) benutzt, welches eine Kombination des Zentralen–Differenzen–Schema (CDS) und des Upwind–Schema (UDS) darstellt. Durch die „richtige“ Auswahl des Blending–Parameters können zwar relativ genaue Lösung mit geringen numerischen Oszillationen erzeugt werden, die Lösung ist aber von diesem gewählten Parameter abhängig. Im ungünstigsten Fall entspricht dieses Konvektionsschema dem „Upwind“–Schema, welches bekanntlich numerisch sehr diffusiv ist. Genauere Lösungsansätze bieten die auf dem TVD–Prinzip (Harten 1983) basierenden Konvektionsschemata höherer Ordnung. Diese sind zwar algorithmisch aufwendiger, können aber zu erheblichen Qualitätsverbesserungen führen. Die Konvektionsschemata CDS, UDS und FBS sind ohne weiteres auch für unstrukturierte Gitter einsetztbar. Im Gegensatz dazu sind TVD–Schemata ausschließlich für strukturierte Gitter formuliert. Ihre Implementierung für unstrukturierte Blockverbindungsflächen erfordert entweder eine spezielle Behandlung oder eine allgemeingültige Formulierung für unstrukturierte Gitter.

4) Parallelisierung des Verfahrens:
Nur ein sehr hoher Parallelisierungsgrad sichert die Effizienz eines Simulationsalgorithmus auf Multiprozessorcomputern (Amdahl's Gesetz, siehe Kap. 4.1). Dies gilt sowohl für die Rechenoperationen als auch für die Datenkommunikation. Alle Approximations– und Beschleunigungstechniken müssen sowohl in ihren algorithmischen Abläufen als auch in der von ihnen verursachten Datenkommunikation auf parallele Effizienz überprüft werden. Traditionelle FV–Verfahren benötigen Interpolationen der Gitterpunktvariablen. Für Gitterpunkte, welche von mehreren Gitterblöcken gemeinsam verwendet bzw. von mehreren parallel laufenden Rechenprozessen verarbeitet werden, ist eine Datenkommunikation zwischen den beteiligten Prozessoren erforderlich. Aufgrund der unstrukturierten Blockverbindungsflächen ist diese Datenkommunikation algorithmisch sehr aufwendig und andererseits im allgemeinen an eine sequentielle Durchführung gekoppelt.

Die in dieser Arbeit verwendeten und weiterentwickelten numerischen Methoden werden im folgenden detailliert dargestellt.

## 3.1 Finite Approximation der Bilanzgleichung

Die Finite–Volumen–Approximation wird am Beispiel einer allgemeinen Bilanzgleichung der Form

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) = s_\phi \tag{3.1}$$

durchgeführt.

Dabei bedeutet $\phi$ eine skalare Variable oder eine kartesische Komponente des Geschwindigkeitsvektors $u$, $v$ oder $w$. Die Quellterme und diejenigen Terme der Bilanzgleichung, die nicht durch den Gradientenfluß $-\nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi)$ dargestellt werden können, sind in $s_\phi$ zusammengefaßt.

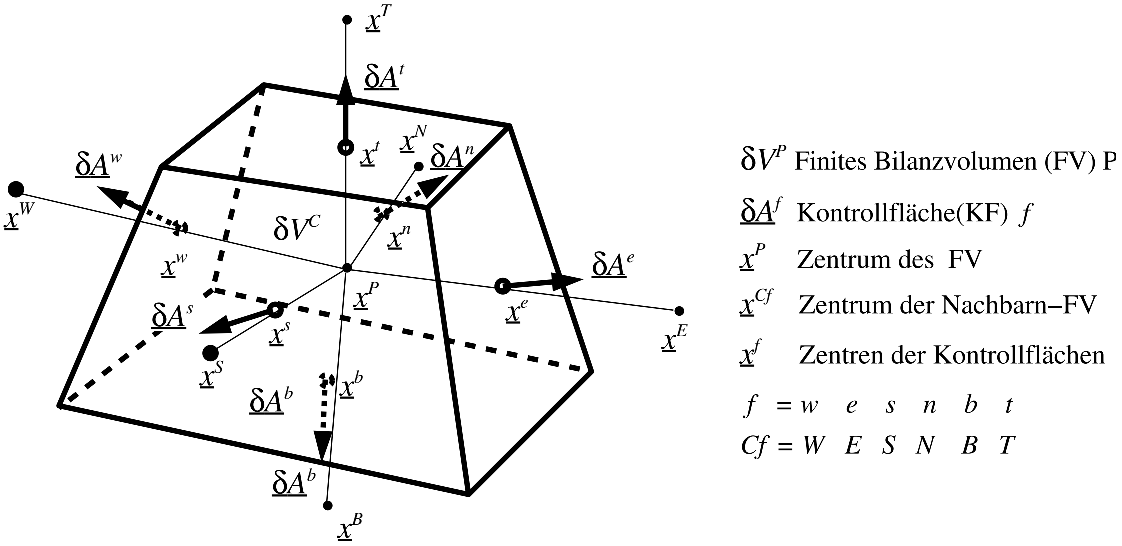



Abbildung 3.1: Bilanzvolumen (Zelle) und Kontrollflächen eines strukturierten Gitters
$f = w$: west; $f = e$: east; $f = s$ : south; $f = n$: north; $f = b$: bottom; $f = t$: top

Die numerische Approximation von Gleichung (3.1) führt auf ein algebraisches Gleichungssystem für die im Zentrum jedes finiten Bilanzvolumens (FV) gespeicherte Variable $\phi^P$

$$A_P^P \phi^P - \sum_f A_{Cf}^P \phi^{Cf} = S^P \ ; \text{ für alle } \ \mathrm{FV}^P \ , \tag{3.2}$$

Der Variablenwert von $\phi$ des jenseits der Kontrollfläche (KF) $f$ liegenden FV–Zentrums $\underline{x}^{Cf}$ ist mit dem Exponent $Cf$ bezeichnet. Der Term $S^P$ enthält sowohl den ursprünglichen Quellterm als auch explizit zu behandelnde Anteile der zeitlichen Änderung sowie der Konvektions– und der Diffusionsterme. $A_P$ stellt die Hauptdiagonale und $-A_{Cf}$ die Nebendiagonalen der Koeffizientenmatrix dar. Der Exponent $P$ der Koeffizienten $A^P$ und der rechten Seite $S^P$ bezieht sich auf das zu bilanzierende Volumen $\mathrm{FV}^P$.

Die Volumenintegration der Bilanzgleichung führt unter Anwendung des Gaußschen Integralsatzes zu folgender Integrodifferentialgleichung:

$$\int_{\delta V} dV \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \oint_{\delta A} \underline{dA} \cdot [(\rho \underline{u} \phi) - \Gamma_\phi \nabla \phi] = S_\phi \ . \tag{3.3}$$

Diese kann für die diskreten Werte im FV–Zentrum $\underline{x}^P$ und an der KF$^f$ für ein FV$^P$ als

$$\left( \delta V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)^P + \sum_f [\ \underline{\delta A} \cdot \ (\rho \underline{u} \phi - \Gamma_\phi \nabla \phi\ )\ ]^f = S_\phi^P \tag{3.4}$$

geschrieben werden. $\sum_f$ bedeutet die Summation über alle KF$^f$, die das betreffende FV$^P$ begrenzen. In dieser Formel zeigt das vektorielle Flächenelement $\underline{\delta A}^f$, das im folgenden KF–Vektor genannt wird, vom Inneren eines Bilanzvolumens nach außen.

In Verbindung mit der diskreten Form der Kontinuitätsgleichung (Gl. 3.4 mit $\phi = 1,\ S_\phi = 0$)

$$\left( \delta V \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^P + \sum_f F_m^f = 0 \ , \tag{3.5}$$

in der der Massenfluß durch $F_m = \underline{\delta A} \cdot \rho \underline{u}$ definiert ist, wird die Ausgangsgleichung der Finite–Volumen–Approximation gewonnen:

$$\left( \delta V \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^P - \sum_f F_m^f \phi^P + \sum_f F_m^f \phi^f - \sum_f [\underline{\delta A} \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi)]^f = S_\phi^P \ . \tag{3.6}$$

### 3.1.1 Implizite Zeitdiskretisierung

Die zeitliche Änderung der Variable $\phi$ wird durch drei aufeinanderfolgende Zeitebenen mit äquidistanter Schrittweite $\delta t$ approximiert:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_t = \frac{3\phi_t - 4\phi_{t-\delta t} + \phi_{t-2\delta t}}{2\ \delta t} \tag{3.7}$$

Diese Formel ist voll implizit und von der Genauigkeit $O(\delta t^2)$.

### 3.1.2 Konvektionsfluß

Der Konvektionsterm spielt bei vielen Transportproblemen eine zentrale Rolle. Die Güte der finiten Approximation des gesamten Gleichungssystems wird demzufolge wesentlich von der genauen Erfassung dieses Terms bestimmt. Das Flächenintegral des Konvektionsterms ist das Produkt des Massenflusses und der zu transportierenden Größe $\phi$ an der KF

$$\underline{\delta A}^f \cdot (\rho \underline{u} \phi)^f = F_m^f \phi^f \ . \tag{3.8}$$

Die Bestimmung der Massenflüsse wird in Kap. 3.4 erläutert. Sie werden zunächst als bekannt angenommen.

Der Wert der Variable $\phi$ an der KF führt durch lineare Interpolation (CDS) mit den beiden benachbarten Zellzentren auf

$$\phi^f = (1-\lambda)\phi^P + \lambda\phi^{Cf} \ , \quad \text{mit } \lambda = \frac{|\underline{x}^f - \underline{x}^P|}{|\underline{x}^f - \underline{x}^P| + |\underline{x}^{Cf} - \underline{x}^f|} \ . \tag{3.9}$$

Daraus ergibt sich bei hinreichend kleiner Zellabmessung eine sehr genaue Approximationsformel, die jedoch leider die physikalische Aussage des Gleichungssystems bei wachsender Zellgröße verfälscht. Das führt zwangsläufig zu Oszillationen in der Lösung. Daher kommen meistens das weniger genaue Upwind–Schema (UDS) oder das Flux–Blending–Schema (FBS) und bei höherer Genauigkeitsanforderung das TVD–Schema (siehe Kap 3.3) zum Einsatz.

Im allgemeinen kann der Konvektionsfluß in einen implizit zu lösenden Teil, der dem Upwind–Schema entspricht, und einen Korrekturanteil, der sich explizit aus der vorhandenen Lösung ergibt, zerlegt werden:

$$F_m^f \phi^f = F_m^f(\phi^{UDS} + \delta\phi^f) = F_m^{f+}\phi^P + F_m^{f-}\phi^{Cf} + F_m^f \delta\phi^f \ . \tag{3.10}$$

Die Größe $\delta\phi^f$ stellt die Differenz zwischen dem verwendeten Konvektionsschema und dem Upwind–Schema dar. Die Abkürzungen $F_m^{f+}$ und $F_m^{f-}$ haben gemäß dem Upwind–Schema die Bedeutung:

| | $F_m^{f+} = \max(0,\ F_m^f)$ | $F_m^{f-} = -\max(0,\ -F_m^f)$ |
|---|---|---|
| $F_m^f > 0:$ | $F_m^f$ | $0$ |
| $F_m^f < 0:$ | $0$ | $F_m^f$ |

(3.11)

Zusammen mit dem Term $-\sum_f F_m^f \phi^P$ ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned} -\sum_f F_m^f \phi^P + \sum_f F_m^f \phi^f &= -\sum_f (F_m^{f+} + F_m^{f-})\phi^P + \sum_f (F_m^{f+}\phi^P + F_m^{f-}\phi^{Cf}) + \sum_f F_m^f \delta\phi^f \\ &= -\sum_f F_m^{f-}(\phi^P - \phi^{Cf}) + \sum_f F_m^f \delta\phi^f \ . \end{aligned} \tag{3.12}$$

Bei der programmtechnischen Umsetzung werden alle Berechnungen an der KF auch flächenweise durchgeführt. Der KF–Vektor ist für beide angrenzenden Bilanzvolumina FV einheitlich definiert. Er zeigt von dem linksangrenzenden $\mathrm{FV}^L$ zum rechtsangrenzenden $\mathrm{FV}^R$. Die aus der finiten Approximation der KF resultierenden Koeffizienten und rechten Seiten der Bilanzgleichung werden für $\mathrm{FV}^L$ und $\mathrm{FV}^R$ in einem Schritt berechnet und zu den entsprechenden Größen addiert.

Der Konvektionsfluß einer KF mit dem Term $-F_m^f\phi^P$ ist demnach für $\mathrm{FV}^L$ gleich $-F_m^{f-}(\phi^L - \phi^R) + F_m^f\delta\phi^f$ und für $\mathrm{FV}^R$ gleich $F_m^{f+}(\phi^R - \phi^L) - F_m^f\delta\phi^f$. Ihr Beitrag zu den Koeffizienten und der rechten Seite der algebraischen Gleichungen für $\mathrm{FV}^L$ und $\mathrm{FV}^R$ führt auf:

$$A_P^L,\ A_R^L:\ -F_m^{f-}\ ;\ \ A_P^R,\ A_L^R:\ F_m^{f+}\ ;\ \ S^L: -F_m^f\delta\phi^f\ ;\ \ S^R: F_m^f\delta\phi^f\ .$$

Im folgenden werden alle Diskretisierungsformeln an der Kontrollfläche nach dieser Vorgehensweise für die $\mathrm{FV}^L$ hergeleitet. Die Bilanz für $\mathrm{FV}^R$ ist bis auf das umgekehrte Vorzeichen mit der

Bilanz für $FV^L$ identisch. Einzige Ausnahme bildet hier der implizite Anteil des schon behandelten Konvektionsflusses mit dem von der Massenbilanz herrührenden Term $-F_m^f \phi^P$.

### 3.1.3 Diffusionsfluß

Im Diffusionsfluß treten Gradienten der Variablen $\phi$ an der Kontrollfläche auf. Der Gradient an einer Kontrollfläche kann zunächst wie folgt komponentenweise ausgedrückt werden

$$\nabla\phi = \frac{\partial\phi}{\partial\xi^1}\underline{g}^1 + \frac{\partial\phi}{\partial\xi^2}\underline{g}^2 + \frac{\partial\phi}{\partial\xi^3}\underline{g}^3 = (\phi^R - \phi^L)\underline{g}^1 + (\nabla\phi)_2\underline{g}^2 + (\nabla\phi)_3\underline{g}^3, \tag{3.13}$$

wobei die kovarianten Basisvektioren $\underline{g}_2$, $\underline{g}_3$ auf der Kontrollfläche liegen. $\underline{g}_1$ ist der Richtungsvektor $\underline{d}$ vom $FV^L$–Zentrum $\underline{x}^L$ zum $FV^R$–Zentrum $\underline{x}^R$ (s. Bild 3.2). $\underline{g}^1$, $\underline{g}^2$ und $\underline{g}^3$ sind ihre entsprechenden kontravarianten Basisvektoren. Die Terme $(\nabla\phi)_2\underline{g}^2$ und $(\nabla\phi)_3\underline{g}^3$ bestimmen sich explizit aus dem letzten Iterationswert von $\phi$. Er verschwindet bei parallelem Verlauf des Abstandsvektors $\underline{d}$ und des KF–Vektor $\underline{\delta A}$ und wird im allgemeinen „Cross Diffusion“ genannt.

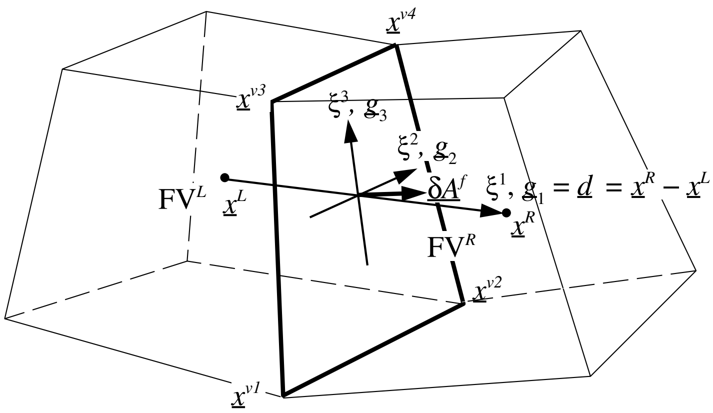



Abbildung 3.2: Kontrollfläche $f$ und die kovarianten Basisvektoren $\underline{g}_1$, $\underline{g}_2$, $\underline{g}_3$

Bei der traditionellen Vorgehensweise sind $\underline{g}_2$ und $\underline{g}_3$ entsprechend dem Gitterlinienverlauf festgelegt

$$\underline{g}_2 = \frac{\underline{x}^{v4} + \underline{x}^{v2} - \underline{x}^{v3} - \underline{x}^{v1}}{2}\ , \ \underline{g}_3 = \frac{\underline{x}^{v4} + \underline{x}^{v3} - \underline{x}^{v2} - \underline{x}^{v1}}{2}$$

und die Diskretisierung von $(\nabla\phi)_2$ und $(\nabla\phi)_3$ bestimmt sich aus den Variablenwerten der vier Eckpunkte der KF:

$$(\nabla\phi)_2 = \frac{\phi^{v4} + \phi^{v2} - \phi^{v3} - \phi^{v1}}{2}\ , \ (\nabla\phi)_3 = \frac{\phi^{v4} + \phi^{v3} - \phi^{v2} - \phi^{v1}}{2}\ .$$

Da die Variablen nur im Zellzentrum gespeichert sind, muß ihr Wert an den Eckpunkten aus den acht umliegenden Zellzentren interpoliert werden. Aufgrund der auf Rechenkoordinaten bezogenen Eckwertinterpolationen ist aber diese Vorgehensweise nur für strukturierte Gitter anwendbar.

In der Arbeit von Demirdžić & Muzaferija (1995) ist eine auf Gradienten basierende Approximation des Diffusionsflusses für unstrukturierte Gitter vorgestellt worden, die zwar ohne Berücksichtigung des Richtungsunterschieds zwischen $\underline{g}_1$ und $\underline{g}^1$ aufgestellt wurde, jedoch eine Grundidee für die vorliegende Arbeit lieferte. Im folgenden wird eine Gradientenkorrekturformel hergeleitet, welche die in der „Cross Diffusion“ vorkommenden Gitterpunktvariablen durch den Gradienten in den beiden angrenzenden finiten Bilanzvolumina $\mathrm{FV}^L$ und $\mathrm{FV}^R$ ersetzt. Bei dieser Vorgehensweise werden die Ableitungen nach $\xi^2$, $\xi^3$ aus dem linear interpolierten Gradienten von $\phi$ errechnet

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi^2} = (\nabla\phi)_2 = \underline{g}_2 \cdot \langle \nabla\phi \rangle \ , \ \frac{\partial \phi}{\partial \xi^3} = (\nabla\phi)_3 = \underline{g}_3 \cdot \langle \nabla\phi \rangle \ , \tag{3.14}$$

mit $\langle F \rangle = F^L(1-\lambda) + F^R\lambda$ als linear interpolierte Größe an der KF.
Die Zerlegung des interpolierten Gradienten in seine Einzelkomponenten führt auf:

$$\langle \nabla\phi \rangle = \langle \nabla\phi \rangle_1 \ \underline{g}^1 + \langle \nabla\phi \rangle_2 \ \underline{g}^2 + \langle \nabla\phi \rangle_3 \ \underline{g}^3 = \underline{g}_1 \cdot \langle \nabla\phi \rangle \ \underline{g}^1 + \underline{g}_2 \cdot \langle \nabla\phi \rangle \ \underline{g}^2 + \underline{g}_3 \cdot \langle \nabla\phi \rangle \ \underline{g}^3 \ . \tag{3.15}$$

Aus der Subtraktion der Gl. (3.13) und (3.15) unter Berücksichtigung der Gl. (3.14) folgt die Gradientenkorrekturformel für die Gradientenbestimmung an der Kontrollfläche:

$$\nabla\phi = \langle \nabla\phi \rangle + \left( \frac{\partial \phi}{\partial \xi^1} - \underline{g}_1 \cdot \langle \nabla\phi \rangle \right) \ \underline{g}^1 \tag{3.16}$$

mit der kontravarianten Basis $\underline{g}^1$

$$\underline{g}^1 = \frac{\underline{g}_2 \times \underline{g}_3}{\underline{g}_1 \cdot \underline{g}_2 \times \underline{g}_3} = \frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \quad \Leftarrow \quad \underline{g}_1 = \underline{d} \ , \ \underline{\delta A} \propto \underline{g}_2 \times \underline{g}_3 \ . \tag{3.17}$$

Entsprechend läßt sich der Diffusionsfluß $-\underline{\delta A} \cdot \Gamma_\phi \nabla\phi$ darstellen durch

$$-\underline{\delta A} \cdot \Gamma_\phi \ \left[ \ \langle \nabla\phi \rangle + \left( \phi^R - \phi^L - \underline{d} \cdot \langle \nabla\phi \rangle \right) \ \frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \ \right] \tag{3.18}$$

$$= -\underbrace{\Gamma_\phi \frac{\underline{\delta A} \cdot \underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \left( \phi^R - \phi^L \right)}_{I} - \underbrace{\Gamma_\phi \left( \underline{\delta A} - \frac{\underline{\delta A} \cdot \underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \ \underline{d} \right) \cdot \langle \nabla\phi \rangle}_{II}$$

In dieser Formel treten nur noch die Größen auf, die sowohl bei strukturierten als auch bei unstrukturierten Gitter eindeutig definiert sind. Bei der Umsetzung in das algebraische Gleichungssystem wird der erste Term (I) implizit eingearbeitet. Der zweite Term (II, „Cross Diffusion“) bestimmt sich explizit aus dem letzten Iterationswert von $\phi$.
Die anteiligen Beiträge des Diffusionsterms zu den Koeffizienten und der rechten Seite der algebraischen Gleichungen sind demnach:

$$A_P^L, \ A_R^L, \ A_P^R, \ A_L^R : \ \Gamma_\phi \gamma \ ; \quad S^L : \ \Gamma_\phi \underline{\delta S} \cdot \langle \nabla\phi \rangle \ ; \quad S^R : \ -\Gamma_\phi \underline{\delta S} \cdot \langle \nabla\phi \rangle$$

mit den Abkürzungen $\gamma = \frac{\underline{\delta A} \cdot \underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}}$ , $\underline{\delta S} = \underline{\delta A} - \gamma \ \underline{d}$ . Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes wird der Gradient $\nabla\phi$ im FV–Zentrum bestimmt zu:

$$(\nabla\phi)^P = \frac{\sum_f \underline{\delta A}^f \ \langle \phi \rangle^f}{\delta V^P} \ . \tag{3.19}$$

Diese Berechnung wird ebenfalls flächenweise durchgeführt, d.h. bei der Berechnung an einer KF wird $\underline{\delta A}^f \ \langle\phi\rangle^f$ zu der Größe $(\nabla\phi)\delta V$ des $\mathrm{FV}^L$ addiert bzw. von der des $\mathrm{FV}^R$ subtrahiert. Nach der Bilanzierung aller KF werden die Größen volumenweise jeweils durch ihren Volumenbetrag $\delta V^P$ dividiert.

Zusammengefaßt haben die Koeffizienten des algebraischen Gleichungssytems (3.2) und der gesamte Quellterm folgende Form:

$$A_{Cf}^P = -F_m^{f-} + (\Gamma_\phi \ \gamma)^f \ , \quad A_P^P = \frac{3}{2 \ \delta t}\delta V + \sum_f A_{Cf}^P \tag{3.20}$$

und

$$S^P = S_\phi^P + \rho^P \frac{4\phi_{t-\delta t}^P - \phi_{t-2\delta t}^P}{2 \ \delta t} \ \delta V - \sum_f (F_m \delta\phi + \Gamma_\phi \ \underline{\delta S} \cdot \langle\nabla\phi\rangle \ )^f . \tag{3.21}$$

Alle Koeffizienten $A_P$ sowie $A_{Cf}$ sind positiv und der Koeffizient der Hauptdiagonale $A_P$ bleibt immer gleich oder größer als die Summe der Koeffizienten der Nebendiagonalen. Damit ist das Gleichungssystem (3.2) diagonaldominant.

Zu erwähnen ist in diesem Zusammenhang, daß alle bisherigen Formeln für beliebig geformte Bilanzvolumina ihre Gültigkeit behalten. Sie können sowohl für strukturierte als auch für unstrukturierte Gitter eingesetzt werden. Anstelle der Eckwertinterpolation ist dabei die Gradientenbestimmung der Lösungsvariablen erforderlich. Dies ist auch vorteilhaft für die Implementierung der algebraischen Spannungsmodelle, da die Geschwindigkeitsgradienten auch für die Bestimmung des nichtlinearen Anteils der Reynoldsspannungen $\underline{\underline{\tau}}_{tn}$ verwendet werden können.

Für eine KF, die durch vier Kanten mit den vier Eckpunkten $\underline{x}^{v1}$, $\underline{x}^{v2}$, $\underline{x}^{v3}$ und $\underline{x}^{v4}$ begrenzt ist, bestimmt sich der KF–Vektor wie folgt:

$$\underline{\delta A} = 0.25 \ \left(-\underline{x}^{v1} + \underline{x}^{v2} - \underline{x}^{v3} + \underline{x}^{v4}\right) \times \left(-\underline{x}^{v1} - \underline{x}^{v2} + \underline{x}^{v3} + \underline{x}^{v4}\right) \ . \tag{3.22}$$

Mit dieser Gleichung kann auch der KF–Vektor $\underline{\delta A}$ einer räumlichen Dreiecksfläche bestimmt werden, wenn man $\underline{x}^{v3}$ und $\underline{x}^{v4}$ mit dem Ortsvektor des dritten Eckpunktes der Dreiecksfläche gleichsetzt.

## 3.2 Behandlung der Reynoldsschen Gleichungen und Transportgleichungen für die Turbulenzvariablen

Die in der Impulsbilanz enthaltenen Reynoldsschen Spannungsterme hängen in starkem Maße von den Geschwindigkeitsgradienten ab. Die lineare Abhängigkeit zwischen Reynoldsspannungen und Geschwindigkeitsgradienten werden nach der Mischungsweghypothese mit dem molekularen Spannungsterm zusammengefaßt

$$\underline{\underline{\pi}}_g = -p_g \underline{\underline{I}} + \mu_g (\nabla \underline{u} + \nabla^T \underline{u}) - \frac{2}{3}\mu_g (\nabla \cdot \underline{u}) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}_{tn} \ .$$

Bei der Umsetzung der Reynoldsschen Gleichungen wird der Term $\mu_g \nabla \underline{u}$ implizit behandelt. Alle anderen Terme werden explizit bestimmt und kommen auf die rechte Seite der Gleichungen. Bei der Bilanzierung einer KF lautet der explizite Teil

$$-\underline{\delta A} \left[ \langle p_g \rangle + \frac{2}{3} \mu_g (\nabla \cdot \underline{u}) \right]^f - \underline{\delta A} \cdot \left[ \mu_g \nabla^T \underline{u} + \langle \underline{\underline{\tau}}_{tn} \rangle \right]^f \ ,$$

wobei die Geschwindigkeitsgradienten an der KF mit der Gradientenkorrekturformel (3.16) bestimmt werden müssen.

Die rechte Seite der Bilanzgleichungen für die Turbulenzvariablen $k, \varepsilon$ oder $\omega$, hier in allgemeiner Form geschrieben als

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \right) \nabla \phi \right] = C_{\phi 1} \frac{\phi}{k} P - C_{\phi 2} \rho \phi \omega \ ,$$

enthält die Produktions– und Dissipationsterme. Der Dissipationsterm ist negativ proportional zur Variable $\phi$. Die implizite Behandlung verstärkt die Hauptdiagonale der Koeffizientenmatrix durch die Addition von $C_{\phi_2} \rho \omega \delta V$. Das beschleunigt allgemein die Konvergenz beim Einsatz des iterativen Gleichungslösers. Die Produktion wird explizit bestimmt.

## 3.3 Variablenbestimmung an der Kontrollfläche

Bei der Berechnung des konvektiven Flusses tritt das Problem auf, daß von den in den Zellzentren gespeicherten Variablenwerten auf die Kontrollfläche interpoliert werden muß. In Laufe der Zeit sind verschiedene Interpolationstechniken entwickelt worden, die im folgenden anhand eines eindimensionalen Transportproblems erläutert werden.

### 3.3.1 Upwind–, Flux–Blending– und Higher–Order–Convection–Schemata

Unter der Annahme eines konstanten Diffusionskoeffizienten $\Gamma_\phi$ ergibt sich aus der Finite–Volumen–Integration der eindimensionalen Transportgleichung

$$\frac{\partial \rho u \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = s_\phi$$

auf einem äquidistanten Gitter der Schrittweite $\delta x$ die Formel

$$\rho\ u\ (\phi^e - \phi^w) - \Gamma_\phi \left( \frac{\phi^E - \phi^P}{\delta x} - \frac{\phi^P - \phi^W}{\delta x} \right) = s_\phi \delta x \ . \tag{3.23}$$

Die Einführung der sogenannten Zell–Peclet–Zahl

$$Pe = \frac{\rho\ u\ \delta x}{\Gamma_\phi} \ , \tag{3.24}$$

die das Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Transport kennzeichnet, führt zu der Zwischengleichung:

$$Pe\ (\phi^e - \phi^w) - (\phi^E - 2\phi^P + \phi^W) = S \ . \tag{3.25}$$

Diese Gleichung läßt sich nun mit verschiedenen Interpolationsschemata zu einer Differenzengleichung

$$A_P \phi^P = A_E \phi^E + A_E \phi^W + S \tag{3.26}$$

zusammenfassen. Eine unabdingbare Anforderung an die Koeffizienten ist, daß alle Koeffizienten gleiches Vorzeichen haben müssen. Andernfalls würde eine positive Änderung des Nachbarwerts $\phi^E$ oder $\phi^W$ auf eine negative Änderung von $\phi^P$ führen. Dies ist physikalisch nicht sinnvoll und führt in der numerischen Berechnung zu Oszillationen in der Lösung.
Der Einsatz eines Zentrale–Differenzen–Schemas (CDS), welches eine Genauigkeitsordnung von $O(\delta x^2)$ hat,

$$\phi^e = (\phi^P + \phi^E)/2 \ , \ \phi^w = (\phi^P + \phi^W)/2 \ , \tag{3.27}$$

führt auf die Koeffizienten:

$$A_E = (1 - Pe/2) \ , \ A_W = (1 + Pe/2) \ , \ A_P = 2 \ .$$

Da die Koeffizienten $A_E$, $A_W$ und $A_P$ gleiche Vorzeichen haben müssen, ist dieses Schema nur im Fall $|Pe| < 2$ anwendbar. Bei vorgegebener Geschwindigkeit $u$ und vorgegebenem Diffusionskoeffizient $\Gamma_\phi$ führt dies zu einer sehr starken Beschränkung des maximal erlaubten Gitterabstands $\delta x$.
Ein Upwind–Schema (UDS) umgeht diese Problematik, da an der Kontrollfläche immer der Variablenwert des stromauf liegenden Zellzentrums herangezogen wird

$$Pe\phi^e = Pe^+\phi^P + Pe^-\phi^E \ , \ Pe\phi^w = Pe^+\phi^W + Pe^-\phi^P \ \text{mit} \ Pe^\pm = \frac{Pe \pm |Pe|}{2} \ . \tag{3.28}$$

Die Koeffizienten:

$$A_E = 1 - Pe^- \ , \ A_W = 1 + Pe^+ \ , \ A_P = 2 + |Pe| \tag{3.29}$$

sind immer positiv. Nachteilig ist die ungenaue Approximation mit einer Genauigkeitsordnung von $O(\delta x)$, die zu starker numerischer Diffusion führt. Bei größerer Gitterschrittweite übersteigt die numerische Diffusion die physikalische Diffusion um ein Mehrfaches und führt zu ungenauen Ergebnissen.
Diese Problematik kann das sogenannte Flux-Blending–Schema (FBS), welches eine Kombination von CDS und UDS darstellt, auch nicht lösen. Mit dem Blending–Faktor $\beta$

$$\phi^e = \beta\phi^{e,CDS} + (1-\beta)\phi^{e,UDS} \ , \phi^w = \beta\phi^{w,CDS} + (1-\beta)\phi^{w,UDS} \tag{3.30}$$

werden folgende Koeffizienten erzeugt:

$$A_E = 1 - \beta\frac{Pe}{2} - (1-\beta)Pe^-, \ A_W = 1 + \beta\frac{Pe}{2} + (1-\beta)Pe^+, \ \ A_P = 2 + (1-\beta)|Pe| \ . \tag{3.31}$$

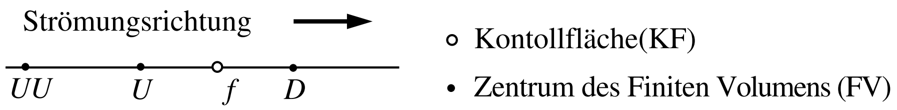



Abbildung 3.3: Stützstellen der Higher–Order–Convection (HOC) Schemata

Um die Forderung nach gleichen Vorzeichen der Koeffizienten zu erfüllen, muß $\beta = 0$ bei $Pe > 2$ und $\beta = 1$ bei $Pe \leq 2$ gewählt werden. Bei manchen Strömungssimulationsprogrammen wird der Blending–Faktor $\beta$ als frei wählbarer Parameter dem Anwender überlassen. $\beta$ soll zwischen 0 und 1 so groß wie möglich gewählt werden, daß noch eine konvergierte numerische Lösung erzielbar ist. Die numerische Oszillation wird dabei im Kauf genommen.
Eine genauere und zuverlässigere Approximation des Konvektionsterms läßt sich mit Interpolationsverfahren höherer Ordnung, den sog. Higher–Order–Convection (HOC)–Schemata erreichen. Diese Schemata stützen sich nicht nur auf die Variablen der direkten Nachbarzellzentren der betreffenden Kontrollfläche, sondern auch auf das übernächste stromauf liegende Zellzentrum, wie aus Bild 3.3 zu entnehmen ist.
Bei dem HOC–Schema (auch als $\kappa$–Schema bekannt)

$$\phi^f = \underbrace{\phi^U}_{I} + \underbrace{\frac{1}{4}[(1+\kappa)(\phi^D - \phi^U) + (1-\kappa)(\phi^U - \phi^{UU})]}_{II}, \; -1 \leq \kappa \leq 1 \; , \tag{3.32}$$

bezieht sich der Exponent $D$ auf das stromab liegende Nachbarzellzentrum, der Exponent $U$ auf das direkt stromauf liegende Nachbarzellzentrum und der Exponent $UU$ auf das stromauf übernächste Nachbarzellzentrum. Der zweite Term $(II)$ kompensiert teilweise die numerische Diffusion des Upwind–Schemas (Term $I$) und wird antidiffusive Korrektur genannt.
Für $Pe > 0$ ergeben sich die Koeffizienten der Differenzengleichung zu:

$$A_E = 1 - \frac{Pe}{4}(1+\kappa) \; , \; A_W = 1 + \frac{3Pe}{4}(1-\kappa) \; , A_P = 2 + \frac{3Pe}{4}(1-\kappa) \; . \tag{3.33}$$

Unter der Voraussetzung gleichen Vorzeichens der Koeffizienten wird die kritische Zell–Peclet–Zahl bestimmt:

$$|Pe_{Krit.}| = \frac{4}{1+\kappa} \; . \tag{3.34}$$

In Tabelle 3.1 sind die bekannten HOC–Verfahren wie CDS, Quadratic Interpolation for Convective Kinematics (QUICK), Cubic Upwind Interpolation Scheme (CUI) und Linear Upwind Difference Scheme (LUDS) mit ihrer jeweiligen kritischen Peclet–Zahl zusammengefaßt. CDS und LUDS stellen hier die beiden Grenzfälle dieser HOC–Familie dar. Eine detaillierte zweidimensionale Untersuchung (Schatz 1996) zeigt, daß die Lösungen der HOC–Verfahren ohne weitere Modifikation entweder mit numerischen Oszillationen oder/und mit numerischer Diffusion behaftet sind.

| Verfahren | $\kappa$ | antidiff. Korrektur | kritische $Pe$–Zahl |
|---|---|---|---|
| CDS | 1 | $\frac{1}{2}(\phi^D - \phi^U)$ | 2 |
| QUICK | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{8}(3\phi^D - 2\phi^U - \phi^{UU})$ | $\frac{8}{3}$ |
| CUI | $\frac{1}{3}$ | $\frac{1}{6}(2\phi^D - \phi^U - \phi^{UU})$ | 3 |
| LUDS | $-1$ | $\frac{1}{2}(\phi^U - \phi^{UU})$ | $\infty$ |

Tabelle 3.1: HOC–Verfahren und ihre kritische $Pe$–Zahl

### 3.3.2 „Total Variation Diminishing (TVD)“–Schemata

Die auf Polynomen höherer Ordnung basierenden Interpolationsverfahren können eine proportional zur Ordnung steigende Anzahl von lokalen Extremwerten aufweisen. Solche Extremwerte wirken sich auf das Ergebnis eines numerischen Lösungsverfahrens derart aus, daß insbesondere bei starker Gradientenänderung Oszillationen in den Lösungsprofilen auftreten. Deshalb darf der Gitterabstand bei solchen Verfahren nicht zu groß gewählt werden.
Die Grundidee der TVD–Schemata besteht darin, die von Extremwerten hervorgerufenen Oszillationen durch vorgegebene Limits quasi abzuschneiden. Auf diese Weise modifizierte HOC–Schemata führen zu stabilen und oszillationsfreien Ergebnissen.

#### Grundprinzip der Limitierung von Approximationsschemata

Um Oszillationen zu vermeiden und einen zwischen den Stützwerten monotonen Lösungsverlauf zu garantieren, formuliert Harten (1983) Anforderungen an limitierte Approximationsschemata:

1. Es dürfen keine neuen Extremwerte entstehen;

2. Existierende Extremstellen dürfen nicht verstärkt werden.

Formal können diese Forderungen durch die Beschränkung der „Total Variation“ der numerischen Lösung an den Stützstellen $\underline{x}_i$,

$$TV(\phi) = \sum_i |\phi_{i+1} - \phi_i| \ , \tag{3.35}$$

eingehalten werden. Die zeitliche Entwicklung (mit Exponent $n$ gekennzeichnet) einer skalaren Größe durch die Konvektion

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \tag{3.36}$$

läßt sich durch

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - C_i^- D_{i-1/2}\phi^n + C_i^+ D_{i+1/2}\phi^n \ , \ \text{mit } D_{l-1/2}\phi = \phi_l - \phi_{l-1} \tag{3.37}$$

numerisch berechnen, wobei $C^-, C^+$ das gewählte Interpolationsschema charakterisieren.

Die Anforderung der Beschränkung der „Total Variation“

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n) \tag{3.38}$$

führt zu der „Total Variation nonincreasing“ (TVNI)–Bedingung

$$C_i^- \geq 0 \ , \ C_i^+ \geq 0 \ , C_i^- + C_i^+ \leq 1 \ . \tag{3.39}$$

Die unter dem Namen Lax–Wendroff–Schema (LW, Lax & Wendroff 1964) und Warming–Beam–Schema (WB, Warming & Beam 1976) bekannten 2. Ordnung–Upwind–Approximationen der Gleichung 3.36 haben für $u > 0$ folgende Form:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \sigma(\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2})^n \ , \tag{3.40}$$

$$\phi_{l+1/2} = \phi_l + \frac{(1-\sigma)}{2}\varphi(r_{l+1/2})D_{l+1/2}\phi \ , \ r_{l+1/2} = \frac{D_{l-1/2}\phi}{D_{l+1/2}\phi} \ , \ l = i-1, i \ .$$

Für das LW–Schema gilt $\varphi(r) = 1$ und für das WB–Schema $\varphi(r) = r$. Das führt zur Bestimmungsgleichung

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \underbrace{\sigma D_{i-1/2}\phi^n}_{Upwind-Anteil} - \underbrace{\frac{\sigma(1-\sigma)}{2}\left[\frac{\varphi(r_{i+1/2})}{r_{i+1/2}} - \varphi(r_{i-1/2})\right] D_{i-1/2}\phi^n}_{Antidiffusiver\ Anteil} \tag{3.41}$$

mit der CFL-Zahl $\sigma = \frac{a\delta t}{\delta x} \leq 1$

Die TVNI–Bedingung begrenzt mit

$$C_i^- = \sigma + \frac{\sigma(1-\sigma)}{2}\left[\frac{\varphi(r_{i+1/2})}{r_{i+1/2}} - \varphi(r_{i-1/2})\right]$$

den zulässigen TVD–Bereich auf

$$\varphi(r) = \begin{cases} \min(2r, 2) & \text{für} \quad r > 0 \\ 0 & \text{für} \quad r < 0 \end{cases} \ . \tag{3.42}$$

Der innerhalb dieses Bereichs festgelegte Funktionsverlauf von $\varphi(r)$ wird Limiter genannt.

Für eine Approximation 2. Ordnung, die aus der Kombination von LW–Schema und WB–Schema gebildet ist,

$$\varphi(r) = (1-\theta)\underbrace{1}_{LW} + \theta\underbrace{r}_{WB} \ , 0 \leq \theta \leq 1 \ , \tag{3.43}$$

wird der TVD–Bereich zusätzlich durch die Linien $\varphi(r) = 1$ und $\varphi(r) = r$ begrenzt. Die obere Grenze dieses Bereichs, auch Superbee–Limiter nach Roe (1985) genannt, läßt sich mathematisch darstellen als

$$\varphi(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2)) \ . \tag{3.44}$$

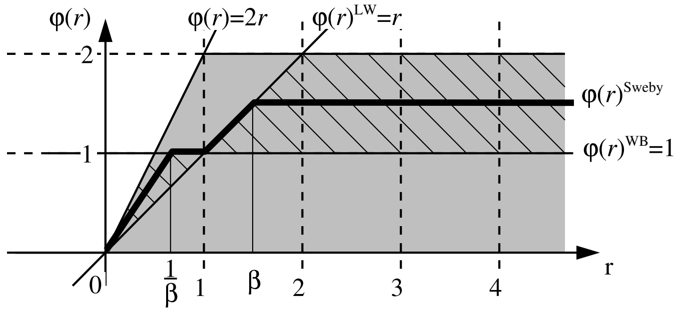



Abbildung 3.4: TVD–Bereich im $\varphi - r$–Diagramm , Sweby–Limiter

Er gehört zu einer Familie von Limitern mit dem Parameter $\beta$ (Sweby 1984):

$$\varphi(r) = \max[0, \min(\beta r, 1), \min(r, \beta)] \ , \ 1 \leq \beta \leq 2 \ , \ (\beta = 2: \ \text{Superbee}) \ . \tag{3.45}$$

Bei $\beta = 1$ stellt der Sweby–Limiter die untere Grenze des TVD–Bereichs für Verfahren von 2. Ordnung dar.
Im $\varphi(r) - r$–Diagramm (Bild 3.4) ist die Funktion $\varphi(r)$ für das LW–Schema und das WB–Schema sowie der Sweby–Limiter grafisch dargestellt. Der TVD–Bereich ist grau schattiert. Alle Limiter, wie hier von Sweby, müssen innerhalb dieses Bereichs verlaufen. Der Bereich der limitierten Approximationsschemata von 2. Ordnung ist zusätzlich schraffiert.
Besondere zu erwähnen sind hier die symmetrischen Limiter mit der Bedingung

$$\varphi(r) = r\varphi(1/r) \ , \tag{3.46}$$

zu denen auch der obengenannte Sweby–Limiter gehört.

**Limitierte Schemata für HOC–Verfahren**

Die in Kapitel 3.3.1 vorgestellten HOC–Verfahren lassen sich zusammenfassen durch

$$\phi^f = \phi^U + \frac{1}{2}\varphi^{HOC}(r) D^f \phi \ , \tag{3.47}$$

$$\varphi^{HOC}(r) = \frac{1+\kappa}{2} + \frac{1-\kappa}{2} r \ , \ r = \frac{D^u \phi}{D^f \phi} \ , \ D^f \phi = \phi^D - \phi^U \ , \ D^u = \phi^U - \phi^{UU} \ .$$

Die Limitierung der HOC–Verfahren bedeutet, daß die Bedingung (3.42) für $\varphi(r)$ hier ebenfalls gelten muß. Da $\kappa$ nur zwischen $-1$ (LUDS–Schema) und 1 (CDS–Schema) gewählt werden kann, ist der TVD–Bereich des HOC–Verfahren analog der Kombination von LW–Schema und WB–Schema durch die Linien $\varphi^{CDS}(r) = r$ und $\varphi^{LUDS}(r) = 1$ begrenzt.
Ein einfacher Limiter für HOC–Verfahren läßt sich folgendermaßen konstruieren (siehe Bild 3.5):

- Wenn $\varphi^{HOC}(r)$ innerhalb des TVD–Bereichs verläuft, folgt der Limiter $\varphi^{HOC.Limit.}$ dem Verlauf von $\varphi^{HOC}(r)$.

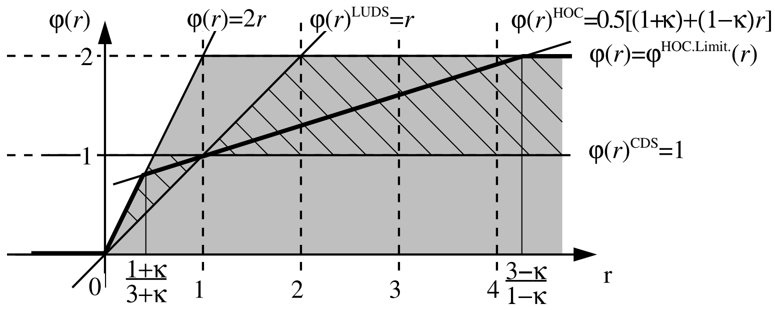



Abbildung 3.5: TVD–Bereich für HOC–Verfahren

- Ansonsten soll der Limiter entlang der Grenzlinie des TVD–Bereichs verlaufen.

Mathematisch läßt sich dieser Limiter durch

$$\varphi^{HOC.Limit.}(r) = \max\left[0, \min\left(2r, \frac{1+\kappa}{2} + \frac{1-\kappa}{2} r, 2\right)\right] \ . \tag{3.48}$$

darstellen. Der allgemeine Limiter für HOC–Verfahren hat folgende Form:

$$\varphi^{HOC.Limit.}(r) = \frac{1+\kappa}{2}\psi(\beta_1, r) + \frac{1-\kappa}{2} r\psi\left(\beta_2, \frac{1}{r}\right) \tag{3.49}$$

Hier kann für den sogenannten „Slope“–Limiter $\psi(\beta, r)$ folgende parametrisierte Formel nach Van Leer (1979) gewählt werden (MUSCL–Limiter):

$$\psi(\beta, r) = \max[0, \min(1, \beta r)] \ , \beta > 1 \ . \tag{3.50}$$

Die Obergrenzen für $\beta_1$ und $\beta_2$ sind unterschiedlich:

$$\beta_{1max} = \frac{3+\kappa}{1+\kappa} \ ; \ \beta_{2max} = \frac{3-\kappa}{1-\kappa} \ . \tag{3.51}$$

Für $\beta_1 = \beta_2 = 1$ stellt der Limiter $\varphi^{HOC.Limit.}(r)$ die untere Grenze des TVD–HOC–Bereichs dar, für $\beta_1 = \beta_{1max}$ und $\beta_2 = \beta_{2max}$ ist $\varphi^{HOC.Limit.}(r)$ identisch mit Gleichung (3.48).
Eine andere Vorgehensweise ist, einen symmetrischen Limiter innerhalb des TVD–HOC–Bereichs als „Slope“–Limiter

$$\psi(\beta_1, r) = r\psi\left(\beta_2, \frac{1}{r}\right)$$

einzusetzen. Damit wird sichergestellt, daß die Variablenänderungen auf beiden Seiten in gleicher Weise behandelt werden. Der Limiter $\varphi^{HOC.Limit.}(r)$ ist in diesem Fall identisch mit $\psi(r)$:

$$\varphi^{HOC.Limit}(r) = \frac{1+\kappa}{2}\psi(r) + \frac{(1-\kappa)}{2}\psi(r) = \psi(r) \ .$$

Entsprechend der Parameterwahl von $\kappa$ im HOC–Verfahren läßt folgender Limiter konstruieren:

$$\varphi^{HOC.Sy.Limit.}(r) = \max\left[0, \min\left(2r, \frac{1+\kappa}{2} r + \frac{1-\kappa}{2}, \frac{1+\kappa}{2} + \frac{1-\kappa}{2} r, 2\right)\right] \ . \tag{3.52}$$

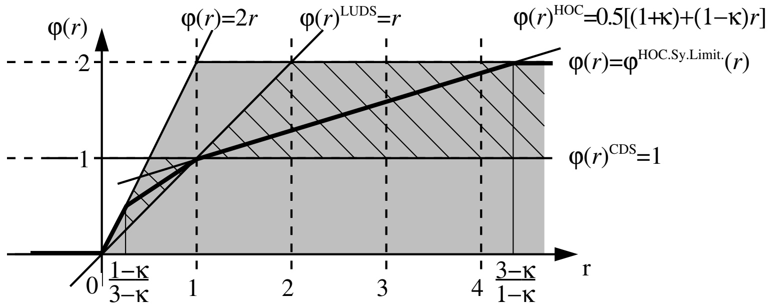



Abbildung 3.6: Symmetrischer TVD–Limiter für HOC–Verfahren

Im Bereich von $1 \leq r \leq \frac{3-\kappa}{1-\kappa}$ entspricht der Limiter dem HOC–Verfahren mit dem Parameter $\kappa$. Der Limiter mit $\kappa = 0.5$ (symmetrischer Limiter für QUICK–Approximation) ist auch unter dem Namen UMIST (Upstream Monotonic Interpolation for Scalar Transport) nach Lien & Leschziner (1994a) bekannt.

Generell wird die limitierte HOC–Approximation zu folgender Formel zusammengefaßt:

$$\phi^{f,TVD} = \phi^U + \frac{1}{2}\varphi^{HOC.Limit.}(r^f)D^f\phi \ . \tag{3.53}$$

Die in den Abkürzungen

$$D^f\phi = \phi^D - \phi^U \ , \ D^u\phi = \phi^U - \phi^{UU} \ , \ r^f = \frac{D^u\phi}{D^f\phi}$$

vorkommende Exponenten $D, U$ und $UU$ haben die gleiche Bedeutung wie in der Gleichung (3.32) und sind im Bild 3.3 dargestellt.

### 3.3.3 Gradientenkorrekturformel der TVD–Schemata

Bei der Erweiterung des Einsatzes von der aus der eindimensionalen Betrachtung gewonnenen TVD–Schemata auf zwei– oder dreidimensionale Differentialgleichungen kann im allgemeinen nicht gewährleistet werden, daß die TVNI–Bedingung eingehalten wird. Trotzdem werden TVD–Schemata vermehrt in numerischen Verfahren eingesetzt. Sowohl in Testrechnungen als auch in praktischen Anwendungen kann das TVD–Verfahren die gestellten Anforderungen erfüllen.

In dem dreidimensionalen Simulationsprogramm ist der durch die Gleichung (3.48) beschriebene TVD–Limiter implementiert, da mit diesem Limiter in dem in Kap. 3.3.4 beschriebenen numerischen Experiment die genauesten Ergebnisse erzielt werden konnten. Die Konvektion eines finiten Bilanzvolumens ist durch die Summe der Konvektionflüsse durch alle seine Kontrollflächen definiert. Der explizite Anteil der Bilanzgleichung infolge der TVD–Approximation wird wie alle Flächenbilanzen flächenweise für ihr linksliegendes Bilanzvolumen FV$^L$ ausgerechnet. Diese Größe wird von dem Quellterm des linksliegenden FV$^L$ subtrahiert und zu dem des rechtsliegenden FV$^R$ addiert.

Da die TVD–Schemata immer vom Variablenwert an drei aufeinanderfolgenden Gitterpunkten (Punkte $UU$, $U$ und $D$ im Bild 3.3) abhängig sind, wurden sie bisher nur auf strukturierten Gittern eingesetzt. Die Variablenwerte in den an die Kontrollfläche angrenzenden FV–Zentren ($U$, $D$) ist zwar immer vorhanden, aber das übernächste stromauf liegende Zentrum FV ($UU$) ist auf unstrukturierten Gittern nicht eindeutig definiert. In dieser Arbeit wird eine modifizierte Formulierung hergeleitet, die die Anwendung der TVD–Schemata auf unstrukturierten Gittern ermöglicht. Die Grundidee besteht darin, daß nicht der Variablenwert am Punkt $UU$ direkt, sondern ein mit Hilfe von Gradienten berechneter Wert als Stützwert für die TVD–Schemata verwendet wird. Neben diesem gitterlinienorientierten Schema wird auch versuchsweise ein stromlinienorientiertes Konvektionsschema formuliert. Dabei wird der Stützwert durch einen Gradientenausdruck an drei fiktiven Punkten entlang der lokalen Stromlinie bestimmt und in den TVD–Limiter eingesetzt.

### TVD–Formulierung entlang der Rechenkoordinaten $i$, $j$ und $k$

Bei der gitterlinienorientierten Art der Implementierung wird die Approximation des in Kapitel 3.3.2 skizzierten MUSCL–Limiters je nach der zu bilanzierenden Kontrollfläche entlang der Rechenkoordinaten $i, j$, oder $k$ ausgeführt. Der explizit zu bestimmende Korrekturanteil an einer Kontrollfläche $F_m^f \delta\phi^f$ , $\delta\phi^f = \phi^{f,TVD} - \phi^U$ läßt sich durch die Berücksichtigung der Gleichung(3.53) wie folgt darstellen:

$$F_m^f \delta\phi^f = \frac{1}{2} F_m^f \varphi(r^f) D^f \phi \ . \tag{3.54}$$

Die durch die Exponenten $U, UU$ und $D$ bezeichneten FV–Zentren sind von dem Vorzeichen des Massenflusses $F_m^f$ abhängig (Bild 3.7). Die vorzeichenabhängige Darstellung der Gleichung (3.54) lautet:

$$\begin{aligned}
F_m^f > 0 : &\quad \tfrac{1}{2} F_m^f \varphi(r^f) D^f \phi = \tfrac{1}{2} F_m^f \varphi\left(\tfrac{D^l\phi}{D^0\phi}\right) D^0\phi \ ; \\
F_m^f < 0 : &\quad \tfrac{1}{2} F_m^f \varphi(r^f) D^f \phi = \tfrac{1}{2} F_m^f \varphi\left(\tfrac{-D^r\phi}{-D^0\phi}\right) (-D^0\phi) = -\tfrac{1}{2} F_m^f \varphi\left(\tfrac{D^r\phi}{D^0\phi}\right) D^0\phi \ ; \\
&\quad D^0\phi = \phi^D - \phi^L ,\ D^l\phi = \phi^L - \phi^{LL} \ ,\ D^r\phi = \phi^{RR} - \phi^R \ .
\end{aligned}$$

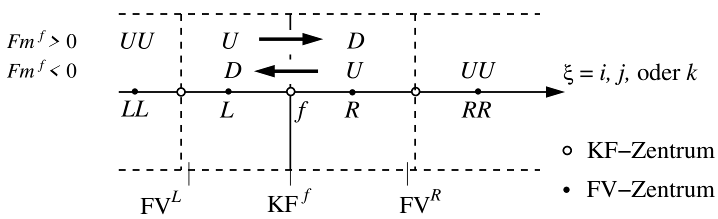



Abbildung 3.7: Stützstellen bei positivem $F_m^f$ (Strömung fließt von $\mathrm{FV}^L$ zum $\mathrm{FV}^R$) und negativem $F_m^f$ (Strömung fließt von $\mathrm{FV}^R$ zum $\mathrm{FV}^L$)

Mit den Abkürzungen

$$F_m^{f+} = \max(0, F_m^f)\ ,\ F_m^{f-} = -\max(0, -F_m^f)\ ,\ r^l = \frac{D^l\phi}{D^0\phi}\ ,\ r^r = \frac{D^r\phi}{D^0\phi}$$

erhält man folgende Beziehung

$$\frac{1}{2}F_m^f\varphi(r^f)D^f\phi = \frac{1}{2}\left[F_m^{f+}\varphi(r^l) - F_m^{f-}\varphi(r^r)D^0\phi\right]\ . \tag{3.55}$$

Die Gleichung (3.55) umfaßt die TVD–Schemata für beide Strömungsrichtungen, enthält aber noch die Abhängigkeit von $\phi^{LL}$ und $\phi^{RR}$. Daher kann sie zunächst nur auf strukturierten Gittern implementiert werden.

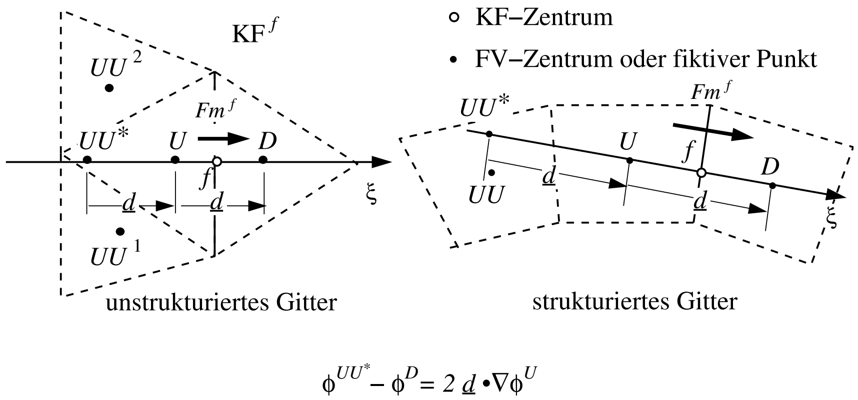



Abbildung 3.8: Stützstellen der Gradientenkorrekturfomel der TVD–Schemata

Wie schon bereits erwähnt, wird diese direkte Abhängigkeit unter Zuhilfenahme der Gradienten von $\phi$ in FV$^L$ und FV$^R$ eliminiert. Dies führt für die Ausdrücke $D^l\phi = \phi^L - \phi^{LL}$ und $D^R\phi = \phi^{RR} - \phi^R$ zu folgenden Approximationsgleichungen

$$D^l\phi = \phi^L - \phi^{LL} = \phi^L - \phi^R + \phi^R - \phi^{LL} \approx 2\underline{d}\cdot\nabla\phi^L - (\phi^R - \phi^L)$$

bzw.

$$D^r\phi = \phi^{RR} - \phi^R = \phi^{RR} - \phi^L + \phi^L - \phi^R \approx 2\underline{d}\cdot\nabla\phi^R - (\phi^R - \phi^L)\ ,$$

die bei einem geraden Verlauf der Gitterlinien und einer äquidistanten Gitterpunktenverteilung exakt sind. Bei sonstigen Gittergestaltungen und auf unstrukturierten Gittern stellen diese Approximationsgleichungen eine Implementierung der TVD–Schemata entlang einer durch die Punkte $UU^*$, $U$ und $D$ verlaufenden geraden Linie dar, die in Bild 3.8 dargestellt.
Die in der Limitierungsfunktion $\varphi$ vorkommenden Parameter $r^l$ und $r^r$ lassen sich durch

$$r^l = \frac{2\underline{d}\cdot\nabla\Phi^L}{D^0\phi} - 1\ , r^r = \frac{2\underline{d}\cdot\nabla\Phi^R}{D^0\phi} - 1 \tag{3.56}$$

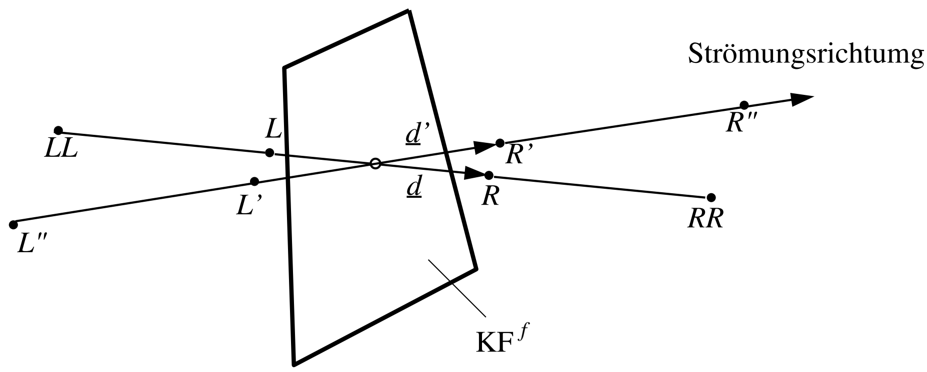



Abbildung 3.9: Stützstellen bei Implemetierung entlang der Strömungsrichtung

bestimmen.
Die notwendige Bestimmung der Gradienten bedeutet im Programm keinen zusätzlichen Rechenaufwand, da diese bei der Bestimmung des Diffusionsflusses (Gl. 3.18) bereits durchgeführt wird. Diese Gradientenkorrekturformel des TVD–Schemas sei mit „GRADGR“ bezeichnet. Ihre Funktionalität wird beim numerischen Experiment (siehe Kap. 3.3.4) und bei der Validierung des Verfahrens voll bestätigt.

**Stromlinienorientierte Formulierung**

Bei der stromlinienorientierten Art der Implementierung wird auf die FV–Zentren als Stützstellen vollständig verzichtet. Statt entlang der Gitterrichtung entsprechend den Punkten $LL, L, R, RR$ wird das TVD–Schema entlang der Richtung des Geschwindigkeitsvektors an der KF mit den Punkten $L'', L', R', R''$ als Stützstellen (Bild 3.9) angewendet:

$$F_m^f \phi^{f,TVD'} = F_m^{f+}\phi^{L'} + \frac{1}{2}F_m^{f+}\varphi(r'^l)D'^0\phi + F_m^{f-}\phi^{R'} - \frac{1}{2}F_m^{f-}\varphi(r'^r)D'^0\phi \; ; \tag{3.57}$$

$$D'^0\phi = \phi^{D'} - \phi^{U'} \; , \; D'^l\phi = \phi^{L'} - \phi^{LL'} \; , \; D'^r\phi = \phi^{RR'} - \phi^{R'} \; , \; r'^l = \frac{D'^l\phi}{D'^0\phi} \; , \; r'^r = \frac{D'^r\phi}{D'^0\phi} \; .$$

Die Vektor $\underline{d}'$ hat die gleiche Länge wie der Vektor $\underline{d}$ und verläuft entlang der Strömungsrichtung

$$\underline{d}' = \mathrm{sgn}(F_m)\underline{u}^f \sqrt{\frac{\underline{d}\cdot\underline{d}}{\underline{u}^f\cdot\underline{u}^f}} \tag{3.58}$$

mit dem linear interpolierten Geschwindigkeitsvektor

$$\underline{u}^f = (1-\lambda)\underline{u}^L + \lambda\underline{u}^R \; .$$

Da die Punkte $L'', L', R', R''$ so nicht als Stützpunkte existieren, bestimmt man ihre Variablenwerte wie bei der gitterlinienorientierten Implementierung mit Hilfe von Gradienten:

$$\phi^{L'} = \phi^L + \lambda(\underline{d} - \underline{d}')\cdot\nabla\phi^L \; , \; \phi^{R'} = \phi^R - (1-\lambda)(\underline{d} - \underline{d}')\cdot\nabla\phi^R \; , \; D'^0\phi = \phi^{D'} - \phi^{U'} \; ,$$

$$D'^{l}\phi = 2\underline{d}' \cdot \nabla\phi^{L} - D'^{0}\phi \ , \ D'^{r}\phi = 2\underline{d}' \cdot \nabla\phi^{R} - D'^{0}\phi \ .$$

Der explizite Anteil $F^f_m \delta\phi = F^f_m \phi^{f,TVD'} - F^f_m \phi^U$ ist

$$F^{f+}_m(\phi^{L'} - \phi^L) + \frac{1}{2}F^{f+}_m \varphi(r'^{l}) D'^{0}\phi + F^{f-}_m(\phi^{R'} - \phi^R) - \frac{1}{2}F^{f-}_m \varphi(r'^{r}) D'^{0}\phi \ . \tag{3.59}$$

Diese Gradientenkorrekturformel des TVD–Schemas wird im folgenden mit „GRADST“ bezeichnet.

### 3.3.4 Zweidimensionales numerisches Experiment

Zur Beurteilung der entwickelten TVD–Schemata wird beim Standardtestfall von Smith & Hutton (1982) die folgende Gleichung

$$\frac{\partial u\phi}{\partial x} + \frac{\partial v\phi}{\partial y} = \frac{1}{Pr}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right) \ \text{für} \ -1 \le x \le 1, \ 0 \le y \le 1$$

für die skalare Variable $\phi$ gelöst.

Das Geschwindigkeitsfeld ist vorgegeben durch $u = 2y(1-x^2), \ v = -2x(1-y^2)$. Die Randbedingungen für die Lösungsvariable lauten:

Eintrittsfläche($-1 \le x \le 0, \ y = 0$):

$$\phi = 1 + \tanh[10(2x+1)] \ ;$$

Austrittsfläche($0 \le x \le 1, \ y = 0$):

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = 0 \ ;$$

Übrigen Berandungen($x = \pm 1, \ 0 \le y \le 1$):

$$\phi = 1 - \tanh(10) \ .$$

Mit steigender Prandtl–Zahl stellt diese Gleichung immer höhere Anforderungen an das numerische Konvektionsschema. Deswegen werden als Beispiel Rechnungen für $Pr = 10^6$ auf zwei unterschiedlichen Gittern durchgeführt.

In den folgenden zwei Bildern sind neben den mit den TVD–Schemata GRADGR und GRADST für QUICK ($\kappa = 1/2$ in Gl. 3.48) erzielten Ergebnissen als Vergleich auch die Rechnungen mit dem Upwind–Schema (UDS) und dem symmetrischen TVD–Schema UMIST dargestellt.

Das Bild 3.10 zeigt die Ergebnisse für ein äquidistantes kartesisches Gitter. Unter den vier Isoliniendarstellungen der Variable $\phi$ mit den verschiedenen Konvektionsschemata sind die Profile der Variable $\phi$ an der Schnittlinie 1 ($x = 0, 0 \le y \le 1$) und der Schnittlinie 2 ($0 \le x \le 1, y = 0$) dargestellt. Aus den Isoliniendarstellungen der Variable $\phi$ geht hervor, daß das Upwind–Schema wie erwartet sehr große numerische Diffusion verursacht, die sich in stark gespreizten Isolinien am Austritt bemerkbar macht. Mit dem UMIST–Schema und dem GRADGR–Schema werden

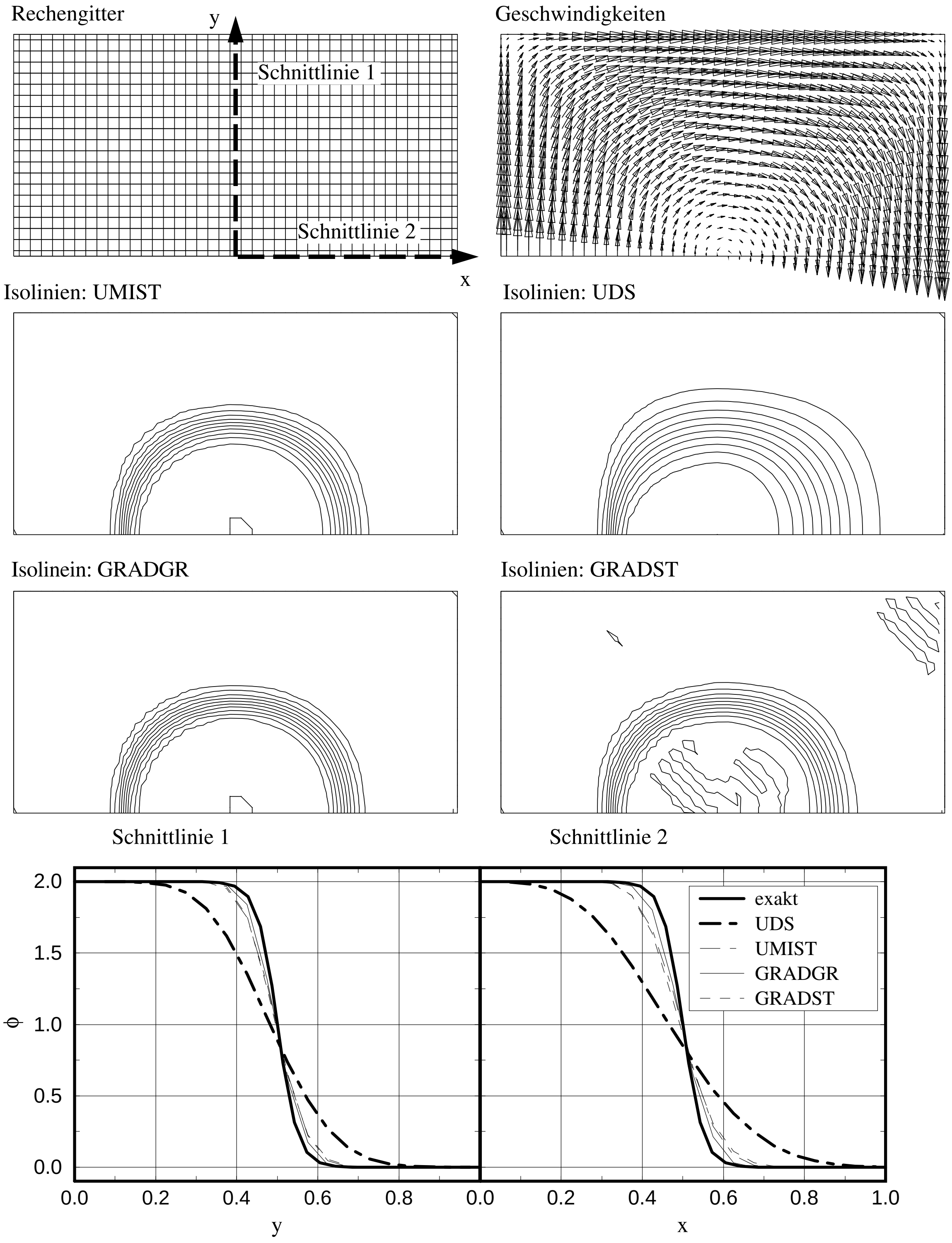



Abbildung 3.10: Rechnung auf einem äquidistanten kartesischen Gitter: Rechengitter, vorgegebene Geschwindigkeit, Isolinien der Variablen $\phi$ und Lösungsprofile an zwei Schnittlinien

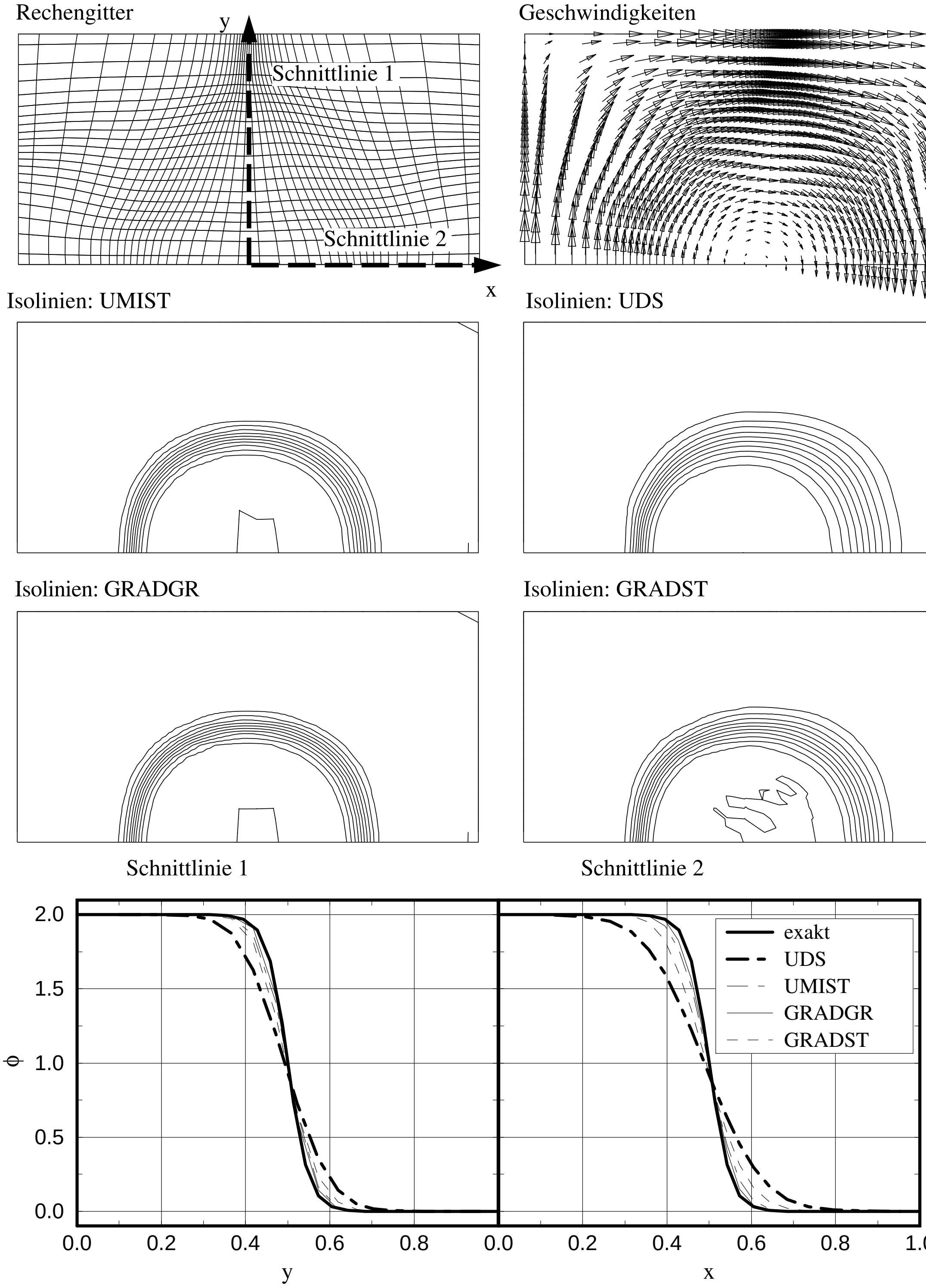



Abbildung 3.11: Rechnung auf einem verzerrten Gitter: Rechengitter, vorgegebene Geschwindigkeit, Isolinien der Variablen $\phi$ und Lösungsprofile an zwei Schnittlinien

fast identische Lösungsprofile entlang der Strömungsrichtung erzieht. Das GRADGR–Schema liefert eine etwas genauere Lösung, wie den Profildarstellungen zu entnehmen ist. Das GRADST–Schema verursacht geringfügig größere numerische Diffusion, und es treten kleine Oszillationen in der Lösung auf.

Das zweite Gitter im Bild 3.11 ist den Strömungsverhältnissen ein wenig angepaßt. Im Vergleich zu den Lösungen auf dem äquidistanten kartesischen Gitter erzielen alle getesteten Konvektionsschemata bessere Ergebnisse, wobei wiederum das GRADST–Schema die genaueste Lösung liefert. Die mit dem GRADST–Schema erzielte Lösung ist ebenso wie auf dem kartesischen Gitter mit numerischer Diffusion und Oszillation behaftet.

Diese Untersuchung zeigen, daß das GRADGR–Schema die Anforderungen, sowohl numerische Diffusion zu minimieren als auch Oszillationen zu vermeiden, sehr gut erfüllt. Diese Anforderungen erfüllt das GRADST–Schema nicht ganz.

Im weiteren Verlauf wird deshalb nur noch das GRADST–Schema für QUICK verwendet. Testrechnungen mit diesem Schema für das HOC–Schema CUI ($\kappa = 1/3$) zeigen nur minimal unterschiedliche Ergebnisse.

## 3.4 SIMPLE Druckkorrekturverfahren

Die mathematische Beschreibung der Strömung (Gl. 2.1 – 2.3) enthält keine Differentialgleichung für den Druck, so daß nur die Massenbilanz (Gl. 2.1) indirekt als Bestimmungsgleichung für den Druck verwendet werden kann. Bei kompressiblen Strömungen kommen im allgemeinen Verfahren zum Einsatz, die die Dichte als primäre Variable verwenden (z.B. Warming & Beam 1976, MacCormack 1982). Der Druck läßt sich dann aus der thermischen Zustandsgleichung für Gase bestimmen. Voraussetzung für diese Vorgehensweise ist aber, daß eine Druck–Dichte–Kopplung auch tatsächlich vorhanden ist. Bei inkompressiblen Strömungen ist eine solche Beziehung nicht gegeben, so daß eine Druck–Dichte–Kopplung definiert werden muß, z.B. durch Einführung einer „künstlichen“ Kompressibilität (Chorin 1967, Peyret & Taylor 1985). Aufgrund der schwachen künstlichen Druck–Dichte–Kopplung und der expliziten Lösungstechnik ist diese Vorgehensweise ineffizient.
Für inkompressible Strömungen sind deshalb Verfahren entwickelt worden, die den Druck als Basisvariable direkt verwenden. Die Bestimmungsgleichung für den Druck läßt sich aus der Massenbilanz unter Verwendung der Impulsbilanz herleiten. Gegenüber den auf die Dichte bezogenen Verfahren besteht der Vorteil, daß diese Formulierung sowohl für inkompressible als für kompressible Strömungen anwendbar ist (z.B. Issa & Lockwood 1977, Karki & Patankar 1989).
Zur Bestimmung des Druckfeldes wird in dieser Arbeit der SIMPLE (Semi–Implicit Method for Pressure–Linked Equations, Patankar & Spalding 1972)–Algorithmus verwendet. Die Erweiterung auf kompressible Strömungen beruht auf der Arbeit von Karki & Patankar (1989).
Aufgrund der starken Druck–Geschwindigkeit–Kopplung wurde das SIMPLE–Verfahren zuerst nur für versetzte Variablenanordnung realisiert, da sonst eine Entkopplung des Systems der Differentialgleichungen auftreten kann. Die versetzte Variablenanordnung ist aber bei der Verwendung von krummlinigen Koordinaten sehr aufwendig. Weiterentwicklungen beruhen deshalb auf Ansätzen, bei denen alle Variablen an der gleichen Stelle gespeichert sind. Die Arbeit von Rhie & Chow (1983) zeigt, daß dabei für die Massenflußberechnung an der Kontrollfäche eine spezielle Interpolation in Abhängigkeit vom Druck erforderlich wird.

### 3.4.1 Massenflußbestimmung an der Kontrollfläche

Die Massenflußbestimmung mit der linear interpolierten Geschwindigkeit an der KF

$$F_m^f = \underline{\delta A} \cdot \rho^f \underline{u}^f = \underline{\delta A} \cdot \rho^f \left[ (1-\lambda)\underline{u}^L + \lambda \underline{u}^R \right] = \underline{\delta A} \cdot \rho^f \langle \underline{u} \rangle^f$$

verursacht eine Entkopplung zwischen Geschwindigkeits– und Druckfelder, da oszillierende Druckfelder in den diskretisierten Gleichungen für Impuls und in der Kontinuitätsgleichung nicht wahrgenommen werden können. Es wird deshalb ein anderer Lösungsansatz (Rhie & Chow 1983) gewählt.

Die diskretisierte Impulsbilanz für das an eine KF$^f$ angrenzende FV$^L$ und FV$^R$

$$A_P^L \underline{u}^L = A_P^L \underline{u}^{*L} - \nabla p^L \delta V^L \tag{3.60}$$

bzw.

$$A_P^R \underline{u}^R = A_P^R \underline{u}^{*R} - \nabla p^R \delta V^R \tag{3.61}$$

soll formell ebenfalls für ein um das KF–Zentrum $f$ gelegtes FV gelten:

$$A_P^f \underline{u}^f = A_P^f \underline{u}^{*f} - \nabla p^f \delta V^f \ , \tag{3.62}$$

Diese Pseudogeschwindigkeit $\underline{u}^*$ soll dabei eine Art Impulsbilanz erfüllen, die ohne Druckeinfluß gebildet wird. Anstelle der linearen Interpolation der Geschwindigkeit $\underline{u}$ wird die Rhie & Chow–Interpolation, d.h die lineare Interpolation der Pseudogeschwindigkeit $\underline{u}^*$, durchgeführt

$$\underline{u}^{*f} = (1-\lambda)\underline{u}^{*L} + \lambda \underline{u}^{*R} = \langle \underline{u}^* \rangle^f \ . \tag{3.63}$$

Zusammen mit der Beziehung $\underline{u}^* = \underline{u} + \nabla p \delta V / A_P$ ergibt sich

$$\underline{u}^f + \nabla p^f \frac{\delta V^f}{A_P^f} = \langle \underline{u} \rangle^f + \left\langle \nabla p \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \ . \tag{3.64}$$

Mit den Approximationen

$$\left\langle \nabla p_g \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \approx \langle \nabla p \rangle^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f, \quad \frac{\delta V^f}{A_P{}^f} \approx \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f$$

wird die Geschwindigkeit an der KF zunächst durch

$$\underline{u}^f = \langle \underline{u} \rangle^f + \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (\langle \nabla p \rangle^f - \nabla p^f) \tag{3.65}$$

ausgedrückt.
Mit der Gradientenkorrekturformel für die Gradientenberechnung an der KF (Gl. 3.16)

$$\nabla \phi^f = \langle \phi \rangle^f + \frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} (\phi^R - \phi^L - \underline{d} \cdot \langle \nabla \phi \rangle)^f)$$

folgen die Interpolationsvorschrift für die Geschwindigkeit und die Bestimmungsgleichung für den Massenfluß

$$\underline{u}^f = \langle \underline{u} \rangle^f - \frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (p^R - p^L - \underline{d} \cdot \langle \nabla p \rangle^f) \ , \tag{3.66}$$

$$F_m^f = \rho^f \left[ \underline{\delta A} \cdot \langle \underline{u} \rangle^f - \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (p^R - p^L - \underline{d} \cdot \langle \nabla p \rangle^f) \right] \ , \ \text{mit } \gamma^f = \frac{\underline{\delta A} \cdot \underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \ .$$

In der obigen Herleitung ist das Entkopplungsproblem zwischen Reynoldsspannungen und Geschwindigkeiten nicht vollständig berücksichtigt. Die linearen Wirbelviskositätsmodelle erfordern keine Extrabetrachtung, da die Reynoldsspannungsterme implizit mit Geschwindigkeitsgradienten formuliert sind. Bei Reynoldsspannungsmodellen, inklusive algebraischen Spannungsmodellen, kann jedoch das Entkopplungsproblem auftreten, wenn der nichtlineare Effekt, d.h. die Unterschied zwischen der linearen Stress–Strain Beziehung und dem tatsächlichen Verhältnis von Stress und Strain groß wird. In Anlehnung an die Rhie & Chow–Interpolation wird die obengenannte Pseudogeschwindigkeit $\underline{u}^*$ bestimmt durch

$$A_P \underline{u} = A_P \underline{u}^* + (-\nabla p_g + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}_{tn}) \delta V \ .$$

Die Geschwindigkeit und der Massenfluß an einer KF erhalten demnach folgende Ausdrücke:

$$\underline{u}^f = \langle \underline{u} \rangle^f - \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \frac{1}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \, \underline{\delta A} \cdot (\underline{\underline{p}}^{*R} - \underline{\underline{p}}^{*L} - \underline{d} \cdot \langle \nabla \underline{\underline{p}}^* \rangle^f) \ , \ \underline{\underline{p}}^* = p_g \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{\tau}}_{tn} \ , \tag{3.67}$$

$$F_m^f = \rho^f \underline{\delta A} \cdot \underline{u}^f \ .$$

Die Bestimmungsgleichungen für den Massenfluß an der Kontrollfläche enthalten außer den flächenbezogenen Geometriegrößen nur noch Variablen bzw. ihre Gradienten in den beiden angrenzenden Bilanzvolumina. Sie sind sowohl auf strukturierten als auch auf unstrukturierten Gittern eindeutig definiert.

### 3.4.2 Druckkorrekturgleichung

Beim iterativen SIMPLE–Verfahren wird zunächst mit dem geschätzten Druck $p$ die Geschwindigkeit $\underline{u}$ aus der Impulsbilanz (Gl. 2.31) bestimmt. Der Massenfluß an der Kontrollfläche (KF) $F_m^f$ ergibt sich aus Gl. (3.67) unter Anwendung der linear interpolierten Dichte $\rho^f = (1-\lambda)\rho^L + \lambda \rho^R = \langle \rho \rangle^f$. Der Residuum der Massenbilanzgleichung $R_m^P$, der Massendefekt, wird anschließend durch eine Korrektur des Druckes $p'$ kompensiert

$$\frac{\partial [\rho^P + \rho'^P(p')]}{\partial t} \delta V^P + \sum_f (F_m + F'_m(p'))^f = 0,$$

oder

$$\frac{\partial \rho'^P(p')}{\partial t} \delta V^P + \sum_f F'_m(p')^f = R_m^P = -\frac{\partial \rho^P}{\partial t} \delta V^P - \sum_f F_m^f \ . \tag{3.68}$$

Die Änderung des Massenflusses $F_m'^f$ infolge der Druckkorrektur $p'$ läßt sich aus der Abhängigkeit zwischen Druck und Geschwindigkeit nach Gl. (3.66) abschätzen:

$$F_m'^f \approx \underbrace{\frac{\rho'^f(p')}{\rho^f} F_m^f}_{I} + \underbrace{\rho^f \underline{\delta A} \cdot \underline{u}'^f}_{II}, \ \text{mit} \ \underline{u}'^f = -\frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (p'^R - p'^L) \ . \tag{3.69}$$

Die Änderung des Massenflusses infolge der Dichteänderung bei kompressiblen Strömungen ist im ersten Term ($I$) berücksichtigt. Sie läßt sich bei gegebener Temperatur $T$ auf die Druckkorrektur $p'$ zurückführen:

$$\frac{\rho'}{\rho} = \frac{p'}{RT} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{\rho'^f(p')}{\rho^f} F_m^f = \frac{F_m^f}{\rho^f RT} p'^f$$

Die gesamte Abhängigkeit der Massenflußänderung von der Druckkorrektur ist demnach:

$$F_m'^f = \frac{F_m^f}{\rho^f RT} p'^f - \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (p'^R - p'^L) \ .$$

In der Druckkorrekturgleichung für ein FV$^P$

$$\underbrace{\left( \frac{3\ \delta V}{2\ \delta t\ RT} \right)^P p'^P}_{I} + \underbrace{\sum_f \left( \frac{F_m}{\rho RT} p' \right)^f}_{II} - \underbrace{\sum_f \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (p'^{Cf} - p'^P)}_{III} = R_m^P \ . \tag{3.70}$$

ist der zweite Term($II$) proportional zum Konvektionsfluß und wird mit dem Upwind-Schema approximiert

$$\left( \frac{F_m}{\rho RT} p' \right)^f = \frac{F_m^{f+}}{(\rho RT)^P} p'^P + \frac{F_m^{f-}}{(\rho RT)^{Cf}} p'^{Cf} \ . \tag{3.71}$$

Die Anwendung des Upwind-Schemas bei der Druckkorrekturgleichung hat keinen Einfluß auf die auskonvergierte Lösung. Sie soll lediglich einen stabilen Iterationsverlauf des Lösungsvorgangs sicherstellen.

Die algebraische Gleichung der Druckkorrektur lautet demnach für ein FV

$$A_P'^P\ p'^P = \sum_f A_{Cf}'^P p'^{Cf} + R_m^P \tag{3.72}$$

mit den Koeffizienten

$$A_{Cf}'^P = -\frac{F_m^{f-}}{(\rho RT)^{Cf}} + \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f$$

$$A_P'^P = \left( \frac{3\ \delta V}{2\ \delta t\ RT} \right)^P + \sum_f \frac{F_m^{f+}}{(\rho RT)^P} + \sum_f \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \ .$$

Diese Gleichung gilt für kompressible Strömungen. Bei inkompressiblen Strömungen entfallen der erste Term von $A_{Cf}'^P$ und die ersten beiden Terme von $A_P'^P$.

Bei einer flächenweise durchzuführenden Bilanzierung liefert Gl. (3.72) den folgenden Beitrag zu den Koeffizienten der Druckkorrekturgleichungen:

$$A_P'^L \ : \ \frac{F_m^{f+}}{(\rho RT)^L} + \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \ , \quad A_R'^L \ : \ -\frac{F_m^{f-}}{(\rho RT)^R} + \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \tag{3.73}$$

$$A_P'^R \ : \ -\frac{F_m^{f-}}{(\rho RT)^R} + \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f \ , \quad A_L'^R \ : \ \frac{F_m^{f+}}{(\rho RT)^L} + \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f$$

Ist der Druck auf einem Rechengebietsrand als physikalische Bedingung fest vorgegeben, ergibt sich als Druckkorrektur $p' = 0$. Die Einarbeitung dieser Randbedingung wird später im Kap. 3.6.2 erläutert. An den übrigen Rändern lassen sich keine Randbedingungen und demzufolge auch kein Beitrag zu den Koeffizienten vorgeben.

Nach der Bestimmung der Druckkorrektur $p'$ werden die sich ergebenden Änderungen der Geschwindigkeit, des Drucks und gegebenfalls der Dichte durchgeführt. Der Massenfluß an der KF muß dann ebenfalls korrigiert werden.
Bei kompressiblen Strömungen folgt anschließend die Bestimmung der Temperatur $T$ entweder aus der Enthalpietransportgleichung (2.33) oder der Bernoullischen Gleichung der Gasdynamik (2.34).
Falls der Druck bei inkompressiblen Strömungen auf dem Rand nicht gegeben ist, läßt sich das Gleichungssystem nicht eindeutig lösen. Dennoch wird eine Anzahl von Iterationen durchgeführt, um den Massendefekt $R_m^P$ zu reduzieren. Beim anschließenden Korrekturschritt für den Druck wird darauf geachtet, daß der Druck in einem Referenz–Volumen (FV$^{PRef}$) konstant bleibt.

### 3.4.3 Iterativer Ablauf des SIMPLE–Verfahrens

Zusammengefaßt wird das SIMPLE–Druckkorrekturverfahren nach folgender Iterationsvorschrift ausgeführt:

1. Abschätzung des Druckfeldes: $\Rightarrow\ p$

2. Lösung der Impulsgleichungen: $\Rightarrow\ \underline{u}$

3. Bestimmung des Massenflusses an den KF $F_m^f$ nach Gl. (3.67),
   Berechnung des Massendefekts $R_m$ nach Gl. (3.68)

4. Lösung der Druckkorrekturgleichung (3.72): $\Rightarrow p'$

5. Korrektur von Geschwindigkeit, Druck und Dichte im FV:

$$\underline{u}^{neu,P} = \underline{u}^P - \left(\frac{\delta V}{A_P}\right)^P (\nabla p')^P \ ,$$

$$p^{neu,P} = p + \alpha_p p'^P \ \text{,evtl.}\ \ p^{neu,P} = p + \alpha_p (p'^P - p'^{PRef}) \ .$$

   Bei kompressibler Strömung zusätzlich:

$$\rho^{neu,P} = \frac{p^{neu,P}}{RT}$$

6. Korrektur des Massenflusses an den KF

$$F_m^{f,neu} = F_m^f + \frac{F_m^{f+}}{(\rho RT)^L} p'^L + \frac{F_m^{f-}}{(\rho RT)^R} p'^R - \rho^f \gamma^f \left\langle \frac{\delta V}{A_P} \right\rangle^f (p'^R - p'^L)$$

7. Lösung des Enthalpiefeldes $h$ mit der Enthalpietransportgleichung (2.33) sowie

$$T = \frac{h}{c_p} = \frac{\kappa - 1}{\kappa R} h \ ;$$

oder mit der Bernoullischen Gleichung der Gasdynamik (2.34)

$$T = \frac{\kappa - 1}{\kappa R} (H_0 - 0.5 \ \underline{u}^{neu,P} \cdot \underline{u}^{neu,P}) \ .$$

8. Lösung weiterer Bilanzgleichungen, z.B. für die Turbulenzvariablen

9. Falls das gesamte System nicht auskonvergiert ist, zurück zu Schritt 2.

Hierbei ist zu beachten, daß bei der Abschätzung der Massenflußänderung durch Gleichung (3.67) die Änderung der interpolierten Geschwindigkeit an den KF ($\langle \underline{u} \rangle$) nicht berücksichtigt wird. Die so errechnete Druckkorrektur $p'$ ist in der Regel größer als die tatsächlich benötigte. Deswegen wird die Korrektur für den Druck mit einem Unterrelaxationsfaktor $\alpha_p$ multipliziert, der erfahrungsgemäß zwischen 0.1 und 0.4 gewählt wird.

## 3.5 Blockverbindungsfläche und periodische Randbedingung

Die KF, deren angrenzende FV zu zwei verschiedenen Gitterblöcken gehören, werden im Prinzip wie die KF innerhalb eines Blockes behandelt. Dabei müssen die Gitterlinien beider Blöcke nicht zwangsläufig einen durchgehenden Verlauf haben. Alle bislang hergeleiteten Bilanzformeln für eine KF benötigen nur den Distanzvektor $\underline{d}$, den KF–Vektor $\underline{\delta A}$ sowie die Volumengröße von beiden angrenzenden FV. Sie können somit auch für die Kontrollflächen zwischen zwei Gitterblöcken (im folgenden <u>B</u>lock<u>i</u>nter – <u>K</u>ontroll<u>F</u>läche, BiKF genannt) eingesetzt werden.

Die KF an den Rändern mit <u>perio</u>discher Randbedingung (PerioKF) werden, von einer kleinen Modifikation abgesehen, wie die BiKF behandelt. Sie stellen jeweils die Grenzfläche zwischen einem tatsächlich vorhandenen FV (FV$^L$ bzw. FV$^R$) und einem virtuellen FV (FV$^{Lv}$ bzw. FV$^{Rv}$) dar. Die FV$^{Lv}$ und FV$^{Rv}$ sind von der Gestaltung her identisch mit FV$^L$ bzw. FV$^R$. Die Variablenwerte der virtuellen FV$^{Lv}$ und FV$^{Rv}$ sind bis auf den Druck identisch mit den Werten des tatsächlich vorhandenen FV$^L$ bzw. FV$^R$.

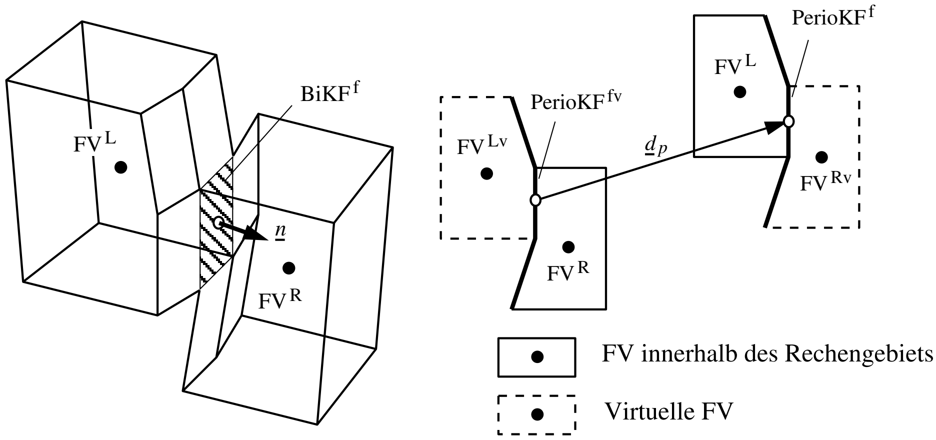



Abbildung 3.12: Kontrollfäche zwischen zwei Gitterblöcken und die geometrische Darstellung der periodischen Randbedingung

Die PerioKF treten immer paarweise in einer Entfernung $\underline{d}_p$ voneinander auf. Der Druckunterschied zwischen beiden KF, des FV$^L$ und FV$^{Lv}$ bzw. des FV$^{Rv}$ und FV$^R$ beträgt

$$dp_p = p^f - p^{fv} = p^{Rv} - p^R = p^L - p^{Lv} = \underline{d}_p \cdot \underline{Dp}_p \;, \tag{3.74}$$

wobei die gerichtete und abstandsbezogene Druckdifferenz $\underline{Dp}_p$ als periodische Randbedingung vorgegeben ist.

Die bei der Bilanzierung von KF benötigten Größen

$$\underline{d} = \underline{x}^{Rv} - \underline{x}^L = \underline{x}^R - \underline{x}^{Lv} = \underline{x}^R - \underline{x}^L + \underline{d}_p \tag{3.75}$$

$$\frac{\partial p}{\partial \xi^1} = p^{Rv} - p^L = p^R - p^{Lv} = p^R - p^L + dp_p$$

sind für beide KF identisch und die Druckwerte an den KF lassen sich wie folgt bestimmen:

$$\mathrm{FV}^L: \; p^f = (1-\lambda)p^L + \lambda p^{Rv} = (1-\lambda)p^L + \lambda(p^R + dp_p) \;; \tag{3.76}$$

$$\mathrm{FV}^R: \; p^{fv} = (1-\lambda)p^{Lv} + \lambda p^R = (1-\lambda)(p^L - dp_p) + \lambda p^R \;.$$

Die Interpolationsfaktoren sind wiederum für beide KF identisch und berechnen sich aus

$$\lambda^f = \lambda^{fv} = \frac{|\underline{x}^f - \underline{x}^L|}{|\underline{x}^f - \underline{x}^L| + |\underline{x}^R - \underline{x}^f + \underline{d}_p|} \;.$$

Bei der Implementierung im Simulationsprogramm ist die Behandlung von BiKF und PerioKF einheitlich gestaltet. Die BiKF werden als PerioKF mit dem Abstandsvektor $\underline{d}_p = \underline{0}$ angesehen. Damit ist die Druckdifferenz $dp_p$ ebenfalls gleich null. Beide KF–Arten werden im folgenden einheitlich als BiKF bezeichnet.

## 3.6 Physikalische Randbedingungen

Für die zu lösenden strömungsmechanischen Bilanzgleichungen müssen auf den Rechengebietsberandungen Randbedingungen vorgegeben werden. Da es sich bei der FVM um die Lösung einer Integrodifferentialgleichung handelt, wird die Flächenintegration dieser Gleichung an den Randflächen durchgeführt und an den randnächsten Bilanzvolumen, teils implizit, teils explizit berücksichtigt.

Bei der Herleitung und Implementierung der Flächenintegrale wird der KF–Vektor $\underline{\delta A}$ an den Rändern stets so definiert, daß er vom Rechengebietsinneren nach außen zeigt. Das angrenzende FV wird als linksliegend angesehen und mit $\mathrm{FV}^L$ bezeichnet. Das Zentrum der KF wird als rechtsliegend angesehen und mit $R$ bezeichnet (siehe Bild 3.13).

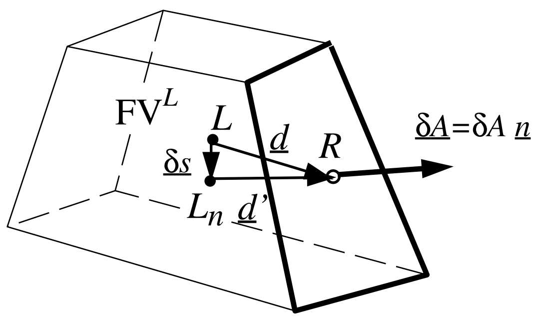



Abbildung 3.13: Geometrische Bezeichnung für die physikalischen Ränder mit dem flächennormalen Punkt $L_n$ an einer KF

### 3.6.1 Impulsgleichung

In den Impulsgleichungen treten die Flächenintegration der Konvektion und die Flächenkraft auf. An der Wand und an der Symmetrieebene wird die Flächenkraft nicht direkt mit der Geschwindigkeit des an die KF angrenzenden $\mathrm{FV}^L$–Zentrums gebildet. Um eine genaue Approximation auch bei schiefwinkligem Gitterlinienverlauf an der Wand und an der Symmetrieebene zu erreichen, wird vielmehr zunächst die Geschwindigkeit an einem Punkt $L_n$ berechnet, an dem der Abstandsvektor $\underline{d}'$ zum Zentrum der Randkontrollfläche $R$ senkrecht zur Randfläche steht. Mathematisch gesehen ist der Abstandsvektor $\underline{d}'$ die Projektion des Abstandsvektors $\underline{d}$ in Flächennormalenrichtung:

$$\underline{d}' = l_n \underline{n} \; , \; l_n = \underline{d} \cdot \underline{n} \; . \tag{3.77}$$

Der Abstandsvektor vom FV$^L$–Zentrum zum Punkt $L_n$ wird mit $\underline{\delta s}$ bezeichnet und verschwindet bei rechtwinkligen Gittern:

$$\underline{\delta s} = \underline{d} - \underline{d}' = \underline{d} - (\underline{d} \cdot \underline{n})\ \underline{n}\ . \tag{3.78}$$

Die Geschwindigkeit am Punkt $L_n$ wird mit explizit berechneten Gradienten der Geschwindigkeit bestimmt:

$$\underline{u}^{L_n} = \underline{u}^L + \underline{\delta s} \cdot (\nabla \underline{u})^L\ . \tag{3.79}$$

An der **Wand** gilt als physikalische Randbedingung der Impulsgleichungen die Wandhaftbedingung $\underline{u} = \underline{0}$. Die von der Wand auf das FV$^L$ wirkende Flächenkraft ist gegeben durch

$$\underline{\delta A} \cdot \underline{\underline{\tau}}_g = -p\underline{\delta A} + \mu_g \delta A \frac{\partial \underline{u}_s}{\partial n} \approx -p^R \underline{\delta A} - \frac{\mu_g \delta A}{l_n} \underline{u}_s^{L_n}\ , \tag{3.80}$$

wobei mit $\underline{u}_s$ die Komponente des Geschwindigkeitsvektors parallel zur Wand bezeichnet wird. Er ergibt sich aus der Differenz zwischen der Gesamtgeschwindigkeit $\underline{u}$ und dem zur Wand senkrecht stehenden Teil des Geschwindigkeitsvektors $\underline{u}_n$

$$\underline{u}_n = u_n\ \underline{n} = (\underline{u} \cdot \underline{n})\, \underline{n}\ ,\ \underline{u}_s = \underline{u} - \underline{u}_n. \tag{3.81}$$

Die Geschwindigkeit am Punkt $L_n$, die durch Gl. (3.79) gegeben ist, liefert als wandparallelen Anteil

$$\underline{u}_s^{L_n} = \underline{u}^L - (\underline{u}^L \cdot \underline{n})\ \underline{n} + \underline{\delta u}^{wand}\ ,\ \underline{\delta u}^{wand} = \underline{\delta s} \cdot (\nabla \underline{u})^L - \left[\underline{\delta s} \cdot (\nabla \underline{u})^L \cdot \underline{n}\right] \underline{n}\ . \tag{3.82}$$

Die Flächenkraftkomponente der Impulsgleichung für die Geschwindigkeitskomponente $u_\alpha$ ist dann mit $c_W = \delta A \mu_g / l_n$

$$-p^R \delta A_\alpha - c_W \left(1 - n_\alpha^2\right) u_\alpha^L + c_W n_\alpha \left(n_\beta u_\beta^L + n_\gamma u_\gamma^L\right) - c_W \delta u_\alpha^{wand}\ , \tag{3.83}$$

wobei für die zyklisch laufenden Indizes $\alpha$, $\beta$ und $\gamma$ keine Summationskonvention gilt. Die Terme mit $u_\alpha^L$ werden implizit behandelt, der Rest wird explizit berücksichtigt. Der zusätzliche Beitrag der Koeffizienten und der rechten Seite in der FV$^L$–Bilanzgleichung beträgt:

$$A_P^L\ :\ c_W \left(1 - n_\alpha^2\right)\ ;\ \ S_P\ :\ -p^R \delta A_\alpha + c_W n_\alpha \left(n_\beta u_\beta^L + n_\gamma u_\gamma^L\right) - c_W \delta u_\alpha^{wand}\ .$$

Bei einer laminaren Strömung ist die Gesamtviskosität $\mu_g$ gleich der dynamischen Viskosität $\mu$ des Fluids, während bei turbulenter Strömung folgende Fallunterscheidung gilt:

a) Das wandnächste FV–Zentrum $L$ befindet sich außerhalb der zähen Unterschicht:
Hier wird das logarithmische Wandgesetz (HRe–Hypothese)

$$\frac{u}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln l_n^+ + B\ ,\ \ l_n^+ = \frac{\rho l_n u_\tau}{\mu}\ ,\ \ \kappa = 0.41\ ,\ B = 5.0 \tag{3.84}$$

herangezogen und daraus eine Beziehung zwischen der Gesamtviskosität $\mu_g$ und der turbulenten Schwankungsenergie $k^L$ hergeleitet:

$$\mu_g = \frac{\kappa \rho l_n u_\tau}{\ln\left(\beta l_n^+\right)} \ , \text{ mit } u_\tau = C_\mu^{1/4}\sqrt{k} \ , \ \beta = \exp\left(\kappa B\right) \ . \tag{3.85}$$

Diese Beziehung gilt für $l_n^+ > 11$.

b) Das wandnächste FV–Zentrum $L$ befindet sich in der zähen Unterschicht mit $l_n^+ < 11$:

$$\mu_g = \mu \ .$$

An der **Symmetrieebene** wird der Geschwindigkeitsvektor $\underline{u}^R$ im Zentrum der Randkontrollfläche mit dem zur Fläche parallelen Anteil des Geschwindigkeitsvektors $\underline{u}^{L_n}$im Punkt $L_n$ gleichgesetzt:

$$\underline{u}^R = \underline{u}_s^{L_n} = \underline{u}^L - \left(\underline{u}^L \cdot \underline{n}\right) \underline{n} + \underline{\delta s} \cdot \left(\nabla \underline{u}\right)^L - \left[\underline{\delta s} \cdot \left(\nabla \underline{u}\right)^L \cdot \underline{n}\right] \ \underline{n} \ .$$

Ohne Massendurchfluß verschwindet der Konvektionsfluß, die Flächenkraft resultiert alleine aus der Druckkraft und der Änderung des senkrechten Anteils des Geschwindigkeitsvektors:

$$-p_g \underline{\delta A} + 2\delta A \mu_g \frac{\partial \underline{u}_n}{\partial n} \approx -p_g^R \underline{\delta A} + \frac{2\delta A \mu_g}{l_n}\left(\underline{u}^R - \underline{u}^{L_n}\right) = -p_g^R \underline{\delta A} - c_S \underline{u}_n^{L_n} \ , \ c_S = \frac{2\delta A \mu_g}{l_n} \ .$$

Die numerische Approximation für der Komponente $u_\alpha$ läßt sich wiederum in einen impliziten $(I)$ und einen expliziten Anteil $(II)$ zerlegen:

$$\underbrace{-c_S n_\alpha^2 u_\alpha^L}_{I} \ \underbrace{-c_S n_\alpha \left(n_\beta u_\beta^L + n_\gamma u_\gamma^L\right) - c_S \delta u_\alpha^{sym} \ - p_g^R \delta A_\alpha}_{II} \ , \ \underline{\delta u}^{sym} = \left[\underline{\delta s} \cdot \left(\nabla \underline{u}\right)^L \cdot \underline{n}\right] \underline{n} \ . \tag{3.86}$$

Der zusätzliche Beitrag zu den Koeffizienten und der rechten Seite ist dann gegeben durch

$$A_P^L \ : \ c_S n_\alpha^2 u_\alpha^L \ ; \quad S^P \ : \ -p_g^R \delta A_\alpha - c_S n_\alpha \left(n_\beta u_\beta^L + n_\gamma u_\gamma^L\right) - c_S \delta u_\alpha^{sym} \ .$$

An der **Eintrittsfläche** ist die Flächenintegration der Impulsbilanz formal identisch mit der Bestimmungsformel für die KF innerhalb des Rechengebiets. Dabei wird der „interpolierte Gradient" von Variable ($\langle\phi\rangle$, $\phi = u_\alpha$) in Gl. (3.16) an der Randkontrollfläche gleich der im angrenzenden FV$^L$–Zentrum gesetzt:

$$\nabla \phi^f = \nabla \phi^L + \left(\phi^R - \phi^L - \underline{d} \cdot \nabla \phi^L\right) \frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}} \ .$$

Die Konvektion ist bei bekanntem Randwert $\phi^R$ gegeben durch

$$F_m^f \phi^f = F_m^f \phi^R$$

und wird explizit von der rechten Seite der Gleichung abgezogen. Die zusätzlichen Beiträge zu den Koeffizienten und der rechten Seite der FV$^L$–Impulsbilanz sind damit:

$$A_P^L \ : \ \mu_g \gamma^f \ ;$$

$$S^L : (\mu_g \gamma^f - F_m^f)\underline{u}^R + \mu_g(\underline{\delta A} - \gamma^f \underline{d}) \cdot \langle \nabla \underline{u} \rangle^f + \underline{\delta A}\left[p_g^R + \frac{2}{3}\mu_g(\nabla \cdot \underline{u})^f\right] + \underline{\delta A} \cdot \mu_g \nabla^T \underline{u}^f \ .$$

Bei inkompressiblen Strömungen ist die Geschwindigkeit $\underline{u}^R$ in der Regel als physikalische Randbedingung gegeben. Bei kompressiblen Strömungen wird sie entweder im Überschall vorgegeben oder lassen sich aus anderen vorgegebenen physikalischen Bedingungen bestimmen.

An der **Austrittsfläche** wird die Schubspannung vernachlässigt und die Flächenkraft besteht nur aus der Druckkraft $-\underline{\delta A}\ p_g^R$ . Sie wird explizit zur rechten Seite $S^L$ der FV$^L$–Bilanzgleichung addiert.

Die Konvektion wird mit dem UPWIND–Schema approximiert und kompensiert den Term aus der Massenbilanz für FV$^L$ (siehe Gl. 3.12).

Der Geschwindigkeitsvektor im Zentrum $R$ der Randkontrollfläche soll hier proportional zum Geschwindigkeitsvektor der angrenzenden FV$^L$ sein. Der Proportionalitätsfaktor wird im inkompressiblen Fall mit der gesamten Massenbilanz berechnet.

### 3.6.2 Randwerte für Massenfluß, Druckkorrektur, Druck und Dichte

Für undurchlässige **Wände** verschwindet der Massenfluß. Die Werte von Druckkorrektur und Druck werden aus dem Gebietsinneren entlang der Gitterlinien auf die Wand linear extrapoliert.

An der **Symmetrieebene** ist die Geschwindigkeitsrichtung parallel zur Randfläche, so daß kein Massenfluß auftritt. Die Druckkorrektur und der Druck werden dann aus den Beziehungen:

$$a)\ \frac{\partial p'}{\partial n} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad p'^R = p'^{L_n} = p'^L + \underline{\delta s} \cdot \nabla p'^L$$

$$b)\ \frac{\partial p}{\partial n} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad p^R = p^{L_n} = p^L + \underline{\delta s} \cdot \nabla p^L$$

bestimmt.

An Rändern mit fest **vorgegebenen Druck**, d.h. $p'^R = 0$, wird der zusätzliche Beitrag der Koeffizienten $A_P'^L$ aus Gl. (3.73) hergeleitet. Der Geschwindigkeitsvektor und der Massenfluß ergeben sich aus Gl. (3.66). Dabei wird die linear interpolierte Größe $\langle\ \rangle$ durch die des angrenzenden FV$^L$ ersetzt:

$$\underline{u}^f = \underline{u}^L - \left(\frac{\delta V}{A_P}\right)^L \frac{\underline{\delta A}}{\underline{d} \cdot \underline{\delta A}}(p^R - p^L - \underline{d} \cdot \nabla p^L) \text{ und } F_m^f = \rho^f \underline{\delta A}^f \cdot \underline{u}^f \ ;$$

$$A_P'^L \ : \ \frac{F_m^{f+}}{(\rho a^2)^L} + \rho^f \gamma^f \left(\frac{\delta V}{A_P}\right)^L \ .$$

Der Koeffizient $A_R'^L$ spielt hier keine Rolle, da er mit $p'^R = 0$ multipliziert wird.

Die Behandlung von Ein– und Austrittsflächen ist bei inkompressiblen und kompressiblen Strömungen unterschiedlich. Sie werden deshalb getrennt betrachtet.

### Inkompressible Strömung

Bei inkompressiblen Strömungen wird die Geschwindigkeit $\underline{u}^R$ an der **Eintrittsfläche** vorgegeben. Der Massenfluß errechnet sich durch $F_m^f = \rho^f \underline{u}^R \cdot \delta A$. An der **Austrittsfläche** wird der Massenfluß zunächst aus dem Skalarprodukt der Geschwindigkeit des angrenzenden FV$^L$ und des KF–Vektor $\underline{\delta A}$ bestimmt. Sie wird dann dahingehend korrigiert, daß der gesamte Massenfluß an der Austrittsfläche mit dem gesamten Massenfluß an der Eintrittsfläche übereinstimmt.
Die Druckkorrektur und der Druck werden wie bei Wänden aus dem Gebietsinnern auf die Randflächen linear extrapoliert.

### Kompressible Strömung

Bei kompressiblen Strömungen sind folgende physikalische Randbedingungen möglich:

1. **Überschalleintritt**:
   Hier sind alle physikalischen Größen ($\underline{u}$, $p$, $\rho$) in Übereinstimmung mit konstanter Ruheenthalpie $H_0$ vorgegeben. Der Massenfluß ist gleich $F_m = \rho \underline{\delta A} \cdot \underline{u}$.

2. **Unterschalleintritt**:
   Hier müssen die Ruheenthalpie $H_0$ oder die Ruhetemperatur $T_0$

   $$H_0 = \frac{\kappa}{\kappa - 1}\, R\, T_0 = \frac{\kappa}{\kappa - 1} \frac{p_0}{\rho_0} = \frac{\kappa}{\kappa - 1} \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \underline{u} \cdot \underline{u}$$

   mit der spezifischen Gaskonstante $R$ und dem Ruhedruck $p_0$ vorgegeben werden, so daß die Ruhedichte $\rho_0$ ebenfalls bekannt ist. Der Druck $p$ wird aus dem Rechengebietsinneren auf die Eintrittsfläche extrapoliert, während sich die Dichte $\rho$ aus der Isentropenbeziehung zwischen der Ruhegröße und der Größe an der Eintrittsfläche bestimmt:

   $$\rho = \rho_0 \left( \frac{p}{p_0} \right)^{1/\kappa}$$

   Der Geschwindigkeitbetrag c ist dann:

   $$c = \sqrt{2 \left( H_0 - \frac{\kappa}{\kappa - 1} \frac{p}{\rho} \right)} \; .$$

   Die Richtung des Geschwindigkeitsvektors wird entweder vorgegeben oder mit der im angrenzenden FV$^L$ gleichgesetzt.

3. **Überschallaustritt**:
   Hier werden alle Größen ($\underline{u}$, $p$, $\rho$) linear aus dem Rechengebietsinneren extrapoliert. Der Massenfluß $F_m$ ist gleich $\rho \underline{\delta A} \cdot \underline{u}$.

4. **Unterschallaustritt**:
   Hier muß der Druck $p$ fest vorgegeben werden und die Druckkorrektur $p'$ verschwindet. Die Dichte $\rho$ wird aus dem Gebietsinneren extrapoliert. Die Bestimmung des Massenflusses und der Geschwindigkeit sowie die notwendigen Modifikationen der Druckkorrekturgleichung wurden bereits bei der Behandlung der Ränder mit vorgegebenem Druck beschrieben.

Hierzu sei angemerkt, daß die oben beschriebenen Randbedingungen vor der Simulation eindeutig vorgegeben sein müssen. Ein Wechsel zwischen verschiedenen Ein– bzw. Austrittsrandbedingungen während der Rechnung ist nicht vorgesehen. Gegebenfalls muß das Rechengebiet so modifiziert werden, daß die Randbedingungen eindeutig definiert werden können.

### 3.6.3 Turbulenzgrößen

An der **Eintrittsfläche** werden die Turbulenzvariablen ($k$ und $\varepsilon$ oder $\omega$) entsprechend den physikalischen Gegebenheiten vorgegeben. Die KF–Bilanz wird genauso durchgeführt wie innerhalb des Rechengebiets, wobei wiederum die „interpolierte Größe“ der im angrenzenden $\mathrm{FV}^L$ gleichgesetzt wird. Wesentlich ist die Behandlung der Beiträge zu den Koeffizienten $A_P^L$, $A_R^L$ und der rechten Seite $S^L$. Während der entsprechende Beitrag zu $A_P^L$ und $S^L$ hinzuaddiert wird, wird $A_R^L$ mit der Einströmgröße multipliziert und der rechten Seite hinzugefügt.
An der **Austrittsfläche** ist der einzige relevante Term der Konvektionsfluß. Er kompensiert sich mit Termen aus der Massenbilanz. Der Variablenwert wird aus dem Gebietsinneren auf die Austrittsfläche extrapoliert.
An der **Symmetrieebene** verschwindet die Flächenintegration der Konvektionsterme, und die Flächenintegration über die Diffusionsterme einer skalaren Größe

$$\underline{\delta A} \cdot \nabla\phi = \delta A\ \underline{n} \cdot \nabla\phi = \delta A\ \frac{\partial\phi}{\partial n}$$

ist aufgrund der Symmetriebedingung $\frac{\partial\phi}{\partial n} = 0$ ebenfalls Null.
Der Wert an der KF wird mit dem Wert des flächennormalen Punktes $L_n$ gleichgesetzt:

$$\phi^R = \phi^{L_n} = \phi^L + \underline{\delta s} \cdot \nabla\phi^L\ . \tag{3.87}$$

An der **Wand** sind die turbulente Schwankungsenergie $k$ und ihr Gradient senkrecht zur Wand Null, so daß die Konvektion und die Flächenintegration über den Diffusionsterm keinen Beitrag liefern.
Bei der turbulenten Dissipationsrate $\varepsilon$ bzw. der spezifischen Dissipationsrate $\omega$ wird für das wandangrenzende $\mathrm{FV}^L$ keine Bilanzgleichung gelöst. Vielmehr werden dort die Werte von $\varepsilon^L$ bzw. $\omega^L$ in Abhängigkeit vom Abstand $l_n$ zur Wand und der turbulenten Schwankungsenergie $k^L$ im $\mathrm{FV}^L$ direkt vorgegeben (siehe Kap 2.2.2 bzw. 2.2.3)

$$\varepsilon^L = \frac{(k^L)^{3/2}}{C_l l_n}, \quad \text{bzw. } \omega^L = \frac{(k^L)^{1/2}}{C_l l_n}\ ,$$

oder bei Verwendung der jeweiligen LRe–Formulierungen

$$\varepsilon^L = \frac{2\nu k^L}{l_n^2}, \quad \text{bzw. } \omega^L = \frac{6\nu}{0.83 l_n^2} \ .$$

Es muß bei der Gittergenerierung darauf geachtet werden, daß der normierte Wandabstand $l_n^+ = \frac{\rho l_n u_\tau}{\mu}$ der Zentren der wandangrenzenden FV bei Anwendung von HRe–Formulierungen im Bereich von $15 \sim 200$ und für LRe–Formulierungen im Bereich von $0.1 \sim 3$ liegt. Gegebenenfalls ist die Rechnung nach der Anpassung des Rechengitters an die Lösung neu durchzuführen.

## 3.7 Lösung der algebraischen Gleichungssysteme

Die verwendete FV–Methode auf Multiblockgittern mit der Blocknumerierung $m$ ($m = 1$ bis $M$) führt für alle Variablen $\phi$ auf ein lineares Gleichungssystem der Form

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\phi} = \underline{S}$$

mit

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}_1^1 & \underline{\underline{A}}_1^2 & \cdots & \underline{\underline{A}}_1^M \\ \underline{\underline{A}}_2^1 & \underline{\underline{A}}_1^2 & \cdots & \underline{\underline{A}}_1^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{\underline{A}}_M^1 & \cdots & \underline{\underline{A}}_M^{M-1} & \underline{\underline{A}}_M^M \end{bmatrix}, \ \underline{\phi} = \begin{bmatrix} \underline{\phi}_1 \\ \underline{\phi}_2 \\ \vdots \\ \underline{\phi}_M \end{bmatrix}, \ \underline{S} = \begin{bmatrix} \underline{S}_1 \\ \underline{S}_2 \\ \vdots \\ \underline{S}_M \end{bmatrix},$$

wobei in $\underline{\phi}_m$ die Variablen und in $\underline{S}_m$ die rechte Seite des Gleichungssystems innerhalb eines Gitterblocks nach Laufindex (i,j,k) geordnet sind.
Die Matrizen der Hauptdiagonale $\underline{\underline{A}}_m^m$ beinhalten die Koeffizienten des Gleichungssystems für den Gitterblock $m$, sofern sich die Koeffizienten auf Variablen innerhalb des gleichen Blocks beziehen. Sie sind bei strukturierten Gittern innerhalb eines Blocks Heptadiagonalmatrizen. Der Ausdruck $\underline{\underline{A}}_m^m \cdot \underline{\phi}_m$ ergibt sich für ein bestimmtes FV zu:

$$\underline{\underline{A}}_m^m \cdot \underline{\phi}_m \ \Rightarrow \ A_P\phi^P - A_W\phi^W - A_E\phi^E - A_S\phi^S - A_N\phi^N - A_B\phi^B - A_T\phi^T \ .$$

In den Marizen $\underline{\underline{A}}_m^n (n \neq m)$ sind diejenigen Koeffizienten der Gleichungen für die FV im Block $m$ zusammengefaßt, die mit den Variablen im Block $n$ multipliziert werden sollen. Da das Verfahren auch unstrukturierte Blockverbindungsflächen erlaubt, haben diese Matrizen im allgemeinen keine erkennbare Struktur. Die gesamte Koeffizientenmatrix $\underline{\underline{A}}$ wird im folgenden als Multiblock–Koeffizientenmatrix bezeichnet.
Das iterative Verfahren zur Lösung algebraischer Gleichungssysteme

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\phi} = \underline{S}$$

läßt sich auf eine allgemeine Iterationsvorschrift zurückführen:

$$\underline{\phi} = \underline{\tilde{\phi}} + \underline{\underline{B}}^{-1} \cdot \underline{R} \ , \quad \text{mit } \underline{R} = \left(\underline{S} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\tilde{\phi}}\right) \ .$$

Hierbei stellt $\underline{\tilde{\phi}}$ die Lösung des vorangegangenen Iterationsschritts dar.
Ausgehend von Startwerten für den Lösungsvektor $\underline{\phi}$ wird die Lösung in hintereinandergeschalteten Iterationen solange verbessert, bis ein vorgegebenes Genauigkeitskriterium erreicht wird.
Die Matrix $\underline{\underline{B}}$ ist hier eine leicht invertierbare Matrix. Die Konvergenzgeschwindigkeit der Iterationsverfahren hängt davon ab, wie gut die Matrix $\underline{\underline{B}}$ die Koeffizientenmatrix $\underline{\underline{A}}$ approximiert. Im allgemeinen wird $\underline{\underline{B}}$ oft als Approximationsmatrix bezeichnet.

### 3.7.1 SIP–Verfahren

In dieser Arbeit wird die sogenannte „Strongly Implicit Procedure (SIP)“ für die Lösung des oben angegebenen algebraischen Gleichungssystems herangezogen. Das SIP–Verhahren wurde ursprünglich von Stone (1968) zur Lösung von Pentadiagonalmatrizen entwickelt, die bei zweidimensionalen Simulationsproblemen auftreten. Beim SIP–Verfahren wird eine Approximationsmatrix $\underline{\underline{B}}$ so konstruiert, daß sie sich in eine untere Dreiecksmatrix $\underline{\underline{L}}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\underline{\underline{U}}$ zerlegen läßt

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{U}}.$$

Die Matrizen $\underline{\underline{L}}$ und $\underline{\underline{U}}$ sind nur auf solchen Diagonalen besetzt, welche in der Matrix $\underline{\underline{A}}$ ebenfalls besetzt sind.
Bei zweidimensionalen Problemen weist die Approximationsmatrix $\underline{\underline{B}}$ neben den fünf Diagonalen, welche in $\underline{\underline{A}}$ besetzt sind, zwei zusätzliche Diagonalen auf. Ihr Einfluß wird durch eine formale Vorabschätzung der betreffenden Variablen kompensiert. Bei einer exakten Erfüllung dieser Abschätzung sind $\underline{\underline{A}}$ und $\underline{\underline{B}}$ identisch. Da die Vorabschätzung der betreffenden Variablen mit ihren Nachbarvariablen erfolgt, ist sie im allgemeinen annähernd richtig. Die Matrix $\underline{\underline{B}}$ stellt somit eine gute Approximation der Matrix $\underline{\underline{A}}$ dar.

Im folgenden wird das SIP–Verfahren für eine Heptadiagonalmatrix $\underline{\underline{A}}$ zur Lösung dreidimensionaler Probleme nach dem gleichen Prinzip hergeleitet. In den nachfolgenden Bildern und Gleichungen ist die Indizierung des Lösungsvektors und der Koeffizientenmatrix durch die im Bild 3.14 dargestellten Exponenten ersetzt. Die Koeffizienten ohne Exponent und die Variable mit dem Exponent $P$ beziehen sich auf die Indizierung $(i, j, k)$. Die sonstigen Exponenten beziehen sich auf die relative Position zur Indizierung $(i, j, k)$:
$W(est) \Rightarrow (i-1, j, k)$ , $E(ast) \Rightarrow (i+1, j, k)$ , $S(outh) \Rightarrow (i, j-1, k)$ ,
$N(orth) \Rightarrow (i, j+1, k)$ , $B(ottom) \Rightarrow (i, j, k-1)$, $T(op) \Rightarrow (i, j, k+1)$
und
$BE \Rightarrow (i+1, j, k-1)$ , $BN \Rightarrow (i, j+1, k-1)$ , $SE \Rightarrow (i+1, j-1, k)$ ,
$NW \Rightarrow (i-1, j+1, k)$ , $TS \Rightarrow (i, j-1, k+1)$ , $TW \Rightarrow (i-1, j, k+1)$ .

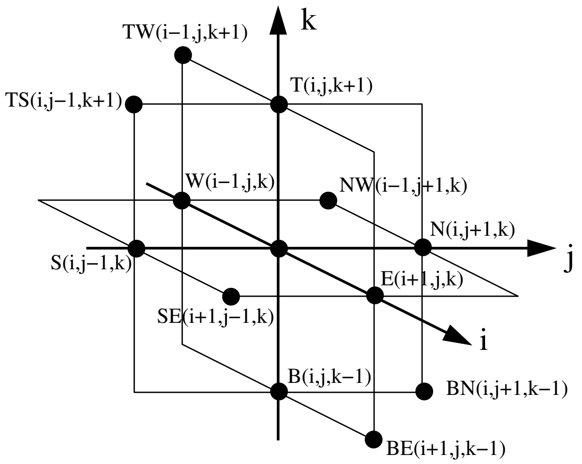



Abbildung 3.14: „Geographische“ Bezeichung der Indizierung

In den Dreiecksmatrizen $\underline{\underline{L}}$ und $\underline{\underline{U}}$ sind jeweils 4 Diagonalen besetzt. Das führt zu einer Approximationsmatrix $\underline{\underline{B}}$ mit 13 Diagonalen (siehe Bild 3.15)

$$B_B = L_B \ , \ B_S = L_S \ , \ B_W = L_W \ , \tag{3.88}$$

$$B_{BE} = L_B U_E^B \ , \ B_{BN} = L_B U_N^B \ , \ B_{SE} = L_S U_E^S \ ,$$

$$B_P = L_P + L_W U_E^W + L_S U_N^S + L_B U_T^B \ ,$$

$$B_E = L_P U_E \ , \ B_N = L_P U_N \ , \ B_T = B_P U_T \ ,$$

$$B_{NW} = L_W U_N^W \ , \ B_{TS} = L_S U_T^S \ , \ B_{TW} = L_W U_T^W \ .$$

Die Diagonalen $B_{BE}$, $B_{BN}$, $B_{SE}$, $B_{NW}$, $B_{TS}$ und $B_{TW}$ sind in der Matrix $\underline{\underline{A}}$ nicht besetzt. Die betreffenden Variablen werden abgeschätzt zu:

$$\phi^{BE} = \alpha\left(\phi^B + \phi^E - \phi^P\right) \ , \ \phi^{BN} = \alpha\left(\phi^B + \phi^N - \phi^P\right) \ , \ \phi^{SE} = \alpha\left(\phi^S + \phi^E - \phi^P\right)$$

$$\phi^{TW} = \alpha\left(\phi^T + \phi^W - \phi^P\right) \ , \ \phi^{TS} = \alpha\left(\phi^T + \phi^S - \phi^P\right) \ , \ \phi^{NW} = \alpha\left(\phi^N + \phi^W - \phi^P\right) .$$

Die Identität der Matrix $\underline{\underline{B}}$ mit der Matrix $\underline{\underline{A}}$ infolge obiger Vorabschätzung führt zu folgender Beziehung zwischen den Koeffizienten beider Matrizen:

$$-A_W = B_W + \alpha\left(B_{TW} + B_{NW}\right) \ , \ -A_E = B_E + \alpha\left(B_{BE} + B_{SE}\right) \ , \tag{3.89}$$

$$-A_S = B_S + \alpha\left(B_{SE} + B_{TS}\right) \ , \ -A_N = B_N + \alpha\left(B_{BN} + B_{NW}\right) \ ,$$

$$-A_B = B_B + \alpha\left(B_{BE} + B_{BN}\right) \ , \ -A_T = B_T + \alpha\left(B_{TS} + B_{TW}\right) .$$

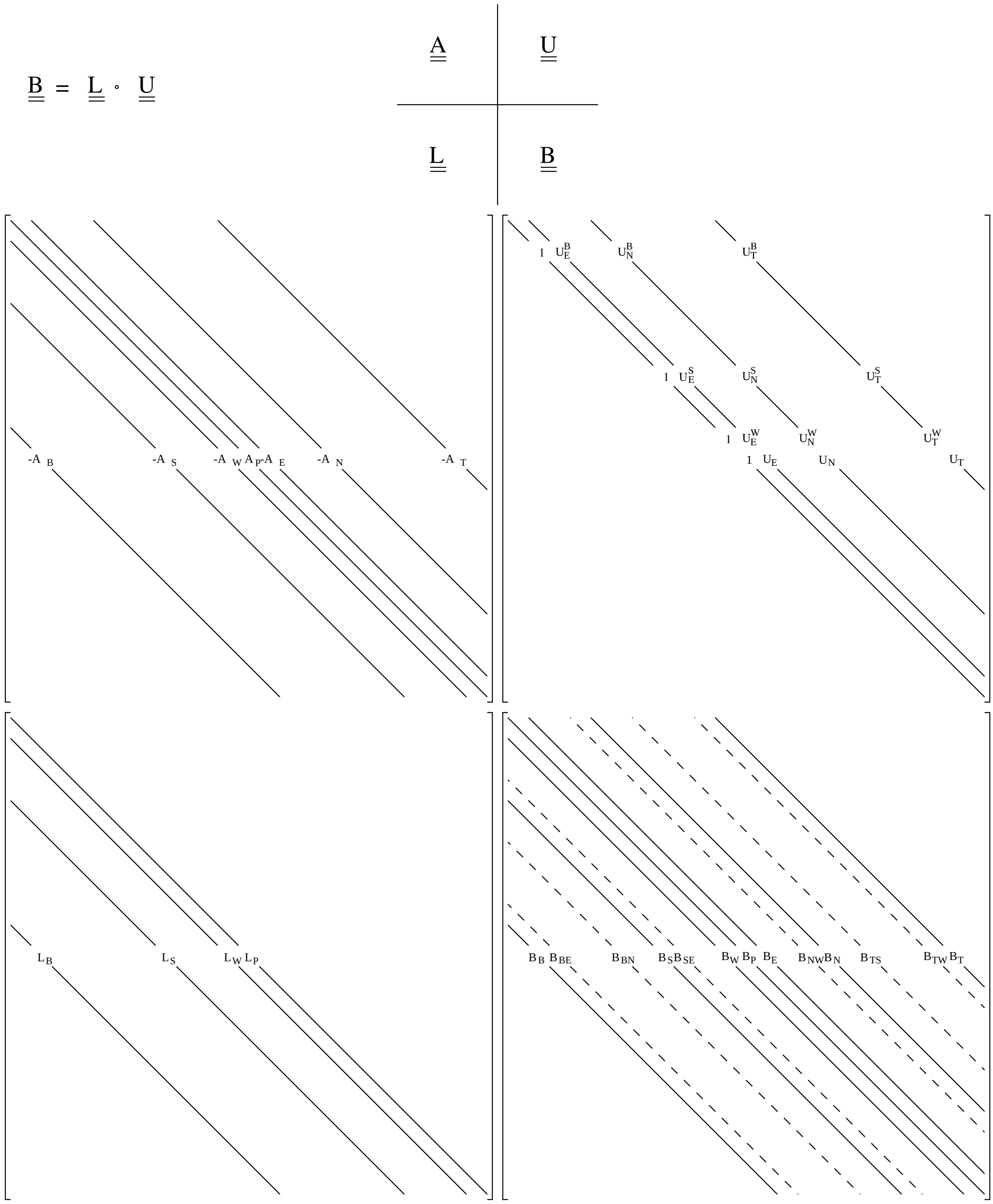



Abbildung 3.15: Heptadiagonale Koeffizientenmatrix $\underline{\underline{A}}$ und LU–Zerlegung der Approximationsmatrix $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{U}}$ mit gestrichelt dargestellten zusätzlichen Diagonalen

Durch Einsetzen dieser Beziehung in die Gleichungen (3.88) lassen sich rekursive Rechenvorschriften für die Koeffizienten der Dreiecksmatrizen $\underline{\underline{L}}$ und $\underline{\underline{U}}$ gewinnen:

$$L_W = \frac{-A_W}{1+\alpha\,(U_T^W + U_N^W)}\ ,\ L_S = \frac{-A_S}{1+\alpha\,(U_E^S + U_T^S)}\ ,\ L_B = \frac{-A_B}{1+\alpha\,(U_E^B + U_N^B)}\ , \tag{3.90}$$

$$\gamma_P = L_W U_E^W + L_S U_N^S + L_B U_T^B\ ,$$

$$\gamma_E = \alpha\left(L_B U_E^B + L_S U_E^S\right)\ ,\ \gamma_N = \alpha\left(L_B U_N^B + L_S U_E^S\right)\ ,\ \gamma_T = \alpha\left(L_S U_T^S + L_W U_T^W\right)\ ,$$

$$L_P = -A_P - \gamma_P + \gamma_E + \gamma_N + \gamma_T\ ,$$

$$U_E = \frac{-A_E - \gamma_T}{L_P}\ ,\ U_N = \frac{-A_N - \gamma_N}{L_P}\ ,\ U_T = \frac{-A_T - \gamma_T}{L_P}\ .$$

Die Invertierungsaufgabe $\underline{D} = \underline{\underline{B}}^{-1} \cdot \underline{R}$ erfolgt in zwei Schritten:

1. Invertierung mit der unteren Dreiecksmatrix $\underline{R}' = \underline{\underline{L}}^{-1} \cdot \underline{R}$. Die rekursive Rechenvorschrift wird der Reihe nach für P mit $i, j, k$ jeweils von der kleinsten zur größten Zahl laufend durchgeführt:

$$R'^P = \left(R^P - L^W R^W - L^S R^S - L^B R^B\right)/L^P. \tag{3.91}$$

2. Invertierung mit der oberen Dreiecksmatrix $\underline{D} = \underline{\underline{U}}^{-1} \cdot \underline{R}'$:

$$D^P = U^P - U^E R'^E - U^N R'^N - U^T R'^T\ . \tag{3.92}$$

   Die Rechenvorschrift muß hier in umgekehrter Reihenfolge ausgeführt werden, wobei die Indizes $i, j, k$ jeweils von der größten zur kleinsten Zahl laufen.

### 3.7.2 Iterationsvorschrift für die Multiblock–Koeffizientenmatrix

Die Multiblock–Koeffizientenmatix $\underline{\underline{A}}$ enthält sowohl den strukturierten Anteil $\underline{\underline{A}}_m^m$ als auch den unstrukturierten Anteil $\underline{\underline{A}}_m^{n(n\neq m)}$. Das SIP–Verfahren kann hier nur auf den strukturierten Anteil angewendet werden.

Die Approximationsmatrix $\underline{\underline{B}}$ hat die Form:

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{B}}_1 & \underline{\underline{0}} & \cdots & \underline{\underline{0}} \\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{B}}_2 & \cdots & \underline{\underline{0}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{\underline{0}} & \cdots & \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{B}}_M \end{bmatrix}$$

Die einzelnen Teile $\underline{\underline{B}}_m$ der Approximationsmatrizen sind unabhängig voneinander. Ihre LU–Zerlegungen $\underline{\underline{B}}_m = \underline{\underline{L}}_m \cdot \underline{\underline{U}}_m$ lassen sich in Abhängigkeit vom strukturierten Anteil $\underline{\underline{A}}_m^m$ der

Multiblock–Koeffizientenmatrix für jeden Block $m$ separat durchführen. Die unstrukturierten Anteile werden hier nicht in die Berechnung der Dreiecksmatrizen $\underline{\underline{L}}_m$ und $\underline{\underline{U}}_m$ einbezogen.
Die Iterationsvorschrift zur Lösung des Gleichungssystems

$$\sum_{n=1}^{m} \underline{\underline{A}}_m^n \cdot \underline{\phi}_n = \underline{S}_m,\ m = 1 \text{ bis } M$$

lautet somit:

1. Berechnung des Residuenvektors $\underline{R}_m$:

$$\underline{R}_m = \underline{S}_m - \sum_{n=1}^{m} \underline{\underline{A}}_m^n \cdot \underline{\tilde{\phi}}_n \ ,\ m = 1 \text{ bis } M \ .$$

2. Invertierung des Residuenvektors mit der unteren Dreiecksmatrix $\underline{\underline{L}}_m$:

$$\underline{\underline{R'}}_m = \underline{\underline{L}}_m^{-1} \cdot \underline{R}_m \ ,\ m = 1 \text{ bis } M \ .$$

3. Invertierung des Vektors $\underline{R'}_m$ mit der oberen Dreiecksmatrix $\underline{\underline{U}}_m$ und Erzeugung des neuen Lösungsvektors:

$$\underline{\phi}_m = \underline{\tilde{\phi}}_m + \underline{\underline{U}}_m^{-1} \cdot \underline{R'}_m \ ,\ m = 1 \text{ bis } M \ .$$

Die separate Durchführung der SIP–Verfahren für jeden einzelnen Gitterblock erlaubt eine parallele Verarbeitung. Somit ist die vorgestellte Iterationsvorschrift ohne Anpassung auch auf Multiprozessormaschinen einsetzbar.

## 3.8 Mehrgittermethode

Die Mehrgittermethode dient der Konvergenzbeschleunigung von iterativen Lösungsverfahren. Eine Überblick über die prinzipielle Vorgehensweise findet sich bei Hackbusch (1985). Das Prinzip besteht darin, daß die Fehleranteile verschiedener Wellenlängen auf unterschiedlichen Gittern mit entsprechenden Maschenweiten reduziert werden. Zahlreiche Arbeiten, z.B. Perić u. a. (1989), Orth (1991), Lien & Leschziner (1994b), Lilek u. a. (1997), sowie eigene Untersuchungen (Yan, Xue, Rung & Thiele 1998) haben übereinstimmend bestätigt, daß sich die Rechenzeiten durch Mehrgittermethoden in Verbindung mit dem SIMPLE–Verfahren auf 1/10 bis 1/100 reduzieren lassen. Allerdings wurde diese Beschleunigungsrate nur bei laminaren Strömungen erzielt. Bei turbulenten Strömungen liegt die Beschleunigungsrate bei 3 bis 15.

### 3.8.1 Zweigitterbeschleunigungsverfahren

Die Mehrgittermethode ist ein rekursiver Prozeß, dessen Grundelement das sogenannte „Zweigitterbeschleunigungsverfahren" ist. Die Konvergenzbeschleunigung der Lösung auf dem Feingitter mit der Maschenweite $h$ wird durch eine zwischengeschaltete Korrekturlösung auf einem Grobgitter mit der Maschenweite $H = 2h$ erzielt. Wegen der stark reduzierten Anzahl der Stützstellen auf dem Grobgitter (im dreidimensionalen Fall eins zu acht gegenüber dem Feingitter) ist der zusätzliche Rechenaufwand im Verhältnis zum Gesamtaufwand sehr gering.
Zur Lösung eines Gleichungssystems $L(\phi) = f$ ist das Zweigitterbeschleunigungsverfahren in vier Schritte gegliedert. In $L$ sind sämtliche funktionalen Abhängigkeiten von $\phi$ zusammengefaßt, und $f$ ist von $\phi$ unabhängig.

1) Der kurzwellige Fehleranteil wird durch $\mu_1$–malige Iteration („Pre–Smoothing") des Feingittergleichungssystems $L^h(\phi^h) = f^h$ weitgehend reduziert. Die Lösung $\overline{\phi}^h$ erfüllt die Gleichungen bis auf ein Residuum $R^h$

$$L^h(\overline{\phi}^h) = f^h + R^h \tag{3.93}$$

2) Berechnung einer Korrektur der Lösung auf dem Grobgitter, die das weitgehend langwellige, von Fein– zum Grobgitter interpolierte Residuum kompensiert. Dabei unterscheidet man das „<u>C</u>orrection <u>S</u>cheme" (CS) für ein lineares Gleichungssystem $L$

$$L^H(\delta\phi^H) = -DR^H \ , \text{ mit dem Grobgitterdefekt } DR^H = [I_h^H]\ R^h \tag{3.94}$$

und das „<u>F</u>ull <u>A</u>pproximation <u>S</u>cheme" (FAS) für ein nichtlineares Gleichungssystem $L$:

$$L^H(\overline{\phi}^H + \delta\phi^H) = L^H(\overline{\phi}^H) - DR^H \tag{3.95}$$

mit $\overline{\phi}^H$ als Startlösung auf dem Grobgitter. Diese kann z.B. durch Interpolation der Feingitterlösung gewonnen werden

$$\overline{\phi}^H = [\hat{I}_h^H]\overline{\phi}^h \ . \tag{3.96}$$

Interpolationsoperatoren $[I_h^H]$ und $[\hat{I}_h^H]$, welche die Übertragungsvorschrift von feinem zu grobem Gitter für das Residuum bzw. die Lösungsvariable darstellen, werden im allgemeinen als Restriktionsoperatoren bezeichnet.

3) Korrektur der Feingitterlösung mit der von Grob– zum Feingitter interpolierten Korrekturlösung:

$$\phi^h = \overline{\phi}^h + \omega[I_H^h]\delta\phi^H ; \ \omega : \text{ Unterrelaxationsfaktor} \ . \tag{3.97}$$

Interpolationsoperatoren $[I_H^h]$ , welche die Übertragungsvorschriften von grobem zu feinem Gitter für die Lösungsvariable darstellen, werden im allgemeinen als Prolongationsoperatoren bezeichnet.

4) Durch $\mu_2$–malige Nachiteration („Post–Smoothing“) des Feingittergleichungssystems wird der noch vorhandene und der durch die Prolongation neu hinzugekommene kurzwellige Fehleranteil weiter reduziert.

Restriktionsoperatoren $[I_h^H], [\hat{I}_h^H]$ und der Prolongationsoperator $[I_H^h]$ werden im Kap. 3.8.3 und 3.8.4 näher erläutert.

### 3.8.2 Mehrgittermethode mit V– oder W–Zyklus

Das Grobgittergleichungsystem (3.94) bzw. (3.95) muß im allgemeinen ebenfalls mit einem iterativen Verfahren gelöst werden. Es ist hier offensichtlich vorteilhaft, diese Gleichungssysteme durch Hinzunahme eines noch gröberen Gitters mit dem oben beschriebenen Zweigitterverfahren zu lösen. Die rekursive Anwendung des Zweigitterverfahrens führt zu Verfahren unter Einbeziehung von mehreren Gitterstufen. Dabei können die Fehler unterschiedlicher Wellenlänge auf den Gittern entsprechend ihrer Maschenweite optimal reduziert werden.

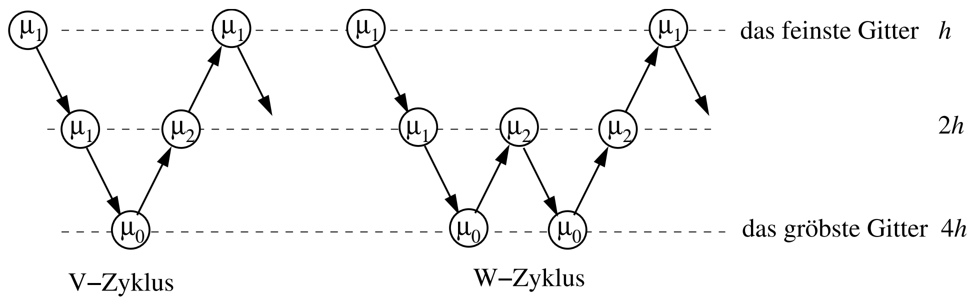



Abbildung 3.16: V– und W–Zyklus der Mehrgittermethode

Unter Zyklus versteht man die Kombination von Zweigitterverfahren auf verschiedenen Gitterstufen. Die Mehrgittermethode wird mit den hintereinandergeschalteten Zyklen durchgeführt, bis ein vorgeschriebenes Konvergenzkriterium auf dem feinsten Gitter erfüllt ist. Wenn auf gröberen Gittern das Zweigitterverfahren nur jeweils einmal Anwendung findet, entsteht ein Mehrgitterverfahren mit V–Zyklus. Das durch zweimalige rekursive Anwendung der Zweigitterbeschleunigung entstandene Verfahren wird als Mehrgittermethode mit W–Zyklus bezeichnet. Bild 3.16 zeigt den V– und W–Zyklus für die drei Gitterstufen $h$, $2h$ und $4h$. In der Praxis wird hauptsächlich der V–Zyklus wegen seiner einfachen Implementierung und der robusten Steuerung eingesetzt (Orth 1991). Nachteil des V–Zyklus gegenüber dem W–Zyklus ist, daß auf gröberen Gittern unter Umständen mehr Iterationsschritte durchzuführen sind. Da aber der Rechenaufwand auf gröberen

Gittern im Verhältnis zum Gesamtaufwand sehr gering ist, spielt dies keine entscheidende Rolle. Mit $\mu_1$ und $\mu_2$ wird in Bild 3.16 die Anzahl der „Pre–Smoothing“– bzw. „Post–Smoothing“–Schritte bezeichnet. Auf dem gröbsten Gitter sollten mehr Iterationsschritte ausgeführt werden, da alle Fehleranteile, deren Wellenlänge über die Maschenweite des gröbsten Gitters hinausgehen, auf diesem Gitter reduziert werden müssen. Die Anzahl der „Smoothing“–Schritte auf dem gröbsten Gitter wird entsprechend mit $\mu_0$ bezeichnet.

Zu erwähnen sei hier noch die „Full MultiGrid“ (FMG)–Methode. Dabei wird die Rechnung nicht direkt vom feinsten Gitter aus gestartet, sondern zuerst die Lösung auf dem gröbsten Gitter ermittelt. Durch Prolongation läßt sich dann eine gute Startlösung für die Mehrgitterrechnung auf dem nächst feineren Gitter gewinnen.

In der vorliegenden Arbeit wird zur Generierung von Gittern verschiedener Stufen folgende Vorgehensweise praktiziert: Ausgehend von dem der Geometrie und den Strömungsverhältnissen angepaßten feinsten Gitter werden rekursiv gröbere Gitter gebildet, wobei nur jede zweite Gitterlinie in jeder Gitterrichtung des Feingitters zur Bildung des nächst gröberen Gitters verwendet wird. Ein Grobgitterbilanzvolumen umfaßt damit jeweils acht Feingitterbilanzvolumina.

### 3.8.3 Restriktion

Der Übertragungsvorgang der Feingittergrößen auf das Grobgitter wird Restriktion genannt. Beim FV–Verfahren, dessen Gitternordnung im Bild 3.17 für den zweidimensionalen Fall dargestellt ist, müssen zur Berechnung des Grobgitterdefekts lediglich die Residuen der Feingitterbilanzvolumina addiert werden:

$$DR^H = [I_h^H]R^h \;\Rightarrow\; DR^{P(l)} = \sum_{P(l+1)} R^{P(l+1)} \,. \tag{3.98}$$

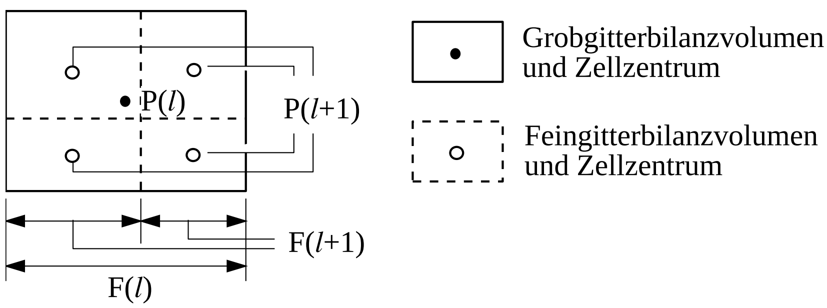



Abbildung 3.17: Anordnung von grobem und feinem Gitter des FV–Verfahrens bei zellzentrierter Variablenanordnung

Die für das „Full Approximation Scheme“ notwendigen Variablenwerte auf dem Grobgitter werden durch volumengewichtete Mittelung aus den Feingitterwerten berechnet:

$$\overline{\phi}^H = [\hat{I}_h^H]\overline{\phi}^h \ \Rightarrow \ \overline{\phi}^{P(l)} = \frac{\sum_{P(l+1)} \delta V^{P(l+1)} \overline{\phi}^{P(l+l)}}{\sum_{P(l+1)} \delta V^{P(l+1)}} \ . \tag{3.99}$$

In beiden Gleichungen wird ein Bilanzvolumen auf dem Gitter $l$ mit $P(l)$ und die ihm zugehörigen Bilanzvolumina auf dem nächstfeineren Gitter $l+1$ mit $P(l+1)$ gekennzeichnet. Bei der Startlösung auf Grobgittern ist es ebenfalls notwendig, Massenflüsse an den Kontrollflächen zu bestimmen. Es ist wichtig, den konservativen Charakter des FV–Verfahrens auch auf Grobgittern zu erhalten. Dies erreicht man dadurch, daß der Massenfluß an einer Kontrollfläche $f(l)$ auf dem Grobgitter als Summe der Massenflüsse an den entsprechenden Kontrollflächen $f(l+1)$ auf dem nächstfeineren Gitter gebildet wird:

$$\overline{F_m}^{f(l)} = \sum_{f(l+1)} \overline{F_m}^{f(l+1)} \ . \tag{3.100}$$

### 3.8.4 Prolongation

Die Prolongation dient zur Übertragung der Grobgitterkorrekturen auf das Feingitter. Beim FV–Verfahren auf strukturierten Gittern werden üblicherweise die Korrekturen für Feingitterstützstellen aus den Korrekturen der umliegenden Grobgitterstützstellen linear interpoliert. In Bild 3.18a sind jeweils vier Stützstellen auf dem Feingitter und die vier diese beeinflussenden Stützstellen auf dem Grobgitter für zweidimensionale Verfahren dargestellt. Im Fall dreidimensionaler Verfahren sind es jeweils acht Stützstellen. Außer dem übermäßigen logistischen Aufwand bei der programmtechnischen Umsetzung für das Multiblockgitter wirkt sich vor allem der damit verbundene Kommunikationsaufwand bei parallelen Simulationsprozessen nachteilig aus.
In dieser Arbeit wird daher eine andere Vorgehensweise entwickelt, die bei der Prolongation die Gradienten der Variablen verwendet. Ein weiterer Vorteil dieser Methode besteht darin, daß sie ohne Änderung auch für unstrukturierte Gitter gilt.
Die Prolongation $[I_H^h]\delta\phi^H$ läßt sich grundsätzlich durch

$$\delta\phi^h = [I_H^h]\delta\phi^H \ \Rightarrow \ \delta\phi^{P(l+1)} = \delta\phi^{P(l)} + \underline{\delta x}^{P(l+1)} \cdot \nabla\delta\phi^{P(l)} \ , \text{für alle } P(l+1) \tag{3.101}$$

bestimmen, wobei der Abstandsvektor durch $\underline{\delta x}^{P(l+1)} = \underline{x}^{P(l+1)} - \underline{x}^{P(l)}$ definiert ist. Nach der Approximationsvorschrift für die Gradientenbildung (3.19) entspricht obige Gleichung einer Interpolation der Feingitterkorrekturen aus den Korrekturwerten der sie umfassenden und umgebenden Bilanzvolumina auf dem Grobgitter (Bild 3.18b). Im wandnahen Bereich mit extremer Gitterstreckung und durch die Körperkontur induzierter starker Krümmung (Bild 3.18c) führt der Prolongationsoperator nach Gl. (3.101) unter Umständen zu Oszillationen in der Feingitterkorrektur. Daher wird der Abstandsvektor $\underline{\delta x}^{P(l+1)}$ nicht direkt mit dem Grobgittervolumenzentrum

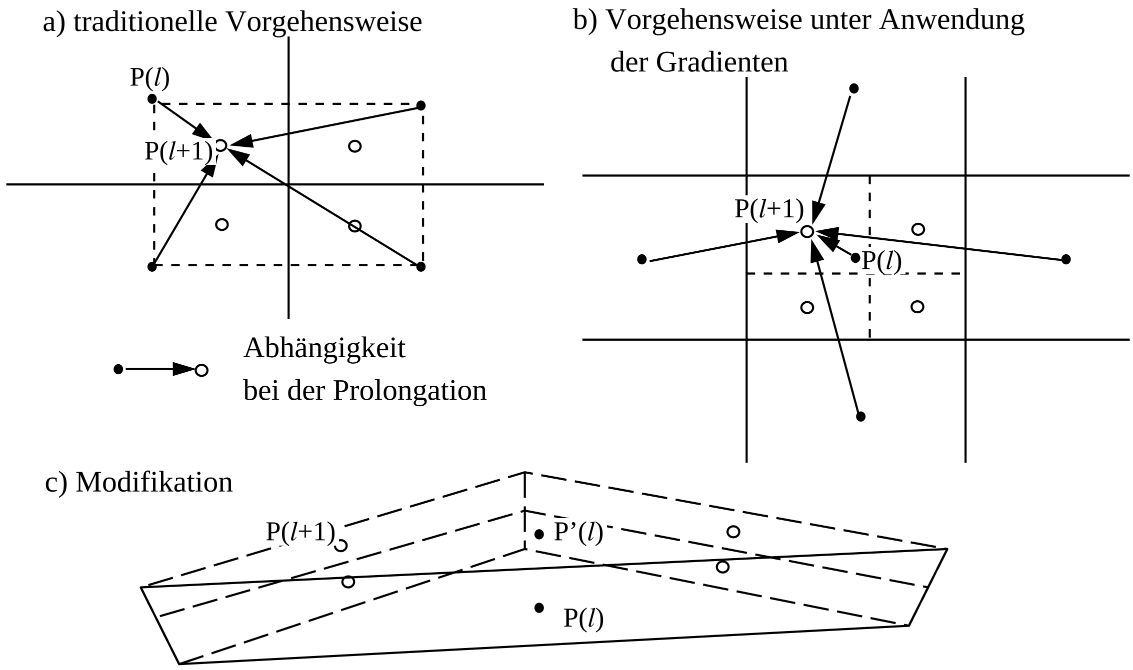



Abbildung 3.18: Abhängigkeiten der Feingitterkorrekturen von den Grobgitterkorrekturen

$\underline{x}^{P(l)}$, sondern mit der restringierten Größe $\underline{x}^{P'(l)}$ gebildet:

$$\underline{\delta x}^{P(l+1)} = \underline{x}^{P(l+1)} - \underline{x}^{P'(l)} \ , \quad \underline{x}^{P'(l)} = \frac{\sum_{P(l+1)} \delta V^{P(l+1)} \underline{x}^{P(l+1)}}{\sum_{P(l+1)} \delta V^{P(l+1)}} \ .$$

In einer Untersuchung (Yan 1997) wurden anhand zweidimensionaler Probleme keine signifikanten Unterschiede im Konvergenzverhalten zwischen der traditionellen Vorgehensweise und der auf Gradienten basierten Vorgehensweise festgestellt.

### 3.8.5 Grobgittergleichungssystem für das SIMPLE–Verfahren

Die Mehrgittermethode kann sowohl zur Beschleunigung bei der Lösung von einzelnen Bilanzgleichung, als auch für das gesamte SIMPLE–Verfahren verwendet werden. Frühere Arbeiten (Lonsdale & Walsh 1984) untersuchten die Beschleunigungswirkung der Mehrgittermethode für die Lösung der Druckkorrekturgleichung, die den rechenintensivsten Teil des SIMPLE–Verfahrens darstellt. Zwar konnte die Rechenzeit für die Druckkorrekturgleichung deutlich reduziert werden, aber für das gesamte SIMPLE–Verfahren betrug der Beschleunigungsfaktor nur zwei. Aufgrund des sehr großen algorithmischen Aufwandes bei der Implementierung der Mehrgittermethode wurde auf diese Vorgehensweise verzichtet.

In dieser Arbeit wird statt dessen das Konzept der Mehrgittermethode auf das SIMPLE–Verfahren als gesamtes System angewendet. Auf jeder einzelnen Gitterstufe werden die Bilanzgleichungen nach dem in Kap. 3.4.3 beschriebenen iterativen Ablauf gelöst. Der Wechsel zwischen den verschiedenen Gitterstufen erfolgt jeweils nach einer vorgeschriebenen Anzahl von Iterationen auf einer Gitterstufe. Da das Gleichungsystem von nichtlinearem Charakter ist, wird für sämtliche Bilanzgleichungen das „Full Approximation Scheme“ bei der Herleitung des Grobgittergleichungssystems angewendet.

Die diskretisierte Impulsbilanz läßt sich in folgender Form schreiben:

$$\underline{A}(\underline{u}) + \underline{D}(p) + \underline{S} = \underline{f} \; . \tag{3.102}$$

$\underline{A}(\underline{u})$ enthält den impliziten Anteil der Impulsbilanz

$$A_i(u_i) = A_P u_i^P - \sum_{Cf} A_{Cf} u_i^{Cf} \;,$$

$\underline{D}(p)$ die Abhängigkeit vom Druck und $\underline{S}$ den expliziten Anteil in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit. Die rechte Seite $\underline{f}$ stellt den von den Lösungsvariablen unabhängigen Anteil dar.

Erfüllt nun eine Näherungslösung $(\overline{\underline{u}}^h, \overline{p}^h, ...)$ auf einem Feingitter $h$ die obigen Gleichungen bis auf die Residuen

$$\underline{Ru}^h = \underline{A}^h(\overline{\underline{u}}^h) + \underline{D}^h(\overline{p}^h) + \underline{S}^h(\overline{\underline{u}}^h) - \underline{f}^h,$$

dann lassen sich die entsprechenden Gleichungen auf dem Grobgitter für die Grobgittervariable $\phi^H = \overline{\phi}^H + \delta\phi^H$ nach Gl. (3.96) darstellen:

$$\underline{A}^H(\underline{u}^H) + \underline{D}^H(p^H) + \underline{S}^H(\underline{u}^H) = \underline{A}^H(\overline{\underline{u}}^H) + \underline{D}^H(\overline{p}^H) + \underline{S}^H(\overline{\underline{u}}^H) - [I_h^H]\underline{Ru}^h \; . \tag{3.103}$$

Die gesamte rechte Seite ist für die Iteration auf dem Grobgitter $H$ konstant. Sie entspricht somit dem von der Lösung unabhängigen Anteil $\underline{f}$ in Gl. (3.102) für die Iterationen auf dem noch gröberen Gitter.

Analog läßt sich die Massenbilanz in Abhängigkeit von Geschwindigkeit und Druck wie folgt darstellen

$$\frac{\partial \rho(p)}{\partial t}\delta V^P + \sum_f F_m^f(p, \underline{u}) = f_m \;\Rightarrow\; L(p, \underline{u}) = f_m, \tag{3.104}$$

wobei sich die rechte Seite $f_m$ wiederum auf den lösungsunabhängigen Anteil bezieht. Sie ist auf dem feinsten Gitter gleich Null. Die Grobgittergleichung für die Massenbilanz lautet demnach:

$$L(p^H, \underline{u}^H) = L(\overline{p}^H, \overline{\underline{u}}^H) - [I_h^H]Rm^h, \text{ mit } Rm^h = L(\overline{p}^h, \overline{\underline{u}}^h) - f_m^h \; . \tag{3.105}$$

Die rechte Seite ist hier für Iterationen auf dem Grobgitter $H$ konstant und stellt den lösungsunabhängigen Anteil $f_m$ in Gleichung (3.104) dar.

Die Gleichungen (3.103) und (3.105) bilden die Grundlage des Mehrgitter–SIMPLE-Verfahrens in dieser Arbeit. Da bei kompressiblen Strömungen der Druck auf Grobgittern als Variable verwendet wird, ist das Grobgittergleichungssystem im Gegensatz zu anderen bekannten Arbeiten

statt mit der Grobgitterdruckkorrektur $\delta p^H$ mit dem Druck $p^H$ direkt formuliert. Aus beiden Gleichungen läßt sich, wie in Kap. 3.4 beschrieben, die Rechenvorschrift des Druckkorrekturverfahrens aufstellen.
Aufgrund des hochgradig nichtlinearen Charakters der Transportgleichungen für die Turbulenzvariablen ($\phi = k$, $\varepsilon$ oder $\omega$)

$$\underbrace{L_\phi(\phi)}_{impliziter\,Anteil} + \underbrace{S_\phi(\phi)}_{expliziter\,Anteil} = f_\phi \tag{3.106}$$

ist eine gesonderte Behandlung bei der Anwendung von Mehrgittermethoden erforderlich. In der Arbeit von Yan u.a. (1998) ist eine Vorgehensweise, die aus Untersuchungen bei der Berechnung von zweidimensionalen turbulenten Strömungen gewonnen wurde, folgendermaßen angeben:

- Festhalten der turbulenten Scheinzähigkeit auf dem groben Gitter während eines Zyklus.
- Die rechte Seite der Grobgittergleichungen

  $$f^H = L_\phi^H(\overline{\phi}^H) + S_\phi^H(\overline{\phi}^H) - [I_h^H]R_\phi^h, \text{ mit } R_\phi^h = L_\phi^h(\overline{\phi}^h) + S_\phi^h(\overline{\phi}^h) - f_\phi^h$$

  wird bei negativem Vorzeichen als „Pseudodissipation“ implizit behandelt.
- Da die Turbulenzvariablen nur positive Werte annehmen können, wird die Feingitterkorrektur

  $$\phi^h = \overline{\phi}^h + \delta\phi^h \text{ mit } \delta\phi^h = \omega[I_H^h]\delta\phi^H$$

  nur dann durchgeführt, wenn $\delta\phi^h$ größer als null ist.

Mit dieser Vorgehensweise wurde bei der Berechnung einer turbulenten Strömung über einen Hügel (Almeida, Durao & Heitor 1993) ein Beschleunigungsfaktor 10 für das HRe–$k$–$\varepsilon$–Modell und ein Faktor von 8 für das LRe–$k$–$\varepsilon$–Modell erzielt.
Die Mehrgittermethode ist in dieser Arbeit für die Impulsgleichungen, die Druckkorrekturgleichung und für das lineare $k$–$\varepsilon$–Modell in der HRe–Formulierung implementiert. Die programmtechnische Umsetzung der Mehrgittermethode für weitere Turbulenzmodelle und vor allem die allgemeine Validierung des Gesamtverfahrens mit höherwertigen Turbulenzmodellen zur Simulation von komplexen dreidimensionalen Strömungen erfordert extremen Aufwand. Diesbezügliche Implementierungs– und Validierungsarbeiten müssen somit einer zukünftigen Weiterentwicklung des Verfahrens vorbehalten bleiben.

Abschließend zu diesem Kapitel ist folgendes anzumerken:

1) Alle Diskretisierungsgleichungen der Finiten Approximation sind in einer allgemeinen, auch auf unstrukturierten Gittern gültigen Formulierung aufgestellt.

2) Anstelle der Eckwertinterpolationen werden hierzu Gradientenberechnungen für die Lösungsvariablen durchgeführt. Die Gradienten lassen sich auch bei anderen numerischen Berechnungen, z.B. bei TVD–Schemata, und bei der Bestimmung der Reynoldsspannungen einsetzen.

3) Die Datenübertragung bei parallelen Simulation beschränkt sich somit auf den Datenaustausch zwischen zwei Prozessoren, die benachbarte Gitterblöcke bearbeiten. Diese Art von Datenkommunikation läßt sich vollständig parallel ausführen (siehe dazu Kap. 4.2.2).

4) Der SIP–Gleichungslöser wird blockweise für die strukturierten Teile der Koeffizientenmatrizen angewendet. Für eine zukünftige Erweiterung des Verfahrens auf hybride Gitter kann die SIP–Approximationsmatrix als Vorkonditionierung im Zusammenhang mit anderen Gleichungslösern eingesetzt werden.

# Kapitel 4

# Parallelisierung

Die immer stärkere Einbeziehung der numerischen Strömungssimulation in die wissenschftliche Erforschung komplexer Strömungsphänome und in die Unterstützung industrieller Entwurfsprozesse führt zu extremen Anforderungen an Rechengeschwindigkeit und Speicherkapazität. Die Strömungsberechnung einer Start–/Lande–Konfiguration eines Transportflugzeugs erfordert z.B. über 10 Millionen Gitterpunkte, damit die komplexe Geometrie und die auftretenden wesentlichen Strömungsphänomene erfaßt werden können. Um die Genauigkeit der numerischen Berechnung für technische relevante Fragestellungen zu gewährleisten, sind außerdem verläßliche Turbulenzmodelle erforderlich, die wiederum zu erhöhtem Bedarf an Rechenresourcen beitragen. Derartige Strömungsprobleme lassen sich in vertretbarer Zeit nur unter Benutzung von Hochleistungsrechnern mit großer Prozessoranzahl sinnvoll lösen.

## 4.1 Merkmale Massiv–Parallelrechner und ihre Anforderungen an Anwenderprogramme

Die hardwaremäßige Entwicklung der Hochleistungsrechner ist in den letzten Jahren schnell fortgeschritten. Sie ist ausgerichtet auf Systeme vernetzter Rechenprozessoren mit verteiltem Arbeitsspeicher, die wegen der großen Anzahl von integrierbaren Prozessoren auch Massiv–Parallelrechner genannt werden. Derartige Rechner sind in zunehmenden Maße in der Lage, sowohl in der Rechenleistung als auch in der Vernetzungstechnologie den Anforderungen von komplexen numerischen Simulationen zu genügen. Theoretisch erreicht ein einzelner Rechenprozessor einen Leistungsbereich von 200 Mflop/s bis 600 Mflop/s. Die Anzahl von vernetzten Prozessoren reicht von ca. 100 bei kleineren Anlagen bis zu über 9,000 bei experimentellen Anlagen (Dongarra 1998). Die maximale Gesamtleistung der größten Anlage hat die Teraflop/s-Grenze weit überschritten (z.B. Intel ASCI Option Red mit 1.8 Teraflop/s). Die Vernetzung von Prozessoren geschieht mit Hilfe von speziell entwickelten Kommunikationsprozessoren, die untereinander mit einem leistungsstarken

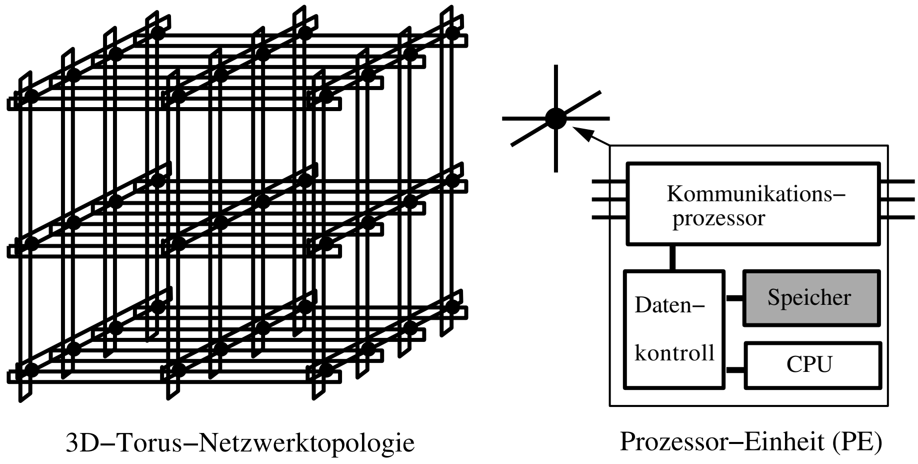



Abbildung 4.1: Hardwarearchitektur von Massiv–Parallelrechnern

Netz im Bereich von GigaBytes pro Sekunde verbunden sind. Sie sind z.B. in einer 3D–Torus–Topologie angeordnet und dienen als Relais–Stationen für den notwendigen Datenaustauch zwischen den Rechenprozessoren. Sie sind sehr effektiv und arbeiten nahezu verzögerungsfrei, falls die beteiligten Rechenprogramme sende– und empfangsbereit sind. In Bild 4.1 ist die prinzipielle Architektur eines Massiv–Parallelrechners dargestellt.

Im Idealfall sollten die Leistungen einzelner Rechenprozessoren addierbar sein. Das heißt, daß die Zeit für eine bestimmte Simulationsaufgabe auf einer Anlage mit n Prozessoren nur $1/n$ der Zeit betragen sollte, die man für die gleiche Aufgabe mit einem Prozessor benötigt. Die Softwareentwicklung für solchen Anlagen ist aber noch nicht soweit ausgereift, daß sich die Leistung einzelner Prozessoren zu 100% addieren ließe. Die parallele Effizienz läßt sich vereinfacht nach Amdahl's Gesetz (Wacker 1989) ermitteln. Wenn sich ein Programm mit einem auf die Rechenzeit $T$ auf einem Prozessor bezogenen Anteil von $\alpha$ parallelisieren läßt, dann ist die parallele Effizienz bei Verwendung von $n$ Prozessoren

$$E_{para} = \frac{T/n}{(1-\alpha)\; T + \alpha\; T/n} = \frac{1}{(1-\alpha)\; n + \alpha}\;. \tag{4.1}$$

Das bedeutet z.B., daß die parallele Effizienz bei einer 90%-tigen Parallelisierung $E_{para} = 52.6\%$ für $n = 10$ und nur noch $E_{para} = 9.2\%$ für $n = 100$ beträgt. Wenn ein Programm wirklich für groß dimensionierte Probleme eingesetzt werden soll, ist eine beinahe vollständige Parallelisierung unumgänglich.

Eine sogenannte Autoparallelisierung von vorhandenen, für Einprozessorrechner geschriebenen Programmen ist prinzipiell möglich. Die Resultate der Autoparallelisierung sind aber meistens unbefriedigend und führen in vielen Fällen zu massivem Leistungseinbruch der einzelnen Prozessoren. Dies ist darauf zurückzuführen, daß viele Prozessoren wegen schlechter Organisation des

Datenaustausches die meiste Zeit im Wartezustand verharren. Wegen der Vielfältigkeit technischer Simulationsaufgaben wird sich dieser Zustand in absehbarer Zeit nur wenig ändern.
Prinzipiell sind folgende Punkte bei Parallelrechnern anzumerken:

- Eine numerische Simulationsaufgabe wird von vielen Prozessoren gleichzeitig durchgeführt. Die Arbeitsteilung muß organisiert bzw. synchronisiert werden.
- Der Arbeitsspeicher ist jedem einzelnen Prozessor zugeteilt, ein direkter Zugriff von einem Prozessor auf den ihm nicht zugeordneten Arbeitsspeicher ist somit nicht möglich. Im Bedarfsfall geschieht der Datenaustausch zwischen den Prozessoren mittels Relaisstation und Datennetzwerk. Dabei müssen die beteiligten Rechenprogramme auf den betroffenen Prozessoren sende– und empfangsbereit sein. Gleichzeitig kann von einem Prozessor aus nur ein Kommunikationskanal zu einem anderen Prozessor eingerichtet werden.
- Die Gesamteffizienz der Simulation hängt sowohl von der Organisation der Rechenaufgabe als auch von der Organisation des Datenaustausches ab. In Idealfall befindet sich niemals ein Prozessor im Wartezustand.

Als Konsequenz daraus ergibt sich für die Programmentwicklung, daß die Programmstruktur von Anfang an für den Einsatz auf Parallelrechnern konzipiert sein muß. Das heißt,

- die Rechenaufgabe muß in gleichzeitig ausführbare Einheiten teilbar sein und die Arbeitsauslastung sollte für alle Prozessoren etwa gleich groß sein. Diese Merkmale werden mit dem Begriff „Load Balancing“ (Lastenausgleich) zusammengefaßt.
- Der Datenaustausch sollte derart organisiert werden, daß er möglichst auf allen Prozessoren gleichzeitig ausgeführt werden kann. In erster Linie muß die benötigte Gesamtzeit für den Datenaustausch unabhängig von der Anzahl der beteiligten Rechenprozessoren und im Verhältnis zur Rechenzeit möglichst klein sein.

Um den oben genannten Anforderungen zu genügen, sind in dem noch jungen Fachgebiet „Parallel Computing“ folgende Organisationsformen parallelen Arbeitens konzipiert worden:

- „Farm“:
  In dieser Organistionsform steuert ein Prozessor, Master–Prozessor genannt, die Organisation der Arbeiten auf den übrigen Prozessoren (Slave–Prozessoren). Die Slave–Prozessoren holen ihre Rechenaufgabe vom Master–Prozessor, übergeben ihre Ergebnisse nach vollendeter Arbeit zurück und holen sich ihre neue Aufgabe. Diese Form der Arbeitsorganisation ist sehr einfach realisierbar. Ihr Anwendungsgebiet ist aber dadurch beschränkt, daß die Arbeiten auf den Slave–Prozessoren keinen Einfluß aufeinander haben dürfen.

- „Pipeline“:
  Bei dieser Organisationsform wird die gesamte Aufgabe entsprechend ihrem zeitlichen Ablauf in verschiedene Arbeitsteile zerlegt. Jeder Prozessor übernimmt das Ergebnis seines vorgeschalteten Prozessors, führt eigene Arbeiten durch und übergibt das Ergebnis dem nachgeschalteten Prozessor. Voraussetzung ist hier, daß zeitlich gleichbleibende Aufgaben durchzuführen sind und die Arbeit in kleine, etwa gleichgroße Anteile zerlegbar ist. Im Bereich der numerischen Strömungssimulation ist auch diese Organisationsform mit der sogenannten Zeitparallelisierung realisierbar. Bei instationären Simulationen kann jedem Prozessor die Berechnung einzelner Iterationsschritte auf verschiedenen Zeitebenen übertragen werden. Nachteilig ist hier die durch die Anzahl der einbezogenen Prozessoren festgeschriebene Iterationsanzahl und der sehr große Speicherbedarf, da alle Daten (Geometrie, Lösungsvariablen) des ganzen Rechengebiets für jeden einzelnen Prozessor bereitgehalten werden müssen. Somit ist die lösbare Problemgröße durch die dem Einzelprozessor zugeordnete Speicherkapazität begrenzt. Der Datenaustausch ist relativ einfach zu parallelisieren, wobei sich die Kommunikationszeit durch Anfall großer Datenmengen (alle Variablen des Gesamtfeldes) nachteilig auf die Effizienz auswirkt.

- „Team Work“:
  In dieser Organisationsform übernimmt jeder einzelne der beteiligten Prozessoren etwa die gleiche Arbeitsbelastung. Wichtig ist hier, daß die Kommunikation zwischen den Prozessoren untereinander je nach Art der Simulationsaufgabe individuell realisiert wird. Bei fortschrittlichen Konzeptionen dieser Organisationsform kann z.B. ein automatischer Ausgleich der Arbeitsauslastung (dynamischer Lastenausgleich) oder eine Einbeziehung von neuen Prozessoren in das „TEAM“ vorgesehen werden.

## 4.2 Implementierung des Simulationsprogramms

Aufgrund der Systemunabhängigkeit wird das Softwarepacket **PVM3** (Geist, Beguelin, Dongarra, Jiang, Manchek & Sunderam 1994) in Form einer „Library“ verwendet. PVM3 ist ursprünglich für Unix-Workstations entwickelt worden und dient in erster Linie zum „Parallel Computing“ auf vernetzten Unix–Rechnern. Sowohl Maschinen gleicher Bauart (homogene Workstationcluster) als auch solche verschiedener Architekturen (heterogene Workstationcluster) können dabei einbezogen werden. PVM3 existiert auch auf allen gängigen Typen von Parallelenrechnern und wird vom Hersteller maschinenspezifisch optimiert.
Das Grundkonzept der Parallelisierung des numerischen Verfahrens basiert in dieser Arbeit auf der Strategie der Gebietszerlegung. Das gesamte Rechengebiet wird in eine Anzahl von Gitterblöcken unterteilt. Jeder parallel laufende Rechenprozeß soll die Berechnung eines oder mehrerer Gitterblöcke übernehmen. Zur Organisation der Rechenaufgaben und des Datenaustausches wird

eine vereinfachte Organisationsform vom Typ „TEAM WORK“ verwendet. Das bedeutet, daß kein spezieller Master–Prozessor die Organisationsaufgabe übernimmt. Der beim Programmablauf anfallende Datenaustausch wird von jedem Rechenprozeß selbst synchronisiert.
Bei der parallelen Strömungssimulation laufen gleiche Programme auf einer Anzahl von Prozessoren. Damit soll sichergestellt werden, daß die Unterprogramme zum Datenaustausch immer an gleicher Stelle aufgerufen werden, wodurch auch die Synchronisierung des gesamten Programmablaufs erfolgt.

### 4.2.1 Lastenausgleich

Die Analyse des numerischen Lösungsablaufs für das FV–Verfahren hat gezeigt, daß die Anzahl der benötigten Rechenoperationen für jedes Bilanzvolumen (FV) etwa gleich groß ist. Der Lastenausgleich wird dadurch erreicht, daß bei der Gittergenerierung alle Gitterblöcke eine nahezu gleiche Anzahl von FV enthalten. Die Simulationsaufgabe eines jeden Gitterblocks wird von einem Prozessor übernommen. Um eine größere Flexibilität zu erreichen, muß ein Prozessor auch in der Lage sein, die Simulationsaufgabe mehrerer Gitterblöcke mit einer geringeren Anzahl von FV zu übernehmen. Ein dynamischer Lastenausgleich ist soweit nicht erforderlich, weil sich die Anzahl der Bilanzvolumina auf einzelnen Prozessoren nicht ändert.
Durch algorithmische Anpassungen (z.B. MultiBlock–SIP–Verfahren) und Bereitstellung eines zusätzlichen Speicherbereiches für Blockverbindungsflächen können alle Rechenoperationen in einem Gitterblock unabhängig von anderen Gitterblöcken ausgeführt werden. Voraussetzung ist, daß die benötigten Daten, die sich auf anderen Prozessoren befinden, auch rechzeitig in den zusätzlichen Speicherbereich übertragen worden sind. Somit ist die vollständige Parallelisierung des Programms zurückgeführt auf ein Problem des Datenaustausches.

### 4.2.2 Synchronisierter Ablauf des Datenaustausches

Bei der Synchronisierung des Datenaustausches müssen zwei Prinzipien beachtet werden:

1. Aufgrund der Hardwarearchitektur von Massiv–Parallelrechnern ist zu einem gegebenen Zeitpunkt von einem Prozessor aus nur ein Kommunikationskanal realisierbar;

2. Je mehr Kommunikationskanäle zu einem gegebenen Zeitpunkt für das gesamte System realisiert werden können, desto kürzer ist der gesamte Zeitaufwand für den Datenaustausch.

Im beschriebenen numerischen Lösungsablauf sind zwei grundverschiedene Arten von Datenaustausch, die sogenannte globale und die lokale Kommunikation, notwendig. Beide Datenkommunikationsarten werden mittels Kommunikationstabellen listengesteuert ausgeführt.

### Die globale Kommunikation

Die globale Kommunikation umfaßt die Sammlung und Verteilung von Informationen von bzw. zu allen beteiligten Prozessoren. Diese Art von Kommunikation wird benötigt, um z.B. die Druckkorrektur an dem Referenzpunkt allen Prozessoren bekanntzumachen oder das Gesamtresiduum als Konvegenzkriterium bei der Lösung des algebraischen Gleichungssystems zu bilden.
Am einfachsten zu verwirklichen ist, daß ein Master–Prozessor von allen anderen Prozessoren Informationen einsammelt und diese dann verteilt („Farm"–Prinzip). Diese Methode führt aber zu einem sequentiellen Ablauf, weil die Datenaustauschvorgänge auf dem Master–Prozessor nur hintereinander ausgeführt werden können. Die hierfür verbrauchte Zeit ist somit linear von der Anzahl ($n$) der beteiligten Prozessoren abhängig. Für kleinere Datenmengen bei einer größeren Anzahl beteiligter Prozessoren fällt zusätzlich die Initialisierungszeit, auch Latenzzeit genannt, zur Einrichtung des Kommunikationskanals stark ins Gewicht.
Eine optimale Kommunikationsstrategie ist hingegen das „Kettenbriefsystem". Damit kann bei einer Anzahl von $n$ Kommunikationsschritten eine beliebige Information zu $2^n$ Prozessoren geschickt oder von ihnen eingesammelt werden. Die gesamte Kommunikationszeit ist somit proportional zu $log(n)$.
Die Prinzipskizze in Bild 4.2 verdeutlicht den Unterschied zwischen beiden Techniken. Die Pfeile, die durch gleiche Zahlen ($m$) in der Skizze bezeichnet sind, stellen die gleichzeitig ausführbaren Datenaustauschvorgänge (synchron im Kommunikationsschritt $m$) dar. Von und zu einem Prozessor dürfen nur Pfeile mit unterschiedlichen Zahlen führen.

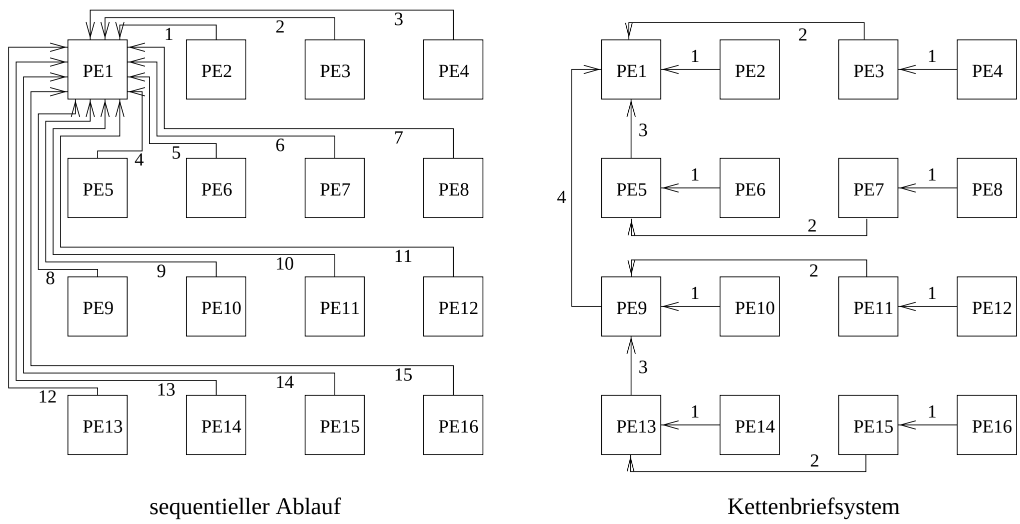



Abbildung 4.2: Sequentielle Ausführung und „Kettenbriefsystem"–Methode für die globale Kommunikation.

Die „Kettenbriefsystem"–Methode läßt sich mit entsprechenden Kommunikationstabellen für einzelne Prozessoren listengesteuert verwirklichen. Als Beispiel sind die Kommunikationstabellen für das in Bild 4.2 dargestellte System von 16 Prozessoren in Tabelle 4.1 zusammengefaßt, die Bedeutung der Zahlenwerte wird am Beispiel des Prozessors 9 in Tabelle 4.2 erklärt.

| KS \ PE | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | -2 | 1 | -4 | 3 | -6 | 5 | -8 | 7 | -10 | 9 | -12 | 11 | -14 | 13 | -16 | 15 |
| 2 | -3 | 0 | 1 | 0 | -7 | 0 | 5 | 0 | -11 | 0 | 9 | 0 | -15 | 0 | 13 | 0 |
| 3 | -5 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -13 | 0 | 0 | 0 | 9 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | -9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

KS: Kommunikationsschritt; $+n$: Empfange von PE $n$ , -$n$: Sende zu PE $n$

Tabelle 4.1: Kommunikationstabellen für globalen Datenaustausch bei 16 Prozessoren.

| KS | PE9 | Aktion bei der Datensammlung: |
|---|---|---|
| 1 | -10 | Empfange Daten von PE10 |
| 2 | -11 | Empfange Daten von PE11 |
| 3 | -13 | Empfange Daten von PE13 |
| 4 | 1 | Sende Daten zu PE1 |

Tabelle 4.2: Globale Kommunikationtabelle für Prozessor 9.

Die Kommunikationstabellen für die globale Kommunikation sind nur von der Anzahl der beteiligten Prozessoren abhängig. Sie werden beim Start des Programms automatisch für jeden Prozessor entsprechend automatisch initialisiert.

Es wurden hierfür zwei Unterprogramme geschrieben. Das Unterprogramm „GLOBSE“ (global senden) dient allein zur Informationsverteilung von einem beliebigen Prozessor aus. Die Informationen werden zunächst zum Prozessor 1 geschickt und anschließend nach dem „Kettenbriefsystem“ an alle Prozessoren verteilt. Hierbei wird die Kommunikationstabelle in umgekehrter Reihenfolge abgearbeitet. Die Vorzeichen haben ebenfalls umgekehrte Bedeutung. Das Unterprogramm „GLOBSU“ (global summen) dient zur Summation von Zahlen von allen PE's und anschließenden Verteilung. Zur Abarbeitung der Kommunikationstabelle während der Datensammlungsphase kommt die Rechenaufgabe hinzu. Die empfangenen Zahlen werden zu der eigenen Zahl oder schon gebildeten Teilsumme hinzuaddiert und dann weiter versendet. Die Endsumme wird immer von Prozessor 1 gebildet und dann nach dem „Kettenbriefsystem“ verteilt.

### Die lokale Kommunikation

Unter lokaler Kommunikation versteht man den Datenaustausch zwischen den beiden Prozessoren, die benachbarte Gitterblöcke bearbeiten. Sie wird im Programm benötigt, um z.B. die Bilanzierung an den Blockverbindungsflächen (BiKF), deren angrenzende Bilanzvolumina nicht auf demselben Prozessor liegen, ausführen zu können. Da auf die Variablen eines Prozessors nicht direkt vom Nachbarprozessor aus zugegriffen werden kann, müssen sie nach jeder Änderung dem Nachbarprozessor durch Datenaustausch bekannt gemacht werden. Die Datenmenge ist hier proportional zur Anzahl der BiKF. Als Beispiel ist ein Testfall (Flügel–Rumpf–Konfiguration, siehe Kap. 6.5) mit 12 Gitterblöcken einschließlich der benötigten lokalen Datenaustauschvorgänge in Bild 4.3 skizziert.

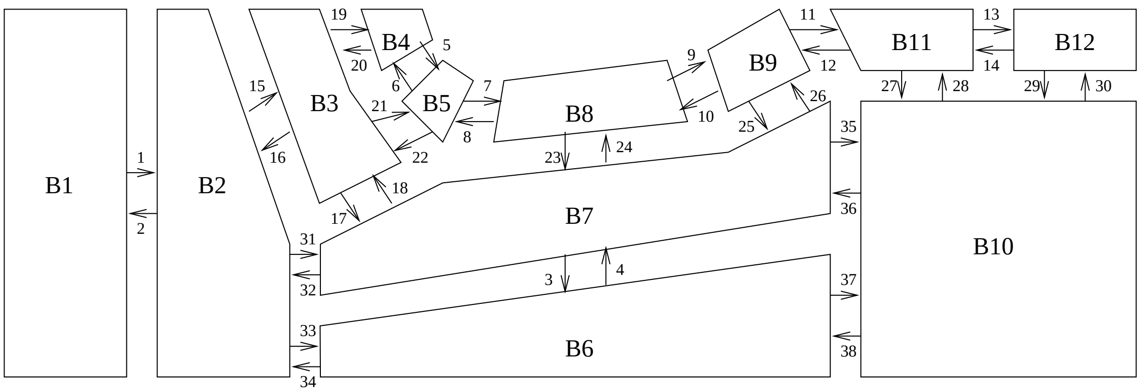



Abbildung 4.3: Bedarf an lokalem Datenaustausch für 12 Gitterblöcke zur Simulation der Umströmung einer Flügel–Rumpf–Konfiguration

Die lokale Kommunikation zeichnet sich dadurch aus, daß

- die Anzahl der Datenaustauschvorgänge für den einzelnen Prozessor durch die Segmentanzahl von Blockverbindungsflächen des ihm zugeordneten Gitterblocks begrenzt ist (im Beispiel maximal 12 für Block 7, Bild 4.3),
- im Hinblick auf das Gesamtsystem die Anzahl der Datenaustauschvorgänge (hier 38) proportional zur Anzahl ($n$) der beteiligten Prozessoren ist und
- die Menge der Austauschdaten pro Vorgang bei einer dreidimensionalen Strömungssimulation proportional zur Potenz 2/3 der Gitterpunktanzahl pro Prozessor ist.

Für ein Problem mit $m$ Gitterpunkten verteilt auf $n$ Prozessoren ist die benötigte Zeit für die lokale Kommunikation demnach proportional zu

$$\frac{\alpha n + \beta n (m/n)^{2/3}}{N} = \frac{\alpha n + \beta n^{1/3} m^{2/3}}{N}.$$

Mit $\alpha$ ist die Latenzzeit zur Einrichtung eines Kommunikationskanals zwischen zwei Prozessoren bezeichnet, $\beta$ stellt den Kehrwert der Bandbreite des Kommunikationskanals dar. $N$ kennzeichnet die Anzahl der gleichzeitig realisierbaren Kommunikationskanäle des gesamten Systems.
Bei einer einheitlichen Anordnung der Gitterblöcke kann jeder Prozessor nach einer einheitlichen Vorgehensweise diese Aufgabe innerhalb weniger Kommunikationsschritte unabhängig von der Anzahl der beteiligten Prozessoren durchführen. So sind z.B. bei einer topologisch zweidimensionalen Anordnung von Blöcken 8 Schritte (siehe Bild 4.4) notwendig. $N$ beträgt hier $n/2$ und der Zeitbedarf ist dann proportional zu $\alpha + \beta n^{-2/3} m^{2/3}$.

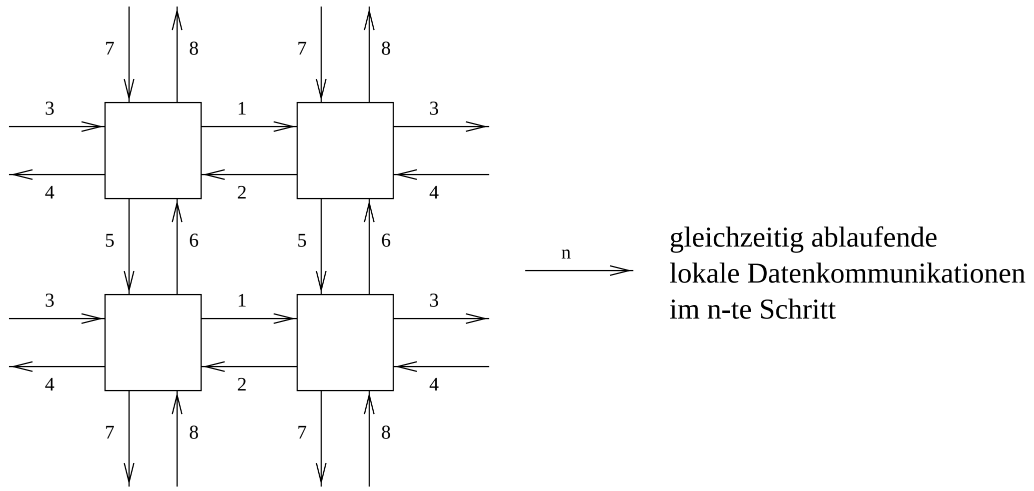



Abbildung 4.4: Synchronisierter Ablauf der lokalen Kommunikation für strukturiert angeordnete Gitterblöcke

Eine einheitliche Gitterblockanordnung stellt jedoch eine zu große Einschränkung bei der Gebietszerlegung und Gittergenerierung dar. Für komplexere Geometrien ist meistens eine unstrukturierte Anordnung von Gitterblöcken notwendig. Bei einer solchen Gitterblockanordnung können die lokalen Datenaustauschvorgänge nicht nach einem einheitlichen Muster ausgeführt werden. Ein sequentieller Ablauf ($N = 1$) der lokalen Kommunikation ist zwar leicht realisierbar, führt aber bei wachsender Anzahl von Prozessoren zu einer beträchlichen Kommunikationszeit. Um lange Wartezeiten einzelner Prozessoren zu vermeiden, muß die lokale Kommunikation auch bei einer unstrukturierten Gitterblockanordnung weitgehend parallel, d.h. mit möglichst großem $N$ (Idealfall $N = n/2$) durchgeführt werden. Dies ist nur durch einen abgestimmten, auf jedem Prozessor individuell auszuführenden Ablauf des Datenaustausches realisierbar.
Um dieses Ziel zu erreichen, wird die lokale genau wie die globale Kommunikation listengesteuert durchgeführt. Die Kommunikationstabellen sind hier im Gegensatz zur globalen Kommunikation problemabhängig, sie werden vorab mit einem Hilfsprogramm generiert und beim Programmstart von jedem Prozessor eingelesen. Für jeden Kommunikationsschritt (KS) ist für jeden Prozessor

ein Zahlenpaar (PE, IDA) in seiner zugehörigen Kommunikationstabelle eingetragen. Die erste Zahl PE stellt bei positivem Vorzeichen die Nummer des Empfängers (EPE) und bei negativem die des Senders (SPE) dar. Die zweite Zahl IDA dient zur Identifikation des Datenaustauschvorgangs. Jedem Vorgang wird dabei durch eine eigene Zahl zugewiesen. Das Zahlenpaar $(0, 0)$ beim entsprechenden Kommunikationsschritt steht für einen Warteschritt.
Die Eingangsinformation für das Hilfsprogramm zur Aufstellung der Kommunikationstabellen ist eine Kostenliste der benötigten lokalen Datenaustauschvorgänge mit IDA, SPE, EPE und KOSTEN (Kosten eines lokalen Kommunikationsvorgangs, hier proportional zur Bitanzahl der auszutauschenden Datenmenge). Sie werden zunächst nach den Kosten (größtes KOSTEN am Anfang der Kostenliste) geordnet. Damit soll erreicht werden, daß die Austauschvorgänge mit etwa gleicher Datenmenge möglichst gleichzeitig ausgeführt werden.
Für die Aufstellung der lokalen Kommunikationstabellen wird nach zahlreichen Tests folgende Strategie gewählt:

1. Suche PE mit maximaler Summe von KOSTEN. Ihn betreffende Datenaustauschvorgänge werden nach ihrer Reihenfolge in der Kostenliste nacheinander (Kommunikationsschritt KS=1,2,...) in der Kommunikationstabelle eingetragen. Das heißt:
   – SPE bekommt das Zahlenpaar (EPE,IDA)
   – EPE bekommt das Zahlenpaar (-SPE,IDA);
   – Streiche den Datenaustauschvorgang aus der Kostenliste.

   Ausgehend von KS=1 gilt nun:

2. Abarbeiten der Kostenliste der Reihe nach. Datenaustauschvorgänge, bei denen weder für SPE noch für EPE ein Zahlenpaar im entsprechenden KS eingetragen ist, werden in die Kommunikationstabelle aufgenommen:
   – SPE bekommt das Zahlenpaar (EPE,IDA)
   – EPE bekommt das Zahlenpaar (-SPE,IDA);
   – Streiche diesen Datenaustauschvorgang aus der Liste.

3. Wenn das Ende der Kostenliste erreicht ist, wird KS um 1 erhöht und zu Schritt 2 zurückgesprungen.

4. Wenn die Kostenliste leer ist, ist die Kommunikationstabelle komplett aufgestellt.

Die nach dieser Strategie automatisch aufgestellte Kommunikationstabelle für das Problem in Bild 4.3 ist in Tabelle 4.3 zusammengefaßt.
Die 38 lokalen Datenkommunikationsvorgänge werden demnach in 12 synchron ablaufenden Schritten ausgeführt. Die Skizze in Bild 4.5 verdeutlicht die Reihenfolge des Kommunikationsablaufs.
Der von dem Hilfsprogramm gefundene Ablauf stellt im diesen Fall sogar den optimalen Ablauf der lokalen Kommunikation dar. Die Anzahl der insgesamt benötigten Kommunikationsschritte ist

| KS \ PE | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2,1 | -1,1 | 0,0 | 5,5 | -4,5 | -7,3 | 6,3 | 9,9 | -8,9 | 0,0 | 12,13 | -11,13 |
| 2 | -2,2 | 1,2 | 0,0 | -5,6 | 4,6 | 7,4 | -6,4 | -9,10 | 8,10 | 0,0 | -12,14 | 11,14 |
| 3 | 0,0 | 6,33 | 7,17 | 0,0 | 8,7 | -2,33 | -3,17 | -5,7 | 11,11 | -12,29 | -9,11 | 10,29 |
| 4 | 0,0 | -6,34 | -7,18 | 0,0 | -8,8 | 2,34 | 3,18 | 5,8 | -11,12 | 12,30 | 9,12 | -10,30 |
| 5 | 0,0 | 3,15 | -3,15 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | -8,23 | 7,23 | 0,0 | -11,27 | 10,27 | 0,0 |
| 6 | 0,0 | -3,16 | 3,16 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 8,24 | -7,24 | 0,0 | 11,28 | -10,28 | 0,0 |
| 7 | 0,0 | 0,0 | 4,19 | -3,19 | 0,0 | 10,37 | -9,25 | 0,0 | 7,25 | -6,37 | 0,0 | 0,0 |
| 8 | 0,0 | 0,0 | -4,20 | 3,20 | 0,0 | -10,38 | 9,26 | 0,0 | -7,26 | 6,38 | 0,0 | 0,0 |
| 9 | 0,0 | 7,31 | 5,21 | 0,0 | -3,21 | 0,0 | -2,31 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 |
| 10 | 0,0 | -7,32 | -5,22 | 0,0 | 3,22 | 0,0 | 2,32 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 |
| 11 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 10,35 | 0,0 | 0,0 | -7,35 | 0,0 | 0,0 |
| 12 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | -10,36 | 0,0 | 0,0 | 7,36 | 0,0 | 0,0 |

Tabelle 4.3: Lokale Kommunikationtabelle für den Testfall Flügel–Rumpf–Konfiguration mit 12 Prozessoren

nicht höher als die maximale Anzahl der von einem Prozessor (hier PE7) benötigten Kommunikationsschritte. Die optimale Lösung kann zwar nicht in allen Fällen erreicht werden, die gefundene Lösung ist jedoch in den meisten Fällen zufriedenstellend. Die Gesamtanzahl der Kommunikationsschritte liegt höchstens um 1 oder 2 über der Anzahl für die optimale Lösung.

Für die lokale Kommunikation wurde das Unterprogramm „EXCCBI“ (exchange connected block interface) geschrieben. Vor den eigentlichen Datenaustauschvorgängen werden die betreffenden Daten in einem zusammenhängenden Speicherblock zusammengestellt und liegen dort zum Abruf bereit. Anschließend wird die individuelle Kommunikationstabelle Schritt für Schritt abgearbeitet. Eine kleine Abweichung vom beschriebenen Ablauf tritt dadurch auf, daß auf eine Synchronisierung aller Prozessoren nach jedem Kommunikationsschritt verzichtet wird. Das heißt, daß die in der Kommunikationstabelle im gleichen Kommunikationsschritt auszuführenden Datenaustauschvorgänge im tatsächlichen Programmablauf zeitversetzt ablaufen können.

Die Grafik in Bild 4.6 macht den Unterschied im zeitlichen Ablauf der Kommunikation für den beschriebenen Testfall mit und ohne globaler Synchronisierung deutlich. Die Befürchtung, daß bei Verzicht auf globale Synchronisierung Übertragungsfehler auftreten können, erwies sich als unbegründet. Dadurch kann die lokale Kommunikation noch kompakter, d.h. zeitsparender ausgeführt werden.

Abschließend sind folgende Punkte anzumerken:

1. Die parallele Version des Simulationsprogramms ist auf alle Rechnerplattformen portierbar. Sie ist sowohl auf einem Massiv–Parallelrechner (CRAY T3E) als auch auf einem Workstationcluster (mit 10 Mbit–Ethernet verbundende Pentium–PC's mit LINUX–Betriebssystem)

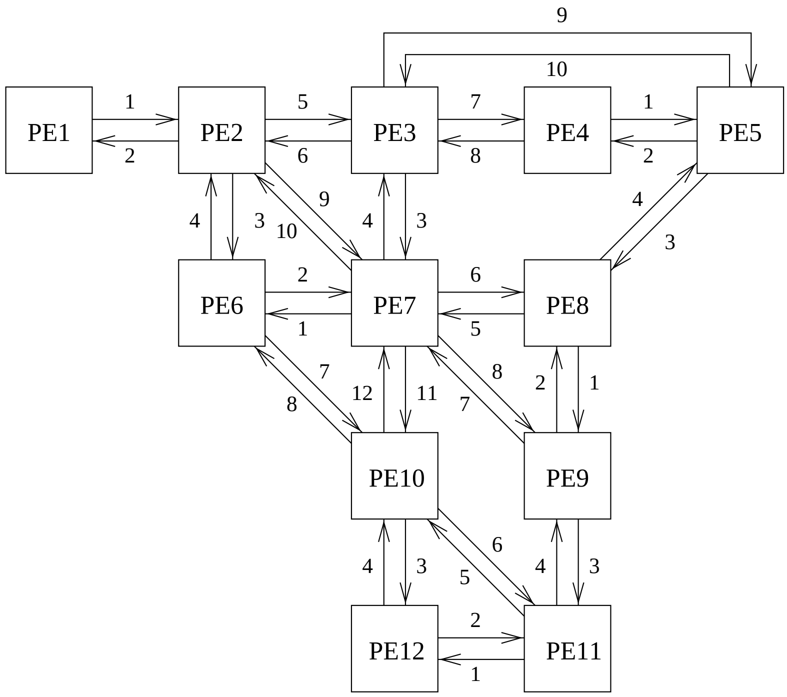



Abbildung 4.5: Synchronisierter Ablauf der lokalen Kommunikation für ein Beispiel mit beliebiger Gitterblockanordnung

getestet worden.

2. Die in dieser Arbeit entwickelte Konzeption zur Datenkommunikation und Synchronisierung erweist sich als sehr effektiv. Der Zeitaufwand für die Datenaustauschvorgänge ist weitgehend von der Anzahl der einbezogenen PE's unabhängig. Sie liegt auf dem Massiv–Parallelcomputer CRAY T3E bei allen Testläufen unter 5%.

3. Das Konzept, die Kommunikationsunterprogramme und das Programm zur Aufstellung der Kommunikationstabellen können für alle parallelen Rechenprogramme auf Basis der Gebietszerlegung eingesetzt werden.

4. Die Hardware–Realisierung, hier in erster Linie die Datennetze zwischen den Prozessoren, hat großen Einfluß auf die Effizienz des Programms. Der mit der Kommunikation verbundene Zeitaufwand ist auf dem Workstationcluster im Gegensatz zu Parallelrechnern sehr hoch. Sie beträgt bei einigen Testläufen auf 4 bzw. 5 Workstations bereits über 30%. Das Problem kann aber dadurch behoben werden, daß die Workstations mit erweiterten Fast–Ethernet–Karten aufgerüstet und zwischen ihnen ein sogenannter Fast–Ethernet–Switch eingebaut wird. Dies entspricht der Vernetzungstechnologie auf Parallelrechnern, d.h., die Datenaustauschgeschwindigkeit zwischen zwei Rechnern ist unabhängig von der Anzahl der

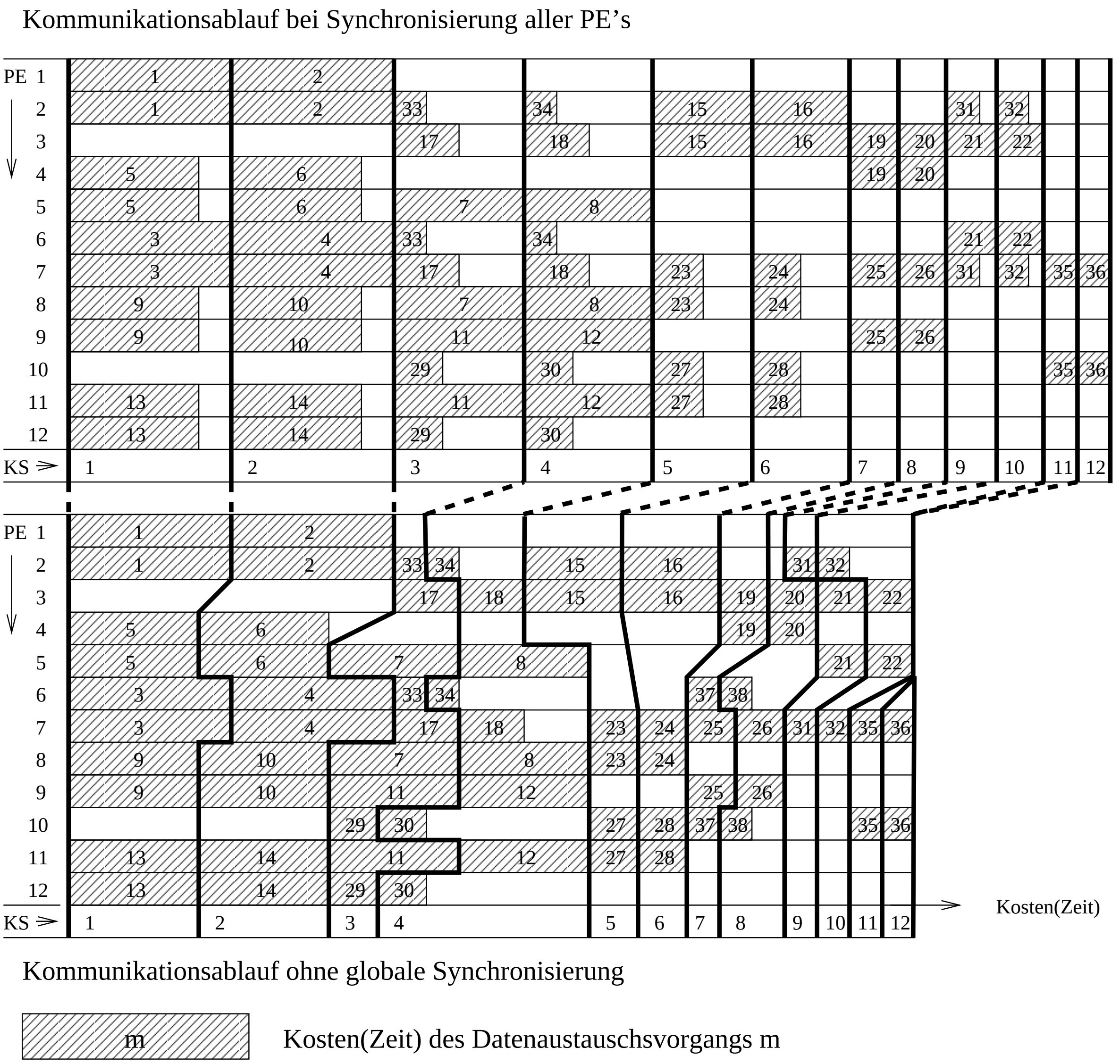



Abbildung 4.6: Kostenunterschied bei der lokalen Kommunikation

parallel durchgeführten Datenaustauschvorgänge und von der Lage der beteiligten Rechner innerhalb der Netzwerktopologie.

# Kapitel 5

# Datenstruktur und Datenzugriff

Da die Gitterpunkte innerhalb einzelner Gitterblöcke strukturiert angeordnet sind, wird der überwiegende Anteil von Daten im Simulationsprogramm strukturiert gespeichert. Für die unstrukturierten Blockverbindungsflächen sind jedoch eine über die strukturierte Speicherung hinausgehende Datenstruktur und ein auf Indexzeigern basierender Datenzugriff erforderlich.
Die Datenstruktur und der Datenzugriff mit Indexzeigern werden zunächst allgemein in Kapitel 5.1 und 5.2 beschrieben. Die auf Gebietszerlegung basierende Parallelisierung des Programms verlangt nur wenige Erweiterungen, die in Kapitel 5.3 gesondert erläutert werden.

## 5.1 Datenstruktur

In dem Simulationsprogramm werden die Datenfelder nach ihrer Speicherungsart in vier Gruppen klassifiziert:

1) Die Ortskoordinaten der Eckpunkte aller Kontrollflächen,

2) FV–Größe: Die volumenbezogene Größen sowie ihre entsprechenden Werte an physikalischen Rändern,

3) KF–Größe: Die flächenbezogenen Größe,

4) Die Koeffizienten des algebraischen Gleichungssystems.

### 5.1.1 Strukturierter Anteil

Der strukturierte Anteil der Daten wird nach Rechenkoordinaten `i, j, k` für jeden Gitterblock `m` auf einer Gitterstufe `l` strukturiert gespeichert. Die Indizierung zur Identifikation eines Bilanzvolumens (FV), einer Kontrollfläche (KF) oder eines Gitterpunktes und die jeweiligen Obergrenzen dieser Indizierung sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt. Die fünfdimensionale Indizierung

| Laufindex | Bedeutung | Obergrenze |
|---|---|---|
| `l` | Gitterstufe | `NGR`: Anzahl der Gitterstufen |
| `m` | Gitterblock | `NBLO`: Anzahl der Gitterblöcke |
| `i` | Rechenkoordinate | `NIGR(l,m)`: 2 + Anzahl der FV in `i`–Richtung |
| `j` | Rechenkoordinate | `NJGR(l,m)`: 2 + Anzahl der FV in `j`–Richtung |
| `k` | Rechenkoordinate | `NKGR(l,m)`: 2 + Anzahl der FV in `k`–Richtung |

Tabelle 5.1: Indizierung des strukturierten Anteils des Datenfeldes im Simulationsprogramm

`(l,m,i,j,k)` wird entsprechend der Speicheradresse im Simulationsprogramm einem eindimensionalen Laufindex `i1d` zugeordnet:

$$\mathtt{i1d} = \mathtt{IJKGR(l,m)} + (\mathtt{i} - 1) * \mathtt{NJGR(l,m)} * \mathtt{NKGR(l,m)} + (\mathtt{j} - 1) * \mathtt{NKGR(l,m)} + \mathtt{k}\ .$$

`IJKGR(l,m)+1` zeigt auf die Startadresse eines Datenfeldes für den Gitterblock `m` auf der Gitterstufe `l`. Die Dimension von `i1d` errechnet sich zu

$$\mathtt{MAXIJK} = \sum_{l=1}^{NGR} \sum_{m=1}^{NBLO} \mathtt{NIGR(l,m)} * \mathtt{NJGR(l,m)} * \mathtt{NKGR(l,m)}\ .$$

Der gültige Indexbereich des strukturierten Anteils verschiedener Datengruppen wird im folgenden einzeln beschrieben.

1. Ortskoordinaten der Gitterpunkte:
   Die Eckpunkte der Kontrollflächen, sofern sie keine Blockverbindungsflächen darstellen, sind die strukturiert angeordneten Gitterpunkte einzelner Gitterblöcke. Ihre Ortskoordinaten werden in drei eindimensionalen Datenfeldern `X, Y, Z` mit dem Laufindex `iv=i1d(l,m,i,j,k)` gespeichert. Der gültige Indexbereich für die Indizierung `(l,m,i,j,k)` ist:

```
l = 1 bis NGR; m = 1 bis NBLO;
  mit NI=NIGR(l,m), NJ=NJGR(l,m), NK=NKGR(l,m):
  i = 1 bis NI-1; j = 1 bis NJ-1; k = 1 bis NK-1.
```

2. FV–Größen:
   Die Feldvariablen, die Ortskoordinaten der FV–Zentren `XC, YC, ZC` und der Volumenbetrag `VOL` jedes FV sind ebenfalls in eindimensionalen Datenfeldern mit dem Laufindex `ic=i1d(l,m,i,j,k)` gespeichert. Ihre Speicherbelegung entspricht dem Indexbereich

```
l = 1 bis NGR; m = 1 bis NBLO;
  mit  NI=NIGR(l,m), NJ=NJGR(l,m), NK=NKGR(l,m):
  i = 2 bis NI-1; j = 2 bis NJ-1; k = 2 bis NK-1.
```

Die Variablen an den Physikalischen Randflächen bzw. die Ortskoordinaten des Zentrums solcher Flächen werden als Pseudo–FV–Größen (PhFV) betrachtet. Sie sind in die Speicherbereiche

```
i = 1 und NI: j = 2 bis NJ-1, k = 2 bis NK-1;
j = 1 und NJ: i = 2 bis NI-1, k = 2 bis NK-1;
k = 1 und NK: i = 2 bis NI-1, j = 2 bis NJ-1.
```

des Datenfeldes integriert.

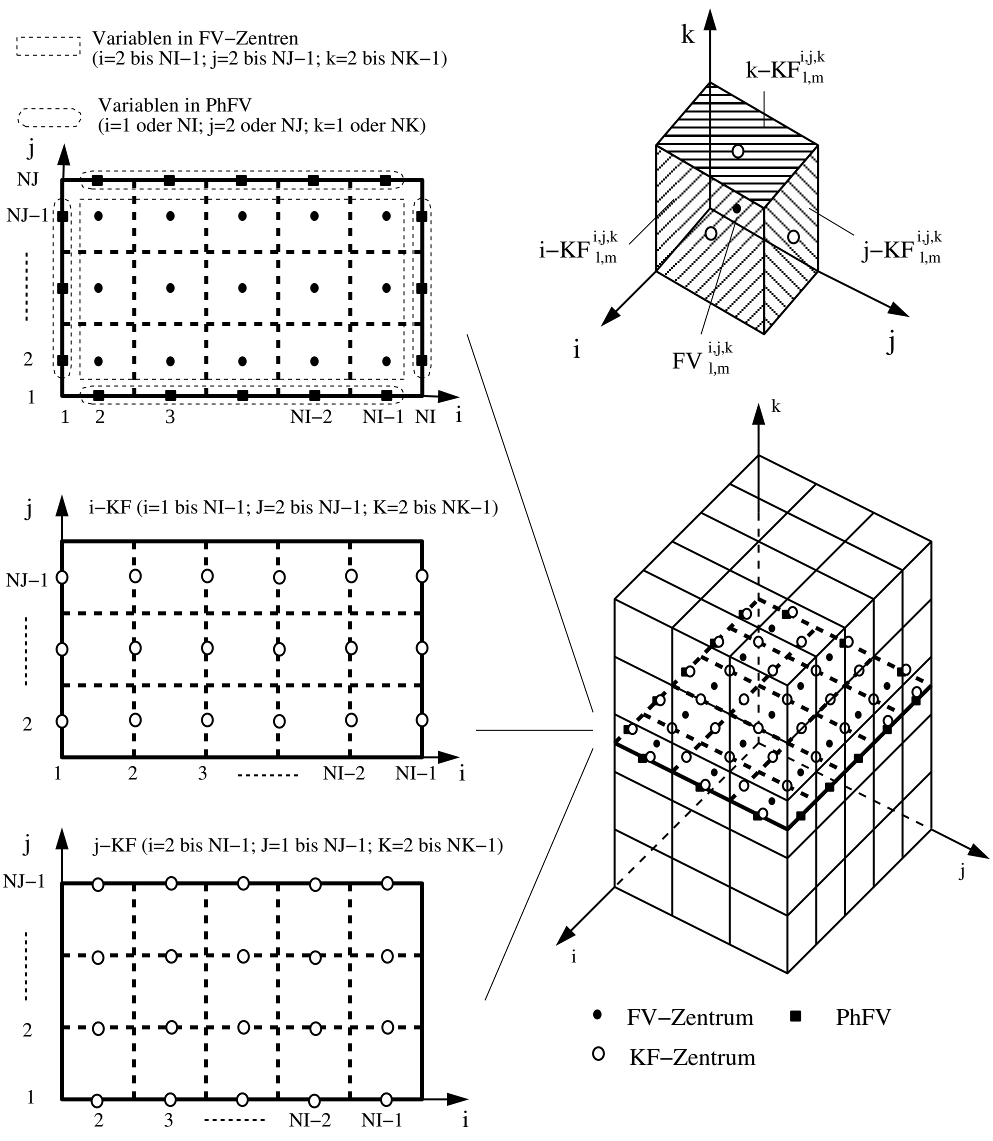



Abbildung 5.1: Indizierung der FV–Größen und der KF–Größen (strukturierter Anteil)

Eine Sonderart der FV–Größen bilden die Gradienten einer Variablen im Bilanzvolumen. Sie werden in einem zweidimensionalen Datenfeld (z.B. `DU(ic,i3)` für $\nabla u$) gespeichert. Der zweite Index (`i3 = 1 bis 3`) zeigt an, ob die gespeicherte Größe der Gradient in x–, y– oder z–Richtung ist.

3. KF–Größen:

   Die im Simulationsprogramm benötigten flächenbezogenen Größen sind der Massenfluß und der geometrische Interpolationsfaktor.

   Eine KF–Größe ist sowohl für Kontrollflächen innerhalb eines Blocks (im folgenden Innere KF, InKF genannt) als auch für Kontrollfläche an einer Physikalischen Berandung (im folgenden PhKF genannt) in einem zweidimensionalen Datenfeld, z.B. für den Massenfluß in `FLUX(ifa,iafa)`, gespeichert. Der erste Laufindex `ifa` hat eine Dimensionierung von `MAXIJK` und wird durch `i1d(l,m,i,j,k)` indiziert. Der zweite Index `iafa(=1,2,3)` zeigt, ob die betreffende KF eine i–KF(`iafa=1`), j–KF(`iafa=2`) oder k–KF(`iafa=3`) ist (Bild 5.1).

   Eine i–KF mit der Indizierung $\mathrm{KF}_{\mathtt{l,m}}^{\mathtt{i,j,k,iafa=1}}$ ist die Kontrollfläche zwischen $\mathrm{FV}_{\mathtt{l,m}}^{\mathtt{i-1,j,k}}$ und $\mathrm{FV}_{\mathtt{l,m}}^{\mathtt{i,j,k}}$. Der gültige Indexbereich für i–KF im Gitterblock `m` auf der Gitterstufe `l` ist

   ```
   NI=NIGR(l,m), NJ=NJGR(l,m), NK=NKGR(l,m);
   i = 1 bis NI-1; j = 2 bis NJ-1; k = 2 bis NK-1,
   ```

   wobei der Bereich von `i = 2 bis NI-2` auf die InKF und der Bereich mit `i = 1 oder NI-1` auf die PhKF bezogen sind. Die Zuordnung von j–KF und k–KF sowie ihre gültigen Indexbereiche ergeben sich analog.

4. Die Koeffizienten des algebraischen Gleichungssystems:

   Der strukturierte Anteil der Koeffizientenmatrix ($A_W^P$, $A_E^P$, $A_S^P$, $A_N^P$, $A_B^P$, $A_T^P$ und $A_P^P$) ist in einem zweidimensionalen Datenfeld `AF(ic,idg)` gespeichert. Der Index `ic=i1d(l,m,i,j,k)` bezieht sich auf das Bilanzvolumen $\mathrm{FV}^P$ und hat die Dimensionierung `MAXIJK`. Der zweite Index `idg` zeigt auf die Diagonale der Koeffizientenmatrix. In `AF(ic,idg)` mit `idg = 1 bis 7` sind die Diagonalen nach der in obiger Klammer aufgelisteten Reihenfolge gespeichert. Der gültige Indexbereich ist:

   ```
   l = 1 bis NBLO; m = 1 bis NGR;
     mit NI=NIGR(l,m), NJ=NJGR(l,m), NK=NKGR(l,m):
     i = 2 bis NI-1; j = 2 bis NJ-1; k = 2 bis NK-1.
   ```

   Alle Koeffizienten, die formal mit Variablen an PhFV multipliziert werden, sind nicht besetzt. Sie werden aus programmtechnischen Gründen gleich Null gesetzt.

### 5.1.2 Unstrukturierter Anteil

Aufgrund der unstrukturierten Blockverbindungsflächen (BiKF) ist ein Teil der Daten unstrukturiert gespeichert. Es sind dies die Ortskoordinaten der Eckpunkte aller BiKF, die für die BiKF benötigten flächenbezogenen Größen (BiKF–Größen) und der unstrukturierte Anteil der Koeffizientenmatrix. Die Gesamtanzahl von Blockverbindungsflächen wird im Simulationsprogramm mit `MAXBIF` bezeichnet.

Die Ortskoordinaten der Eckpunkte von BiKF sind in den Datenfeldern `X, Y, Z` hinter den strukturiert angeordneten Ortskoordinaten der Gitterpunkte gespeichert. Die Länge des zusätzlich belegten Speicherbereichs ist gleich der vierfachen Gesamtanzahl von BiKF (`4 x MAXBIF`).

Eine BiKF–Größe ist in einem zusätzlichen, eindimensionalen Datenfeld mit eigenem Namen (z.B. `FLUBI(ifa)` für Massenfluß) gespeichert. Der Laufindex `ifa` hat die Dimensionierung `MAXBIF`.

Der unstrukturierte Anteil der Koeffizientenmatrix wird in zwei Datenfeldern (`AL(ifa), AR(ifa)`) gespeichert. Die Dimensionierung des Laufindex `ifa` entspricht ebenfalls der Anzahl aller BiKF `MAXBIF`. In `AL(ifa)` ist der Koeffizient $A_R^L$ der Gleichung des links an die BiKF–`ifa` grenzenden $FV^L$, der mit der Variable von dem rechtsangrenzenden $FV^R$ multipliziert werden soll, abgelegt. `AR(ifa)` stellt das passende Gegenstück ($A_L^R$) dar.

## 5.2 Datenzugriff und Indexzeiger

Im Hinblick auf den Datenzugriff können alle Rechenoperationen auf einer Gitterstufe in Rechenoperationen für finite Bilanzvolumina (im folgenden FV–orientierte Rechenoperationen genannt) und Rechenoperationen für Kontrollfächen (im folgenden KF–orientierte Rechenoperationen genannt) unterteilt werden. Die einzige Ausnahme bildet dabei die Ermittlung der Residuen bei der Lösung des algebraischen Gleichungssystems. Sie stellt eine Kombination von beiden Rechenoperationsarten dar.

### 5.2.1 Rechenoperationen für finite Bilanzvolumina

Mit den FV–orientierten Rechenoperationen werden Volumenintegrationsterme bestimmt. Da alle Bilanzvolumina strukturiert angeordnet sind, genügt dafür ein strukturierter Ablauf mit dem Laufindex `ic=i1d(l,m,i,j,k)`:

```
m = 1 bis NBLO:
  { IJKST=IJKGR(l,m); NI=NIGR(l,m); NJ=NJGR(l,m); NK=NKGR(l,m); NJK=NJ*NK;
    i = 2 bis NI-1, j = 2 bis NJ-1, k = 2 bis NK-1:
    { ic = IJKST + (i-1)*NJK + (j-1)*NK + k ;
      Rechenoperationen...  }  } .
```

### 5.2.2 Rechenoperationen für Kontrollflächen

Bei Rechenoperationen einer Kontrollflächenbilanzierung werden sowohl die KF–Größen der betreffenden Kontrollfläche $\mathrm{KF}^f$ als auch die FV–Größen der beiden Bilanzvolumina ($\mathrm{FV}^L$, $\mathrm{FV}^R$) benötigt. Eine Kontrollfläche innerhalb eines Gitterblocks (InKF) oder an einem physikalischen Rand (PhKF) wird durch das Indexpaar `(ifa,iafa)` identifiziert, eine Blockverbindungsfläche (BiKF) mit dem Laufindex `ifa`. Zur Bestimmung des ebenfalls benötigten KF–Vektors $\underline{\delta A}$ kommen die Ortskoordinaten der vier Eckpunkte der Kontrollfläche hinzu. Der Datenzugriff wird mit den jeder Kontrollfläche zugeordneten Indexzeigern

```
icl:  Laufindex des linksangrenzenden Bilanzvolumens;
icr:  Laufindex des rechtsangrenzenden Bilanzvolumens;
iv1, iv2, iv3, iv4:  Laufindizes der vier Eckpunkte
```

realisiert. Zusätzlich müssen hier die tangierten Koeffizienten des algebraischen Gleichungssystems ($A_P^L$, $A_R^L$, $A_P^L$, $A_R^L$) identifiziert werden.

#### Kontrollflächen innerhalb eines Gitterblocks (InKF)

Für KF–Operationen innerhalb eines Gitterblocks können die Differenzbeträge zwischen dem Index `ifa` und den Indizes `icl,icr,iv1,iv2,iv3,iv4` je nach i–, j– oder k–KF (`iafa=1,2,3`) für einen Gitterblock einheitlich berechnet werden. Die hier tangierten Koeffizienten $A_P^L$, $A_R^L$ bzw. $A_P^R$, $A_L^R$ werden in `AF(icl,7)` und `AF(icl,idgl)` bzw. `AF(icr,7)` und `AF(icr,idgr)` gespeichert. Die Indexzeiger `idgl, idgr` hängen nur von `iafa` ab.

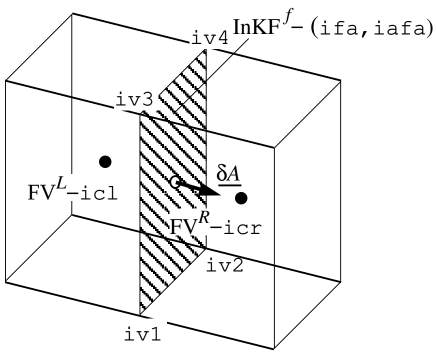



Abbildung 5.2: Indizierung bei der Bilanzierung an einer inneren KF (InKF)

Es gilt nun folgender Ablauf, um alle InKF der Gitterstufe `l` zu erfassen:

```
m = 1 bis NBLO,
  mit IJKST=IJKGR(l,m); NI=NIGR(l,m); NJ=NJGR(l,m); NK=NKGR(l,m); NJK=NJ*NK:
```

```
{ iafa = 1 bis 3, mit idgl = 2*iafa, idgr = 2*iafa - 1:
    { Berechnung der Indexdifferenzen icdl,icdr,ivd1,ivd2,ivd3,ivd4 und
      der Obergrenze des logischen Indexbereichs der InKF NIF, NJF, NKF:
      iafa=1: ivd1=-NK-1,   ivd2 =-1,   ivd3=-NK,  ivd4=0,
              icdl=0,       icdr = NJK, NIF =NI-2, NJF =NJ-1, NKF=NK-1;
      iafa=2: ivd1=-1-NJK,  ivd2 =-NJK, ivd3=-1,   ivd4=0,
              icdl=0,       icdr = NK,  NIF =NI-1, NJF =NJ-2, NKF=NK-1;
      iafa=3: ivd1=-NJK-NK, ivd2 =-NK,  ivd3=-NJK, ivd4=0,
              icdl=0,       icdr = 1,   NIF =NI-1, NJF =NJ-1, NKF=NK-2;
      i = 2 bis NIF, j = 2 bis NJF, k = 2 bis NKF:
        {  ifa = IJKST + (i-1)*NJK + (j-1)*NK + k;
           icl = ifa + icdl; icr = ifa + icdr;
           iv1 = ifa + ivd1; iv2 = ifa + ivd2;
           iv3 = ifa + ivd3; iv4 = ifa + ivd4;
           Rechenoperationen...  }  }  } .
```

### Kontrollflächen zwischen den Gitterblöcken (BiKF)

Die Blockverbindungsflächen (BiKF) sind durch Indexzeiger segmentweise zusammengefaßt. Die Anzahl der BiKF–Segmente wird mit `MAXBI` und die Anzahl der BiKF auf allen Gitterstufen mit `MAXBIF` bezeichnet. Jedes Segment (mit Laufindex `lbi; lbi = 1 bis MAXBI` ) enthält eine Anzahl von zusammenhängenden BiKF. `IBIST(l,lbi)+1` und `IBILZ(l,lbi)` stellen die Startadresse bzw. die Anzahl der BiKF des Segments dar.

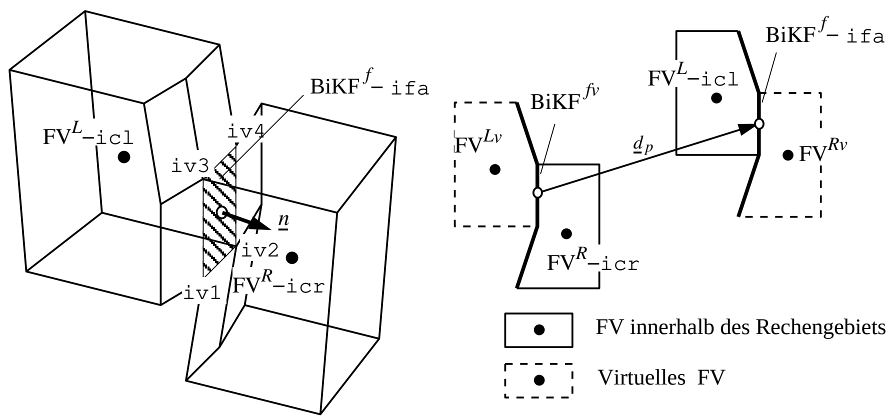



Abbildung 5.3: Indizierung der BiKF einschließlich der KF an den periodischen Rändern

Wenn sich BiKF an einem Rand mit periodischer Randbedingung befinden, werden sie so zu Segmenten zusammengefaßt, daß alle BiKF$^f$ innerhalb eines Segments einen einheitlichen Richtungsvektor $\underline{d}_p$ haben. Es ist hier nur Speicherplatz für BiKF$^f$ mit dem Laufindex `ifa` erforderlich. Der Richtungsvektor $\underline{d}_p$ für jedes Segment (`DPIX(lbi), DPIY(lbi), DPIZ(lbi)`) und die Druckdifferenz $dp_p$ (`DPDROP(lbi)`) werden bei der Programminitialisierung eingelesen bzw. berechnet. Für jede BiKF mit dem Index `ifa` werden die Indizes der FV$^L$ `INBI(1,ifa)`, FV$^R$ `INBI(2,ifa)` und die Indizes ihrer 4 Eckpunkte (`IVBI(1 bis 4, ifa)`) bzw. der geometrische Interpolationsfaktor `FGBI(ifa)` von einem Hilfsprogramm generiert und in der Initialisierungsphase des Programms eingelesen. Die Koeffizienten $A_P^L$, $A_R^L$ und $A_P^R$, $A_L^R$ sind in `AF(icl,7)` und `AL(ifa)` bzw. `AF(icr,7)` und `AR(ifa)` gespeichert. Mit dem folgenden Ablauf lassen sich alle Blockverbindungsflächen auf einer Gitterstufe `l` erfassen:

```
lbi = 1 bis MAXBI:
  { ifa = IBIST(l,lbi)+1 bis IBIST(l,lbi)+IBILZ(l,lbi):
    { icl = INBI(1,ifa);  icr = INBI(2,ifa);
      iv1 = IVBI(1,ifa);  iv2 = IVBI(2,ifa);
      iv3 = IVBI(3,ifa);  iv4 = IVBI(4,ifa);
      Rechenoperationen....  } }
```

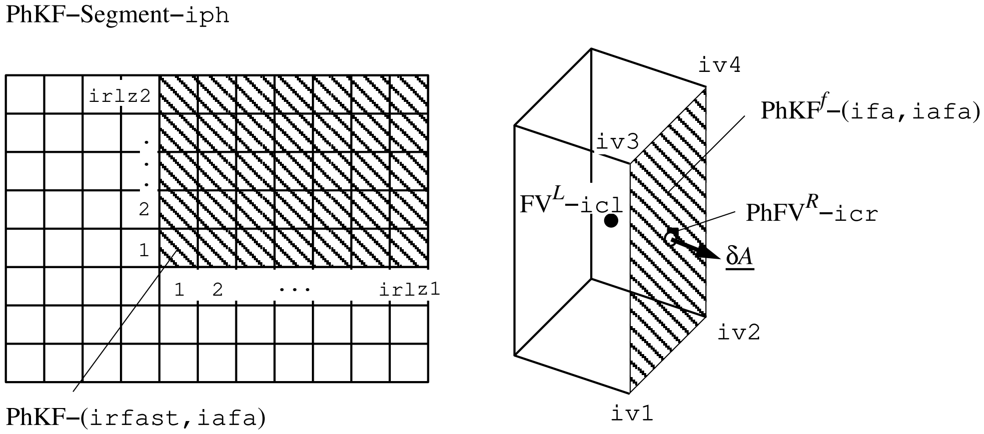
**Kontrollflächen an den physikalischen Berandungen**

Für die Kontrollflächen an den physikalischen Berandungen (PhKF) ist der KF–Vektor $\underline{\delta A}$ stets so definiert, daß er immer vom Rechengebietsinnern nach außen zeigt. Der Zugriff auf PhKF geschieht segmentweise mit der Numerierung `iph`. Auf einer Gitterstufe `l` sind die PhKF–Segmente nach der Art der Randbedingung `irart` zusammengefaßt. `INRST(l,irart)+1` und `INRLZ(l,irart)` sind die Startnumerierung und die Anzahl der PhKF–Segmente der Randbedingungsart `irart` mit

```
irart=  1:   Eintritt
        2:   Austritt
        3:   Symmetrie
        4:   Wand mit vorgegebener Temperatur
        5:   adiabate Wand
        6:   Wand mit vorgegebenem Waermefluss
        7:   alle Wandsegmente ( 4 & 5 & 6 )
        8:   vorgegebener Druck
```

Die Indizierung der PhKF innerhalb eines Segments hat eine zweidimensionale Struktur. Für den Zugriff auf einzelne PhKF werden folgende Indexzeiger für jedes PhKF–Segment festgelegt:

```
IJKSTR(iph)  : ifa - Index der ersten PhKF;
IARFA(iph)=1 : Rand mit i = 1 ,   =2 : i = NI-1,
```




irfast=IJKRST(iph)
irlz1 =IRLZ  (1,iph)
irlz2 =IRLZ  (2,iph)

Abbildung 5.4: Segment von physikalischen KF (PhKF) und die Indizierung bei der Bilanzierung einer PhKF

```
         =3 :          j = 1 ,   =4 : j = NJ-1,
         =5 :          k = 1 ,   =6 : k = NK-1;
IRLZ(1,iph)  : Dimension des PhKF-Segments in erster Indexrichtung;
IRLZ(2,iph)  : Dimension des PhKF-Segments in zweiter Indexrichtung;
IRST(1,iph)  : ''Offset'' in erste Indexrichtung;
IRST(2,iph)  : ''Offset'' in zweite Indexrichtung;
IDPHFA(1,iph): Indexdifferenz zwischen ifa von PhKF und
               ihrem angrenzenden FV (icl) ;
IDPHFA(2,iph): Indexdifferenz zwischen ifa von PhKF und
               ihrem angrenzenden PhFV (icr) ;
IDPHFA(3,iph): Indexdifferenz zwischen ifa und iv1;
IDPHFA(4,iph): Indexdifferenz zwischen ifa und iv2;
IDPHFA(5,iph): Indexdifferenz zwischen ifa und iv3;
IDPHFA(6,iph): Indexdifferenz zwischen ifa und iv4.
```

Die Indexzeiger werden vom Hilfsprogramm generiert und am Anfang des Simulationsprogramms eingelesen. Folgender Ablauf wird für den Zugriff auf alle PhKF der Art `irart` auf Gitterstufe `l` festgelegt:

```
iph = INRST(l,irart)+1, INRST(l,irart)+INRLZ(l,irart):
  { irfast = IJKSTR(iph)   ; iafa   = (IARFA(iph)+1)/2;
    irlz1  = IRLZ(1,iph)   ; irlz2  = IRLZ(2,iph) ;
    irst1  = IRST(1,iph)   ; irst2  = IRST(2,iph) ;
```

```
icdl   = IDPHFA(1,iph) ; icdr   = IDPHFA(2,iph) ;
ivd1   = IDPHFA(3,iph) ; ivd2   = IDPHFA(4,iph) ;
ivd3   = IDPHFA(5,iph) ; ivd4   = IDPHFA(6,iph) ;
i1 = 1 bis irlz1, i2 = 1 bis irlz2:
{  ifa = irfast + (i1-1)*irst1 + (i2-1)*irst2
   icl = ifa + icdl ; icr = ifa + icdr ;
   iv1 = ifa + ivd1 ; iv2 = ifa + ivd2 ;
   iv3 = ifa + ivd3 ; iv4 = ifa + ivd4 ;
   Rechenoperationen....  } }
```

### 5.2.3 Berechnung der Residuen beim Multiblock–SIP–Verfahren

Bei der Durchführung des in Kapitel 3.7.2 beschriebenen SIP–Verfahrens zur Lösung des algebraischen Gleichungssystems ist ein Rechenschritt notwendig, bei dem das Residuum für die Gleichung eines einzelnen FV bestimmt werden muß:

$$\underline{R}_m = \underline{S}_m - \sum_{n=1}^{NBLO} \underline{\underline{A}}_m^n \cdot \underline{\phi}_n \ , \ m = 1 \text{ bis } \texttt{NBLO} \ .$$

Die Koeffizientenmatrix besteht wegen der Anwendung auf Multiblockgitter aus dem strukturierten Anteil $\underline{\underline{A}}_m^m$ (in `AF` FV–orientiert gespeichert) und dem unstrukturierten Anteil $\underline{\underline{A}}_m^n (n \neq m)$ (in `AL` und `AR` BiKF–orientiert gespeichert). $\underline{\phi}$ und $\underline{S}$ sind die als `PHI` bzw. `S` FV–orientiert gespeicherte Lösungsvariable und die rechte Seite. Die Bestimmung des Residuenvektors $\underline{R}_m$(in `RES` FV–orientiert gespeichert) besteht wegen der unterschiedlichen Speicherstruktur der Koeffizientenmatrix aus zwei Schritten:

1. Die FV–orientierte Operation zur Bestimmung von $\underline{S}_m - \underline{\underline{A}}_m^m \cdot \underline{\phi}_m$:

```
m = 1 bis NBLO ,
  mit IJKST=IJKGR(l,m); NI=NIGR(l,m); NJ=NJGR(l,m); NK=NKGR(l,m); NJK=NJ*NK:
  { i = 2 bis NI-1, j = 2 bis NJ-1, k = 2, NK-1:
    { ic = IJKST + (i-1)*NJK + (j-1)*NK + k ;
      icw = ic - NJK; ice = ic + NJK;
      ics = ic -  NK; icn = ic +  NK;
      icb = ic -   1; ict = ic +   1;
      RES(ic) =   AF(ic,1) PHI(icw) + AF(ic,2) PHI(ice)
                + AF(ic,3) PHI(ics) + AF(ic,4) PHI(icn)
                + AF(ic,5) PHI(icb) + AF(ic,6) PHI(ict)
                - AF(ic,7) PHI(ic)  + S(ic) .  } }
```

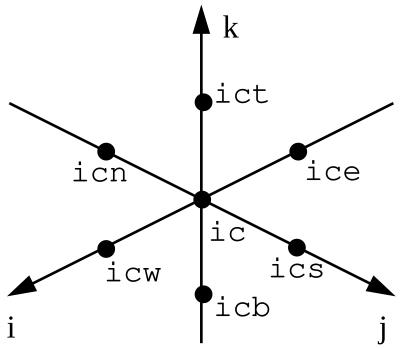



Abbildung 5.5: Indexbezeichung bei der FV–orientierten Rechenoperation während der Durchführung des SIP–Verfahrens

Hier sind außer dem Index `ic` für das betreffende FV zusätzlich die Indizes `icw, ice, ics, icn, icb, ict` seiner Nachbar–FV innerhalb eines Gitterblocks (nach der relativen "geographischen" Position benannt) zu bestimmen. Diese Indizes werden bei anderen FV–orientierten Rechenoperationen während der Durchführung des SIP–Verfahrens benötigt und mit der gleichen Formel bestimmt.

2. Zusätzliche Glieder aus $-\sum_{n=1}^{NBLO} \underline{\underline{A}}^n_m \cdot \underline{\phi}$ werden KF–orientiert ausgeführt und jeweils zu den Residuen der beiden angrenzenden FV hinzuaddiert:

```
lbi = 1 bis MAXBI
  { ifa = IBIST(1,lbi) + 1 bis IBIST(1,lbi) + IBILZ(1,lbi)
      { icl = INBI(1,ifa); icr = INBI(2,ifa);
        RES(icl) = RES(icl) + AL(ifa) PHI(icr);
        RES(icr) = RES(icr) + AR(ifa) PHI(icl).  } }
```

## 5.3 Datenstruktur und Datenzugriff bei BiKF–orientierten Rechenoperationen in der parallelen Programmversion

Bei der parallelen Programmversion wird jedem separat ablaufenden Prozeß für die ihm zugeteilten Gitterblöcke, wie in Kapitel 5.1 beschrieben, Speicherplatz zur Verfügung gestellt.
Die Blockverbindungsflächen in einem Rechenprozeß werden programmtechnisch bedingt in drei Gruppen unterteilt:

1) Interne BiKF, deren beide angrenzende FV diesem Prozeß zugeteilt sind. Die interne BiKF entstehen z.B. durch Verarbeitung von mehreren Gitterblöcken in einem Prozeß.

2) "Linksorientierte" BiKF, deren linksangrenzendes FV diesem Prozeß zugeteilt sind.

3) "Rechtsorientierte" BiKF, deren rechtsangrenzendes FV diesem Prozeß zugeteilt sind.

Bei einer BiKF–Größe sind für alle drei Gruppen Speicherplätze reserviert. Außer der gesamten Anzahl (`MAXBI`) der vom Prozess betroffenen BiKF–Segmente sind die Anzahl der Segmente mit interner BiKF (`MBII`), die Anzahl der Segmente mit linksorientierter BiKF (`MBIL`) und die Anzahl der Segmente mit rechtsorientierter BiKF (`MBIR`) für jeden Prozeß registriert. Die Speicherplätze gleichartiger BiKF–Segmente liegen zusammen.

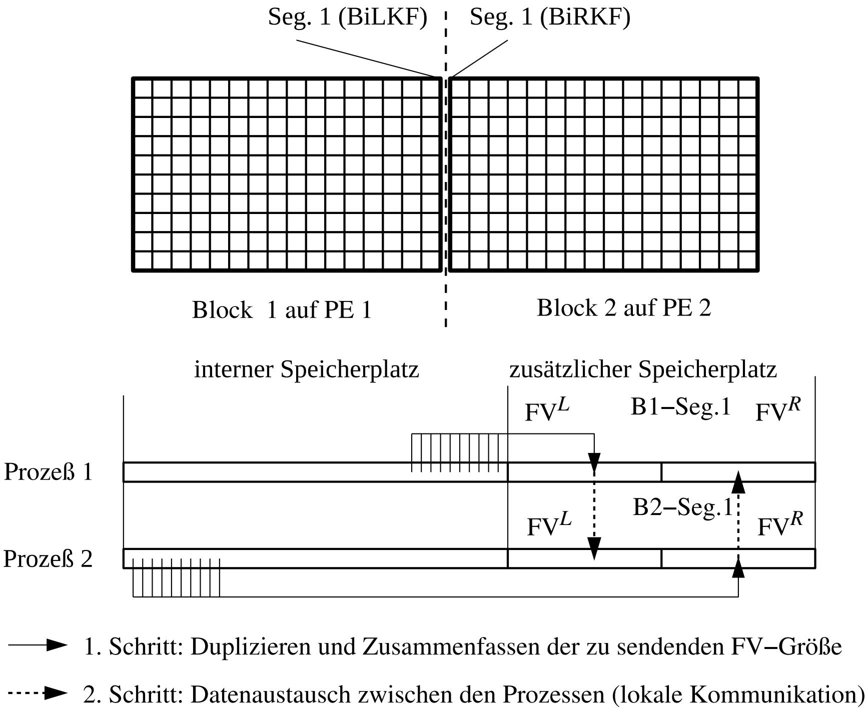



Abbildung 5.6: Datenzugriff bei Rechenoperationen für BiKF auf Parallelrechnern

Für den Datenaustausch zwischen den Prozessen wird zusätzlicher Speicherplatz belegt. Davon betroffen sind die FV–Größen in den an eine BiKF angrenzenden FV. Der zusätzliche Speicherplatz wird hinter dem strukturierten Speicherbereich (im folgenden als interner Speicherbereich bezeichnet) der jeweiligen Variable belegt. Obwohl im zusätzlichen Bereich die FV–Größe gespeichert werden soll, ist er dennoch BiKF–orientiert organisiert. Die Dimension des zusätzlich belegten Speicherbereiches entspricht der zweifachen Anzahl `MAXBFX` aller in einem Prozeß befindlichen links– und rechtsorientierten BiKF. Es steht Speicherplatz zum Zusammenfassen und Empfangen von auszutauschenden FV–Größen bereit, gleichfalls für die zusätzliche Dimensionierung des ersten Laufindex der Gradienten. Für interne Blockverbindungsflächen ist kein zusätzlicher Speicherplatz für eine FV–Größe notwendig.

Der zusätzliche Speicherplatz ist wie die BiKF–Größen segmentweise zusammengefaßt. In einem

Segment liegen nur die zusammenliegenden BiKF, deren angrenzende $FV^L$ oder $FV^R$ einheitlich von einem anderen Prozeß bearbeitet werden sollen.
Für jedes BiKF–Segment werden die Indexzeiger `IBIST, IBILZ` und für jede BiKF die Indexzeiger `INBI, IVBI` wie bei dem sequentiellen Programm vom Hilfsprogramm generiert und sind als Eingabedaten einzulesen. Bei der internen BiKF zeigen beide Indizes `icl = INBI(1,ifa)` und `icr = INBI(2,ifa)` auf die Speicheradresse von $FV^L$ und $FV^R$ im internen Speicherbereich. Da beide FV dem Prozeß zugeteilt sind, kann bei den BiKF–orientierten Rechenoperationen auf die FV–Größe von $FV^L$ und $FV^R$ direkt zugegriffen werden. Bei der linksorientierten BiKF zeigt der Index `icl` weiterhin auf $FV^L$ , der Index `icr` dagegen auf die Speicheradresse im zusätzlichen Speicherbereich. Das angrenzende $FV^R$ ist einem anderen Prozeß zugeteilt, damit ist die gespeicherte FV–Größe nicht direkt ansprechbar. Bei der rechtsorientierten BiKF ist es umgekehrt.
Bevor BiKF–orientierte Operationen für nicht interne BiKF gestartet werden können, muß der Datenaustauch zwischen den Prozessen durchgeführt werden. Der Datenaustauschvorgang geschieht in zwei Schritten (siehe Bild 5.6):

1. Duplizieren und Zusammenfassen der auszutauschenden FV–Größen. Für linksorientierte BiKF (BiLKF im Bild) werden sie durch `icl` und für rechtsorientierte BiKF (BiRKF im Bild) durch `icr` angezeigt. Sie werden in jeweils segmentweise zusammengefaßte, zusätzliche Speicherbereiche kopiert.

2. Lokale Kommunikation zwischen den Prozessen. Die detaillierte Durchführungsmethode ist in Kapitel 4.2 erklärt.

Bei den anschließenden Rechenoperationen an den BiKF wird darauf geachtet, daß die Wertzuweisung für die Größen mit den Indizes `icl, icr` nur stattfindet, wenn ihre Speicheradresse im internen Speicherbereich liegt. Bei interner BiKF wird die Wertzuweisung für die Größe bei beiden Indizes durchgeführt. Bei linksorientierter BiKF ist sie nur für die FV–Größe mit dem Index `icl` auszuführen und bei rechtsorientierter BiKF ist für den Index `icr`.

Abschließend ist zu diesem Kapitel noch anzumerken, daß der Datenzugriff bei flächenbezogenen Rechenoperationen in einer "unstrukturierten" Art organisiert ist. Sowohl für strukturierte Kontrollflächen innerhalb eines Gitterblocks als auch für unstrukturierte Blockverbindungsflächen werden die sechs Indexzeiger `icl, icr, iv1, iv2, iv3, iv4` entweder berechnet oder aus vorab generierten Tabellen entnommen. Die anschließenden Rechenoperationen verwenden nur noch diese Indexzeiger. Mit einem System von standardisierten Programmeinzelteilen in Form von „INCLUDE“–Files können diese Indexzeiger bei Implementierung und Erweiterung einheitlich und fehlerfrei berechnet werden.

Für die Bearbeitung von physikalischen Randbedingungen sind die Indexzeiger unabhängig davon, an welcher Gitterblockberandung die betreffende Kontrollfläche liegt, einheitlich gestaltet und vorab generiert. Die Beschaffung dieser Indexzeiger geschieht ebenfalls mit den standardisierten „INCLUDE“–Files.

Für die zukünftige Erweiterung des Rechenprogramms auf hybride Gitter können die entwickelte Datenstruktur und Programmteile für die BiKF–orientierten Rechenoperationen ohne Modifikation auch für die Kontrollflächen im unstrukturierten Anteil des Rechengitters verwendet werden. Die notwendigen Modifikationen für das Rechenprogrammm bestehen dann unter anderem in der Erweiterung der Datenstruktur von FV–Größen und der Programmstruktur für die unstrukturierten Bilanzvolumina, in der Organisation der Indexzeiger für die unstrukturierten physikalischen Randflächen, sowie in der Implementierung eines geeigneten Gleichungslösers.

# Kapitel 6

# Programmvalidierung

In der folgenden Tabelle findet sich ein Überblick der Testfälle, die zur Programmvalidierung dienen:

| | Merkmale | | | | Experiment |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Rohrkrümmer | 3D | lam. & turb. | inkomp. | Taylor (1982) |
| 2 | Nischen | 3D | lam. | inkomp. | – |
| 3 | Rohr | 3D | turb. | inkomp. | Cheesewright (1990) |
| 4 | Rohr mit Querschnittsändrung | 3D | turb. | inkomp. | Davis (1992) |
| 5 | Kanal | 2D | lam. | komp., Stoß | Mason (1980) |
| 6 | Flügel | 3D | turb. | komp., Stoß | Schmitt (1979) |
| 7 | Flügel–Rumpf–Konfiguration | 3D | turb. | inkomp. | Devenport (1990) Ölcmen (1995) |

Tabelle 6.1: Übersicht der Testfälle

Bei der Validierung des Simulationsprogramms stehen folgende Gesichtspunkte im Vordergrund:

1) Funktionalität der Konvektionsschemata ⇒ Testfall 1 ;
2) Multiblockgitter mit unstrukturierten Blockverbindungflächen ⇒ Testfall 1 ;
3) Effizienz der Mehrgittermethode ⇒ Testfall 1, 2 ;
4) Parallele Effizienz ⇒ Testfall 1, 6, 7 ;
5) Funktionalität der kompressiblen Erweiterung ⇒ Testfall 5, 6 ;
6) Auswirkung der höherwertigen Turbulenzmodelle ⇒ Testfall 3, 4, 7 ;
7) Beschreibung von komplexen Strömungsphänomenen ⇒ Testfall 7 .

Bis auf eine Vergleichsrechnung im Testfall 1 wird das gradientenbasierte TVD–Schema GRADGR für QUICK ($\kappa = 0.5$) als Konvektionsschema verwendet.

## 6.1 Grundelemente des Verfahrens

Die ausgewählten numerischen Techniken und Turbulenzmodelle zur dreidimensionalen Strömungsberechnung sollen zuerst in Hinblick auf ihre allgemeine Funktionsfähigkeit anhand ausgewählten Strömungen in einem quadratischen Rohr mit $90^0$–Krümmung (Testfall 1) untersucht werden. Diese Strömungskonfiguration zeichnet sich durch starke Sekundärwirbel aus. Außerdem existieren experimentelle Ergebnisse als Validierungsbasis sowohl für die laminare als auch für die turbulente Strömung.

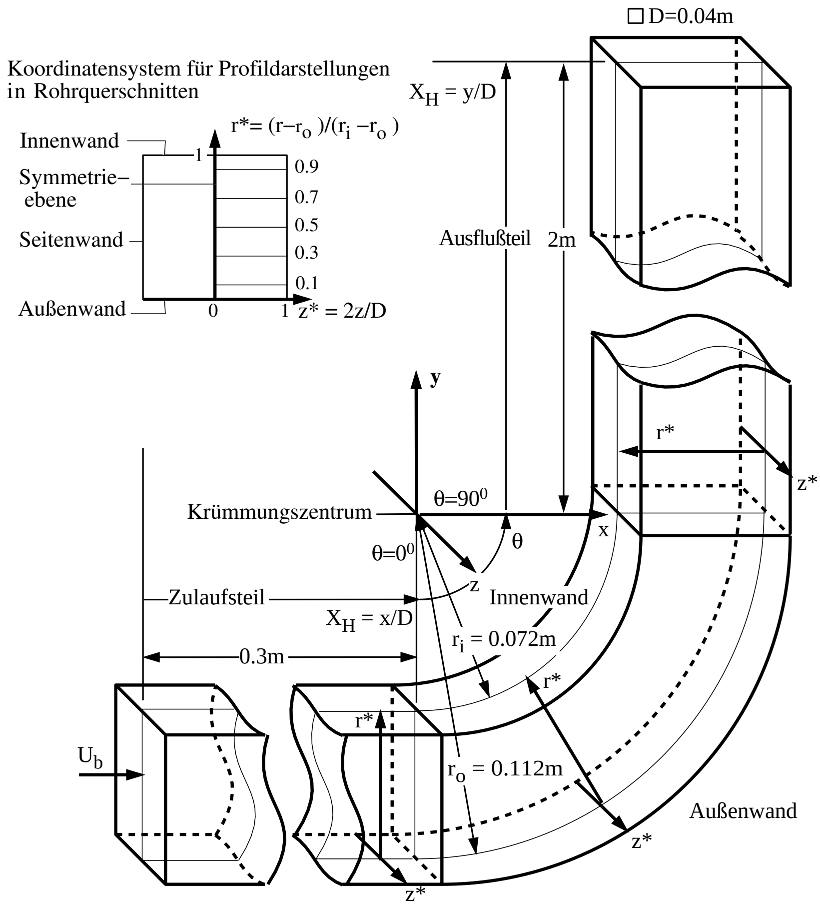



Abbildung 6.1: Geometrie des quadratischen Rohres mit $90^0$–Krümmung, Taylor u.a. 1982

Bild 6.1 zeigt die Rohrgeometrie des Experiments von Taylor u. a. (1982) , wobei eine laminare (Re=790) und eine turbulente Strömung (Re=40000) untersucht wurden. Die $Re$–Zahl ist mit der Einströmgeschwindigkeit $U_b$ und dem hydraulischen Durchmesser $D$ gebildet. Das Geschwindigkeitsprofil am Rohreingang wird entsprechend dem Experiment für die Strömungssimulation als Blockprofil mit der Geschwindigkeit $U_b$ angenommen.

### Laminare Strömung

Zur Simulation der laminaren Strömung wird zunächst ein Einblockgitter mit einer Anzahl von 24($z$–Richtung) $\times$ 24(radiale Richtung) $\times$ 60(axiale Richtung), insgesamt also 34560 Finiten Bilanzvolumina (FV) verwendet.

Die Rohrgeometrie wird in vollem Umfang durch das Gitter erfaßt. Die Gitterebenen sind in axialer Richtung im Bereich der Krümmung verdichtet (30 FV). Der Zulaufteil wird mit 20 FV und der senkrecht stehende Ausflußteil mit 10 FV in Hauptstömungsrichtung relativ grob aufgelöst. Das verwendete Einblockgitter im Rohrquerschnitt ist in Bild 6.6 dargestellt.

Auf diesem Gitter werden Rechnungen mit dem Upwind–Konvektionsschema erster Ordnung (UDS) und dem GRADGR–Schema (TVD) durchgeführt.

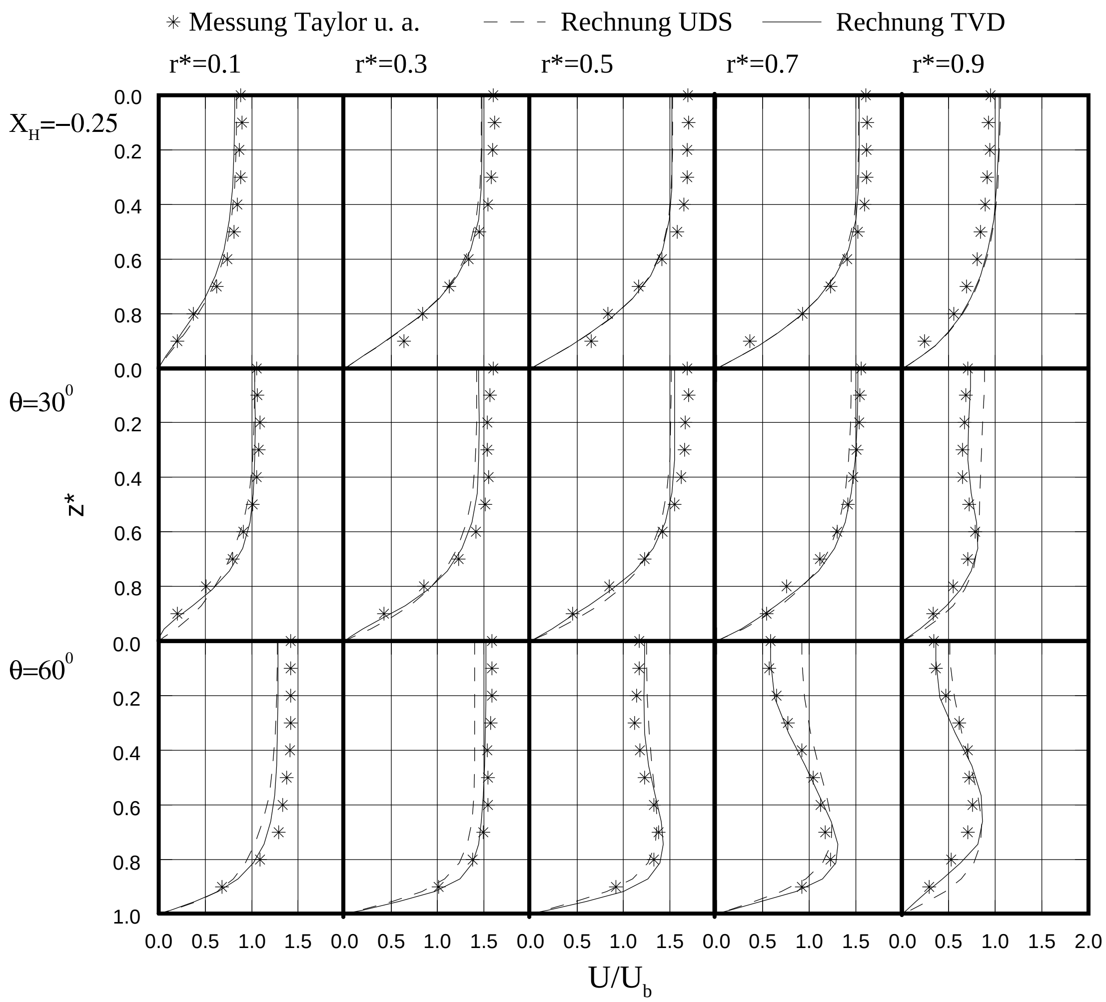



Abbildung 6.2: Laminare Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 790$) mit axialen Geschwindigkeitsprofilen $U/U_b$ in den Rohrquerschnitten $X_H = -0.25$, $\theta = 30^0$ und $\theta = 60^0$

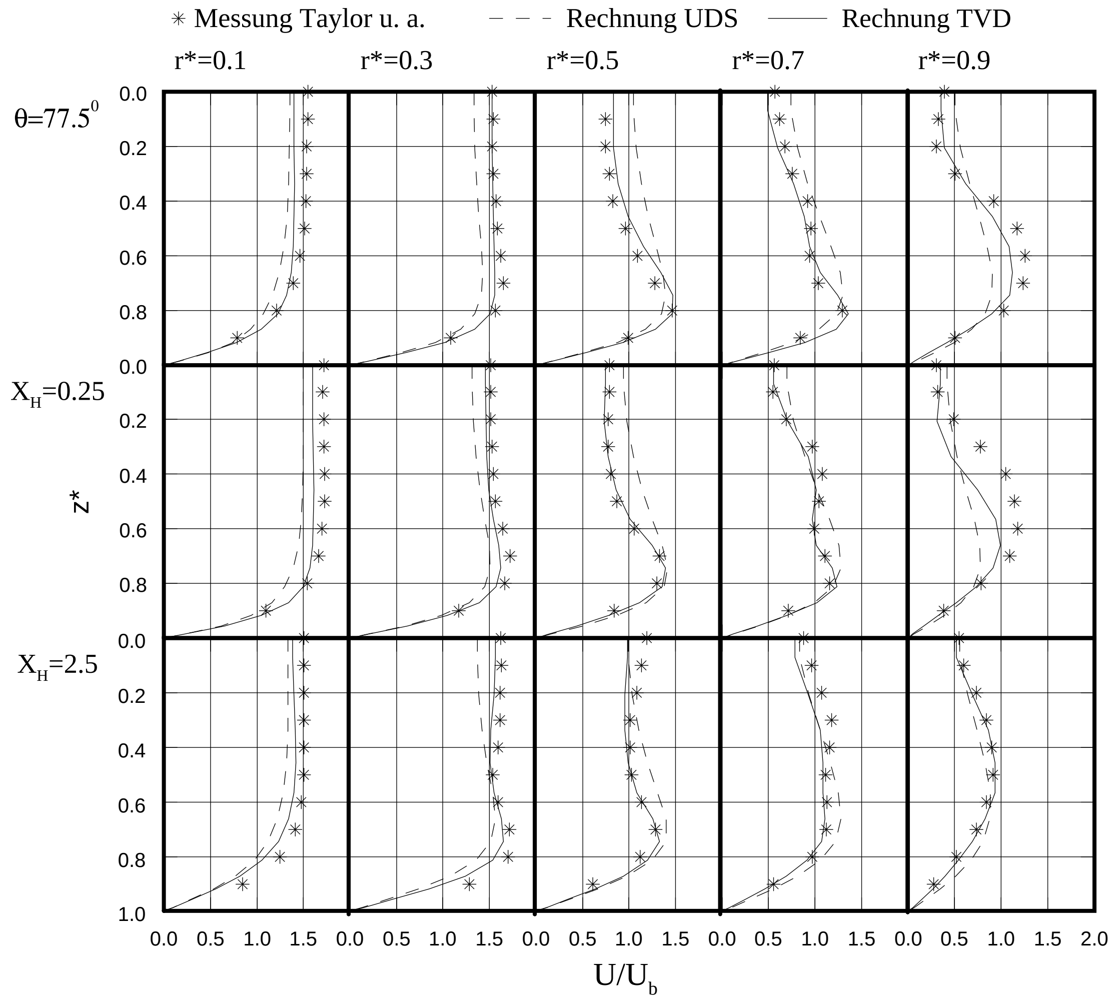



Abbildung 6.3: Laminare Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 790$) mit axialen Geschwindigkeitsprofilen $U/U_b$ in den Rohrquerschnitten $\theta = 77.5^0,\ X_H = 0.25,\ X_H = 2.5$

In den Bildern 6.2 bis 6.4 sind axiale und radiale Geschwindigkeitsprofile im Vergleich mit den Messungen dargestellt. Die Ergebnisse mit dem GRADGR–Schema stimmen mit den Meßdaten sehr gut überein, obwohl das eingesetzte Gitter relativ grob ist. Das Ergebnis mit dem Upwind–Schema zeigt, daß dieses Konvektionsschema zu viel numerische Diffusion in die Rechnung einbringt und damit die Geschwindigkeitsprofile „geglättet“ werden.

Die Isolinien der Axialgeschwindigkeit und die Vektorplots der Sekundärströmung in verschiedenen Rohrquerschnitten sind in Bild 6.5 dargestellt. Deutlich ist zu erkennen, daß in der am Anfang weitgehend zweidimensionalen Strömung starke axiale Wirbel durch die Rohrkrümmung erzeugt werden. Die Stelle mit der maximalen Axialgeschwindigkeit wandert sehr schnell von der Rohrmitte zur Krümmungsaußenseite. Die Sekundärströmung bewegt sich entlang der Rohrseitenwände in Richtung des Krümmungszentrums (Innenwand) und entlang der Symmetrieebene wieder zurück zur Außenwand. Diese großräumige axiale Wirbelstruktur teilt sich im hinteren

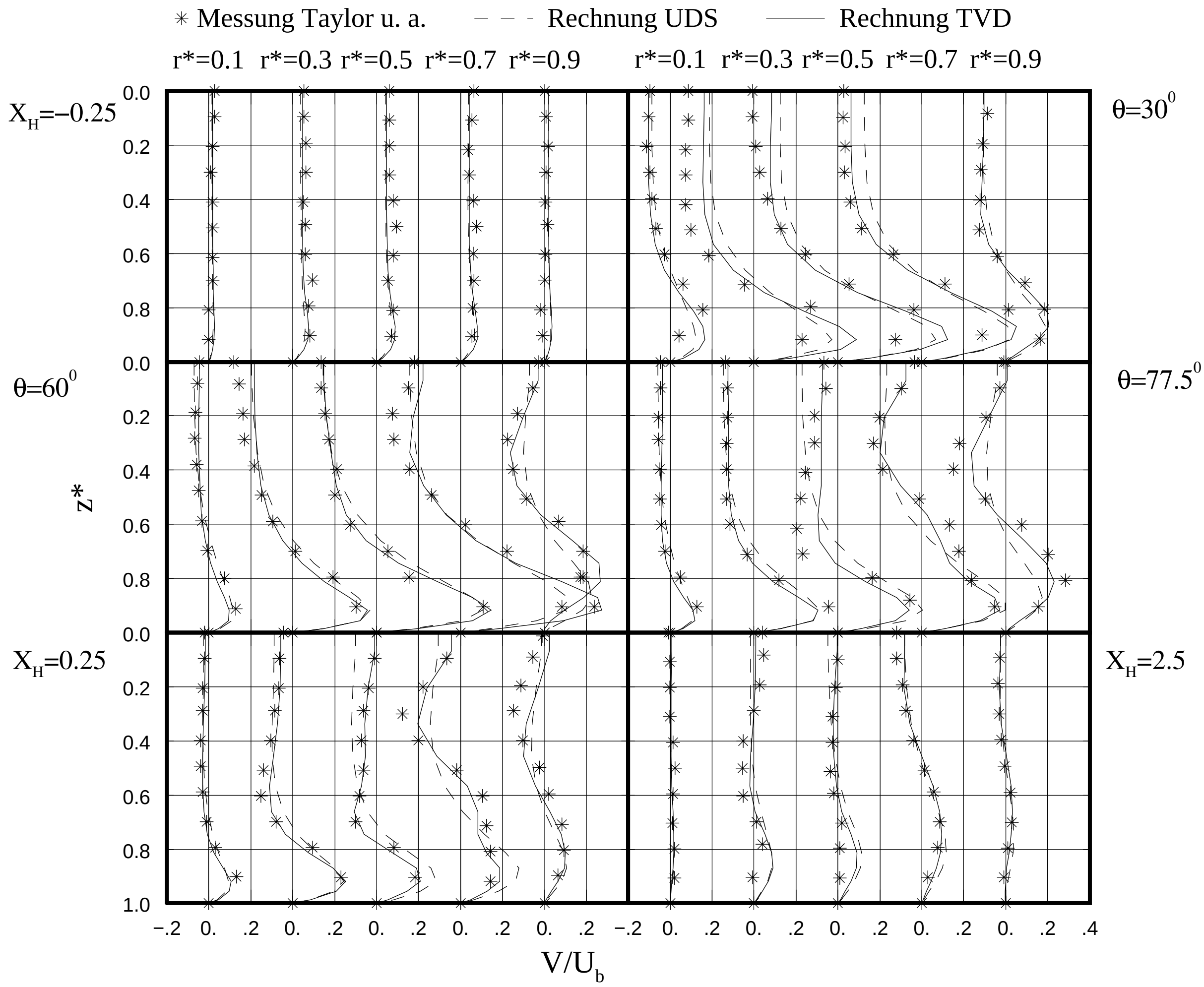



Abbildung 6.4: Laminare Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 790$) mit radialen Geschwindigkeitsprofilen ($V/U_b$) in den Rohrquerschnitten $X_H = -0.25,\ \theta = 30^0,\ \theta = 60^0,\ \theta = 77.5^0,\ X_H = 0.25,\ X_H = 2.5$

Teil der Krümmung in zwei Wirbel und setzt sich in den senkrecht stehenden Rohrteil hinein fort. Die maximale Radialgeschwindigkeit erreicht etwa bei $\theta = 60^0$ nahe der Seitenwand ca. 60% der Einströmgeschwindigkeit.

In der Vergleichsrechnung mit dem Upwind–Schema ist die Struktur der Sekundärströmung in der Krümmung und weiter stromab etwa gleichbleibend. Die im Experiment festgestellte Zweiteilung der axialen Wirbel kann mit diesem Konvektionsschema nicht wiedergegeben werden. Im Gegensatz dazu läßt sich die Entwicklung der axialen Wirbelstruktur mit dem GRADGR–Schema nachvollziehen.

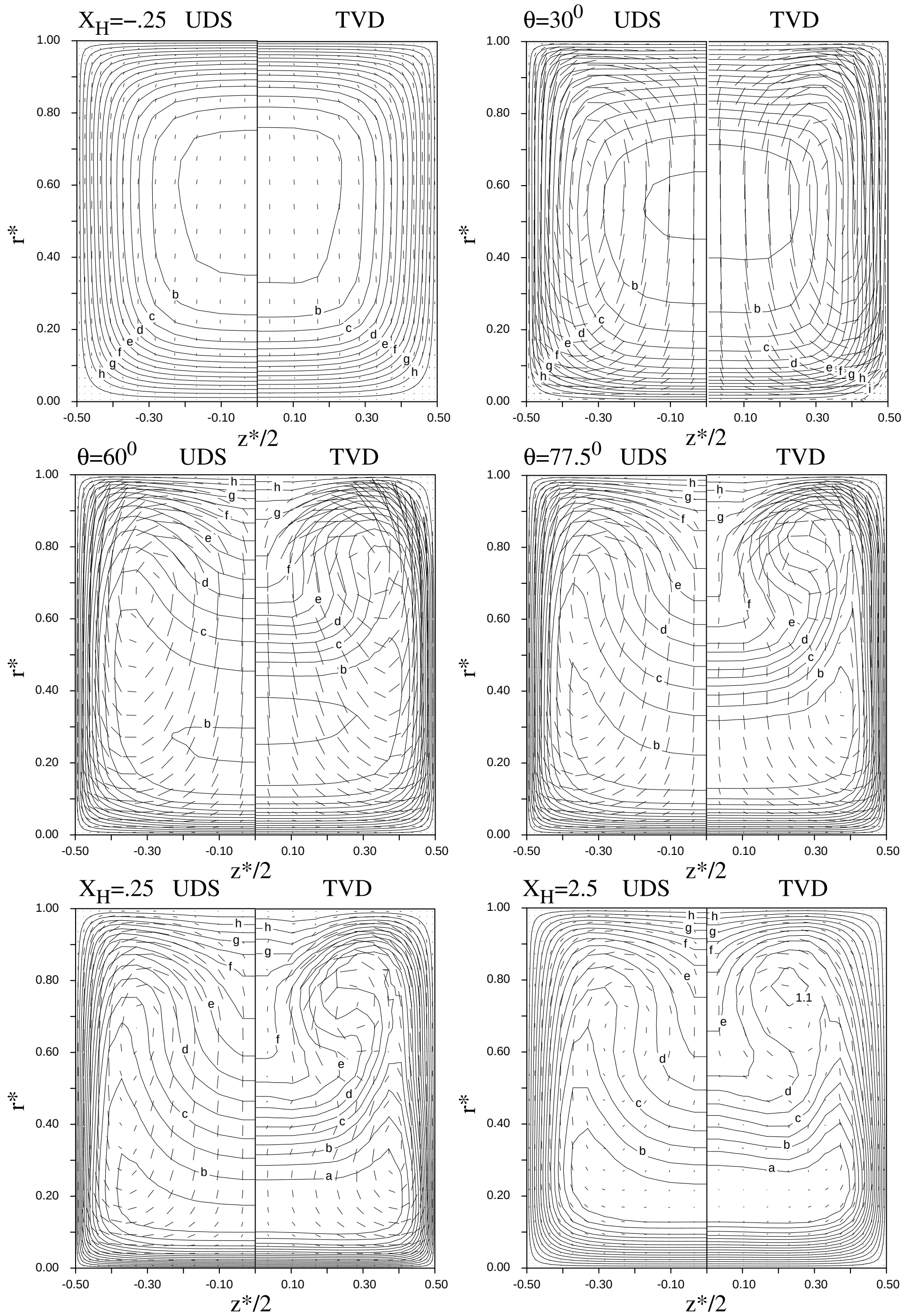



Abbildung 6.5: Laminare Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 790$) mit Isolinien der Axialgeschwindigkeit ($U/U_b$; $\Delta = 0.1$ mit a=1.6, b=1.4, c=1.2, d=1.0, e=0.8, f=0.6, g=0.4, h=0.2, i=0.0) und Vektorplots der Sekundärströmung

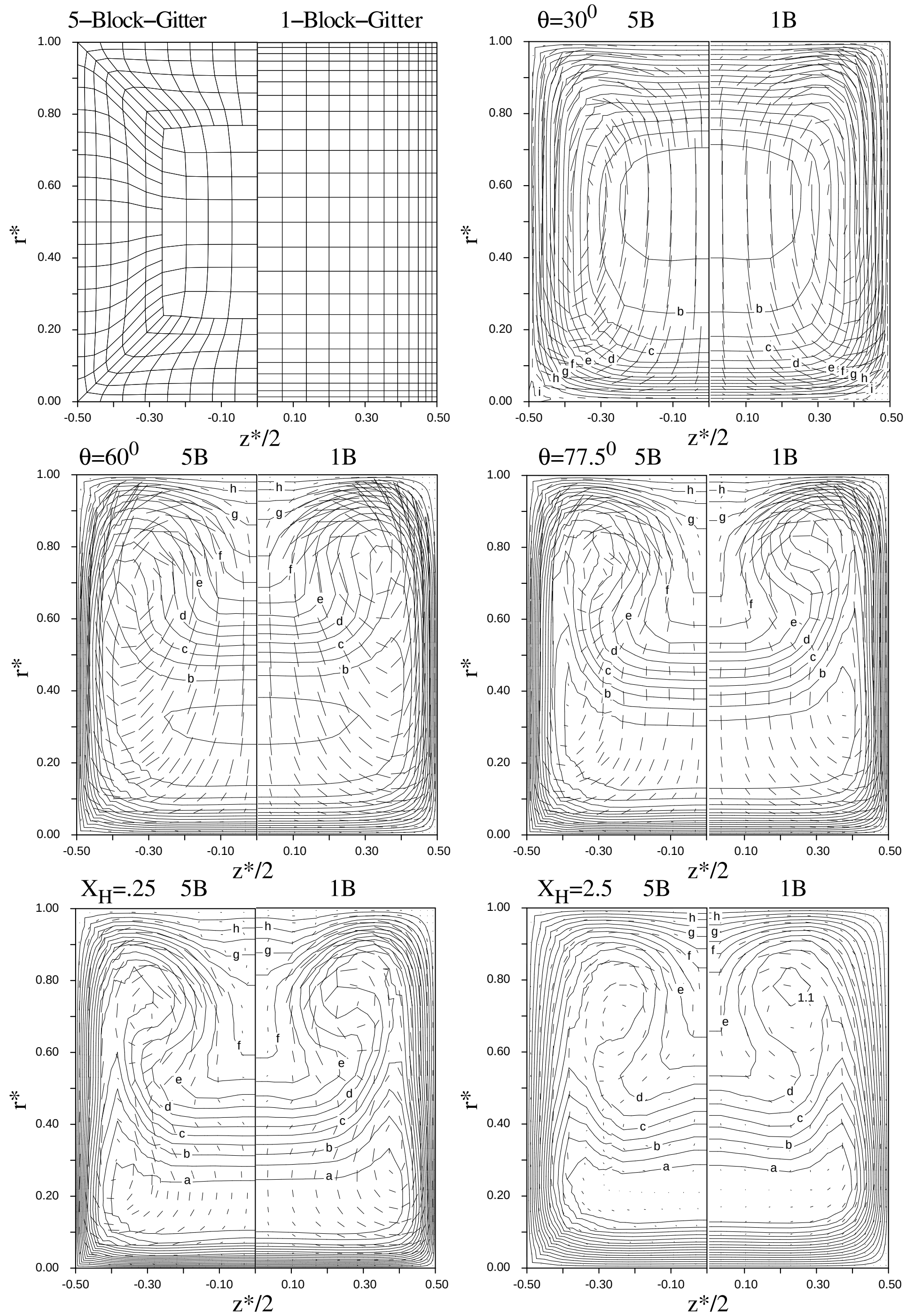



Abbildung 6.6: Laminare Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 790$) mit Isolinien der Axialgeschwindigkeit ($U/U_b$; $\Delta = 0.1$ mit a=1.6, b=1.4, c=1.2, d=1.0, e=0.8, f=0.6, g=0.4, h=0.2, i=0.0) und Vektorplots der Sekundärströmung

Um das Verhalten des Verfahrens auf Multiblockgittern mit unstrukturierten Blockverbindungsflächen zu untersuchen, wird ein 5–Block–Gitter (siehe Bild 6.6) zugrunde gelegt. Für diesen Fall sind als Ergebnisse Isolinien der Axialgeschwindigkeit und Vektorplots der Sekundärströmung an verschiedenen Rohrquerschnitten im Vergleich für 1– und 5–Block–Gitter dargestellt. Die gute Übereinstimmung der Ergebnisse ist eine Bestätigung der Allgemeingültigkeit der implementierten Approximationsformeln sowohl für strukturierte Kontrollflächen innerhalb eines Gitterblocks als auch für unstrukturierte Blockverbindungsflächen.

Zur Sicherstellung der korrekten programmtechnischen Umsetzung des Kommunikationsprinzips erfolgt zusätzlich eine Testrechnung mit dem 5–Block–Gitter auf einem Workstationcluster, welcher aus fünf vernetzten Pentium–PC's mit dem LINUX–Betriebssystem besteht. Das Ergebnis der parallelen Simulation ist identisch mit dem der Simulation auf einer Workstation. Aufgrund der langsamen Netzverbindung zwischen den PC's (Ethernet mit 10 Mbit/s) beträgt die Kommunikationszeit etwa 35% der gesamten Rechenzeit.

### Turbulente Strömung

Die turbulente Strömung mit der Reynoldszahl $Re = 40000$ wurde auf dem 1–Block–Gitter (24×24×60 FV) mit dem linearen (EVM) und dem quadratischen (ASM) $k$–$\varepsilon$–Turbulenzmodell berechnet. Wegen des groben Gitters werden die Turbulenzmodelle in ihrer HRe–Formulierung eingesetzt.

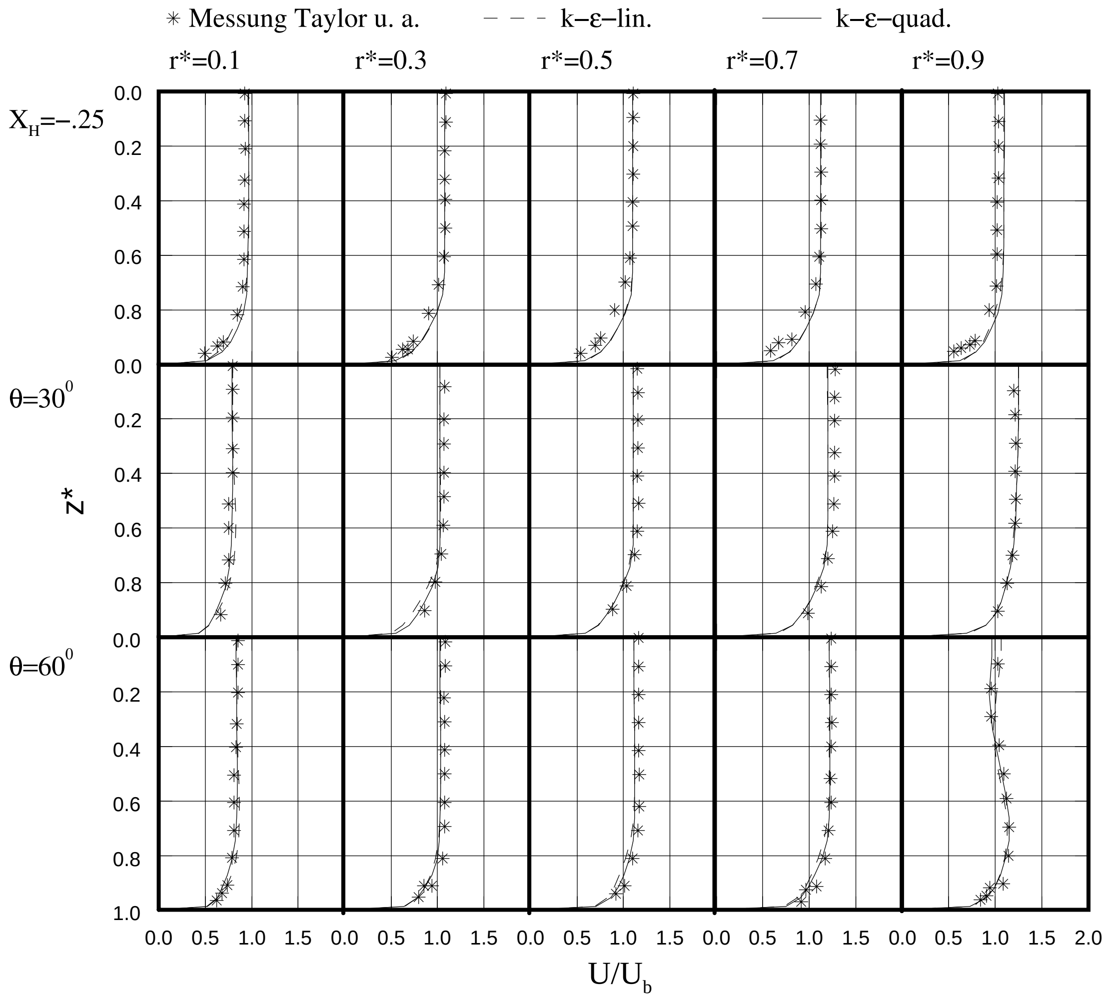



Abbildung 6.7: Turbulente Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 40000$) mit axialen Geschwindigkeitsprofilen ($U/U_b$) in den Rohrquerschnitten $X_H = -0.25$, $\theta = 30^0$ und $\theta = 60^0$

Die Übereinstimmung der Geschwindigkeitsprofile (Bild 6.7 bis 6.9) der Rechnung mit den Messungen ist bereits bei dem linearen $k$–$\varepsilon$–Modell sehr gut. Das quadratische Modell gibt an einigen

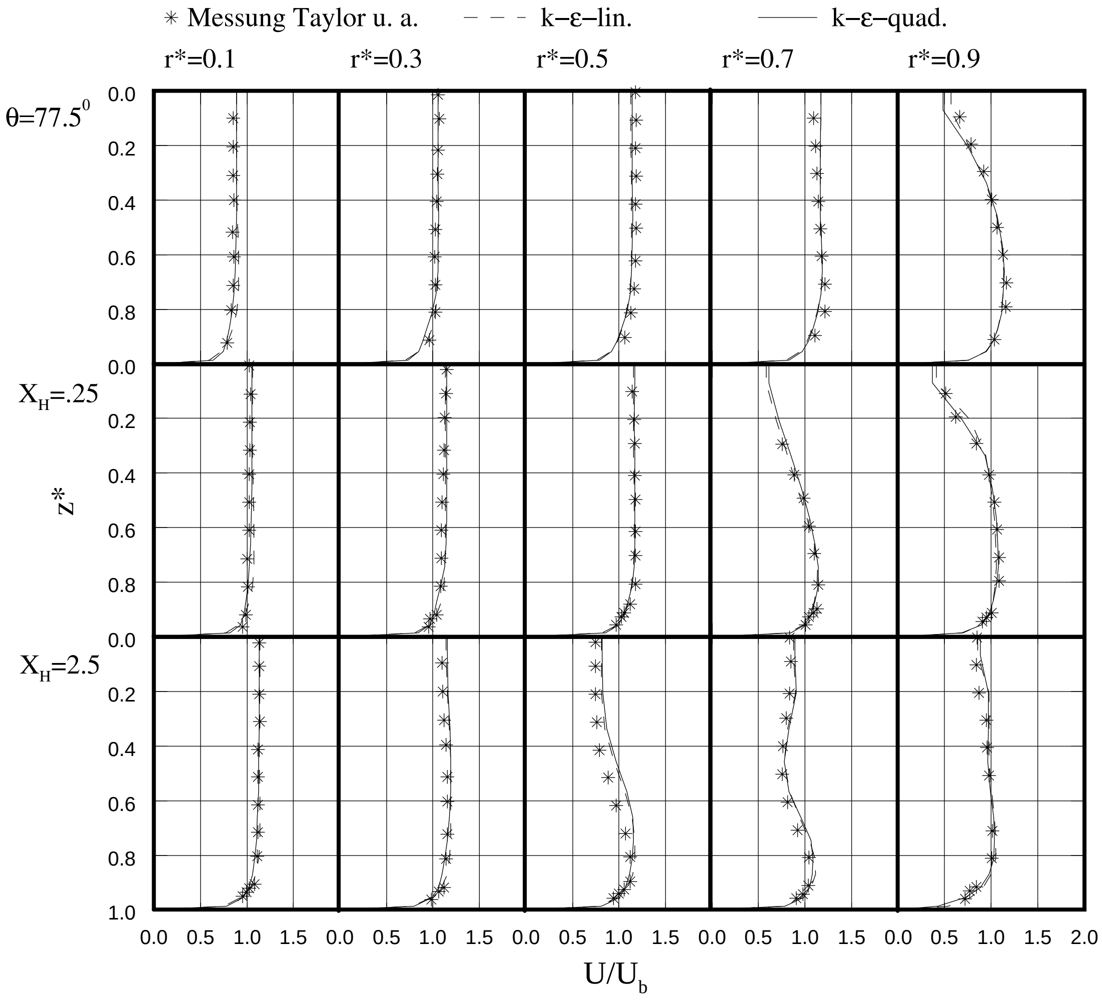



Abbildung 6.8: Turbulente Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 40000$) mit axialen Geschwindigkeitsprofilen ($U/U_b$) in den Rohrquerschnitten $\theta = 77.5^0,\ X_h = 0.25$ und $X_H = 2.5$

stromab gelegenen Rohrquerschnitten die radialen Geschwindigkeitsprofile jedoch noch besser wieder.

Die gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung für das lineare Turbulenzmodell liegt vermutlich darin begründet, daß sich die turbulente Rohrströmung wegen der isotropen Einströmbedingung (Blockprofil) und des kurzen Zulaufteils erst entwickeln muß. Der nichtlineare Effekt kommt demzufolge erst weiter stromab zum Tragen.

In Bild 6.10 sind die Isolinien der axialen Geschwindigkeit und Vektorplots der sekundären Strömung in verschiedenen Rohrquerschnitten für die Rechnungen mit linearem und quadrati-

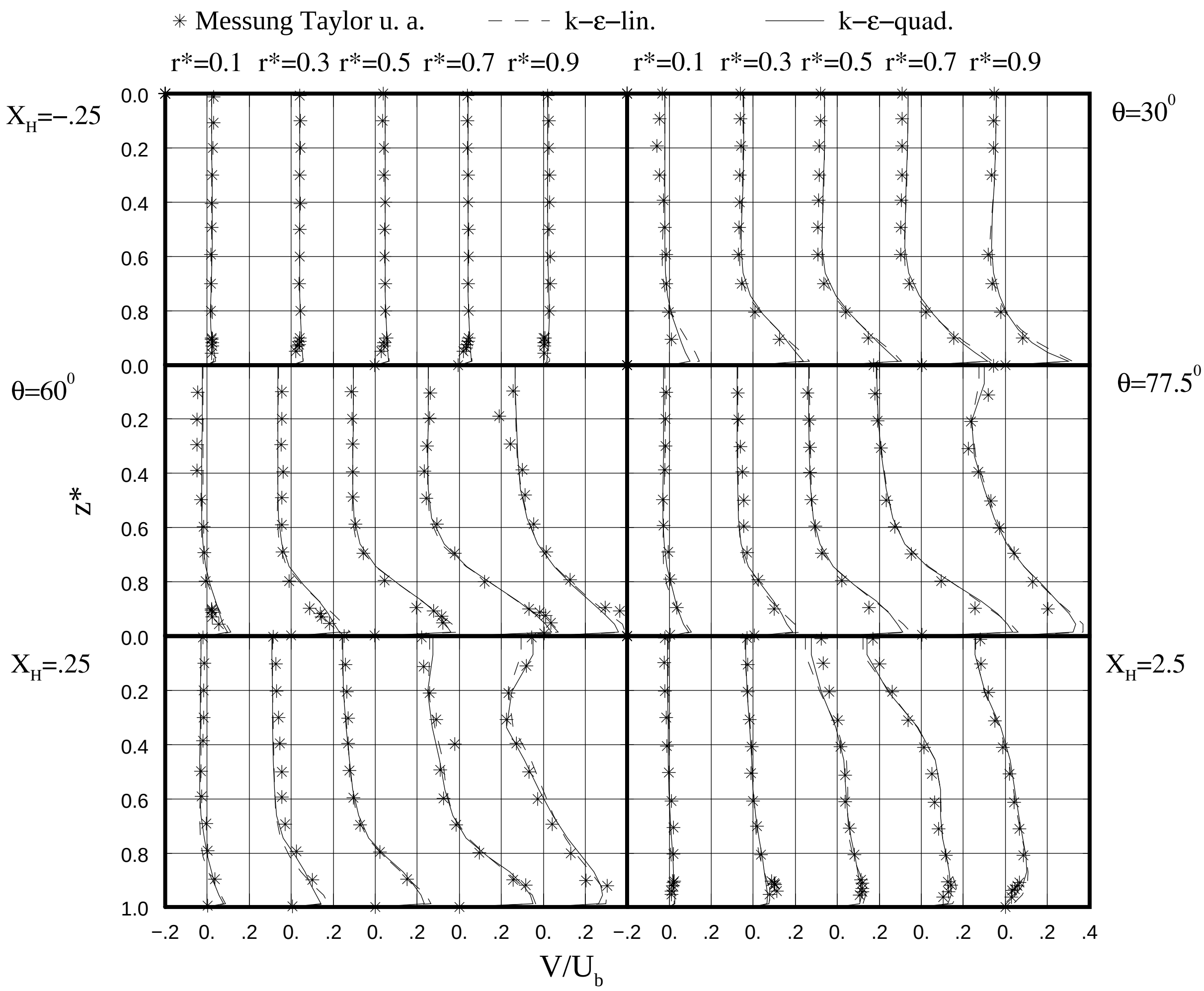



Abbildung 6.9: Turbulente Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 40000$) mit radialen Geschwindigkeitsprofilen ($V/U_b$) in den Rohrquerschnitten $X_H = -0.25,\ \theta = 30^0,\ \theta = 60^0,\ \theta = 77.5^0,\ X_H = 0.25,\ X_H = 2.5$

schem Turbulenzmodell einander gegenübergestellt. Die Sekundärströmung ist etwas kleiner als bei der laminaren Strömung. Die Position mit der maximalen axialen Geschwindigkeit liegt am Anfang des Krümmungsteils nahe der Innenwand. Sie wandert in der Krümmung nur langsam nach außen. Am Ausgang des Krümmungsteils liegt diese Stelle etwa in der Mitte des Rohres. Die maximale radiale Geschwindigkeit erreicht wie beim laminaren Fall bei $\theta = 60^0$ nahe der Seitenwand etwa 40% der Eingangsgeschwindigkeit.

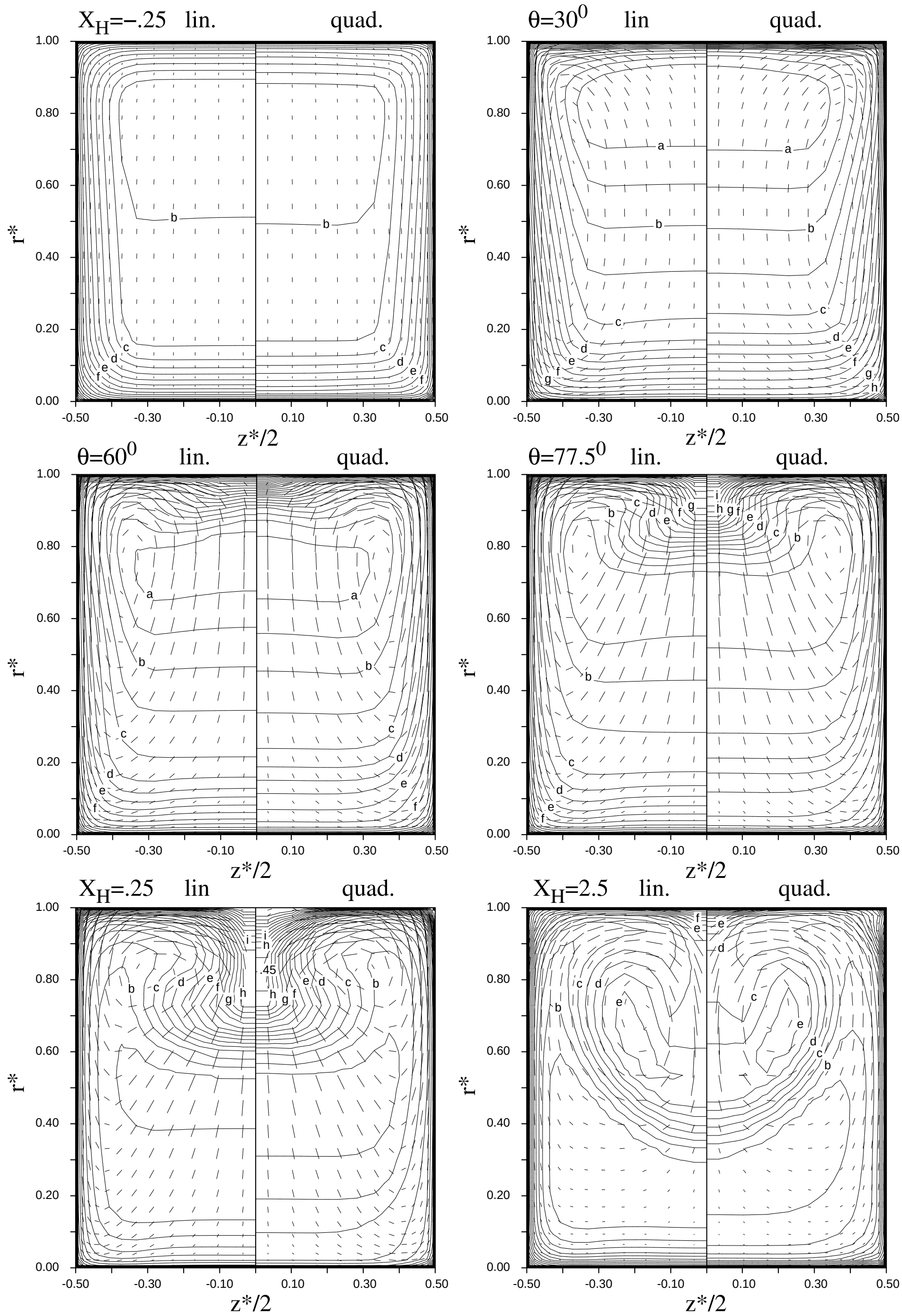



Abbildung 6.10: Turbulente Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 40000$) mit Isolinien der normierten Axialgeschwindigkeit ($U/U_b; \Delta = 0.05$ mit a=1.2, b=1.1, c=1.0, d=0.9, e=0.8, f=0.7, g=0.6, h=0.5, i=0.4) und Vektorplots der Sekundärströmung

## 6.2 Untersuchung der Mehrgittermethode

### 6.2.1 Laminare Nischenströmung in einem würfelförmigen Hohlraum

Die Bewertung der Mehrgittermethode erfolgt durch die Simulation einer durch eine bewegte Wand angetriebenen Nischenströmung in einem würfelförmigen Hohlraum (Testfall 2). Hierfür liegen eingehende Vergleichsuntersuchungen vor (z.B. Orth 1991, Lien u.a. 1994, Lilek u.a. 1997). Für die drei betrachteten Reynoldszahlen ($Re$ = 100, 400, 1000; gebildet mit der Geschwindigkeit der oberen Wand und der Würfelkantenlänge) hat das verwendete dreistufige kartesische Gitter (40×40×40, 20×20×20 und 10×10×10 FV) eine zur Wand hin verdichtete Gitterlinienverteilung. Die Vektorplots in Bild 6.11 stellen die Geschwindigkeitsfelder der Strömung bei $Re$=1000 in drei ausgesuchten Schnittebenen dar. In der Symmetrieebene (y=0.5) ist die Strömung durch den großen Wirbel in der Mitte und die kleinen Wirbel in den unteren Ecken charakterisiert. Das komplexe sekundäre Wirbelsystem kommt durch Zirkulationsgebiete in den Schnittebenen $x = 0.5$ und $z = 0.5$ deutlich zum Vorschein.

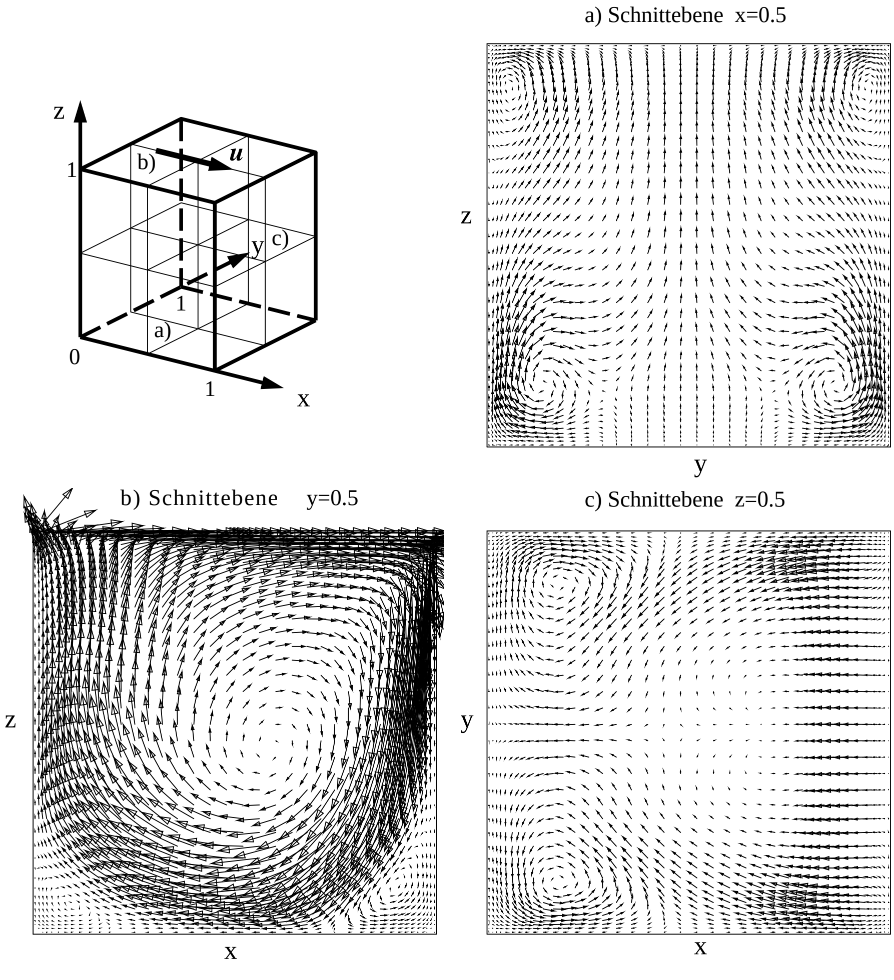



Abbildung 6.11: Vektorplots der laminaren dreidimensionalen Nischenströmung bei $Re = 1000$

Tabelle 6.2 enthält die Steuerungsparameter für Mehrgitterberechnungen (MG)

$\mu_1$: Anzahl der „Pre–Smoothing“–Iterationen;

$\mu_2$: Anzahl der „Post–Smoothing“–Iterationen;

$\mu_0$: Anzahl der Iterationen pro Zyklus auf dem gröbsten Gitter;

$\omega_\phi$: Unterrelaxationsfaktor bei Prolongation für Varable $\phi$

und die Effizienzsteigerung gegenüber Eingitterberechnungen (SG) sowie einige Vergleichsuntersuchungen.

| Gitterstufe | 3 mit $40^3$, $20^3$ und $10^3$ FV | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Relaxationsfaktor | $\omega_{u,v,w} = 1,\ \omega_p = 0.4$ | | | | | | | | |
| Iterationsanzahl | $\mu_1 = 2,\ \mu_2 = 2$ | | | | | | | | |
| | | $\mu_0 = 2$ | $\mu_0 = 8$ | | $\mu_0 = 2$ | $\mu_0 = 8$ | | $\mu_0 = 2$ | $\mu_0 = 8$ |
| | Re=100 | | | Re=400 | | | Re=1000 | | |
| | SG | MG | MG | SG | MG | MG | SG | MG | MG |
| $CPU$–Zeit (sek.) | 3566 | 203 | 201 | 3073 | 215 | 194 | 2878 | 240 | 198 |
| $CPU_{SG}/CPU_{MG}$ | – | 17.6 | 17.7 | – | 14.3 | 15.8 | – | 12.0 | 14.5 |
| Vergleichsarbeit | (Gitterstufen/ $N^3$ auf dem feinsten Gitter: $CPU_{SG}/CPU_{MG}$) | | | | | | | | |
| Orth (1991) | – | | | – | | | ($4/64^3$: 3.9) | | |
| Lien (1994) | ($3/32^3$: 6.4) ($3/40^3$: 10.1) | | | – | | | | | |
| Lilek (1997) | ($3/32^3$: 6.6) ($4/64^3$: 30.0) | | | – | | | ($3/32^3$: 2.6) ($4/64^3$: 12.6) | | |

Tabelle 6.2: Effizienzsteigerung durch Einsatz der Mehrgittermethode für die laminare dreidimensionale Nischenströmung

Neben Rechnungen mit 8 Iterationen auf dem gröbsten Gitter ($\mu_0 = 8$) sind Mehrgitterberechnungen mit $\mu_0 = 2$ durchgeführt worden. Obwohl die Rechenzeit für einen Zyklus geringer ist, verbrauchen diese Rechnungen generell mehr Rechenzeit als jene mit $\mu_0 = 8$. Mit wachsender Reynoldszahl steigt der Mehraufwand von 1% auf bis zu 20%. Dies bestätigt die in Kap. 3.8.2 getroffene Aussage, daß bei Mehrgitterberechnungen auf dem gröbsten Gitter mehr Iterationen durchgeführt werden sollten als auf den feineren Gittern.

Bild 6.12 zeigt den logarithmisch aufgetragenen Residuenverlauf für die Ein– und Mehrgitterberechnungen ($\mu_0 = 8$) bei $Re = 400$. Bei der Eingitterberechnung wird das Residuum bei Beginn des Iterationsablaufs relativ schnell reduziert, danach sinkt die Konvergenzgeschwindigkeit deutlich. Insgesamt werden 166 Iterationen benötigt, um das festgeschriebene Konvergenzkriterium ($Residuum < 10^{-3}$) zu erreichen. Bei der Mehrgitterberechnung bleibt die Konvergenzgeschwindigkeit konstant hoch. Nach 6 Mehrgitterzyklen mit 12 Iterationen auf dem feinsten Gitter ist das Konvergenzkriterium erreicht.

Das Verhalten der Mehrgittermethode auf Multiblockgittern ist für den Einsatz in praxisnahen Anwendungen sehr wichtig. Dazu wird in einem weiteren Test das ursprüngliche Gitter in acht

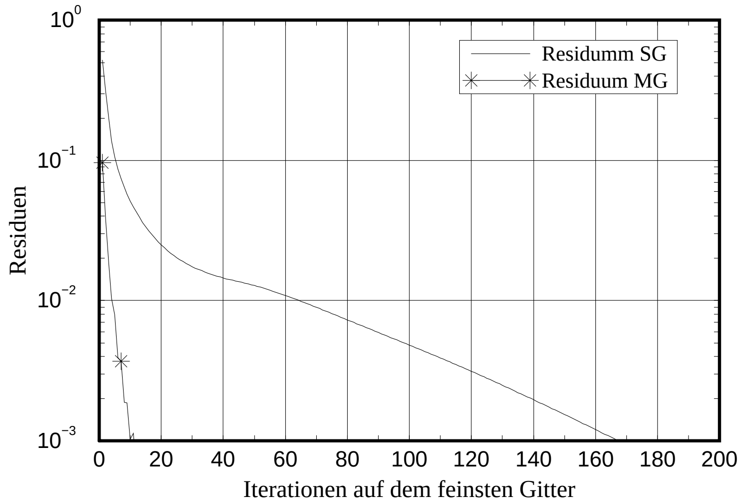



Abbildung 6.12: Laminare dreidimensionale Nischenströmung mit Residuenverlauf der Berechnung bei $Re = 400$

gleichgroße Blöcke unterteilt. Die in Tabelle 6.3 dokumentierten Effizienzsteigerungen sind noch größer als die entsprechenden Ergebnisse der Simulation auf dem 1–Block–Gitter. Die Rechenzeiten der Mehrgitterberechnungen mit dem 8–Block–Gitter liegen nur unwesentlich höher als die der Rechnungen mit dem 1–Block–Gitter.
Die $Re$–Abhängigkeit der Effizienzsteigerung in den vorliegenden Testrechnungen ist im Gegensatz z.B. zur Arbeit von Lilek (1997) relativ klein.

| Gitterstufe | 3 mit 8x20$^3$, 8x10$^3$ und 8x5$^3$ FV | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| MG–Parameter | $\omega_{u,v,w} = 1,\ \omega_p = 0.4,\ \mu_1 = 2,\ \mu_2 = 2,\ \mu_0 = 8$ | | | | | |
| | Re=100 | | Re=400 | | Re=1000 | |
| | SG | MG | SG | MG | SG | MG |
| $CPU$–8–Block | 4120 | 218 | 3757 | 223 | 3807 | 227 |
| $CPU_{SG}/CPU_{MG}$ | – | 18.9 | – | 16.9 | – | 16.8 |
| $CPU$–1–Block | 3317 | 193 | 3073 | 194 | 2878 | 198 |
| $CPU_{SG}/CPU_{MG}$ | – | 17.2 | – | 15.8 | – | 14.5 |

Tabelle 6.3: Mehrgittermethode auf Multiblockgittern für die laminare dreidimensionale Nischenströmung

### 6.2.2 Laminare und turbulente Rohrkrümmerströmung

Die in Kap. 6.1 beschriebenen Rohrkrümmerströmungen (Testfall 1, Taylor u.a. 1982) wurden für Mehrgitteruntersuchungen mit dem 1–Block–Gitter als feinster Gitterstufe herangezogen. Die Ergebnisse der Mehrgitterberechnungen für die laminare Strömung mit zweistufigen und dreistufigen Gittern im Vergleich zur dort verwendeten Eingittermethode sind in Tabelle 6.4 aufgelistet.

| Gitterstufe | 1<br>24×24×60 | 2<br>24×24×60, 12×12×30 | 3<br>24×24×60, 12×12×30, 6×6×15 |
|---|---|---|---|
| Relaxationsfaktor | – | $\omega_{u,v,w} = .6,\ \omega_p = 0.4$ | |
| Iterationsanzahl | – | $\mu_1 = 3,\ \mu_2 = 2,\ \mu_0 = 8$ | |
| $CPU$–Zeit (sek.) | 8312 | 2315 | 1486 |
| $CPU_{SG}/CPU_{MG}$ | – | 3.59 | 5.60 |

Tabelle 6.4: Effizienzsteigerung durch Einsatz der Mehrgittermethode für die laminare Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, Re=790)

Bild 6.13 zeigt den Residuenverlauf auf dem feinsten Gitter bei allen drei Rechnungen. Die Kurven der Mehrgitterberechnungen sind mit starken Oszillationen behaftet. Der Grund liegt in dem bereits auf der feinsten Stufe relativ groben Gitter. Mit den Grobgittern (12×12×30 und 6×6×15 FV) können die über dem Rohrquerschnitt stark veränderlichen Strömungsverhältnisse nicht annähernd aufgelöst werden. Die prolongierte Korrekturlösung ist dann zwangsläufig mit starken kurzwelligen Fehleranteilen behaftet. Diese Fehleranteile wurden jedoch durch Iterationen auf dem feinsten Gitter sehr schnell reduziert. Trotz dieses oszillierenden Residuenverlaufs wird eine Leistungssteigerung um einen Faktor von 5.6 erreicht.

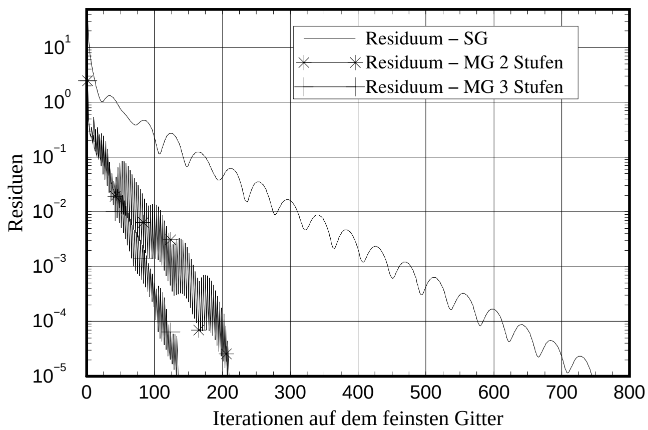



Abbildung 6.13: Residuenverlauf bei der Berechnung der laminaren Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, Re=790)

Für die turbulente Strömung ist zunächst mit der Mehrgittermethode für alle Gleichungen, d.h. auch für die Turbulenzgrößen, keine Konvergenz auf dem dreistufigen Gitter erzielt worden. Der Grund hierfür liegt in der problematischen Formulierung der HRe–Randbedingung für die Turbulenzgrößen auf stark vergröberten Gittern. Prinzipiell kommt es hier zu Inkonsistenzen im Rahmen der HRe–Hypothese für das jeweils wandnächste FV, welche eine physikalisch unsinnige Grobgitterkorrektur verursachen.

Im Rahmen einer zweiten Testrechnung wurden deshalb die Turbulenzgleichungen nur auf der feinsten Gitterstufe gelöst. Die hieraus restringierten Grobgitterwerte werden während des nächsten Mehrgitterzyklus festgehalten. Die somit erzielte Konvergenzbeschleunigung auf der Basis von drei Gitterstufen beträgt 4.6 gegenüber der Eingitterberechnung. Verwendet man die Mehrgittermethode für die Turbulenzgrößen auf den beiden feinsten Stufen des Gitters, so verlängert sich die Rechenzeit um 20% gegenüber der oben beschriebenden Mehrgittertiefe von 1 für die Turbulenzgleichungen. In Tabelle 6.5 sind beide Rechnungen im Vergleich mit der Eingitterberechnung dokumentiert.

| Gitterstufe | 1 | $u, v, w, p$: 3; $k, \varepsilon$: 1 | $u, v, w, p$: 3; $k, \varepsilon$: 2 |
|---|---|---|---|
| Relaxationsfaktor | – | $\omega_{u,v,w} = .6,\ \omega_p = 0.4,\ \omega_{k,\varepsilon} = 0.3$ | |
| Iterationsanzahl | – | $\mu_1 = 3,\ \mu_2 = 2,\ \mu_0 = 8$ | |
| $CPU$–Zeit (sek.) | 15783 | 3879 | 4549 |
| $CPU_{SG}/CPU_{MG}$ | – | 4.1 | 3.5 |

Tabelle 6.5: Verhalten der Mehrgittermethode bei der turbulenten Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 40000$)

Die Residuenverläufe für die Mehrgitterberechnungen (siehe Bild 6.14) sind wie bei der laminaren Strömung mit sehr starken Oszillationen behaftet, wobei die Oszillationen der Rechnung mit $k$ und $\varepsilon$ auf zwei Gittern noch deutlich größere Amplituden zeigen. Das erklärt vermutlich die Divergenz der am Anfang erwähnten Testrechnung der Mehrgittermethode für die Turbulenzgrößen auf allen drei Gitterstufen.

Die Untersuchungen für zweidimensionale Strömungen (Yan, Xue, Rung & Thiele 1998) zeigten, daß bei einem sorgfältig vorbereiteten Rechengitter, dessen wandnahe Bilanzvolumina für alle Gitterstufen die Anforderungen der Randbedingungen erfüllen, eine höhere Konvergenzbeschleunigung auch für turbulente Strömungen mit der Mehrgittermethode erreicht werden kann. In dieser Untersuchung wurden für eine turbulente Strömung über einen Hügel (Almeida et al. 1993) ein Beschleunigungsfaktor von 10 für das HRe–$k$–$\varepsilon$–Modell ($200 \times 80$–FV auf der feinsten Gitterebene) und ein Faktor von 8 für das LRe–$k$–$\varepsilon$–Modell ($200 \times 120$–FV auf der feinsten Gitterebene) erzielt.

Aus den Untersuchungen der Mehrgittermethode für beide Testfälle und den obengenannten

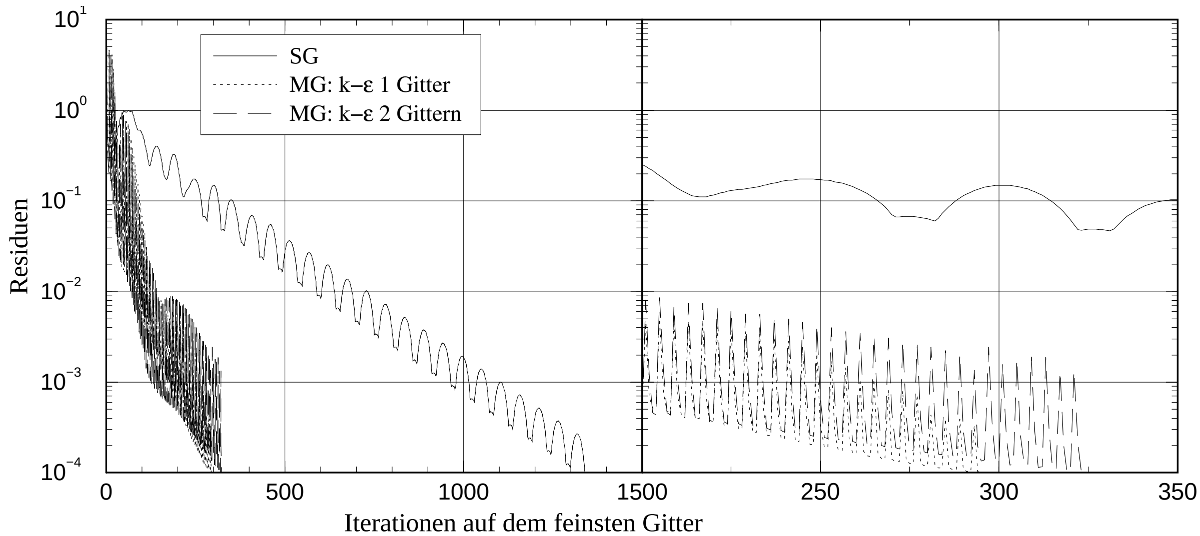



Abbildung 6.14: Turbulenten Rohrkrümmerströmung (Taylor u.a. 1982, $Re = 40000$) mit dem Residuenverlauf (links: Gesamtablauf; rechts: Teilbereich)

zweidimensionalen Untersuchungen lassen sich vorläufige Folgerungen ziehen:

1) Die Mehrgittermethode ist eine wirkungsvolle Beschleunigungstechnik für die laminare Strömungsberechnung.

2) Der Einsatz von Multiblockgittern vermindert nicht die Konvergenzbeschleunigung dieser Methode. Daher ist ihre Anwendung für parallele Simulationsprozesse sehr sinnvoll.

3) Die Simulation turbulenter Strömungen erfordert eine sorgfältige Vorbereitung der Rechengitter. Die wandnahen Bilanzvolumina müssen für alle Gitterstufen die Anforderungen der Randbedingungen erfüllen.

4) Wird Forderung 3 nicht erfüllt, muß die Anwendung der Mehrgittermethode auf die Impuls– und Massenbilanzgleichung beschränkt werden.

Hierzu sei noch angemerkt, daß bei der Simulation komplexer dreidimensionaler Strömungen auf der Basis der Navier–Stokes–Gleichungen die in Punkt 3 gestellte Anforderung an die Gitterpunktverteilung im Wandnahbereich auch für das feinste Gitter nur schwer einzuhalten ist. Dafür muß bereits eine extrem hohe Anzahl von Gitterpunkten eingesetzt werden. Eine weitere Verfeinerung des Rechengitters, deren Punktanzahl sich von Stufe zur Stufe immer um einen Faktor 8 vergrößert, übersteigt in vielen Fällen die zur Verfügung stehende Rechenkapazität. Eine allgemeingültige Vorgehensweise für die Transportgleichungen der Turbulenzgrößen, die auch gilt, wenn die in Punkt 3 genannte Bedingung für Rechengitter verletzt wird, ist hier sehr wünschenswert. Sie sollte in einer separat laufenden Untersuchung systematisch erarbeitet und validiert werden.

## 6.3 Auswirkung der quadratischen ASM

### 6.3.1 Turbulente Strömung in einem geraden quadratischen Rohr

Die Beschreibung turbulenter Strömungsphänomene wird für zwei ausgewählte Turbulenzmodelle, das lineare HRe $k$–$\varepsilon$ EVM und das quadratische HRe $k$–$\varepsilon$ ASM, am Beispiel einer vollausgebildeten turbulenten Strömung im einem geraden quadratischen Rohr (Testfall 3) mit den Reynoldszahlen $Re = 4410$ und $Re = 59000$ dokumentiert (Bild 6.15). Die angegebene $Re$–Zahlen sind mit der über dem Rohrquerschnitt gemittelten Geschwindigkeit $U_b$ und der Rohrhöhe $D$ gebildet. Es ist bekannt, daß das Phänomen einer Sekundärströmung zweiter Art auftritt. Die turbulente Hauptströmung wird von einer Sekundärströmung überlagert, die vom Rohrzentrum aus zu den Ecken fließt und von der Mitte der Rohrwand wieder zum Rohrzentrum zurückkehrt.

Periodische Randbedingungen mit einer konstanten Druckdifferenz liegen für die Ein– und Austrittsfläche des Rechengebiets vor. Die Viskosität wird während der Rechnung ständig Reynoldszahl nachkorrigiert, um die $Re$–Zahl einzuhalten.

In Bild 6.16 sind die Isolinien der axialen Geschwindigkeit und Vektorplots der Sekundärströmung dargestellt. Die axiale Geschwindigkeit ist mit der gemittelten Geschwindigkeit $U_b$ normiert.

In der Simulation mit dem linearen Modell kommt das Phänomen der Sekundärströmung nicht zum Vorschein. Die maximale axiale Geschwindigkeit liegt im Vergleich mit den Messungen zu hoch. Dagegen kann das Phänomen mit dem quadratischen Modell zumindest qualitativ wiedergegeben werden.

Die Geschwindigkeitsprofile der Sekundärströmung (Bild 6.17), berechnet mit dem quadratischem

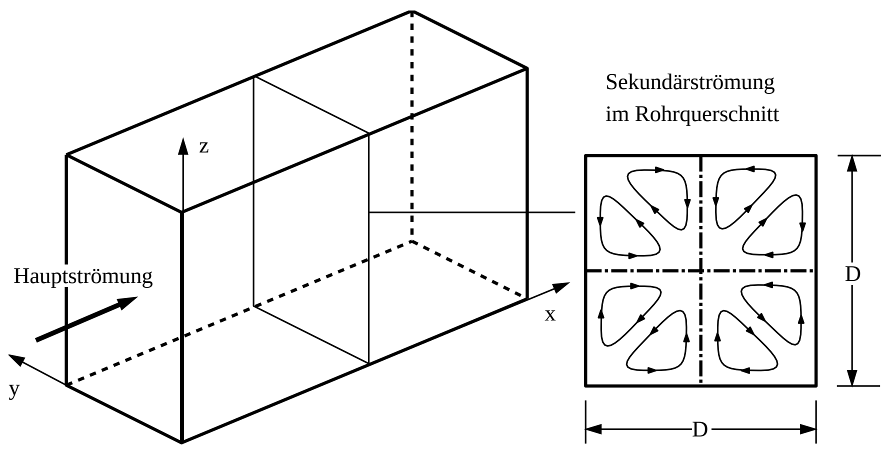



Abbildung 6.15: Sekundärströmung zweiter Art bei turbulenter Strömung in einem quadratischen Rohr

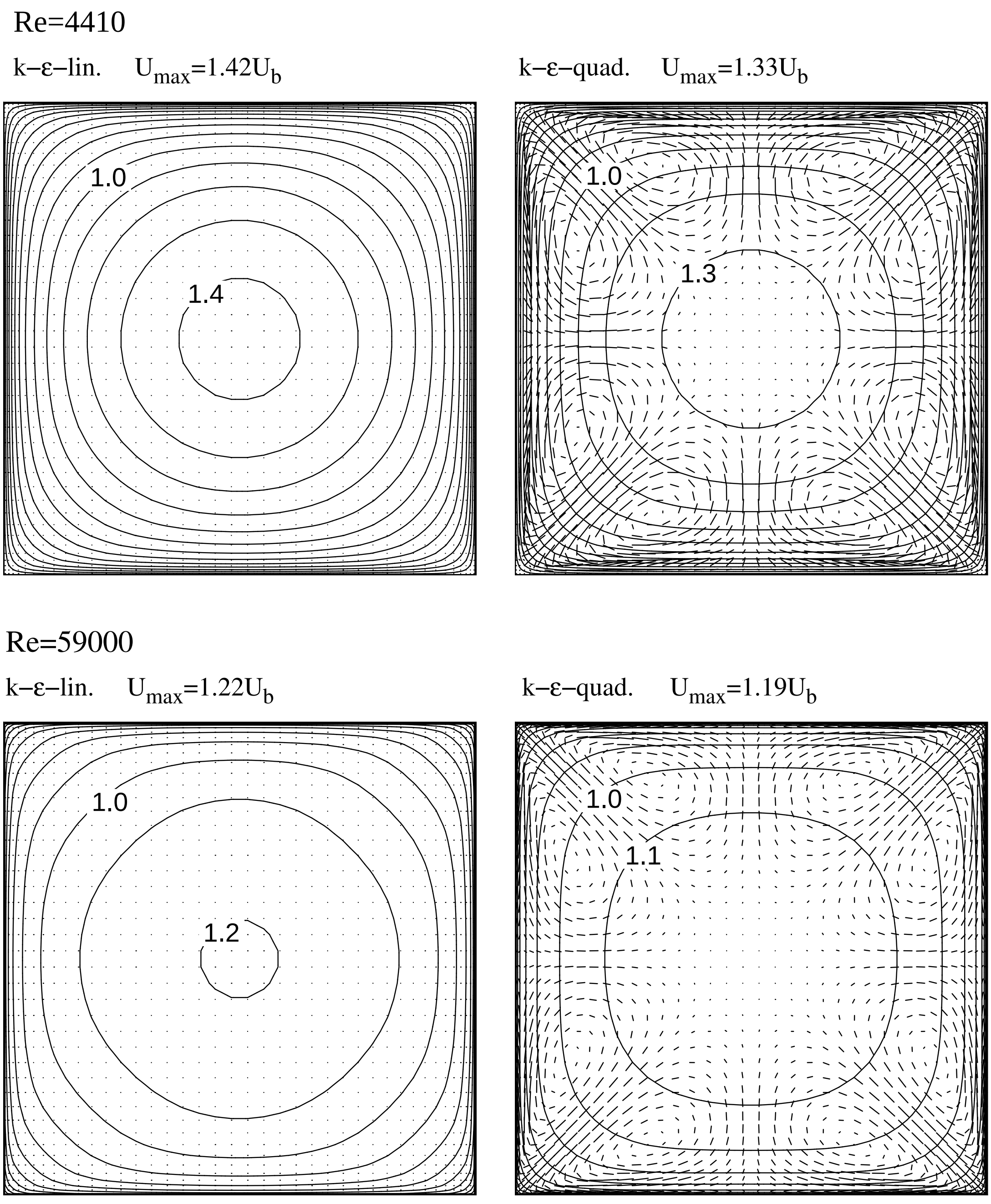



Abbildung 6.16: Turbulente Strömung in einem quadratischen Rohr mit Isolinien der Geschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung ($u/U_b$ : $\Delta = 0.1$) und Vektorplots der Sekundärströmung

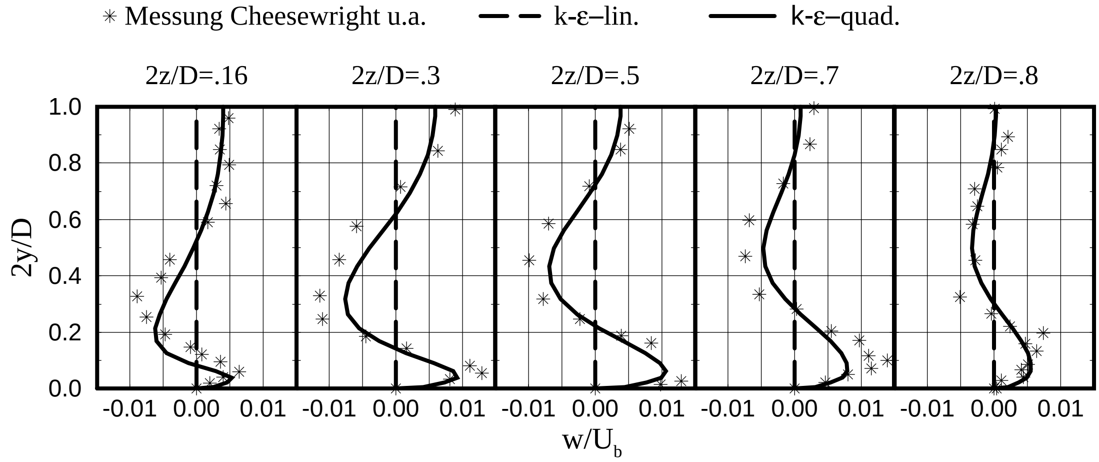



Abbildung 6.17: Turbulente Strömung in einem quadratischen Rohr mit Geschwindigkeitsprofilen der Sekundärströmung, $Re = 4410$; Messung bei $Re = 3675$ (Cheesewright u.a. 1990)

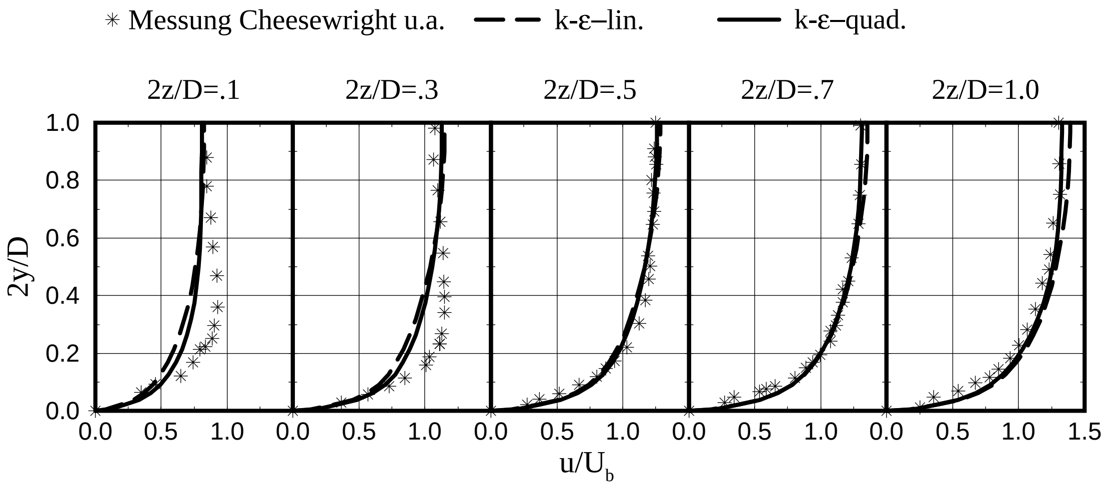



Abbildung 6.18: Turbulente Strömung in einem quadratischen Rohr mit axialen Geschwindigkeitsprofilen, $Re = 4410$; Messung bei $Re = 3675$ (Cheesewright u.a. 1990)

Modell, stimmen mit den Messungen (Cheesewright 1990 bei $Re = 3675$, DNS von Gavrilakis 1992 bei $Re = 4410$ zeigte fast identische Ergebnisse) in ihrer Profilform sehr gut überein. Der Geschwindigkeitsbetrag der sekundären Strömung ist jedoch generell zu gering.

Die axialen Geschwindigkeitsprofile (Bild 6.18) sind zwar voller ausgebildet als bei Verwendung des linearen Modells, weichen aber für beiden Modelle im ecknahen Bereich von den Messungen ab.

Die Geschwindigkeitsprofile bei $Re = 59000$ (Bild 6.19 und 6.20) zeigen im Prinzip die gleichen

Verläufe wie bei der kleineren $Re$–Zahl. Allerdings rücken die Extrema der Sekundärströmungsprofile näher an die Wand heran.

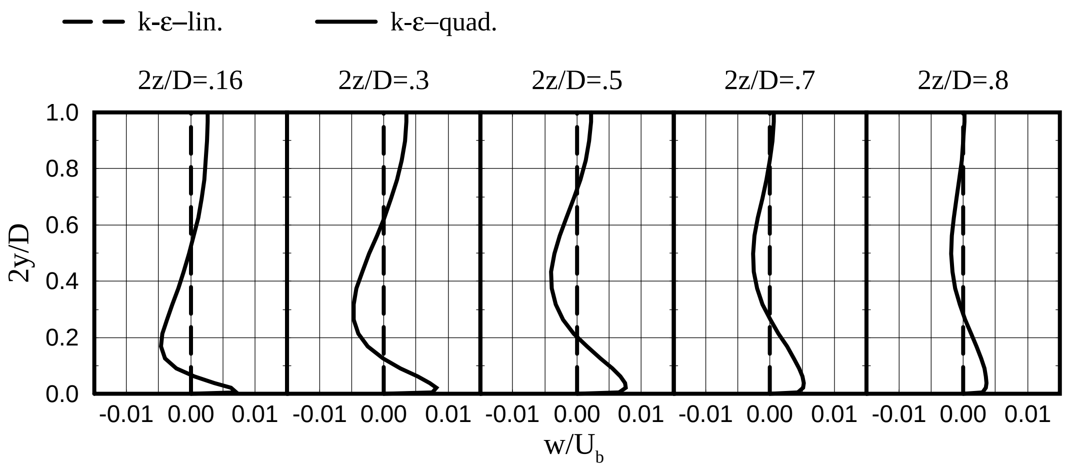



Abbildung 6.19: Turbulente Strömung in einem quadratischen Rohr mit Geschwindigkeitsprofilen der Sekundärströmung, $Re = 59000$

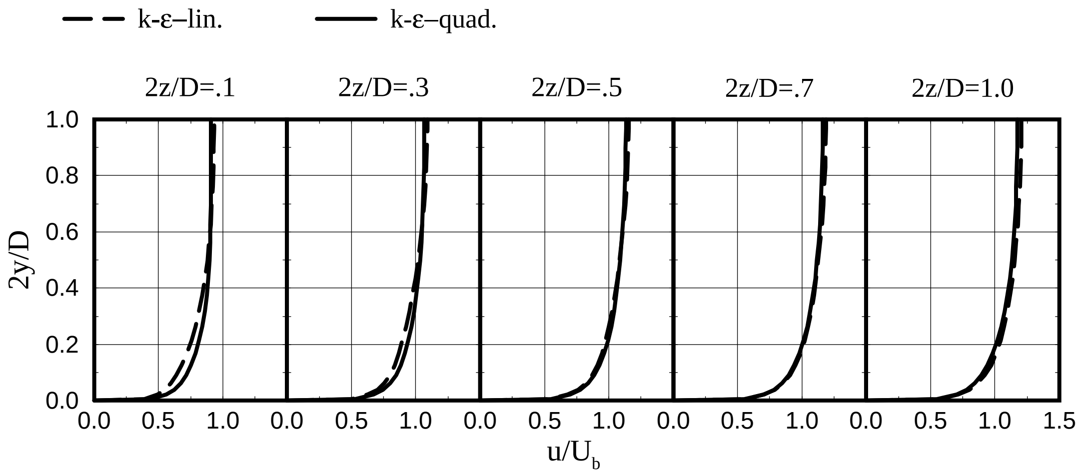



Abbildung 6.20: Turbulente Strömung in einem quadratischen Rohr mit axialen Geschwindigkeitsprofile, $Re = 59000$

Das Verhältnis der maximalen Axialgeschwindigkeit $U_{max}$ zur gemittelten Geschwindigkeit $U_b$ beträgt bei dem quadratischen Modell 1.33 ($Re = 4410$) bzw. 1.19 ($Re = 59000$). Diese $Re$–Abhängigkeit wird auch durch die Experimente gestützt. Aus den Messungen ($Re = 3675$, Cheesewright u. a. 1990) und den DNS–Werten ($Re = 4410$, Gavrilakis 1992) läßt sich ein Verhältnis von 1.33 bestimmen. Für den Bereich größerer $Re$–Zahlen haben Demuren & Rodi (1984) zahlreiche Meßdaten zusammengetragen und eine Abhängigkeitskurve aufgezeichnet. Das Verhältnis $U_{max}/U_b$ liegt knapp unter 1.20 für $Re = 59000$.

### 6.3.2 Turbulente Strömung in einem Rohr mit Querschnittsänderung

Sekundärströmungen in Rohren können nicht nur durch Krümmung wie im Testfall 1, sondern auch durch die Formgebung hervorgerufen werden. Davis u. a. (1992) untersuchten eine dreidimensionale turbulente Strömung in einem Rohr, dessen Querschnitt sich entlang der axialen Richtung vom einem Kreis zu einem Rechteck ändert (Testfall 4). Die mit der gemittelten Eingangsgeschwindigkeit ($U_b = 29.98 m/s$) und dem Rohreingangsdurchmesser ($2R = 0.020428 m$) gebildete Reynoldszahl beträgt $3.9 \cdot 10^5$. In Bild 6.21 ist die Geometrie des Rechengebiets dargestellt. Der Querschnitt des Rohres (in der $y$–$z$–Ebene) wird mit $(y/a)^n + (z/b)^n = 1$ angegeben, wobei $a$ und $b$ Funktionen von $x/R$ sind.

Unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaft genügt die Betrachtung eines Viertels der eigentlichen Rohrgeometrie durch ein 2–Block–Gitter. In Bild 6.23 sind die Gitterlinien an der Rohrmantelfläche, an der Eintrittsfläche ($x/R = -1$) und an der Austrittsfläche ($x/R = 8$) dargestellt. Die Strömung bei $x/R = -1$ ist im Experiment eine achsensymmetrische Grenzschichtströmung und keine vollausgebildete turbulente Rohrströmung. Das gemessene Geschwindigkeitsprofil wird als Einströmbedingung für die Simulation vorgegeben. Die Turbulenzvariablen werden während der Rechnung vom Gebietsinneren auf die Eintrittsfläche extrapoliert.

Für diese turbulente Strömung werden die Rechnungen mit dem linearen $k$–$\varepsilon$ EVM und dem quadratischen $k$–$\varepsilon$ ASM in der HRe–Formulierung durchgeführt.

Bild 6.22 enthält die Vektorplots und Isotachendarstellungen im Vergleich zum Experiment. Durch die Formänderung des Rohrquerschnitts wird die Strömung im Übergangsbereich zur schmalen Seite des Querschnitts hin umgelenkt. Am Ausgang dieses Bereichs bildet sich eine Sekundärwirbelströmung nahe der schmalen Seite. Die Wirbel werden stromab weitertransportiert. Dabei

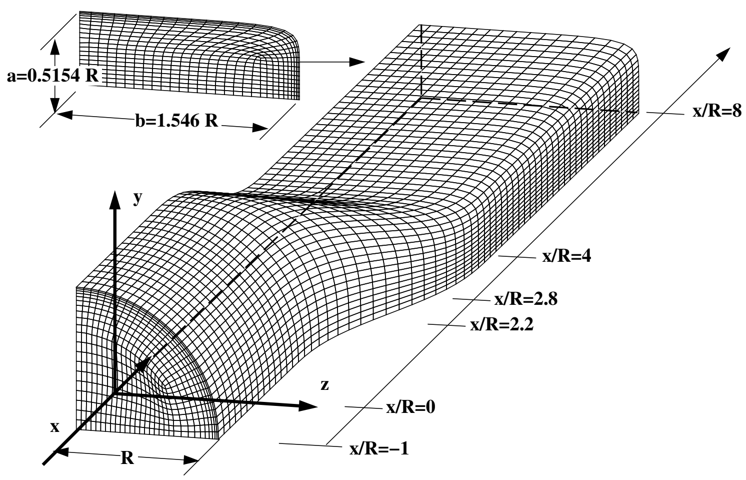



Abbildung 6.21: Geometrie des Rechengebiets eines Viertels sowie des Rechengitters an den physikalischen Rändern eines transformierten Rohres, Davis u.a. 1992

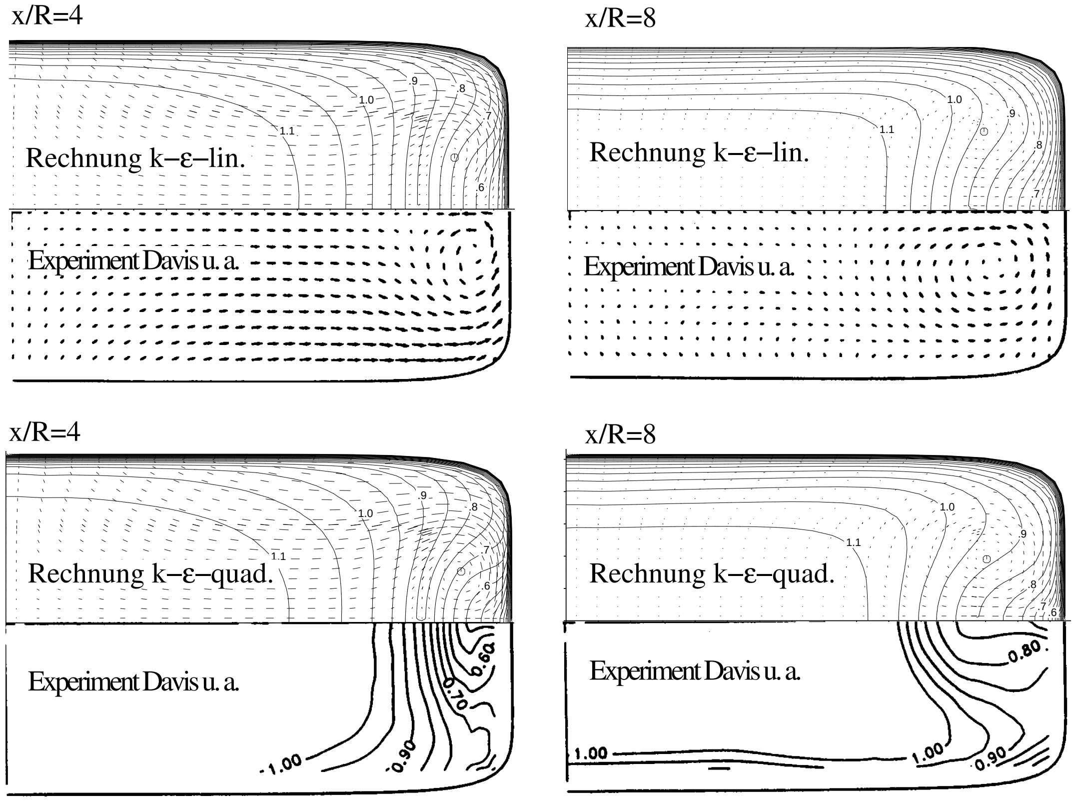



Abbildung 6.22: Turbulente Rohrströmung (Davis u.a. 1992, $Re = 3.9 \cdot 10^5$) mit Vektorplots und Isolinien der axialen Geschwindigkeit ($u/U_b$; $\Delta = 0.05$) in zwei ausgewählten Querschnitten

entfernt sich das Wirbelzentrum von der schmalen Seite und der $z$–Achse der Querschnitte.

In den Rechnungen mit beiden Turbulenzmodellen wird die sekundäre Wirbelströmung qualitativ vorausgesagt. Allerdings ist die Wirbelstärke in der Rechnung mit dem linearen Turbulenzmodell deutlich kleiner als im Experiment. Das quadratische Modell bringt hier eine Verbesserung. Die damit durchgeführte Rechnung kann aber die gemessene Stärke der sekundären Wirbelströmung, vor allem im stromab liegenden Schnitt ($x/R = 8$), ebenfalls nicht erreichen.

Die gemessenen Isolinien der axialen Geschwindigkeit zeigen starke Einbuchtungen an den schmalen Seiten beider dargesteller Rohrquerschnitte. Hier zeigt wiederum die Rechnung mit dem quadratischen Turbulenzmodell ein realistischeres Bild als die mit dem linearen Modell.

Das axiale Geschwindigkeitsprofil auf der $z$–Symmetrieachse in verschiedenen Rohrquerschnitte ist zusammen mit den Meßwerten in Bild 6.23 dargestellt. An den Meßpositionen vor dem Ende des Übergangsbereichs ($x/R = 2.2$ und $x/R = 2.8$) stimmen die Ergebnisse beider Rechnungen mit dem Experiment gut überein. Die danach gebildete sekundäre Wirbelströmung verursacht einen treppenförmigen Verlauf des $u$–Profils. Diese Eigenschaft wird an der Position $x/R = 4$ von dem linearen Modell überhaupt nicht, vom quadratischen Modell dagegen sehr gut wiedergege-

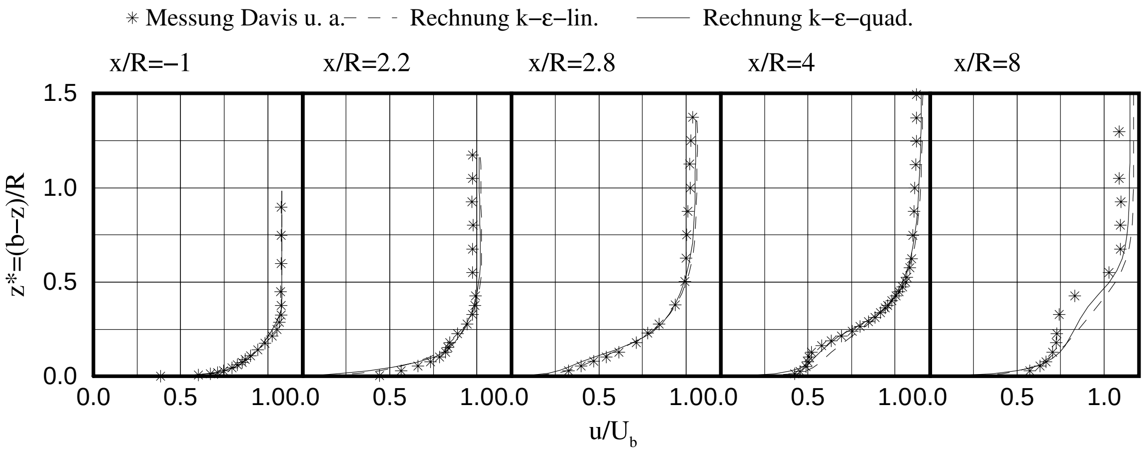



Abbildung 6.23: Turbulente Rohrströmung (Davis u.a. 1992, $Re = 3.9 \cdot 10^5$) mit axialen Geschwindigkeitsprofilen ($u/U_b$) auf der $z$–Symmetrieachse

ben. An der weiter stromab gelegenen Meßposition $x/R = 8$ hingegen wird der Profilverlauf auch von der Rechnung mit dem quadratischen Modell nur teilweise wiedergegeben.

Vorläufig lassen sich folgende Punkte zur Auswirkung des algebaischen Spannungsmodells feststellen:

1) Im Vergleich mit dem linearen $k$–$\varepsilon$ EVM erreicht das quadratische ASM für beide Testfälle substantiell bessere Übereinstimmungen mit den Experimenten.

2) Vergleichsuntersuchungen von Eifert, Pfuderer & Janicka (1997) für den Testfall 4 auf der Basis impliziter Reynoldsspannungsmodelle zeigen in Abhängigkeit vom verwendeten „Pressure–Strain (PS)“–Modell bessere oder auch schlechtere als die hier erzielten ASM–Ergebnisse. Dabei ist jedoch zu bemerken, daß sich die Ergebnisse in den Vergleichsuntersuchungen tendentiell mit dem Grad der Nichtlinearität des verwendeten PS–Modells verbessern. Das hier verwendete explizite ASM setzt jedoch prinzipiell lineare PS–Modelle voraus.

## 6.4 Kompressible Erweiterung des SIMPLE–Verfahrens

### 6.4.1 Zweidimensionale Kanalströmung

Die Erweiterung des SIMPLE–Druckverfahrens auf kompressible Strömungen wird zunächst am Beispiel der Strömung mit einem reflektierten schrägen Verdichtungsstoß in einem symmetrischen ebenen Kanal (Testfall 5) demonstriert, für die Experimente vorliegen (Mason, Putnam & Re 1980).

Zur Simulation dieser in der $x-y$–Ebene als zweidimensional betrachteten Strömung wurde in der $z$-Richtung die periodische Randbedingung ohne Gesamtdruckdifferenz vorgegeben. Die Simulation erfolgt auf zwei verschiedenen Gittern mit $200 \times 40$ bzw. $100 \times 20$ FV ( Längs– $\times$ Quer– Richtung). Die Kanalgeometrie mit den entsprechenden Randbedingungen sowie das feinere Rechengitter sind in Bild 6.24 skizziert. An der Eintrittsfläche ist die Ruhetemperatur $T_0$ und der Ruhedruck $p_0$ vorgegeben.

Am Eingang des Kanals herrscht Unterschallströmung, die durch die Verengung des Kanalquerschnitts auf Überschall beschleunigt wird. Im zweiten Teil des Kanals erfährt der Querschnitt eine geringfügige Erweiterung. Der hintere Teil ist mit dem sich stetig verengenden ersten Teil durch eine Kurve mit kleinem Krümmungsradius verbunden. Die Strömung beschleunigt nach dem Durchgang durch die engste Stelle des Kanals zunächst weiter, kann aber kurz danach geometriebedingt nicht weiter expandieren. Es bildet sich ein schräger Verdichtungsstoß, der die Symmetrieebene passiert und von der Kanalwand reflektiert wird. Die Strömung verläßt das Rechengebiet mit Überschallgeschwindigkeit.

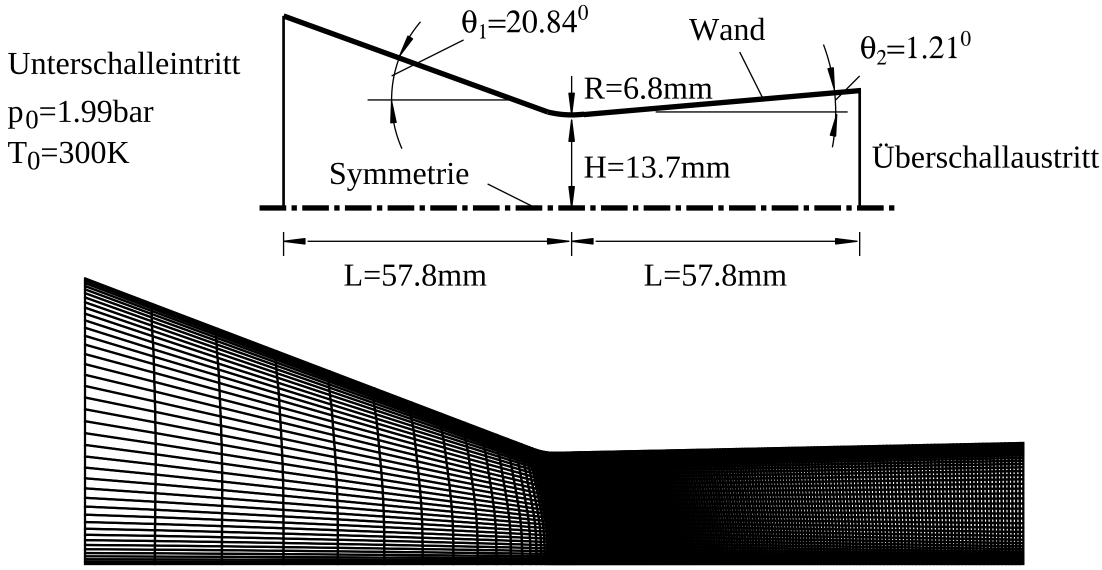



Abbildung 6.24: Geometrie, Randbedingungen und Rechengitter für die kompressible Kanalströmung, Mason u.a. 1980

Bild 6.25 enthält die Isolinien der berechneten Machzahlverteilung für das feine $(200 \times 40)$ Gitter. Der reflektierende Verdichtungsstoß wird klar von der Isoliniendarstellung nachgezeichnet. Der auf beiden Gittern berechnete und der gemessene Druckverlauf entlang der oberen Kanalwand ist ebenfalls im gleichen Bild dargestellt.

Die Eingangsmachzahl beträgt 0.22, die Strömung wird bis zu einer Machzahl von 1.437 bei der Simulation auf dem feinen Gitter und 1.433 auf dem groben Gitter beschleunigt. In dem Druckverteilungsdiagramm ist die gute Übereinstimung der Rechen– und Meßdaten ersichtlich. Die numerische Lösung tendiert zwar hinter dem Stoß zu einem leichten und lokal begrenzten oszillierenden Verhalten. Dies hat aber weder einen Einfluß auf die Stabilität des Verfahrens noch beeinflußt die Oszillation das Gesamtbild der Strömung. Außer an der Reflektionsstelle des Verdichtungsstoßes, wo der Stoß auf dem feinen Gitter deutlich schärfer aufgelöst wird, zeigen die Druckverläufe auf beiden Gittern keine signifikante Unterschiede.

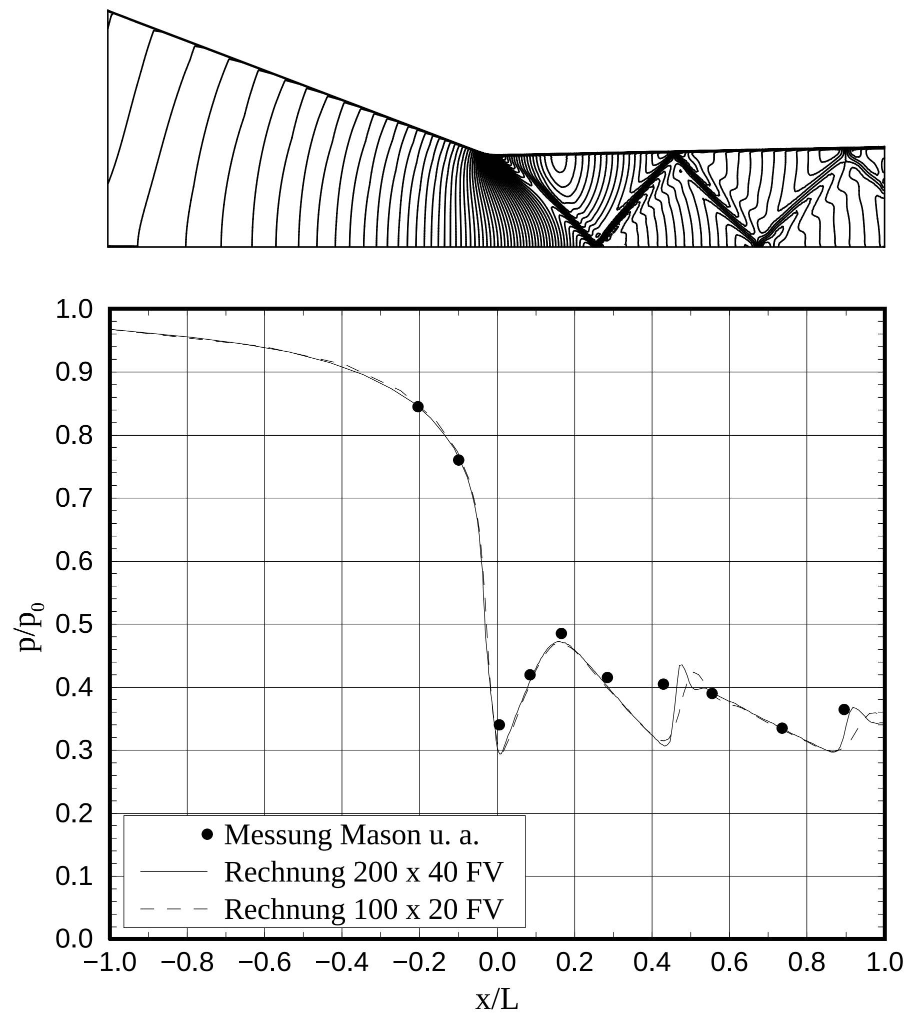



Abbildung 6.25: Kompressible Kanalströmung (Mason u.a. 1980) mit Isoliniendarstellung für die Machzahl $(\Delta = 0.02)$ sowie Druckverlauf $(p/p_0)$ entlang der oberen Kanalwand

### 6.4.2 Dreidimensionale transsonische Umströmung des ONERA M6–Flügels

Das auf kompressible Strömungen erweiterte SIMPLE–Druckkorrekturverfahren wird zusätzlich am Beispiel des ONERA M6–Flügels (Testfall 6) überprüft, für den experimentelle Untersuchungen (Schmitt & Charpin 1979) vorliegen. Die Einströmung im Windkanalexperiment gilt als annähernd laminar. Die laminar–turbulente Transition ist nicht fixiert. Die betrachteten transsonischen Strömungen bei einer Machzahl von $Ma_\infty = 0.84$ und einer Reynoldszahl von $Re = 11.7 \cdot 10^6$ werden durch ein $\lambda$–förmiges Stoßmuster auf der Flügeloberseite charakterisiert. Bei einem Anstellwinkel von $\alpha = 3.06^0$ laufen zwei getrennte Verdichtungsstöße ab der Flügelwurzel bis zu einer Position von etwa 85% der Halbspannweite aufeinander zu. Danach vereinigen sich die beiden Stöße zu einem einzigen Verdichtungsstoß. Bei höheren Anstellwinkeln ($\alpha = 5.06^0$, $6.06^0$) verschiebt sich die Vereinigungsstelle in Richtung der Flügelwurzel und es treten im Gegensatz zu $\alpha = 3.06^0$ Ablösegebiete auf.

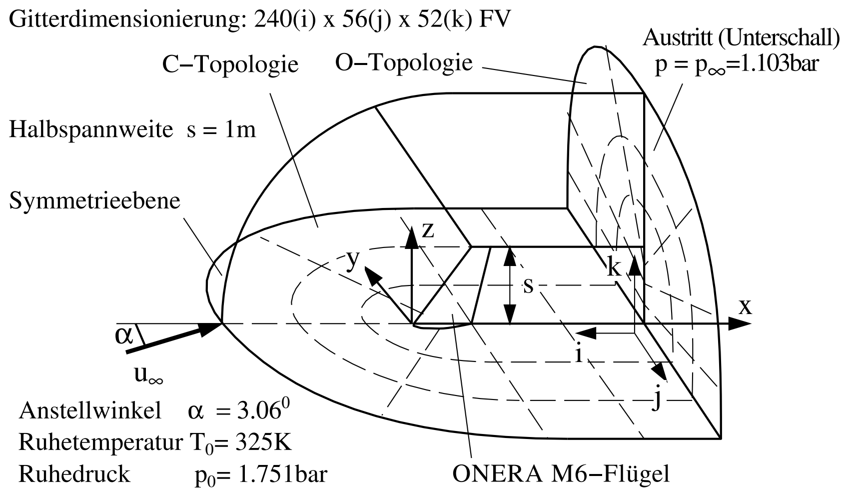



Abbildung 6.26: Randbedingungen und Gittertopologie für die transsonische Umströmung des ONERA M6–Flügels, Schmitt u.a. 1979

Das Rechengitter bildet eine C–O–Topologie (siehe Bild 6.26) und besteht aus etwa 700,000 FV. Dabei sind 240 FV in Strömungsrichtung (davon 176 entlang des jeweiligen Profilschnitts), 56 FV in Fernfeld– und 52 FV in Spannweitenrichtung angeordnet. Die Gitterlinien sind zur Wand hin stark verdichtet und für die Anwendung von Low–Re–number (LRe)–Turbulenzmodellen geeignet. Der Fernfeldabstand des Rechengebiets liegt bei etwa 5 Halbspannweiten. Für die Berechnungen mit 16 Prozessoren auf dem Parallelrechner CRAY–T3E wird das gesamte Rechengitter gleichmäßig entlang der Strömungsrichtung (i–Richtung) in 16 gleichgroße Blöcke unterteilt.
An der Eintrittsfläche sind die Ruhedruck $p_0$ und die Ruhetemperatur $T_0$ vorgegeben. Zur Simulation der annähernd laminaren Einströmung wird dort ein Turbulenzgrad von 0.1% und eine

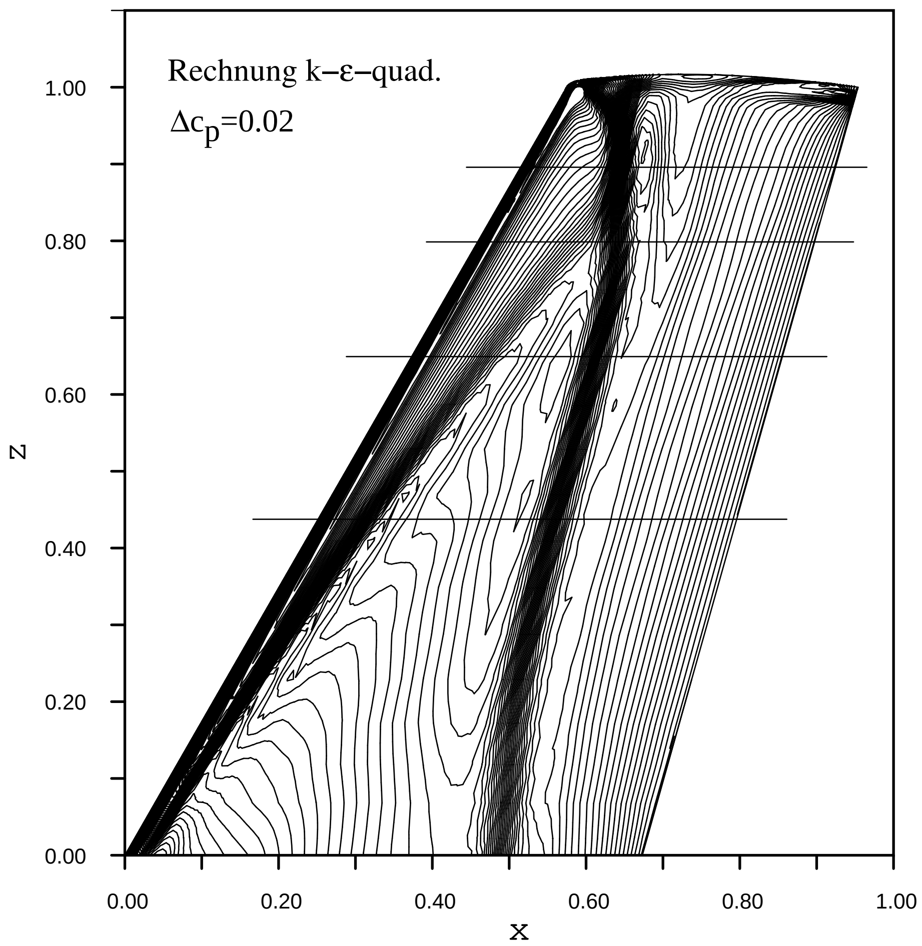



Abbildung 6.27: Transsonische Flügelumströmung (ONERA–M6, Schmitt u.a. 1979, $\alpha = 3.06^0$) mit Druckverteilung ($c_p$) auf der Flügeloberseite

sehr kleine turbulente Wirbelzähigkeit (10% der molekularen Zähigkeit) angenommen. An der Austrittsfläche (Unterschall) ist der Druck $p = p_\infty$ festgehalten. Die Rechnungen erfolgen mit dem Standard $k$-$\varepsilon$ EVM, dem LLR $k$-$\omega$ EVM, dem quadratischen $k$-$\varepsilon$ ASM, und dem quadratischen $k$-$\omega$ ASM. Weiterhin werden Rechnungen mit der Bernoullischen Gleichung der Gasdynamik ($H_0 = const.$) und der Enthalpietransportgleichung ($h$-Bilanzgl.) als Energiebilanz verglichen.
Bild 6.27 zeigt die Isolinien des Druckbeiwertes $c_p$ bei $\alpha = 3.06^0$ auf der Flügeloberseite bei Verwendung des quadratischen $k$-$\varepsilon$–Modells. Das $\lambda$–förmige Stoßmuster ist deutlich zu erkennen.

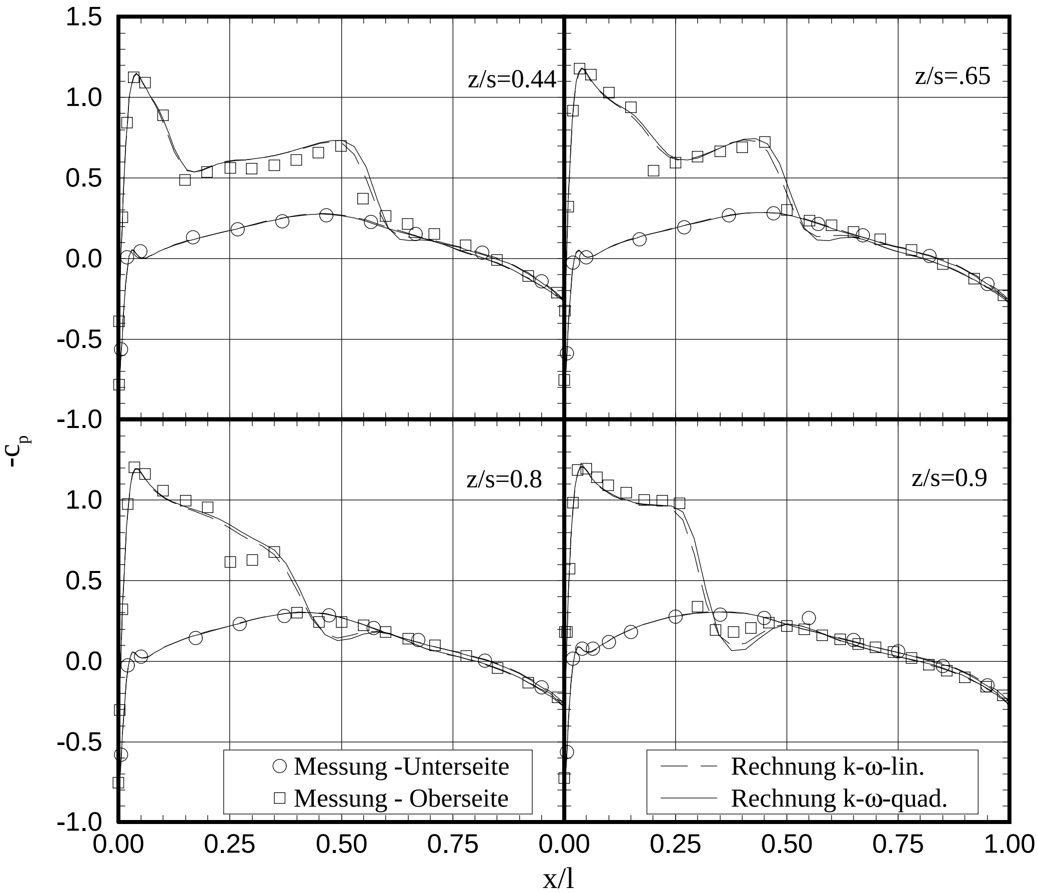



Abbildung 6.28: Transsonische Flügelumströmung (Schmitt u.a. 1979, $\alpha = 3.06^0$) mit Druckverteilung ($c_p$) in verschiedenen Profilschnitten, Rechnungen mit der Bernoullischen Gleichung der Gasdynamik

Die $c_p$–Verteilungen in vier Profilschnitten ($z/s$=0.44, 0.65, 0.8 und 0.9; $s$: Halbspannweite) sind in Bild 6.28 für das lineare und quadratische $k$–$\omega$ Modell im Vergleich zum Experiment dargestellt. Die Rechnungen erfolgten mit der Bernoullischen Gleichung der Gasdynamik als Energiebilanz. Die Flügeltiefe ($x-$Achse) ist mit der lokalen Flügellänge normiert. Aus dem Vergleich mit den Messungen geht hervor, daß die berechnete Druckverteilung bis auf die Umgebung der Verdichtungsstöße die des Experiments sehr genau wiedergibt. Der hintere Stoß bzw. der vereinigte Stoß werden in allen vier Profilschnitten relativ scharf aufgelöst, die berechnete Position des Stoßes entspricht der gemessenen Stoßlage. Der vordere Stoß ist in der Druckverteilung der Profilschnitte $z/s$=0.44 und 0.65 noch gut erkennbar, der berechnete Druckanstieg fällt jedoch ziemlich flach aus. In der Schnittebene $z/s$=0.8 fällt das Ende des vorderen Stoßes mit dem Anfang des hinteren Stoßes zusammen. Der in der Meßkurve scharf abgebildete treppenförmige Verlauf wird jedoch von den Rechenergebnissen mit allen Modellen nicht erfaßt. Zu einer genaueren Auflösung des

vorderen Stoßes reicht hier die Gitterfeinheit in Flügeltiefenrichtung nicht aus.
Alle Rechenergebnisse für die verschiedenen Turbulenzmodelle sind bei diesem Anstellwinkel nahezu identisch.
In Bild 6.29 sind die Druckverteilungen der Rechnungen mit der Bernoullischen Gleichung und der Enthalpietransportgleichung verglichen. Hier zeigt die Rechnung mit der Enthalpietransportgleichung zur Flügelspitze hin eine geringfügige Verbesserung stromab des Stoßes.

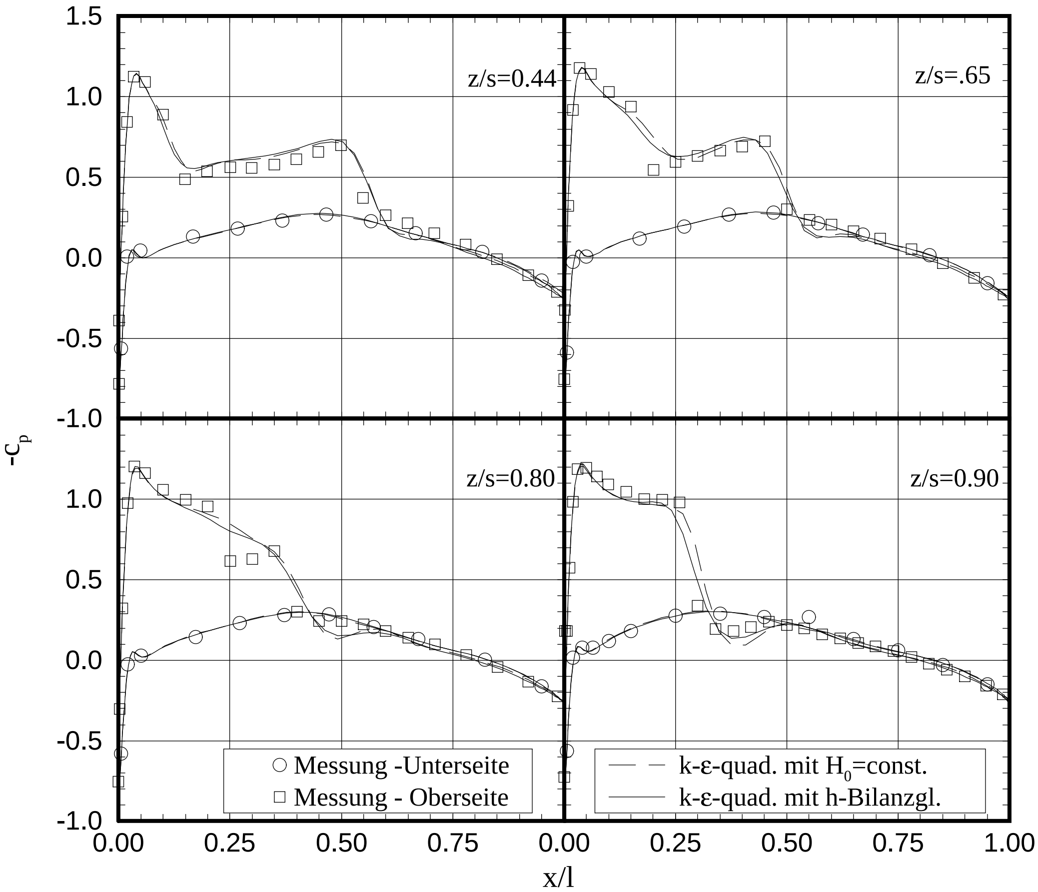



Abbildung 6.29: Transsonische Flügelumströmung (Schmitt u.a. 1979, $\alpha = 3.06^0$) mit Druckverteilung ($c_p$) in verschiedenen Profilschnitten, Vergleich der Bernoullischen Gleichung und der Enthalpietransportgleichung

Bei $\alpha = 5.06^0$ wurden keine auskonvergierten Lösungen mit dem LLR $k$-$\omega$–Modell und dem darauf basierten quadratischen ASM erzielt. Die Druckverteilungen mit den $k$-$\varepsilon$–Modellen sind in Bild 6.30 dargestellt.
Die Rechnungen mit dem linearen $k$–$\varepsilon$–Modell zeigen ein sehr stabiles Konvergenzverhalten. Demgegenüber lassen sich die Rechnungen mit dem quadratischen $k$–$\varepsilon$ ASM nur mit sehr starker Unterrelaxation durchführen, was zu einer Erhöhung der Rechenzeit um das 2.5– bis 3–fache gegenüber

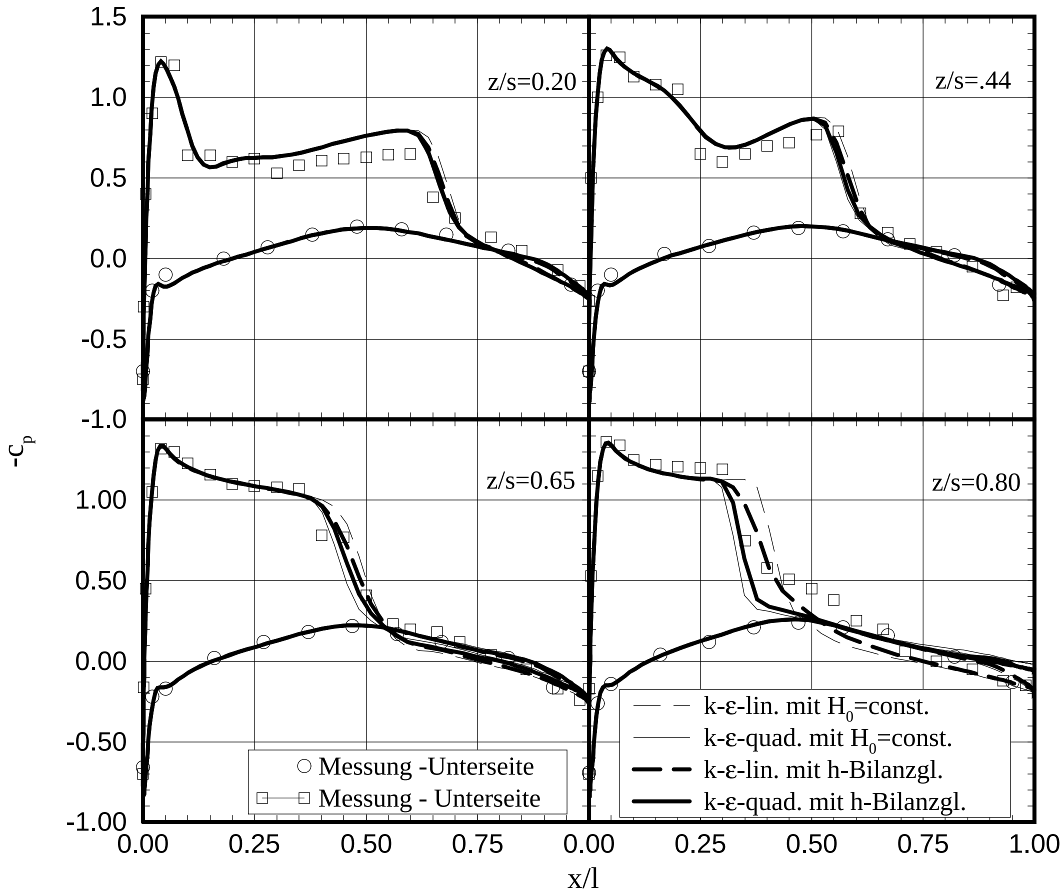



Abbildung 6.30: Transsonische Flügelumströmung (Schmitt u.a. 1979, $\alpha = 5.06^0$) mit Druckverteilung ($c_p$) in verschiedenen Profilschnitten

dem linearen Modell führt. Der Grund dafür liegt in dem durch das lineare und das quadratische Modell unterschiedlich vorhergesagten Ablöseverhalten. Das lineare $k$–$\varepsilon$–Modell führt hier zu einem relativ kleineren Ablösegebiet, die berechnete Strömung ist an der Flügelhinterkante wieder anliegend. Der gemessene Hinterkantendruck wird von diesen Modell in allen Profilschnitten (Bild 6.30) richtig wiedergegeben. Demgegenüber ist die Strömung mit dem quadratischen ASM durch großräumige Wirbel hinter dem Stoß gekennzeichnet, die lokal vom Stoß bis zur Hinterkante reichen. Dieses Verhalten wird durch den flachen Verlauf der Druckverteilung und den erhöhten Hinterkantendruck ($z/s = 0.80$ in Bild 6.30) gegenüber der Messung bestätigt. In den Profilschnitten $z/s = 0.20, 0.44$ und 0.65 zeigen alle Rechenergebnisse eine gute Übereinstimmung mit der Messung.

Interessant ist hier der Vergleich der Rechnungen mit der Bernoullischen Gleichung ($H_0 = const.$) und mit der Enthalpietransportgleichung ($h$-Bilanzgl.). In den Profilschnitten $z/s = 0.20$ und 0.44 unterscheiden sich alle Rechnungen und die Messung nur geringfügig. Im Schnitt $z/s = 0.65$ sind

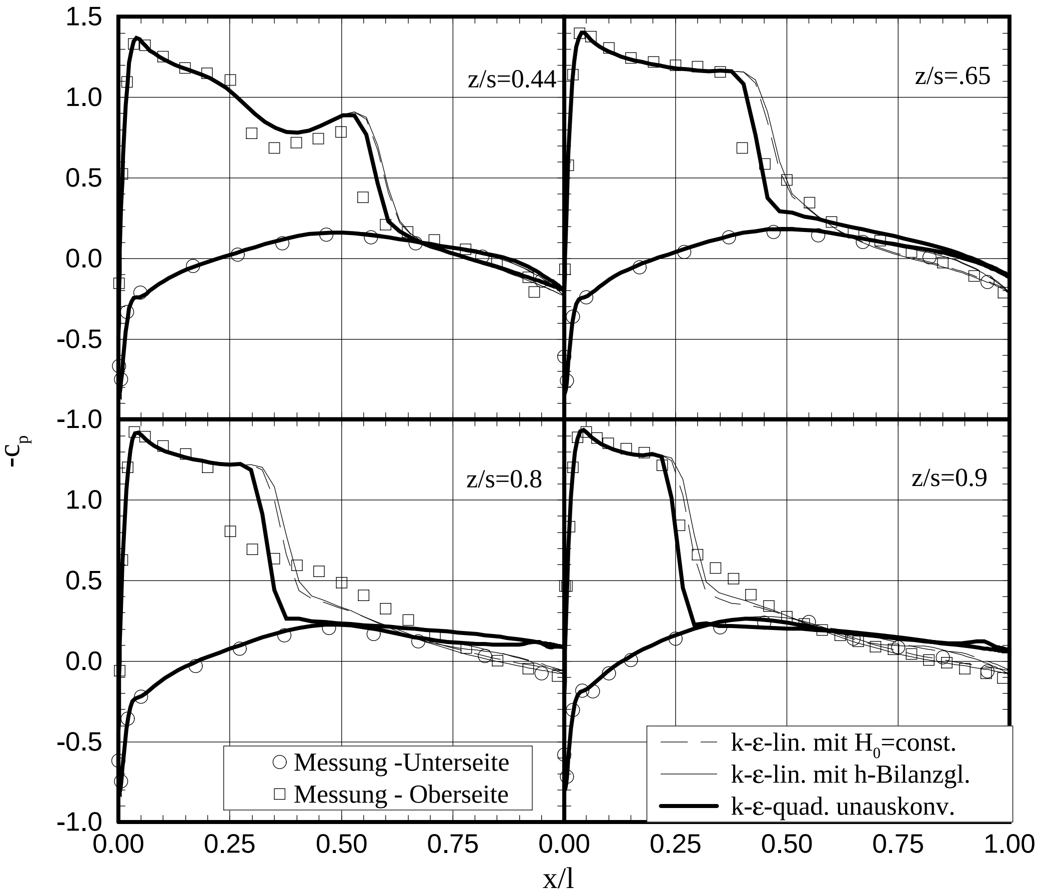



Abbildung 6.31: Transsonische Flügelumströmung (Schmitt u.a. 1979, $\alpha = 6.06^0$) mit Druckverteilung ($c_p$) in verschiedenen Profilschnitten

die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit linearem und quadratischem Turbulenzmodell bei Anwendung der Bernoullischen Gleichung deutlich zu erkennen. Die Lösungen mit der genaueren Enthalpietransportgleichung liegen dazwischen, der durch die Turbulenzmodelle verursachte Unterschied ist deutlich kleiner. Im Schnitt $z/s = 0.80$ liegen die Lösungen mit der Enthalpietransportgleichung ebenfalls enger beieinander als die mit der Bernoullischen Gleichung und haben eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment.

Bei einem Anstellwinkel von $\alpha = 6.06^0$ wurde nur für die Rechnungen mit dem linearen $k$–$\varepsilon$–Modell eine auskonvergierte Lösung erreicht, deren Druckverteilungen in Bild 6.31 im Vergleich mit den Messungen dargestellt sind. Die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit der Bernoullischen Gleichung und der Enthalpietranportgleichung sind hier gering. Die gemessene Stoßlage an den Schnitten $z/s = 0.65$ und $z/s = 0.80$ wird von beiden Rechnungen nicht richtig wiedergegeben. Im gleichen Bild sind nicht auskonvergierte Ergebnisse der Rechnung mit dem quadratischen $k$–$\varepsilon$ ASM dargestellt. Die Stoßlagen stimmen im Prinzip besser mit den Meßergebinissen überein,

aber die stromab des Stoßes liegenden größräumigen Wirbel, erkennbar am stark erhöhten Hinterkantendruck und der flachen Druckverteilung, lassen eine stationäre Lösung nicht mehr zu.
Da in der Arbeit von Schmitt & Charpin (1979) nur die Druckverteilung dokumentiert ist, besteht keine Möglichkeit einer differenzierten Beurteilung der verschiedenen Turbulenzmodelle. Bei Verdichtungsstößen mit anschließender Ablösung, wobei in dreidimensionalen Strömungen oftmals mit starker Stromlinienkrümmung zu rechnen ist, bedürfen alle hier eingesetzten Turbulenzmodelle Modifikationen.

Der Vergleich zwischen der Bernoullischen Gleichung der Gasdynamik und der Enthalpietransportgleichung bestätigt einerseits, daß die Bernoullische Gleichung eine gute Approximation der Energiebilanz darstellt. Andererseits beansprucht die Lösung der Enthalpietransportgleichung nur etwa 10% des gesamten Rechenaufwands und hat keinen negativen Einfluß auf das Konvergenzverhalten. Aufgrund des allgemeineren Gültigkeitsbereichs sollte sie in Zukunft immer verwendet werden.
Die Rechnungen zeigen, daß das eingesetzte Rechengitter an der Flügeloberseite nicht fein genug ist, um die Verdichtungsstöße genau aufzulösen. Insbesondere die algebraische Spannungsmodelle benötigen an Stoßstellen sehr feine Rechengitter, vor allem, wenn die Stromlinienkrümmung stark ist. Ob die algebraischen Spannungsmodelle die Experimente bei feineren Gittern besser wiedergeben, muß in einer weiterführenden Arbeit untersucht werden. In der vorliegenden Arbeit ist die Grundfunktionalität des Simulationsprogramms bei turbulenten transsonischen Strömungen sichergestellt.
Die parallele Effizienz wird durch die beschriebenen Testrechnungen voll bestätigt. Hierbei wird eine effektive Leistung pro Prozessor von 61 MFlop/s erreicht. Die Kommunikationszeit beträgt etwa 5% der Gesamtrechenzeit.

## 6.5 Umströmung einer Flügel–Rumpf–Konfiguration

In vielen technischen Anwendungen treten komplexe Strömungsphänomene auf, die durch die Strömung um Körper hervorgerufen werden. Die turbulente Umströmung einer Flügel–Rumpf–Konfiguration zwischen einem nicht verwundenen, ungepfeilten Flügel und einer ebenen Platte (Testfall 7) zählt unter aerodynamischen Gesichtspunkten zu den relevanten Testfällen. Der Testfall ist wegen der umfangreichen experimentellen Ergebnisse zur Validierung des numerischen Verfahrens und der Turbulenzmodelle besonders gut geeignet. Der untersuchte Tragflügel setzt sich aus gleichbleibenden Profilschnitten zusammen und wird ohne Anstellung umströmt (Bild 6.32). Der hintere Teil des Flügelprofils besteht stromab des Dickenmaximums aus einem NACA 0020–Profil; der vordere Teil wird durch eine 3:2–Halbellipse beschrieben. Die mit der Referenzgeschwindigkeit ($U_\infty = 26.75$ m/s) und der Flügeltiefe ($4.254T = 0.305$ m) gebildete Reynoldszahl beträgt $Re = 4.86 \cdot 10^5$.
Charakteristisch für diesen Testfall ist das Auftreten eines Hufeisenwirbels. Dieser entsteht an der Flügelvorderkante und wird entlang des Flügels stromab transportiert. Durch die Verdrängungswirkung des Flügels ist die Grenzschichtströmung über der ebenen Platte stark dreidimensional. Die Experimente von Devenport u. a. (1990) konzentrierten sich auf die Strömung im Nahbereich der vorderen Symmetrieebene, wo der Hufeeisenwirbel entsteht. Ölcmen u. a. (1995) untersuchten den Einfluß des durch den Hufeisenwirbel erzeugten Druckgradienten auf die Grenzschichtströmung der ebenen Platte.
Die Abmessungen des Rechengebiets und die verwendeten Randbedingungen sind in Bild 6.32 skizziert. Bei der numerischen Simulation wurde unter der Ausnutzung der Symmetrie nur die

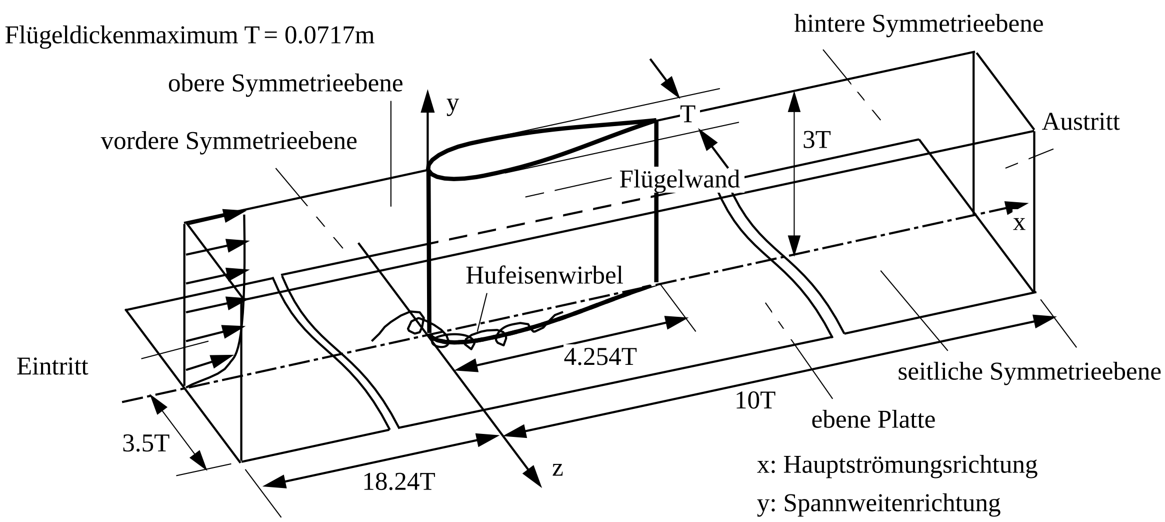



Abbildung 6.32: Geometrie der Flügel–Rumpf–Konfiguration, Devenport u.a. 1990, Rechengebiet und Randbedingungen

Hälfte der Konfiguration berechnet. Das Rechengitter besteht aus 12 Blöcken mit insgesamt etwa 500,000 finiten Bilanzvolumen.

Mit der HRe–Formulierung der Turbulenzmodelle können die auftretenden Strömungsphänomene nicht erfaßt werden. Daher finden die LRe–Turbulenzmodelle Anwendung, die aber eine sehr hohe Auflösung des wandnahen Bereichs durch das Rechengitter verlangen. Das verwendete Netz hat die erste Gitterschicht oberhalb der ebenen Platte bei einem $y^+$–Wert von $y^+ \approx 1.5$. Innerhalb der zähen Unterschicht ($y^+ < 11$) liegen ca. 5 Gitterschichten.

An der Eintrittsfläche ($x/T = -18.24$) des Rechengebiets wird den experimentellen Bedingungen entsprechend eine voll ausgebildete zweidimensionale turbulente Grenzschichtströmung angesetzt. Hierzu erfolgt eine zweidimensionale Vorrechnung, die das gemessene Geschwindigkeitsprofil in der vorderen Symmetrieebene gut wiedergibt. Die Ergebnisse dieser Rechnung einschließlich der Turbulenzvariablen werden als Einströmbedingung über die gesamte Eintrittsfläche festgeschrieben.

Für die Strömungssimulation werden sowohl die Basismodelle ($k$–$\varepsilon$, LLR $k$–$\omega$ EVM) als auch die Modelle mit höherwertiger Stress–Strain–Beziehung (quadratische $k$–$\varepsilon$, $k$–$\omega$ ASM) herangezogen.

Alle Rechnung erfolgten auf dem Parallelrechner CRAY–T3E unter Verwendung von 12 Prozessoren. Die Gitterblockanordnung und die Organisation des Datenaustauschs zwischen den Prozessoren sind bereits beispielhaft in den Bildern 4.3 und 4.5 des vorangehenden Kapitels dargestellt worden.

**Strömung in der Nähe der vorderen Symmetrieebene**

In Bild 6.33 werden die mit dem quadratischen $k$–$\omega$ Turbulenzmodell berechneten Geschwindigkeitsvektoren in der vorderen Symmetrieebene mit den Messungen verglichen. Der Hufeisenwirbel kommt klar zum Vorschein. Ebenso gute Übereinstimmung findet man für das in Spannweitenrichtung extrem dünne Rezirkulationsgebiet stromauf des Hufeisenwirbels ($-0.47 < x/T < -0.3$). Das Zentrum des Hufeisenwirbels liegt jedoch etwas tiefer als die gemessene Position.

Die in Bild 6.34 und Bild 6.35 dargestellten Ergebnisse mit jeweils beiden linearen bzw. quadratischen Turbulenzmodellen unterscheiden sich erheblich. Das wird insbesondere durch die Position des Ablösepunktes, des Wirbelzentrums und die maximale Rückströmgeschwindigkeit dokumentiert, die in Tabelle 6.6 im Vergleich zu den Messungen zusammengefaßt sind.

In der Rechnung mit dem linearen $k$–$\varepsilon$–Modell ist der Hufeisenwirbel nur andeutungsweise erkennbar (Bild 6.34). Die maximale Rückströmgeschwindigkeit liegt folglich auch deutlich unter dem gemessenen Wert. Mit dem LLR $k$–$\omega$–Modell zeigt sich ein Wirbel in der Symmetrieebene, der in der Stärke etwa der gemessenen Strömung entspricht. Allerdings liegt die Position des Wirbels und damit verbunden die Position des Ablösepunktes weiter stromauf als bei den Messungen.

Im Gegensatz zum linearen $k$–$\varepsilon$–Modell liefert die Rechnung mit der quadratischen Erweiterung des Modells ein viel klareres Bild des Hufeisenwirbels (Bild 6.35). Die Position des Wirbelzentrums in Hauptströmungsrichtung ($x/T$) wird sehr genau vorhergesagt, in Spannweitenrichtung

| | Ablösepunkt $(x/T)$ | Wirbelzentrum $(x/T, y/T)$ | max. Rückströmung |
|---|---|---|---|
| Messung | -.47 | ( 0.20, 0.050) | -13.0 m/s |
| lin. $k$–$\varepsilon$ | -.29 | ( 0.16, 0.030) | -7.2 m/s |
| quad. $k$–$\varepsilon$ | -.29 | ( 0.19, 0.038) | -8.7 m/s |
| lin. LLR $k$–$\omega$ | -.50 | ( 0.32, 0.038) | -12.4 m/s |
| quad. $k$–$\omega$ | -.48 | ( 0.22, 0.035) | -9.5 m/s |

Tabelle 6.6: Flügel–Rumpf–Umströmung (Devenport u.a. 1990) mit charakteristischen Größen in der vorderen Symmetrieebene

$(y/T)$ liegt sie knapp unter der gemessenen Position. Die Rückströmung ist weniger stark als im Experiment ausgebildet, die Strömung löst kurz vor der Wirbelbildung ab.
Die Rechnung mit dem quadratischen $k$–$\omega$–Modell liefert ein ähnliches Bild für den Hufeisenwirbel wie das quadratische $k$–$\varepsilon$–Modell (Bild 6.35). Das Verhalten der Strömung vor der Wirbelbildung wird besser vorhergesagt. Das weit stromaufwärts reichende, in Spannweitenrichtung sehr dünne Rückstromgebiet wird von diesem Modell fast exakt wiedergegeben.
Die obere Hälfte des Bildes 6.36 enthält ein Foto des Ölfilm–Experiments von Devenport u. a. in der Plattenebene nahe der Flügelvorderkante. Die untere Hälfte zeigt die mit dem quadratischen $k$–$\omega$ Modell berechnete Wandschubspannungsrichtung. Auf dem Foto des Ölfilm–Experiments sind zwei Linien klar erkennbar. Die vordere Linie markiert den Anfang des dünnen Ablösegebiets. Die hintere Linie grenzt den Bereich des vom Hufeisenwirbel einbezogenen Strömungsgebiets nach außen ab. Signifikant ist hier die abrupte Richtungsänderung der Wandschubspannung relativ zu dieser Linie. Diese Eigenschaft der Strömung wird ebenso wie die Lage des Rückströmgebiets und des unmittelbaren Einflußbereichs des Hufeisenwirbels von der Rechnung mit dem quadratischen $k$–$\omega$–Modell sehr exakt wiedergegeben.
Bild 6.37 gibt einen Überblick über die Qualität der mit dem quadratischen $k$–$\omega$–Modell erzielten Druckverteilung $(c_p)$ in der Plattenebene. Der vom Hufeisenwirbel verursachte Unterdruck führt hier zu Einbuchtungen bzw. Knicken in den Isobaren. Der Verlauf und die Lage der Isolinien sind in guter Übereinstimmung mit den Experimenten.
In Bild 6.38 sind $c_p$–Isolinien und Wandschubspannungsrichtungen für die mit dem linearen und dem quadratischen $k-\varepsilon$ Modell erzielten Ergebnisse vergleichend dargestellt. Die Begrenzungslinie des Wirbelströmungsbereichs, gekennzeichnet durch die abrupte Änderung der Wandschubspannungsrichtung, und die von dem Hufeisenwirbel verursachten Knicke in den Isobaren kommen in den Ergebnissen des quadratischen Modells sehr deutlich zum Vorschein. Demgegenüber spiegeln die Rechenergebnisse auf Basis des linearen Modells eine weitestgehend kontinuierliche Richtungsänderung der Wandschubspannung wieder. Die Einbuchtung in den Isobaren ist nur schwach ausgeprägt. Der Grund liegt in der gegenüber dem Experiment zu schwach vorhergesagten Stärke des Hufeisenwirbels.

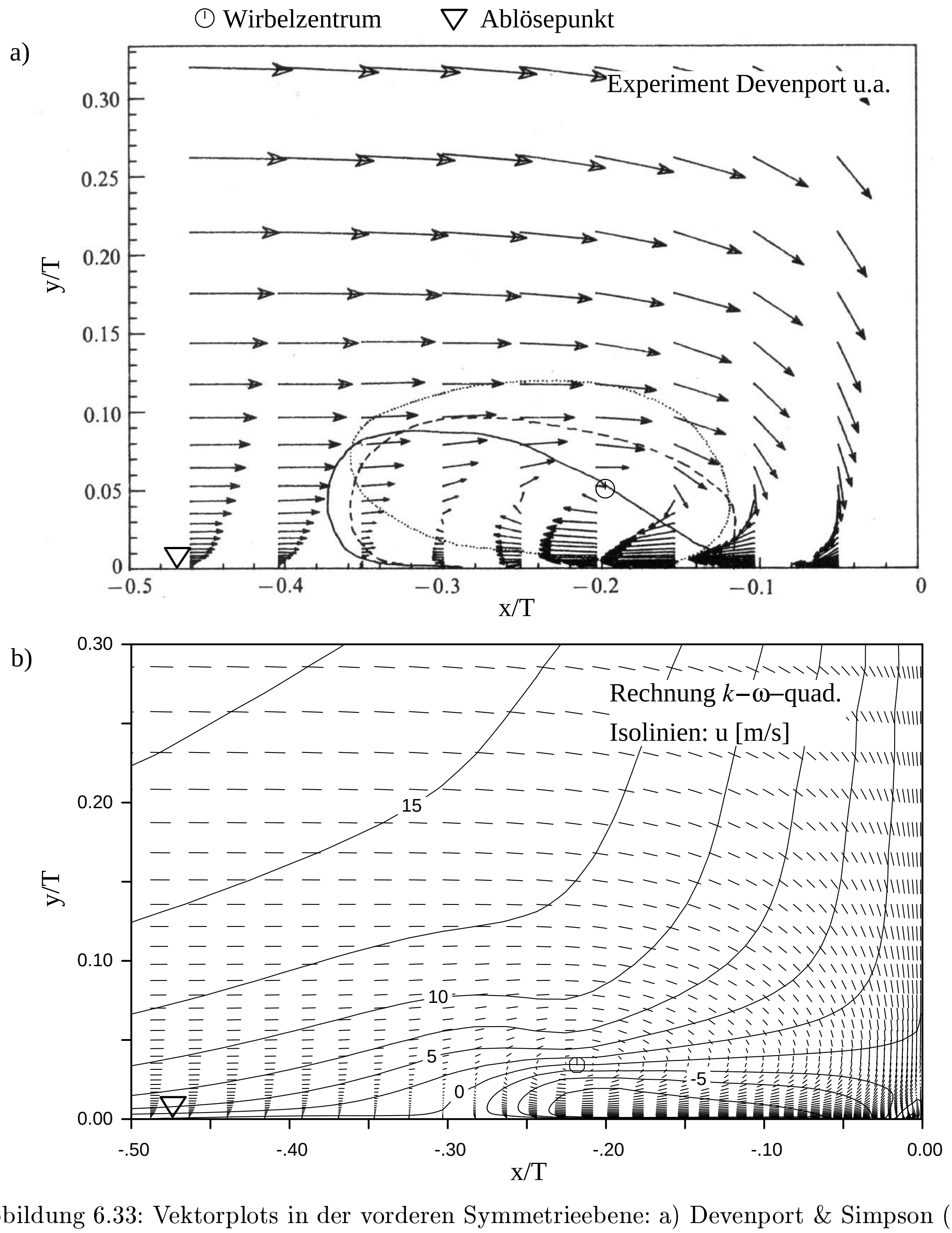



Abbildung 6.33: Vektorplots in der vorderen Symmetrieebene: a) Devenport & Simpson (1990) b) Ergebnis des quad. $k$–$\omega$ ASM mit Isolinien der Geschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung

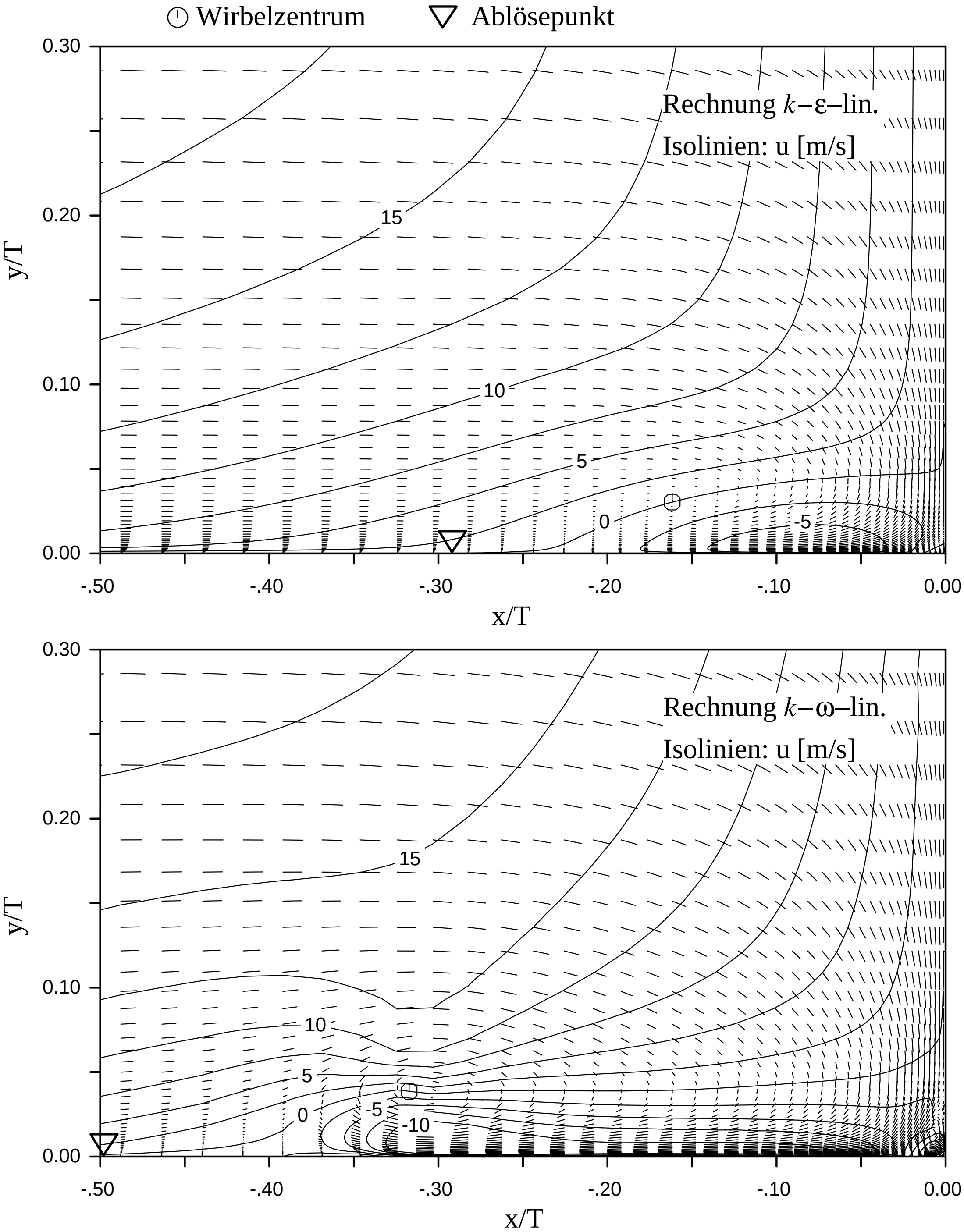
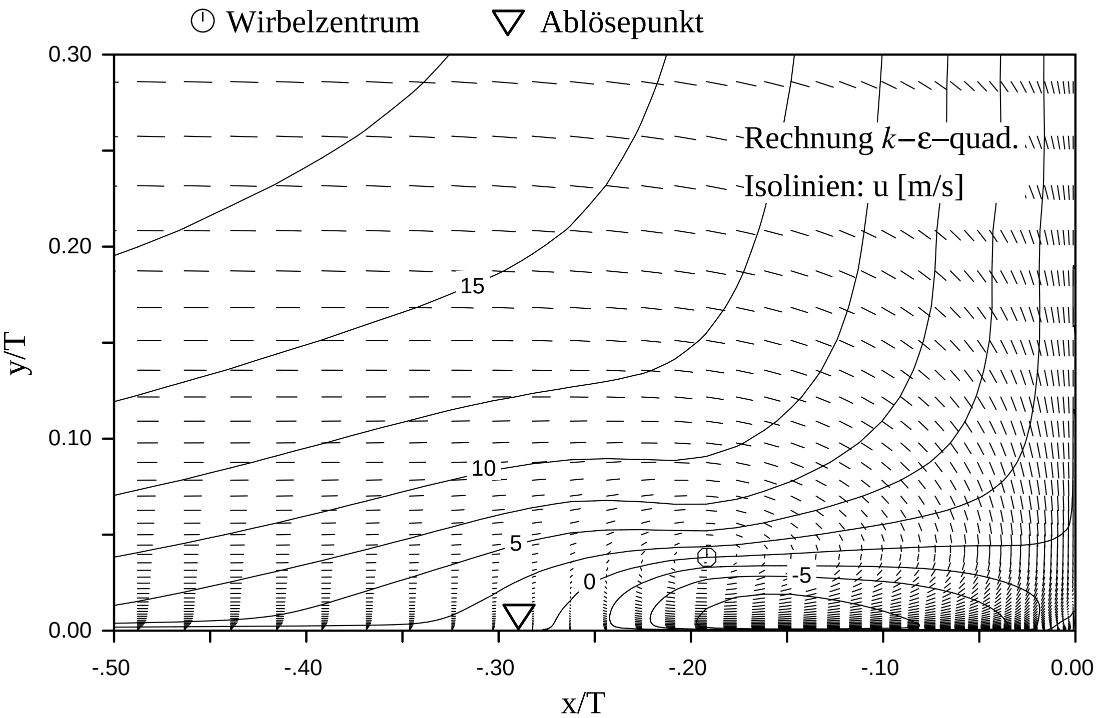



Abbildung 6.34: Flügel–Rumpf–Umströmung (Devenport u.a. 1990) mit Rechenergebnissen für lineare Turbulenzmodelle (EVM)



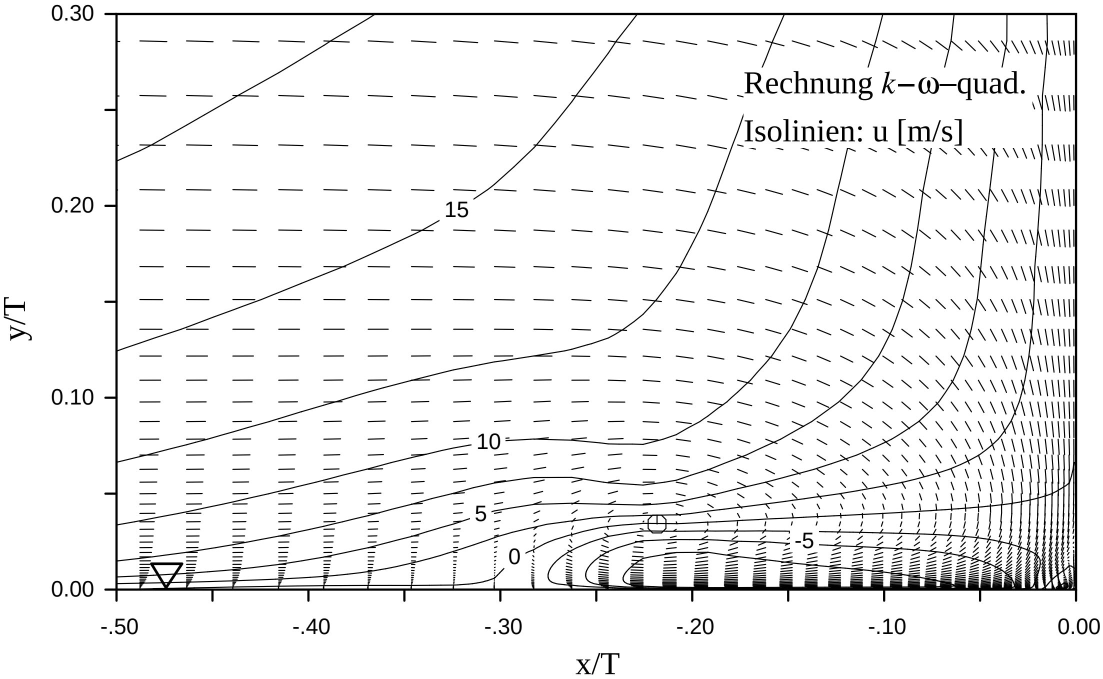




Abbildung 6.35: Flügel–Rumpf–Umströmung (Devenport u.a. 1990) mit Rechenergebnissen für quadratische Turbulenzmodelle

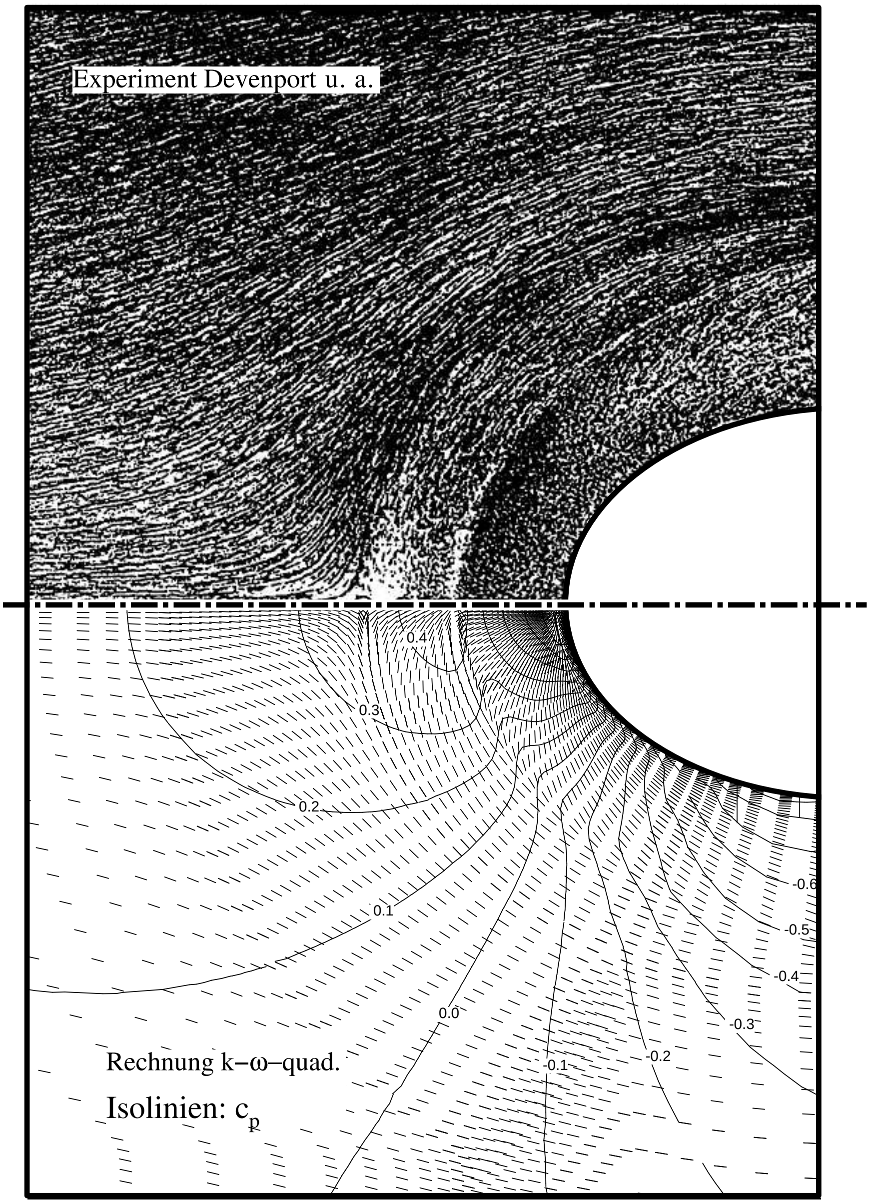



Abbildung 6.36: Flügel–Rumpf–Umströmung (Devenport u.a. 1990) mit Wandschubspannungsrichtungen in der Plattenebene

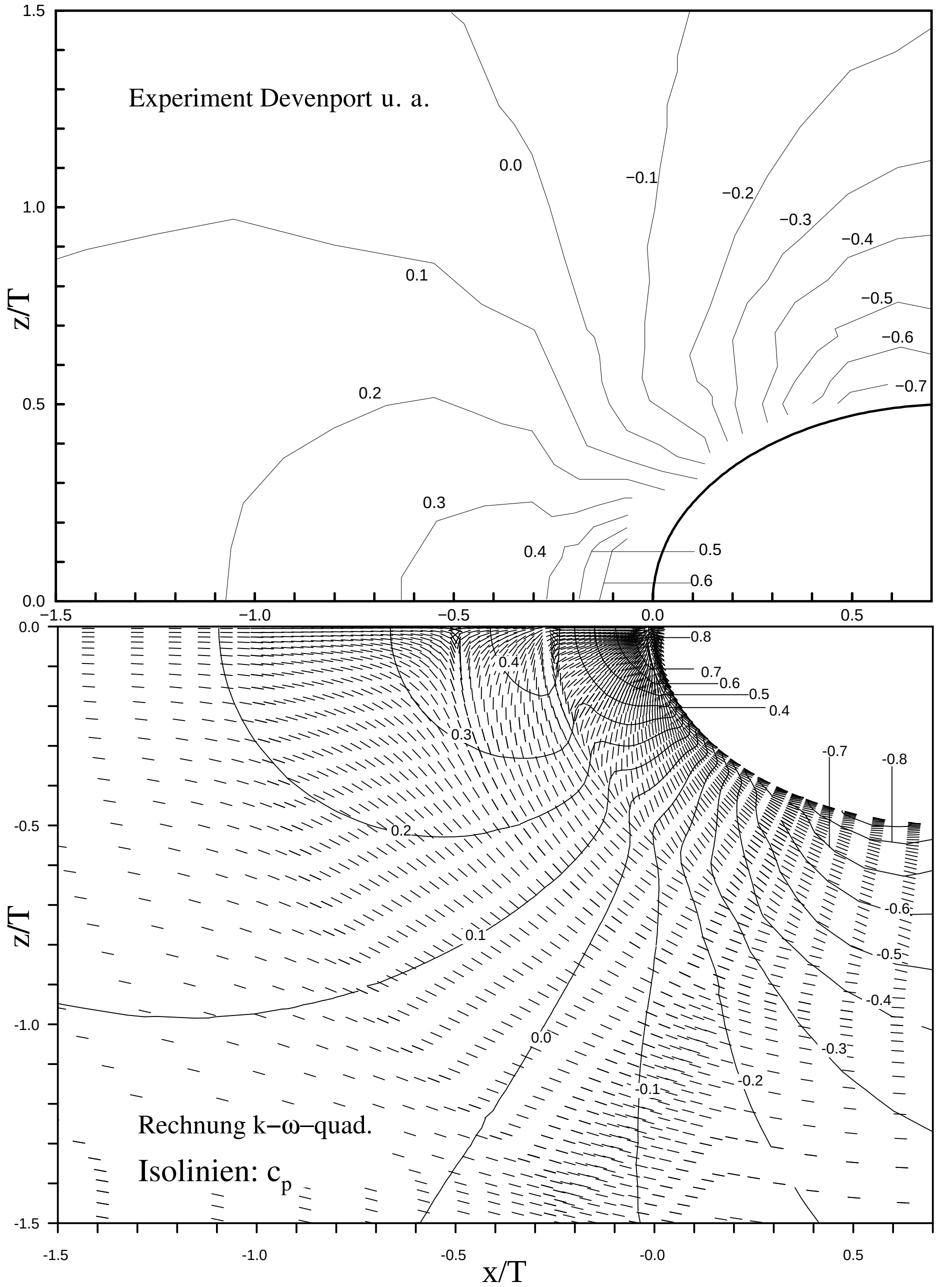



Abbildung 6.37: Flügel–Rumpf–Umströmung (Devenport u.a. 1990) mit Isobaren ($c_p$) in der Plattenebene

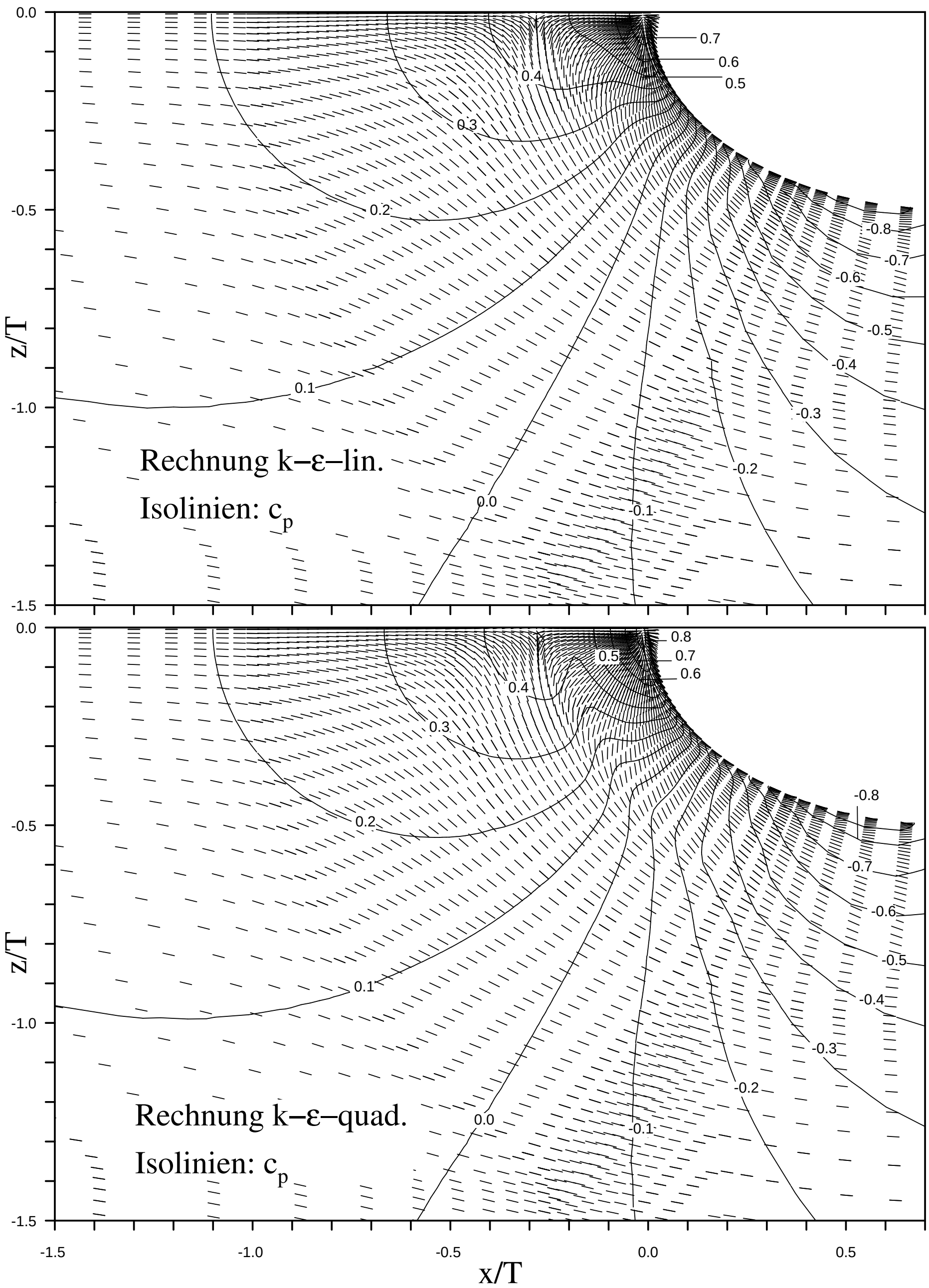



Abbildung 6.38: Flügel–Rumpf–Umströmung (Devenport u.a. 1990) mit Isobaren ($c_p$) und Wandschubspannungsrichtungen in der Plattenebene

**Dreidimensionale Grenzschichtströmung über der ebenen Platte**

Aufgrund des Verdrängungseffekts des Flügels einschießlich des Hufeisenwirbels führt die Grenzschichtströmung über der ebenen Platte zu einem Druckgradienten quer zur Anströmrichtung. Sie ist im Nahbereich der Flügelwurzel hochgradig dreidimensional.

| Station | $x/T$ | $z/T$ | $U_{ref}$ (m/s) | $\beta_{FS}$ | $\beta_w$ | $\delta$(mm) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | -1.590 | -0.467 | 27.6 | $-1.68^0$ | $-6.1^0$ | 38.6 |
| 1 | -1.239 | -0.513 | 27.5 | $-2.64^0$ | $-11.5^0$ | 39.2 |
| 2 | -0.811 | -0.620 | 27.5 | $-4.81^0$ | $-24.0^0$ | 40.2 |
| 3 | -0.471 | -0.722 | 27.5 | $-8.63^0$ | $-33.7^0$ | 39.3 |
| 4 | -0.166 | -0.914 | 27.5 | $-9.45^0$ | $-30.6^0$ | 39.0 |
| 5 | 0.092 | -1.04 | 27.5 | $-7.71^0$ | $-19.7^0$ | 39.6 |
| 6 | 0.421 | -1.17 | 27.5 | $-5.09^0$ | $-7.17^0$ | 39.2 |
| 7 | 0.768 | -1.25 | 27.5 | $-2.71^0$ | $-3.50^0$ | 38.8 |

Tabelle 6.7: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit Position und Meßdaten der Stationen 0 bis 7

Im folgenden werden die Rechenergebnisse mit den Messungen von Ölcmen u. a. (1995) verglichen. In Tabelle 6.7 sind die Position der Meßstationen, die Referenzgeschwindigkeit $U_{ref}$, der Außenströmungswinkel $\beta_{FS}$, der Wandschubspannungswinkel $\beta_w$ und die Grenzschichtdicke $\delta$ aus den Messungen enthalten. Die Meßstationen liegen entlang einer von der Wandschubspan-

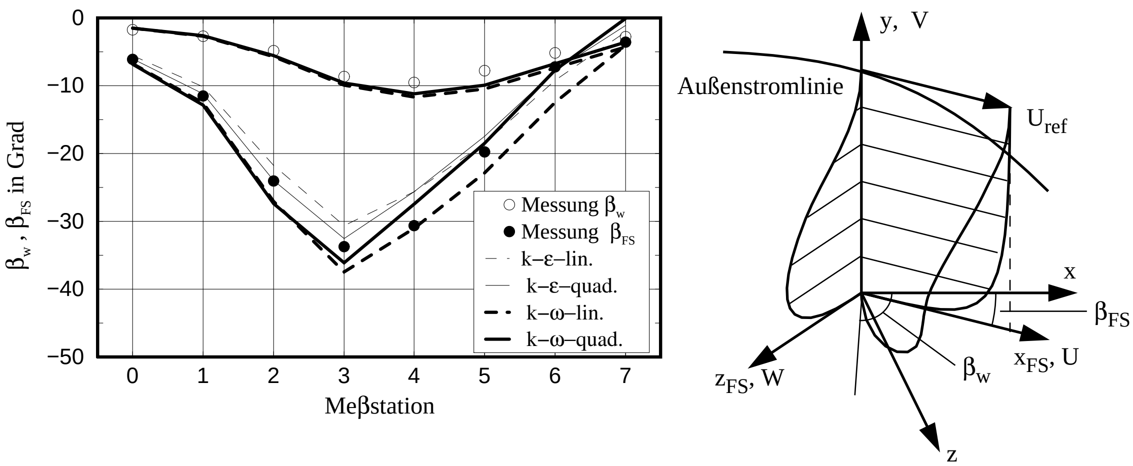



Abbildung 6.39: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit dem Vergleich des Außenströmungswinkels $\beta_{FS}$ und des Wandschubspannungswinkels $\beta_w$ in den Meßstationen 0 bis 7; Grenzschichtkoordinaten $x_{FS}, z_{FS}$

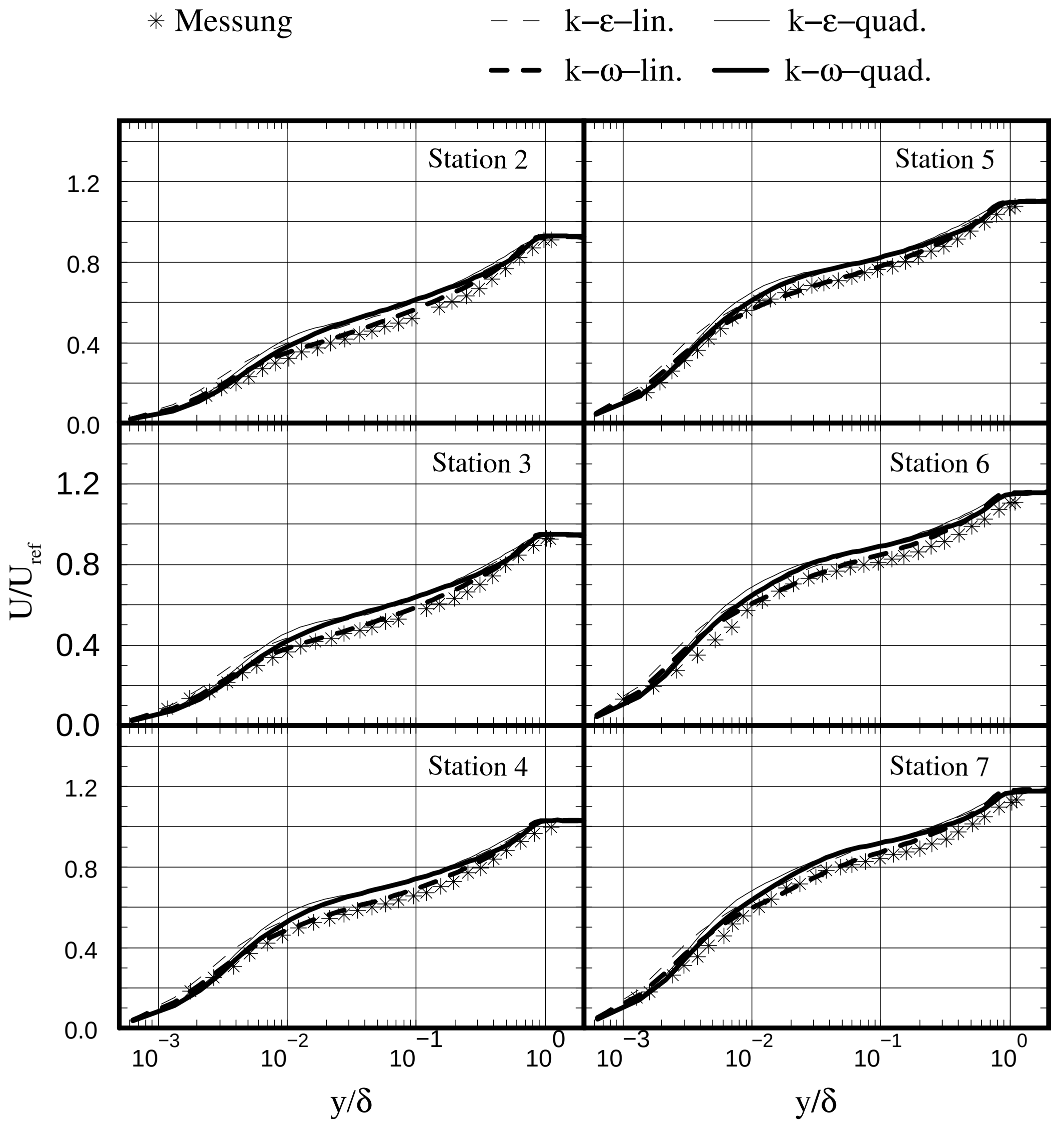



Abbildung 6.40: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit Geschwindigkeitsprofilen U in den Meßstationen 2 bis 7

nungsrichtung tangierten Linie knapp außerhalb des von dem Hufeisenwirbel direkt einbezogenen Strömungsbereichs.

Die berechneten Außenströmungswinkel und Wandschubspannungswinkel stimmen für alle Turbulenzmodelle relativ gut mit den Messungen überein (Bild 6.39).

In den Bildern 6.40 bis 6.47 sind die Profile der mittleren Geschwindigkeiten und der Reynoldsspannungen auf der Basis von Grenzschichtkoordinaten über dem normierten Wandabstand $y/\delta$ dargestellt. Die Drehung des Bezugssystems ($\beta_{FS}$) und die Referenzgrößen ($U_{ref}, \delta$) sind für alle Profile den Meßwerten entnommen worden.

In Bild 6.40 sind die Geschwindigkeitsprofile $U$ in Richtung der Außenströmung in den Meßstationen 2 bis 7 dargestellt. Hierbei erzielt die Rechnung mit dem linearen LLR $k$–$\omega$–Modell das beste Ergebnis. Andere Modelle liefern geringfügig vollere U–Profile im Bereich des logarithmischen Wandgesetzes (Log–Law Bereich, für den Testfall $5 \cdot 10^{-3} < y/\delta < 3 \sim 4 \cdot 10^{-2}$).

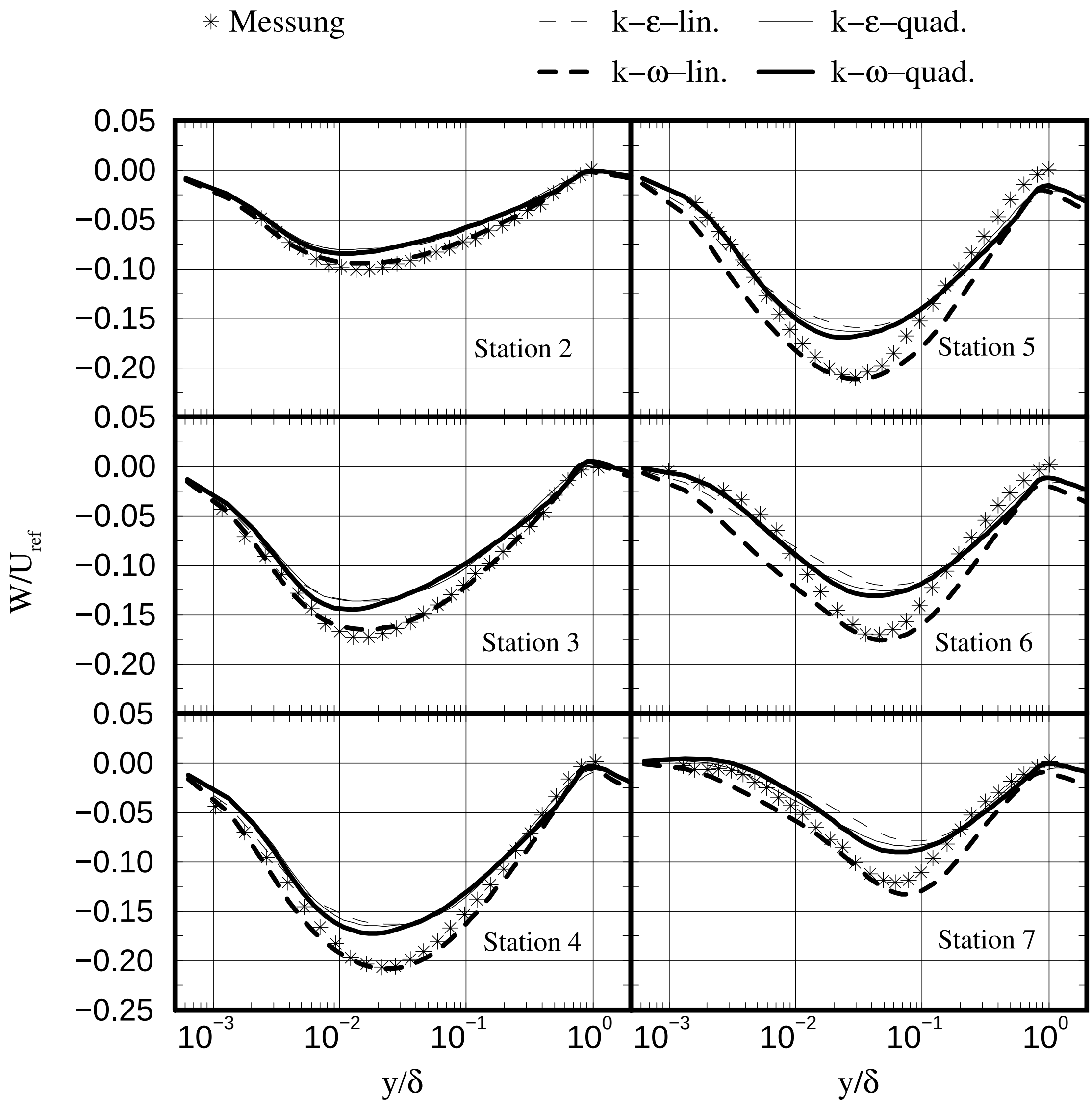



Abbildung 6.41: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit Geschwindigkeitsprofilen W in den Meßstationen 2 bis 7

Die maximale Querströmung (W–Profil in Bild 6.41) wird, vom linearen und quadratischen $k$–$\varepsilon$– sowie vom quadratischen $k$–$\omega$–Modell um etwa 20 % unterschätzt. Dagegen wird mit dem linearen LLR $k$–$\omega$ Modell im Log–Law–Bereich die beste Übereinstimmung mit den Meßdaten erreicht. Beide quadratischen Modelle erzielen jedoch im Bereich der zähen Unterschicht ($y/\delta < 5 \cdot 10^{-3}$) eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messungen.

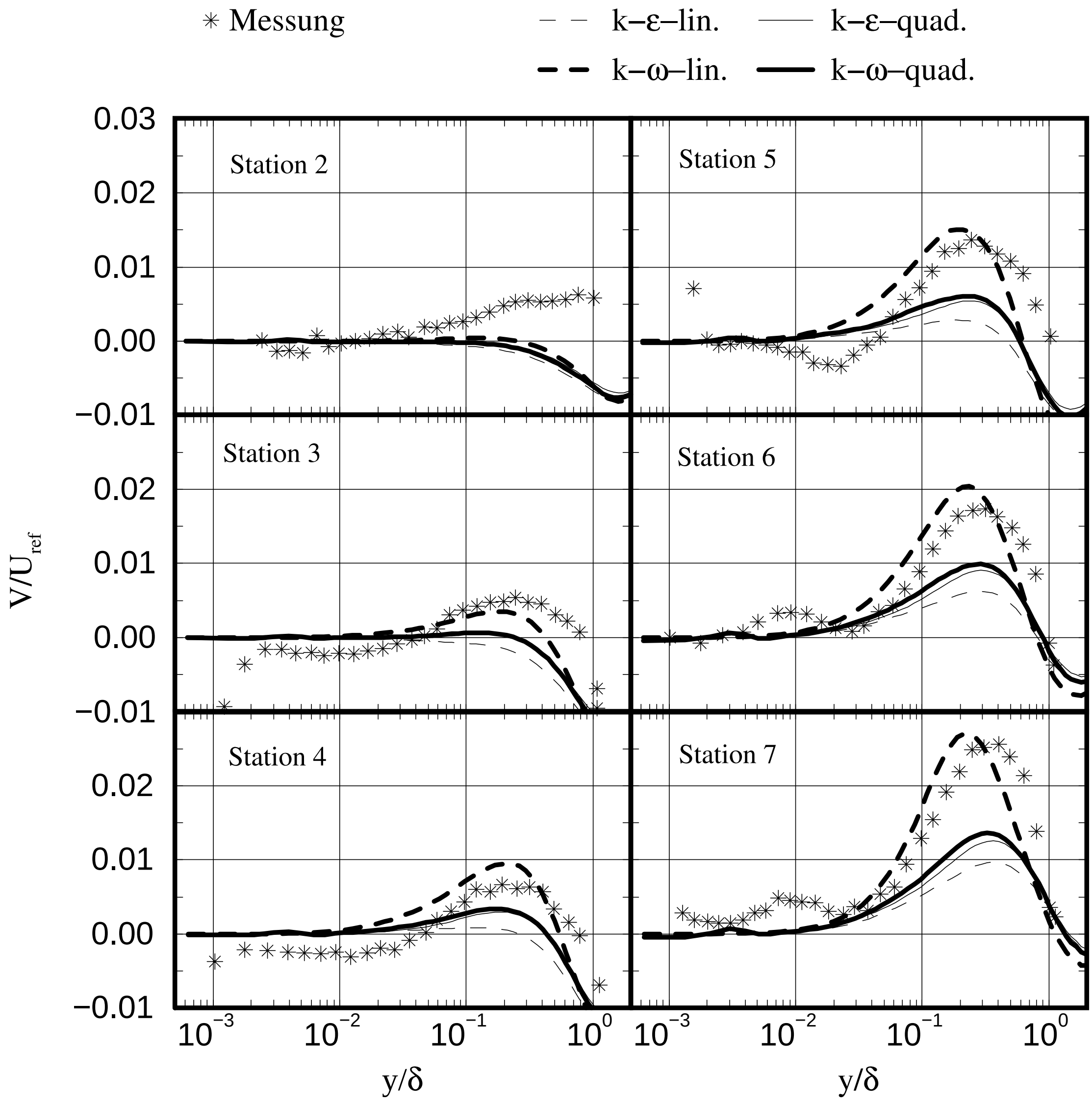



Abbildung 6.42: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit Geschwindigskeitprofilen V in den Meßstationen 2 bis 7

Für alle Turbulenzmodelle stimmt die Wandnormalengeschwindigkeit $V$ in der Profilform mit den Messungen überein (Bild 6.42), wobei das LLR $k$–$\omega$–Modell hier die beste quantitative Übereinstimmung erzielt.

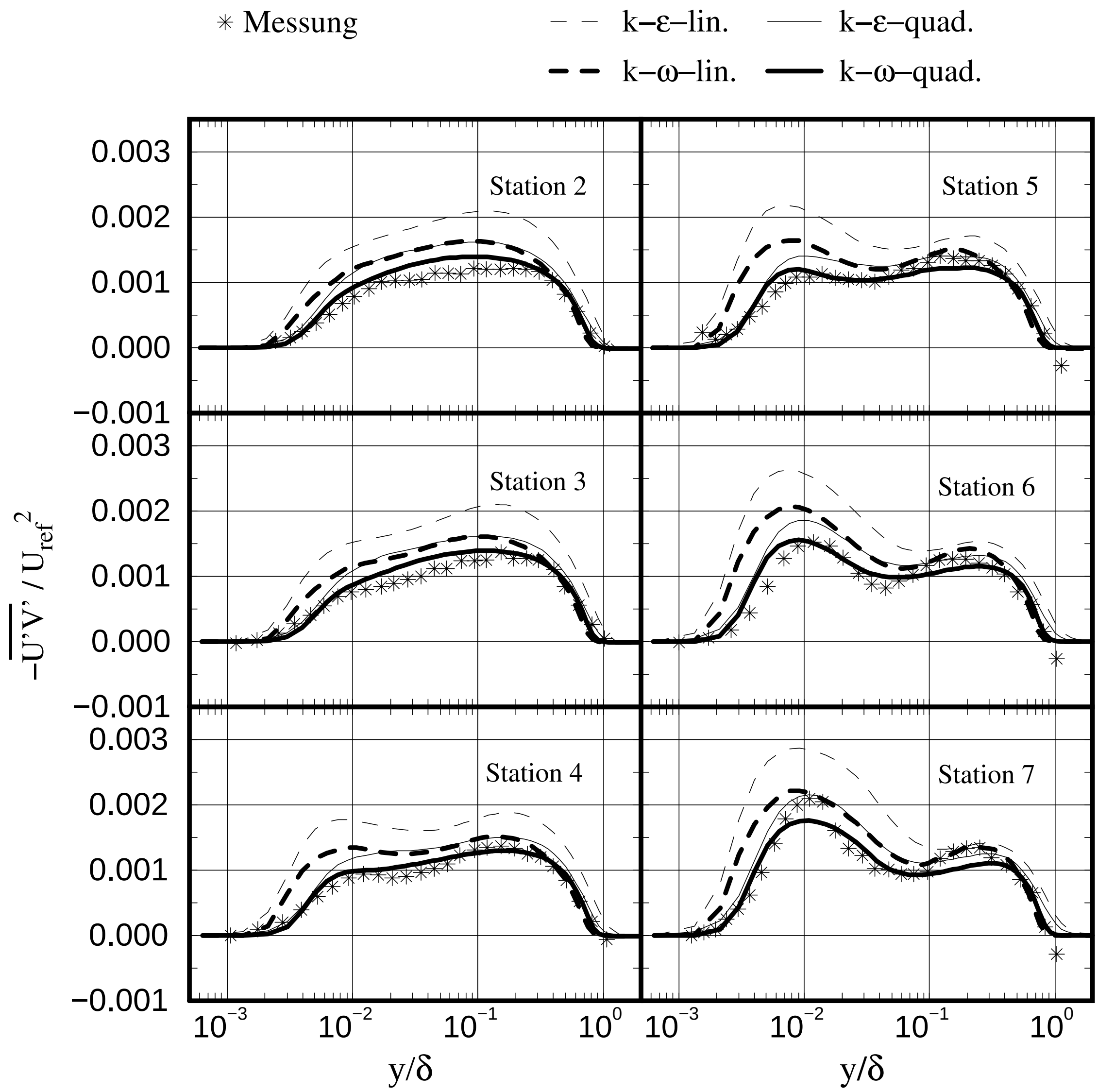



Abbildung 6.43: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit der Reynoldsschen Schubspannung $-\overline{U'V'}$ in den Meßstationen 2 bis 7

In einer ebenen zweidimensionalen Grenzschichtströmung wird der turbulente Austausch von der Reynoldsschen Schubspannung $-\overline{U'V'}$ dominiert. Diese ist an der Wand null, erreicht ihr Maximum am Anfang des Log–Law–Bereichs und fällt dann zum Grenzschichtaußenrand hin wieder auf Null ab. Wegen der dreidimensionalen Effekte zeigen die in Bild 6.43 dargestellten $-\overline{U'V'}$–Profile einen anderen Verlauf. In den Meßstationen 2 und 3 sind die Maxima gegenüber einer zweidimensionalen Grenzschichtströmung nach außen verschoben. Ab Station 4 bildet sich ein zweites Maximum am Anfang des Log–Law–Bereichs. Das innere Maximum übertrifft das äußere Maximum in den hinteren Meßstationen 5 und 6. Dies steht im Einklang mit der dort abnehmenden Querströmung. Qualitativ geben alle Turbulenzmodelle den Verlauf der gemessenen Profile

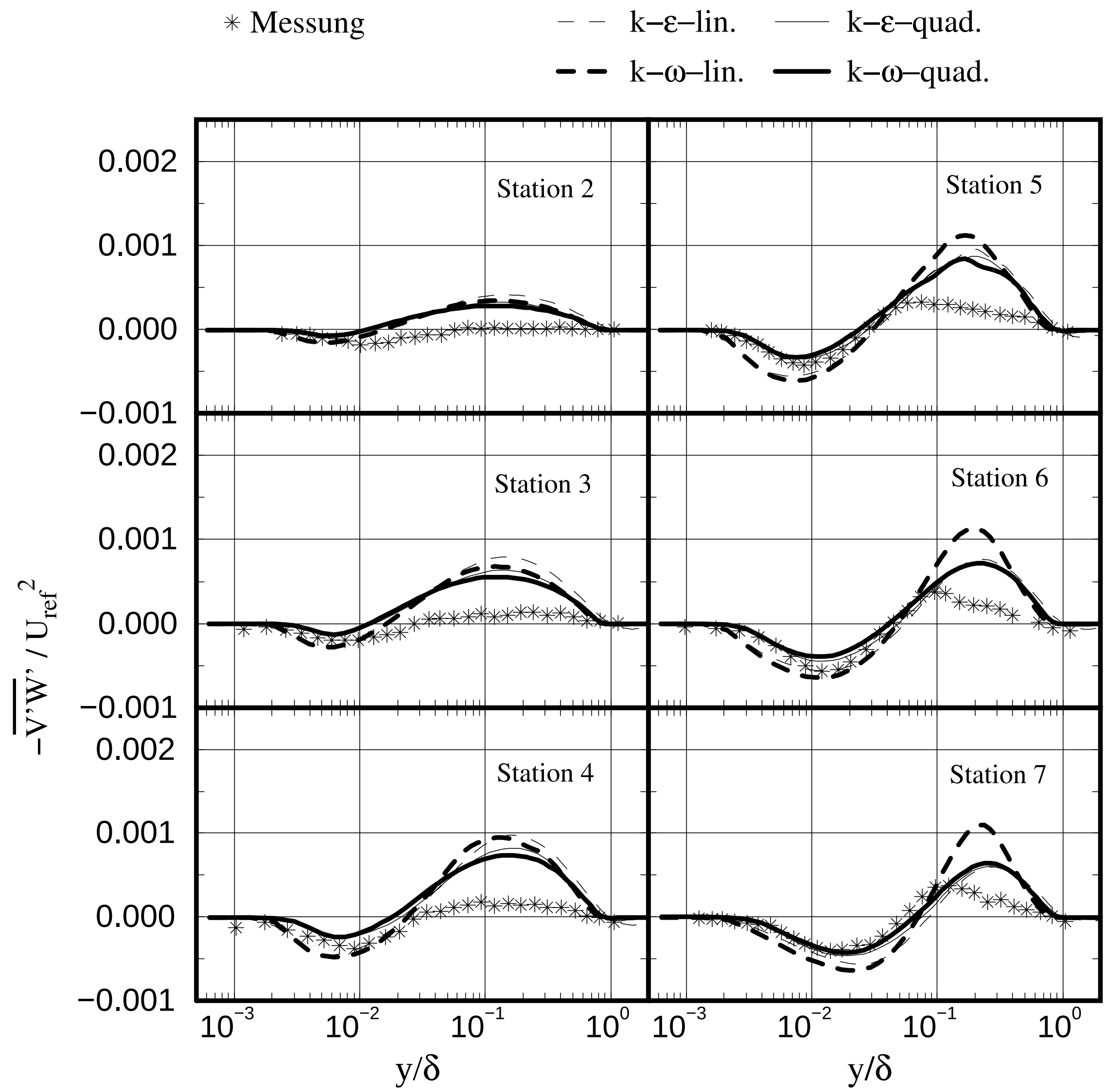



Abbildung 6.44: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit der Reynoldsschen Schubspannung $-\overline{V'W'}$ in den Meßstationen 2 bis 7

wieder, wobei die beiden quadratischen Modelle auch eine sehr gute quantitative Übereinstimmung erzielen.

Die Reynoldssche Schubspannung $-\overline{V'W'}$, die den turbulenten Austausch der Querkomponente $(W)$ des Impulses verursacht, wird in der zähen Unterschicht und in weiten Teilen des Log–Law–Bereichs von den Rechnungen gut wiedergegeben (Bild 6.44). Im Grenzschichtaußenbereich, wo der Meßwert frühzeitig absinkt, steigen die gerechneten Werte bei allen Turbulenzmodellen bis zu einem Maximum. Die Lage des $-\overline{V'W'}$–Maximums fällt mit dem des $-\overline{U'V'}$–Profils zusammen. Für dreidimensionale turbulente wandgebundene Strömungen existiert ein Mechanismus, der den turbulenten Austauschvorgang der Querkomponente des Impulses dämpft. Dieses Phänomen wird

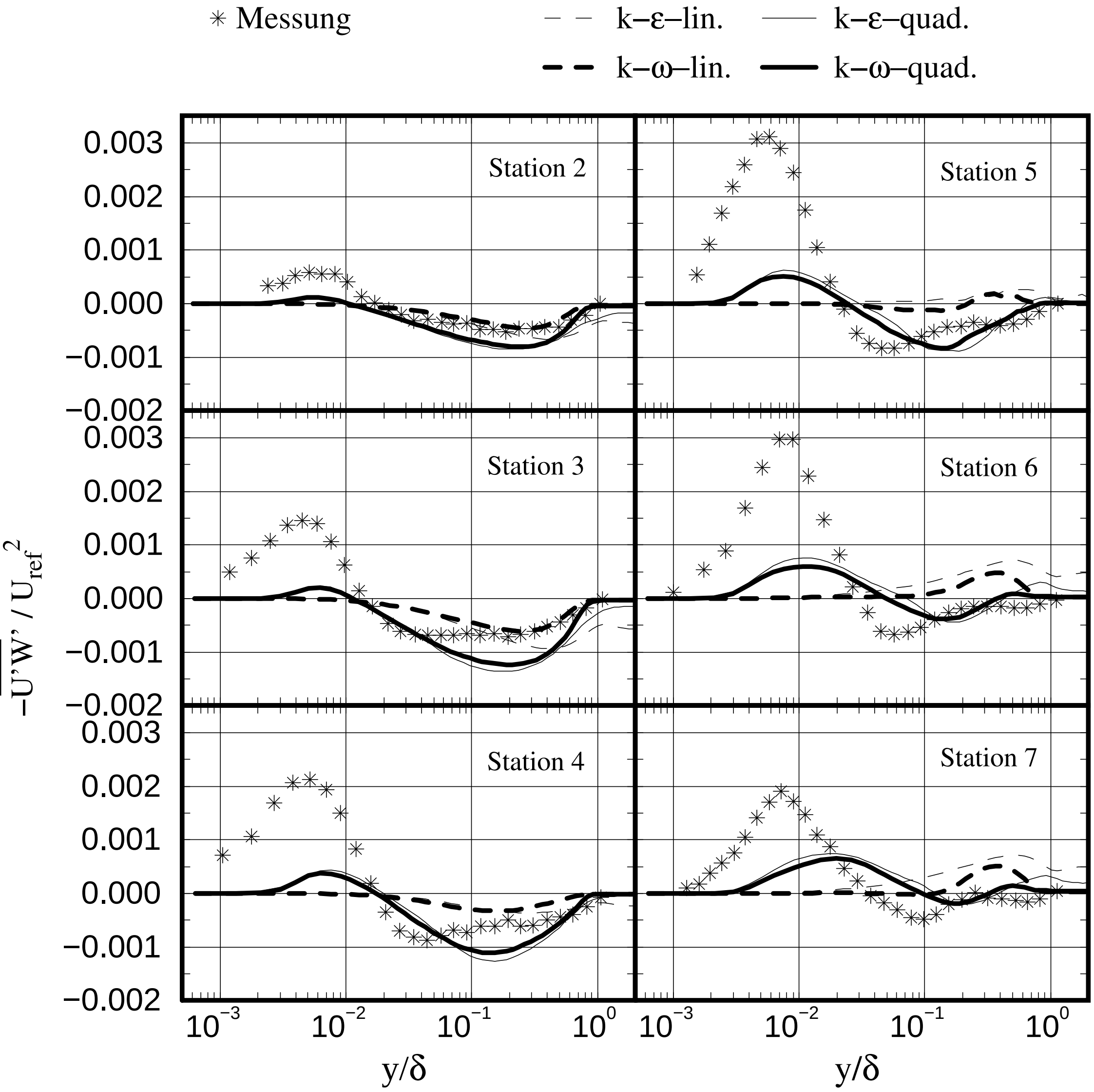



Abbildung 6.45: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit der Reynoldsschen Schubspannung $-\overline{U'W'}$ in den Meßstationen 2 bis 7

hier von keinem der verwendeten Turbulenzmodelle wiedergegeben.

Bei der Vorhersage der Reynoldsschen Schubspannung $-\overline{U'W'}$ (Bild 6.45) versagen alle Modelle. Vor allem im wandnahen Bereich verzeichnen die Experimente mit Zunahme der Dreidimensionalität der mittleren Strömung einen starken Zuwachs dieser Spannung. Die quadratischen Modelle vermögen zwar tendentiell diesem Wachstum zu folgen, der Betrag wird jedoch um ein Mehrfaches unterschätzt.

Diese Spannung beschreibt den turbulenten Austauschvorgang parallel zur Wand und spielt in der Bilanzgleichung der gemittelten Geschwindigkeit eine untergeordnete Rolle. Deswegen stimmen die Profile der mittleren Geschwindigkeiten trotz der falschen Vorhersage dieses Terms mit den

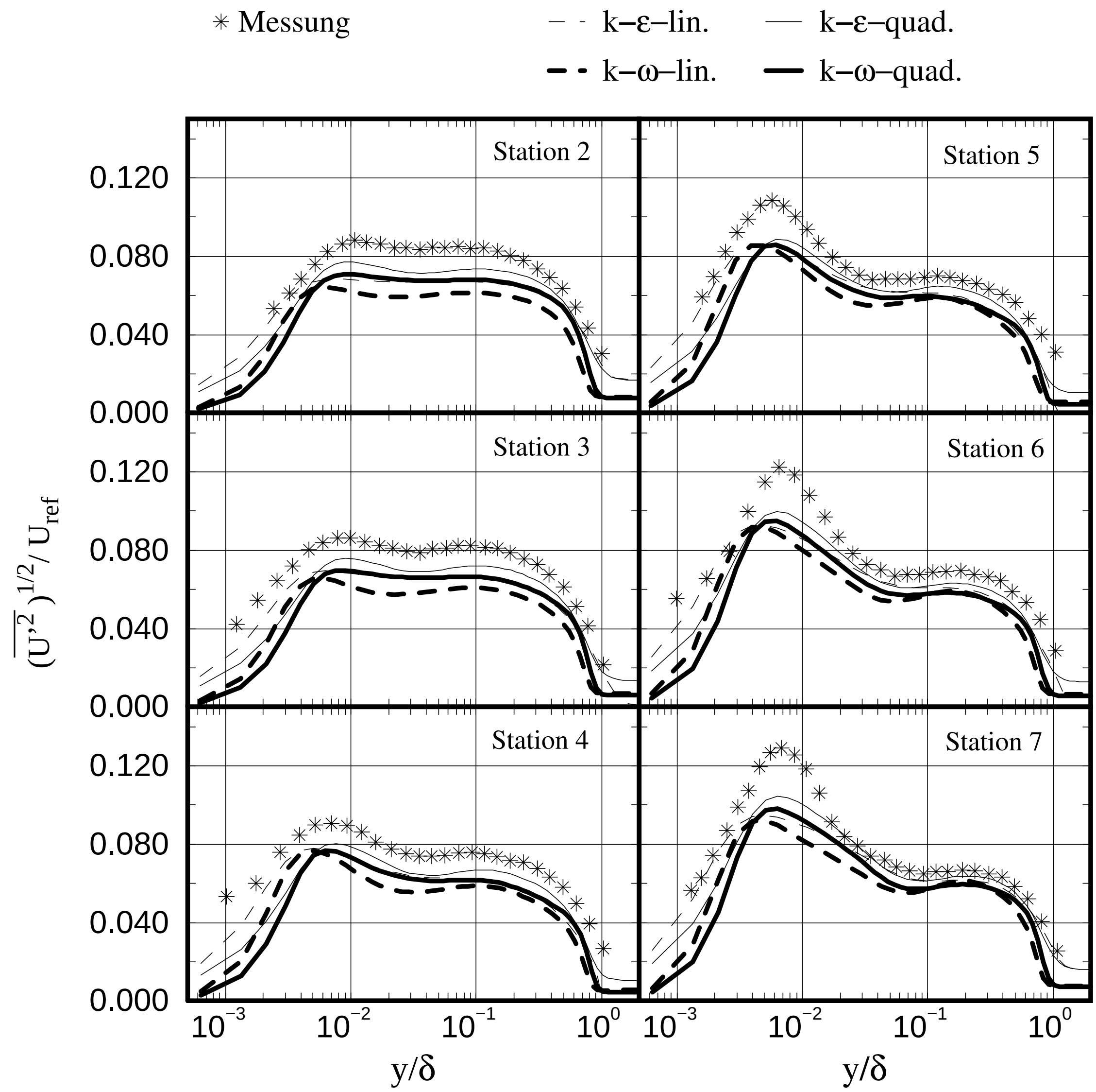



Abbildung 6.46: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit der Reynoldsschen Normalspannung $\overline{U'^2}$ in den Meßstationen 2 bis 7

Messungen überein.

Die Übereinstimmung der Reynoldsschen Normalspannung $\overline{U'^2}$ (Bild 6.46) zwischen den Rechnungen und der Messung ist relativ gut. Das in der Messung festgestellte Maximum und der Anstieg am Anfang des Log–Law–Bereichs entlang den Meßstationen wird von den Turbulenzmodellen weitgehend korrekt wiedergegeben. Die $\overline{V'^2}$– und $\overline{W'^2}$–Profile in Bild 6.48 zeigen einen analogen Verlauf wie die $\overline{U'^2}$–Profile. Dieser Verlauf wird aber von experimenteller Seite nicht bestätigt.

In Bild 6.47 sind alle drei Reynoldsschen Normalspannungen in der Meßstation 7 zusammen dargestellt. Die gemessenen Profile zeigen stark anisotrope Verläufe im Innenbereich. In der Rechnung mit dem linearen $k$–$\varepsilon$–Modell (linkes Diagramm) sind zwischen den drei Profilen kaum Unter-

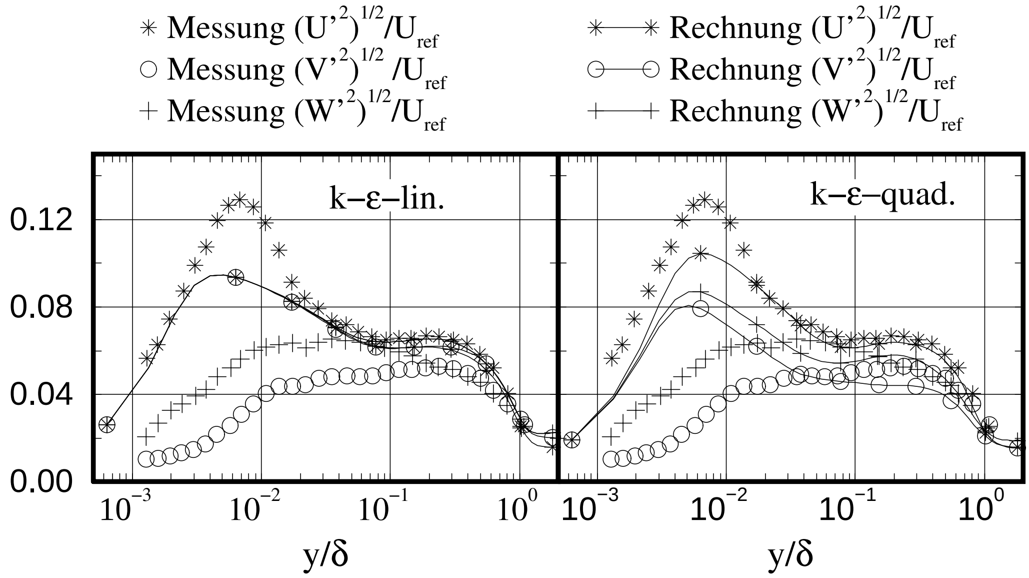



Abbildung 6.47: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit den Reynoldsschen Normalspannungen in Meßstation 7

schiede feststellbar. Die nichtlineare Erweiterung bringt eine Verbesserung. Sie kann das korrekte Maß an Spannungsanisotropie aber nicht wiedergeben.

Im Hinblick auf eine Wertung der Turbulenzmodelle lassen sich folgende Schlußfolgerungen ziehen:

1. Das LLR $k$–$\omega$ Modell liefert bei diesem Testfall bessere Ergebnisse als das Standard $k$–$\varepsilon$–Modell. Der Grund liegt in der strömungsabhängigen Formulierung der Modellkoeffizienten, die Aspekte des Realizibility–Prinzips und den Einfluß der Stromlinienkrümmung berücksichtigt. Das Modell liefert von allen hier getesteten Modellen die besten mittleren Geschwindigkeitsprofile. Letzteres gilt sowohl für die Primärgeschwindigkeit ($U$) als auch für die Quer– ($W$) und Normalgeschwindigkeiten ($V$).

2. Die Verwendung quadratischer algebraischer Spanungsmodelle verbessert die Qualität der vorhergesagten Reynoldsschen Spannungen. Bei den beiden Schubspannungen $-\overline{U'V'}$ und $-\overline{V'W'}$, die den turbulenten Austauschvorgang dominieren, wird zumindest im inneren Bereich der Grenzschicht eine sehr gute Übereinstimmung mit den Meßwerten erzielt. Vorteile des quadratischen Modells in Verbindung mit der LLR–$\omega$–Gleichung zeichnen sich außerdem bei der Simulation im Bereich der vorderen Symmetrieebene ab.

3. In einer Vergleichsarbeit von Visonneau (1997) wurde die gleiche Strömungskonfiguration auf Basis eines impliziten Reynoldsspannungsmodells (RSM) untersucht. Die Profile der bei-

den dominanten Schubspannungsterme $-\overline{U'V'}$ und $-\overline{V'W'}$ sind in der Vergleichsrechnung mit RSM und in der hier durchgeführten Rechnung mit dem quadratischen $k$–$\varepsilon$ ASM nahezu identisch. Die anisotropen Normalspannungszustände der Grenzschichtströmung sind jedoch in der Vergleichsrechnung besser erfaßt. Die Entstehung des Hufeisenwirbels in der vorderen Symmetrieebene wird von RSM und ASM in gleicher Weise wiedergegeben. Die Druckverteilungen in der Plattenebene stimmen ebenfalls überein.

4. Eine weitere Verbesserung wird zumindest bei der Berechnung dreidimensionaler Grenzschichtströmungen durch die Berücksichtigung kubischer Terme zur Bildung der Reynoldsspannungen erhofft (Rung u.a. 1998).

Aufgrund des nicht ganz ausbalancierten Lastenausgleichs (unterschiedliche Anzahl von FV pro Gitterblock, maximal 50,000 FV) ist die effektive Leistung auf dem Parallelrechner CRAY–T3E nicht ganz so hoch wie bei Testfall 6 (siehe Kap. 6.4.2). Der erreichte Wert beträgt hier 55 MFlop/s. Die Kommunikationszeit liegt im Verhältnis zur Gesamtrechenzeit bei 4%.

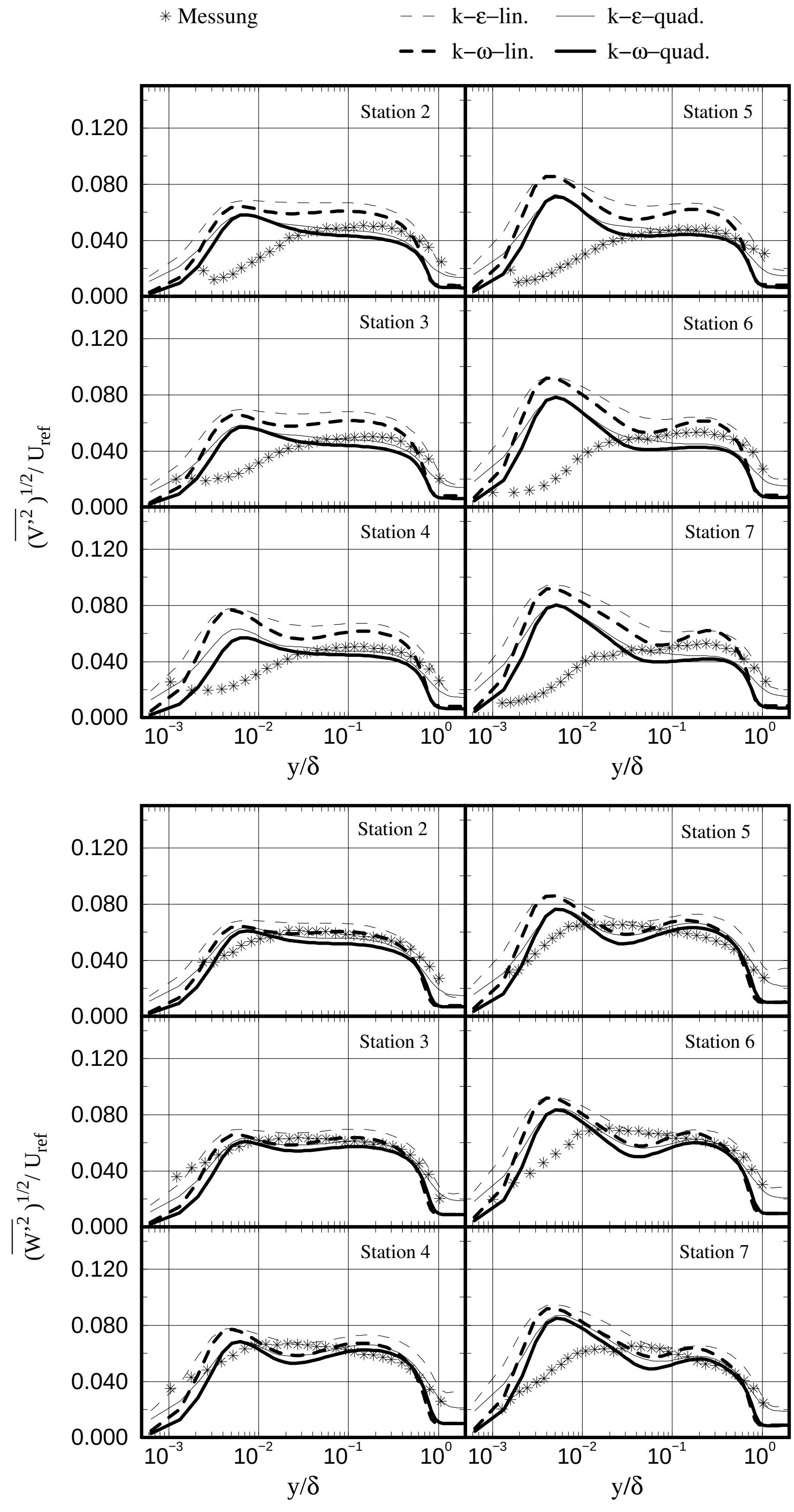



Abbildung 6.48: Flügel–Rumpf–Umströmung (Ölcmen u.a. 1995) mit den Reynoldsschen Normalspannungen $\overline{V'^2}$ und $\overline{W'^2}$ in den Meßstationen 2 bis 7

# Kapitel 7

# Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit ist ein paralleler Lösungsalgorithmus zur dreidimensionalen Simulation komplexer turbulenter Strömungen entwickelt worden. Das Rechenverfahren basiert auf allgemeinen körperangepaßten Koordinaten. Für die Simulation können Multiblockgitter mit beliebigen Blockanordnungen und unstrukturierten Blockverbindungsflächen eingesetzt werden. Mit derartigen Gittern läßt sich eine genaue und effiziente Erfassung von komplexen Geometrien verwirklichen. Die numerische Approximation basiert auf dem Finite Volumen Verfahren mit zellzentrierter Variablenanordnung. Alle Diskretisierungsformeln sind in allgemeingültigen Formulierungen aufgestellt, die auch auf unstrukturierte Gitter übertragbar sind. Diese Eigenschaft umfaßt insbesondere die neu entwickelten TVD–Konvektionsschemata höherer Ordnung. Durch die Erweiterung des ursprünglichen Druckkorrekturverfahrens kann der numerische Lösungsalgorithmus sowohl für inkompressible als auch für kompressible Strömungen eingesetzt werden. Zur Konvergenzbeschleunigung wurde die Mehrgittermethode für das Gesamtverfahren implementiert. Angepaßt an die Struktur der Koeffizientenmatrizen auf Multiblockgittern wurde die „Strongly Implicit Procedure“ von Stone zur effizienten Lösung von algebraischen Gleichungssystemen eingesetzt. Zur genaueren Erfassung turbulenter Strömungsvorgänge wurden nichtlineare algebraische Spannungsmodelle in das Verfahren implementiert.
Bei der programmtechnischen Umsetzung des numerischen Verfahrens wurde eine überschaubare Datenstruktur mit einheitlichen Datenzugriffsmethoden konzipiert, welche durch ein System von standardisierten Programmeinzelteilen unterstützt wird. Dies stellt nicht nur eine große Erleichterung für die allgemeine Programmentwicklung dar, sondern soll auch weiterführende Entwicklungen und Erweiterungen des Programms vereinfachen.
Anhand einer Reihe von experimentell vermessenen Testfällen wurden die elementaren Funktionalitäten des Simulationsprogramms validiert. Die Testrechnungen umfaßten laminare und turbulente sowie inkompressible und kompressible Strömungen, die teilweise auch für Entwurfsverfahren im Ingenieurbereich von Interesse sind. Vergleichsrechnungen wurden auf unterschiedlichen Gittern für die Mehrgittermethode sowie für unterschiedliche Turbulenzmodelle durchgeführt.

Für laminare Strömungen sind mit der Mehrgittermethode Effizienzsteigerungen des Gesamtverfahrens um den Faktor 6 bis 18 erreicht worden. Dies steht in guter Übereinstimmung mit vergleichenden Untersuchungen anderer Autoren. Unbefriedigend bleiben jedoch die Testergebnisse für turbulente Strömungen. Eine allgemeingültige Anwendung der Mehrgittermethode unter Verwendung komplexer Transportgleichungsturbulenzmodelle ist derzeit noch nicht in Sicht.

Die auf der Gebietszerlegung basierende Parallelisierung des Verfahrens ermöglicht die Anwendung des Programms auch auf komplexere Simulationsaufgaben. Alle numerischen Methoden und Lösungsprozeduren sind auf ihre Parallelisierbarkeit überprüft und an die Architektur von Massiv–Parallelrechnern angepaßt worden. Den Schwerpunkt bei der Parallelisierung bildete die Verwirklichung effizienter Datenkommunikation auf Mehrprozessorcomputern mit verteilten Arbeitsspeichern. Für die lokale Datenkommunikation wurde eine weitgehend parallele Ausführungsvorschrift gefunden, deren flexibler Einsatz durch programmunabhängig generierte Kommunikationstabellen realisiert wurde. Der Ablauf der globalen Kommunikation folgt der optimalen Strategie des sogenannten „Kettenbriefsystems“. Die Kommunikation basiert auf dem allgemein verfügbaren Softwarepaket PVM3. Die parallele Effizienz des Simulationsprogramms wurde durch die Testrechnungen auf dem Massiv–Parallelrechner CRAY T3E unter Verwendung von 12 bzw. 16 Prozessoren untersucht. Die erzielte effektive Leistung von etwa 55 bis 61 MFlop/s pro Prozessor ist vergleichbar mit anderen Strömungssimulationsprogrammen. Die Effizienz des entwickelten parallelen Algorithmus wurde auch bei DNS und LES Untersuchungen mit ähnlichen Leistungen bei bis zu 60 Prozessoren bestätigt. Hervorzuheben ist die Unabhängigkeit der Leistung von der Prozessoranzahl, die auch als lineare Skalierbarkeit bezeichnet wird. Voraussetzung dazu ist die in dieser Arbeit realisierte fast vollständige Parallelisierung sowohl der Rechenalgorithmen als auch der Datenkommunikation.

Die für zweidimensionale und achsensymmetrische Strömungen bewährten algebraischen Spannungsmodelle liefern auch im Rahmen der hier gezeigten dreidimensionalen Anwendungsbeispiele im Vergleich zu den linearen Wirbelviskositätsmodellen realitätsnähere Simulationsergebnisse. Die Qualität der Ergebnisse auf der Basis algebraischer Spannungsmodelle ist generell vergleichbar mit derjenigen, die von anderen Autoren im Zusammenhang mit impliziten Reynoldsspannungsmodellen erzielt wurde.

Das entwickelte Simulationsverfahren stellt eine Kombination von ausgewählten Einzeltechniken dar, die aufeinander abgestimmt sind und in dieser Weise die effiziente Berechnung von komplexen Strömungen erlauben. Von zentraler Bedeutung ist dabei der interdisziplinäre Ansatz von Strömungsmechanik, Numerik, Modellbildung und „High Performance Computing“, mit dem gleichzeitig die Grundlage für ein hybrides Berechnungsverfahren für komplexe Strömungsgeometrien bereitgestellt wurde.

# Literaturverzeichnis


ALMEIDA, G. P., DURAO, D. F. G. & HEITOR, M. V. (1993), 'Wakes flow behind two-dimensional model hills', *Experimental Thermal and Fluid Science* **7**, 87–101.

BALDWIN, N. & LOMAX, J. (1978), 'Thin layer approximation and algebraic model for separated flow', *AIAA Paper* 78–0257.

BOUSSINESQ, J. (1877), 'Théorie de l'Écoulement tourbillant', *Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr.* **23**, 46–50.

CEBECI, T. & SMITH, A. M. O. (1974), 'Analysis of turbulent boundary layers'. Academic Press, NY.

CHEESEWRIGHT, R. MCGRATH, G. & PETTY, D. (1990), 'LDA measurements of turbulent flow in a duct of square cross section at low Reynolds number', *Aeronautical Engineering Dept. Rep. ER 1011.* Queen May Westfield College, Univ. London, UK.

CHORIN, A. (1967), 'A numerical method for solving incompressible viscous flow problems', *AIAA Journal* **2** 1, 12–26.

DAVIS, D. O. & GESSNER, F. B. (1992), 'Experimental investigation of turbulent flow through a circular transition duct', *AIAA Journal* **30** (2), 367–375.

DEMIRDŽIĆ, I. & MUZAFERIJA, S. (1995), 'Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology', *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **125**, 235–255.

DEMIRDŽIĆ, U. L. & PERIĆ, M. (1993), 'A collocated finite volume method for predicting flows at all speeds', *Int. J. for Num. Meth. Fluids* **16**, 1029–1050.

DEMUREN, A. O. & RODI, W. (1984), 'Calculation of turbulence-driven secondary motion in noncircular ducts', *J. Fluid Mech.* **140**, 189–222.

DEVENPORT, W. J. & SIMPSON, R. L. (1990), 'Time–dependent and time–averaged turbulence structure near the nose of a wing–body junction', *J. Fluid Mech.* **210**, 23–55.

DONGARRA, J. J. (1998), 'Performance of various computers using standard linear equations software', *http://www.netlib.org/benchmark/performance.ps.* Comp. Sci. Department, Univ. of Tennessee.

EIFERT, C., PFUDERER, D. G. & JANICKA, J. (1997), 'Simulation of flow through circular to rectangular transition duct using non–linear second order moment closures', *Proc. 11th Symp. on Turbulent Shear Flows* **1**, 3–1 – 3–6.

FAVRE, A. (1965), 'Equations des gaz turbulents compressibles', *Jounal de Mechanique* **4(3)**, 361–390.

FERZIGER, J. H. & PERIĆ, M. (1997), 'Computational methods for fluid dynamics', Springer–Verlag.

GATSKI, T. & SPEZIALE, C. (1993), 'On explicit algebraic stress models for complex turbulent flows', *J. Fluid Mech.* **254**, 59–75.

GAVRILAKIS, S. (1992), 'Numerical simulation of low-Reynolds-number turbulent flow through a straight square duct', *J. Fluid Mech.* **244**, 101–129.

GEIST, A., BEGUELIN, A., DONGARRA, J., JIANG, W., MANCHEK, R. & SUNDERAM, V. (1994), 'PVM: Parallel virtual machine. – A user's guide and tutorial for networked parallel computing', *http://www.netlib.org/pvm3/book/pvm-book.html.* The MIT Press.

HACKBUSCH, W. (1985), 'Multi–grid methods and application', Springer–Verlag.

HARTEN, A. (1983), 'High resolution schemes for hyperbolic conservation laws', *J. Comp. Physics* **49**, 357–393.

HIRSCH, C. (1990), 'Numerical computation of internal and external flows. Vol.2 – 23.3: Discretization of the incompressible Navier–Stokes equations', John Wiley & Sons Ltd. pp. 654–661.

ISSA, R. I. & LOCKWOOD, F. C. (1977), 'On the prediction of two-dimensional supersonic viscous interaction near walls', *AIAA Journal* **15** (2), 182–188.

JAMESON, A. (1991), 'Time dependent calculations using multigrid, with application to unsteady flows past airfoils and wing', *AIAA Paper* 91–1596.

JAMESON, A., SCHMIDT, W. & TURKEL, E. (1981), 'Numerical solutions to the Euler equations by finite volume methods using Runge–Kutta time stepping', *AIAA Paper* 81–1259.

JONES, W. P. & LAUNDER, B. E. (1972), 'Prediction of laminarization with a two-equation turbulence model', *Int. J. Heat and Mass Transfer* **15**, 301–314.

Karki, K. C. & Patankar, S. V. (1989), 'Pressure based calculation procedure for viscous flows at all speeds in arbitrary configurations', *AIAA Journal* **27**, 1167–1174.

Kolmogorov, A. N. (1942), 'Equations of turbulent motion of an incompressible fluid', *Izvestia Academy of Sciences, USSR, Phyics* **6** Nos. 1 and 2, 56–58.

Launder, B. E., Reece, G. & Rodi, W. (1975), 'Progress in the development of a Reynolds stress turbulence closure', *J. Fluid Mech.* **68**, 537–566.

Lax, P. D. & Wendroff, B. (1964), 'Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy', *Comm. Pure and Applied Mathematics* **17**, 381–398.

Lien, F. S. (1992), 'Computational modelling of 3D flow in complex ducts and passages', *Ph. D. Thesis.* Institute of Science and Technoloy, Univ. Manchester, UK.

Lien, F. S. & Leschziner, M. A. (1993), 'Computational modelling of 3D turbulent flow in S–diffuser and transition ducts', *Engineering Turbulence Modelling and Experiments 2,* W. Rodi and F. Martelli(Eds.) **2**, 217–228.

Lien, F. S. & Leschziner, M. A. (1994a), 'A general non-orthogonal finit–volume algorithm for turbulent flow at all speed incorporating second–moment closure. Part 1: Numerical implementation. Part 2: Application', *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **114**, 123–149.

Lien, F. S. & Leschziner, M. A. (1994b), 'Multigrid acceleration for recirculating laminar and tubulent flows computed with a non–orthogonal, collocated finite–volume scheme', *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **118**, 351–371.

Lilek, Z., Muzaferija, S. & Perić, M. (1997), 'Efficiency and accuracy aspects of a full–multigrid SIMPLE algorithm for three–dimensional flows', *Num. Heat Transfer* **31B**, 23–42.

Lonsdale, G. & Walsh, J. E. (1984), 'The pressure correction method and the use of a multigrid technique for laminar source–sink flow between corotating discs', *Num. Anal. Report No. 95.* Univ. Manchester, UK.

MacComack, R. W. (1982), 'A numerical method for solving the equations of compressible viscous flow', *AIAA Journal* **20**, 1275–1281.

Mason, M. L., Putnam, L. E. & Re, R. J. (1980), 'The effect of throat contouring on two–dimensional converging–diverging nozzle at static conditions', *NASA TP*–1704.

Ölcmen, S. M. & Roger, L. S. (1995), 'An experimental study of a three-dimensional pressure-driven turbulent boundary layer', *J. Fluid Mech.* **290**, 225–262.

ORTH, A. (1991), 'Merhgittermethode zur Berechnung inkompressibler, stationärer Strömungen mit krummlinigen Berandungen', *Dissertation.* Fakultät Bauingenieur– und Vermessungswesen, Univ. Fridericiana zu Karlsruhe.

OSHER, S. (1985), 'Convergence of generalized MUSCL schemes', *SIAM Journal Numerical Analysis* **22**, 947–961.

PATANKAR, S. V. & SPALDING, D. (1972), 'A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three–dimensional parabolic flow', *Int. J. Heat and Mass Transfer* **15**, 1787–1806.

PERIĆ, M., RÜGER, M. & SCHEUERER, G. (1989), 'A finite multigrid method for calculation of turbulent flows', *Proc. 7th Symp. on Turbulent Shear Flow.*

PEYRET, R. & TAYLOR, T. (1985), 'Computational methods for fluid flow', Springer–Verlag.

REYNOLDS, O. (1895), 'On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion', *Philosophical Transaction of the Royal Society of London, Series A* **8**, 183–208.

RHIE, C. & CHOW, W. L. (1983), 'Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation', *AIAA Journal* **21** (11), 1525–1532.

RIZZI, A. & ERIKSSON, L. (1985), 'Computation of inviscid incompressible flow with rotation', *J. Fluid Mech.* **153**, 275–312.

ROE, P. L. (1985), 'Some contributions to the modelling of discontinuous flows', *Proc. 1983 AMS-SIAM Summer Seminar on Large Scale Computing in Fluid Mechanics, Lectures in Applied Mathematics* **22**, 163–193.

RUNG, T. & THIELE, F. (1996), 'Computational modelling of complex boundary–layer flows', *Proc. 9th Intern. Symposium on Transport Phenomena in Thermal–Fluid Engineering,* Singapore, pp. 321–326.

RUNG, T., THIELE, F. & FU, S. (1998), 'On the realizability of non–linear stress–strain relationships for Reynolds–stress closures', submitted to *Flow, Turbulence and Combustion,* KLUWER Academic Publishers, Dortrecht, NL.

SCHADE, H. & KUNZ, E. (1980), 'Strömungslehre'. Walter de Gruyter–Verlage.

SCHATZ, M. (1996), 'Einsatz von Differenzierungsschemata höherer Ordnung in der Numerischen Thermo– und Fluidmechnik', *Interner Bericht.* Hermann–Föttinger–Institut für Strömungsmechanik, Techn. Univ. Berlin.

SCHMITT, V. & CHARPIN, F. (1979), 'Pressure distributions on the ONERA M6–wing at transonic mach numbers', *AGARD-AR-138*.

SCHÖNUNG, B. (1990), 'Numerische Strömungsmechanik: Inkompressible Strömungen mit komplexen Berandungen', Springer–Verlag.

SIVALOGANATHAN, S. & SHAW, G. J. (1987), 'On the smoothing properties of the SIMPLE pressure correction algorithm', *Int. J. for Num. Meth. Fluids* **5**, 441–461.

SMAGORINSKY, J. (1963), 'General circulation experiments with the primitive equations, Part I: The basic experiment', *Monthly Weather Rev.* **91**, 99–164.

SMITH, R. & HUTTON, A. (1982), 'The numerical treatment of advection: A performance comparison of current methods', *Numer. Heat Transfer* **5**, 439–631.

SOH, W. Y. (1987), 'Time–marching solution of incompressible Navier–Stokes equations for internal flow', *J. Comput. Physics* **70**, 232–252.

STONE, H. L. (1968), 'Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations', *SIAM J. Numer. Anal.* **5** (3), 530–558.

SUTHERLAND, D. M. (1893), 'The viscosity of gases and molecular forces', *Phil. Mag. Ser.* **36** (5), 507–530.

SWEBY, P. K. (1984), 'High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws', *SIAM Journal Numerical Analysis* **21**, 995–1011.

TAYLOR, A. M. K. P., WHITELAW, J. H. & YIANNESKIS, M. (1982), 'Curved ducts with strong secondary motion: velocity measurements of developing laminar and turbulent flow', *Journal of Fluids Engineering* **104**, 350–359.

THOMPSON, J. F. (1996), 'A reflection on grid generation in the 90s: trends, needs, and influences', *Proc. of 5th Int. Grid Conference: Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamic* pp. 1029–1110.

VAN DEN VORST, H. A. (1992), 'BI–CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI–CG for the solution of non–symmetric linear systems', *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **13**, 631–644.

VAN DOORMAAL, J. P., TURAN, A. & RAITHBY, G. D. (1987), 'Evaluation of new techniques for the calculation of internal recirculation flows', *AIAA Paper* 87–0059.

VAN DRIEST, E. R. (1956), 'On turbulent flow near a wall', *Journal of the Aeronautical Sciences* **23**, 1007.

Van Leer, B. (1979), 'Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov's method', *J. Comp. Physics* **32**, 101–136.

Visonneau, M. (1997), 'private Mitteilung'. Ecole Centrale de Nantes, Laboratoire de Mechanique des Fluides.

Wacker, H. (1989), 'Das skalierte Gesetz von Amdahl zur Leistungsermittlung von Vektorrechnern', *Supercomputer'89 Anwendungen, Achitekturen, Trends.* Springer–Verlag.

Warming, R. F. & Beam, R. W. (1976), 'Upwind second order difference schemes and applications in aerodynamic flows', *AIAA Journal* **24**, 1241–1249.

Wilcox, D. C. (1993), 'Turbulence modeling for CFD'. DCW Industries, Inc., La Cañada, CA.

Wilcox, D. C. & Rubesin, M. W. (1980), 'Progress in turbulence modeling for complex flow fields including effects of compressibility', *NASA TP*–1517.

Wolfshtein, M. (1967), 'Convection processes in turbulent impinging jets', *Heat Transfer Section Report SF/R/2.* Imperial College, London.

Yan, J. (1997), 'Untersuchung der Prolongationsoperatoren im zweidimensionalen Multi–Grid–SIMPLE–Verfahren', *Interner Bericht,* Hermann–Föttinger–Institut für Strömungsmechanik, Techn. Univ. Berlin.

Yan, J., Xue, L., Rung, T. & Thiele, F. (1998), 'A modified full multigrid algorithm for Navier–Stokes equations', submitted to *Int. J. for Num. Meth. Fluids.*