

Statistische Eigenschaften turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion

Als Diplomarbeit vorgelegt von

Johannes Lülff

Januar 2011

Institut für Theoretische Physik

Westfälische Wilhelms-Universität Münster

v1.0 – Abgabeverision

Umschlagabbildung: Siehe Abbildung 4.9 auf Seite 114

Dieses Dokument wurde mit L^AT_EX 2_ε und KOMA-Script erstellt.

Die verwendeten Schriften sind

URW Garamond

URW Classico

URW Nimbus Mono

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Grundlagen	5
1.1 <i>Heated from below and cooled from above</i>	5
1.2 Grundgleichungen	9
1.2.1 Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen	9
1.2.2 Randbedingungen	10
1.2.3 Die Boussinesq-Approximation	11
1.2.4 Varianten des Auftriebsterm	12
1.2.5 Entdimensionalisierung	13
1.3 Lineare Stabilitätsanalyse	14
1.4 <i>Response</i> -Parameter	16
1.4.1 Skalierungsverhalten mit steigender Rayleigh-Zahl	17
1.5 Zusammenfassung	18
2 Direkte Numerische Simulation	21
2.1 Von Experimentellen und Numerischen Daten	21
2.2 Das Pseudospektralverfahren für die Navier-Stokes-Gleichung	22
2.2.1 Grundzüge des Spektralverfahrens	23
2.2.2 Das <i>Pseudo</i> am Pseudospektralverfahren	24
2.2.3 Behandlung des Druckgradienten	25
2.2.4 Zeitintegration via Runge-Kutta-Verfahren	27
2.3 Umgehen des Druckterms: Die Wirbeltransportgleichung	29
2.4 Randbedingungen	30
2.4.1 <i>Volume penalization</i>	31
2.5 Anwendung auf die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen	33
2.5.1 Pseudospektralverfahren und <i>volume penalization</i>	33
2.5.2 Zeitliche Integration	35
2.6 Implementationsdetails	36
2.6.1 Periodisches Simulationsgebiet	37
2.6.2 Diskretisierung der Felder	38
2.6.3 <i>Fast Fourier Transformation</i>	38
2.6.4 <i>Dealiasing</i>	41

2.6.5	Wahl des <i>penalization</i> -Parameters	43
2.6.6	Wahl des Zeitschrittes	44
2.6.7	Parallelisierung	45
2.6.8	Code-Design	49
2.7	Erweiterungen	49
2.7.1	Spannungsfreie Ränder	49
2.7.2	Vertikale <i>no flux</i> -Wände	51
2.8	Zusammenfassung	54
3	Phänomenologie	57
3.1	Visualisierungen der Felder	57
3.1.1	Schnappschüsse der Felder im stationären Bereich	60
3.1.2	Visualisierungen im zeitlichen Verlauf	61
3.2	Zeitliche Verläufe gemittelter Größen	64
3.2.1	Die <i>large-scale current</i> -Zeit	64
3.2.2	Zeitreihen	65
3.3	Vertikal aufgelöste Mittelwerte	68
3.4	Skalierung mit der Rayleigh-Zahl	71
3.4.1	Visualisierungen bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen	71
3.4.2	Skalierung der gemittelten Größen mit der Rayleigh-Zahl	75
3.5	Kleine Rayleigh-Zahlen	79
3.6	Validierungen der Numerik	82
3.6.1	Horizontal gemittelte Profile	83
3.6.2	Auflösungskriterium der Felder	84
3.6.3	Randverhalten der laminaren Felder	86
3.7	<i>No flux</i> -Seitenwände	88
3.8	Zusammenfassung	93
4	Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Entwicklungsgleichungen	95
4.1	Einführung	95
4.2	Eine Entwicklungsgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung	96
4.2.1	Ableitungen der feinkörnigen Verteilung	97
4.2.2	Das Schließungsproblem	98
4.2.3	Einführung von bedingten Mittelwerten	99
4.2.4	Statistische Symmetrien	100
4.3	Die Temperatur-PDF	103
4.3.1	Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF	103
4.3.2	Aus DNS bestimmte Ergebnisse	104
4.3.3	Methode der Charakteristiken	109
4.4	Verknüpfungen zum Wärmetransport: Die Homogenitätsrelation	116
4.4.1	Homogenitätsrelation für die Verbund-PDF	117

4.4.2	Homogenitätsrelation für die Temperatur-PDF	118
4.5	Zusammenfassung	123
5	Zusammenfassung und Ausblick	125
A	Anhang	129
A.1	Eckdaten der benutzten Simulationen	129
A.2	Beiliegende DVD	133
A.2.1	Ordnerstruktur	133
A.2.2	Videos	134
A.3	Zusatzmaterialien zum Simulationsprogramm	138
A.3.1	Schematischer Ablauf des Simulationsprogramms	138
A.3.2	Strukturierung des Codes	139
A.3.3	Parameter der Eingabedatei	139
	Abbildungsverzeichnis	I
	Literaturverzeichnis	V

Einleitung

Welch Schauspiel! aber ach!
ein Schauspiel nur!
Wo fass ich dich,
unendliche Natur?

*(Johann Wolfgang von Goethe.
Faust I)*

Turbulente Strömungen widersetzen sich seit mehr als zweihundert Jahren einer umfassenden Beschreibung, was gemeinhin als „das Turbulenzproblem“ bezeichnet und von namhaften Persönlichkeiten als „das letzte große ungelöste Problem der klassischen Physik“ genannt wird. Angesichts der Allgegenwärtigkeit turbulenter Strömungen um uns herum ist diese bisherige Unlösbarkeit doch eine eher verwundernde Tatsache – ein jeder besitzt ein mehr oder weniger anschauliches, intuitives Verständnis turbulenter Strömungen, wieso soll dann eine Beschreibung des Phänomens so unerreichbar sein?

Ein Puzzlestück des Gesamtbildes, das die Turbulenz darstellt, ist die turbulente Strömung von Flüssigkeiten und Gasen, die durch Temperaturunterschiede angetrieben wird und so für einen Wärmetransport sorgt. Als Beispiel für eine solche Strömung denke man nur an das Wetter, dessen Unvorhersagbarkeit von jedem bestätigt werden kann und dessen Wärmetransport im Leben vieler Menschen eine große Rolle spielt – gerade diese „Konvektion“ genannte Art turbulenter Strömungen ist somit für jeden anschaulich zugänglich und gleichzeitig für jeden relevant.

In den zwei Abbildungen dieser Einleitung sind zwei weitere Beispiele turbulenter Strömungen dargestellt, bei denen der Antrieb durch Temperaturunterschiede erfolgt. Abbildung 1 zeigt den Ausbruch des isländischen Vulkans Eyjafjallajökull, der im Frühjahr des Jahres 2010 eine erhebliche Behinderung des europäischen Flugverkehrs zur Folge hatte und somit weiter die Relevanz für das Verstehen derartiger Strömungen unterstreicht: Die heiße Aschewolke stieg durch den Temperaturunterschied in die kältere Atmosphäre auf und verteilte sich dort; da die genaue Verteilung zunächst unklar war, mussten die Flugzeuge in vielen Ländern am Boden bleiben. In der Abbildung sind zwei vergrößerte Ausschnitte der Aschewolke gezeigt, durch die ein Einblick in die hohe räumliche Komplexität der Strömung vermittelt wird. Abbildung 2 zeigt über einem Schornstein aufsteigenden heißen Dampf. In den vier Bildern sind vier aufeinanderfolgende Zeitpunkte zu sehen; bei genauer Betrachtung der aufsteigenden und sich dabei verdrehenden Details wird hier eine Vorstellung der zeitlichen Komplexität gegeben.



Abbildung 1: Aufsteigende Aschewolke des Eyjafjallajökull während des Ausbruchs im Frühjahr 2010. In der Mitte ist eine zweifache, rechts eine vierfache Vergrößerung des linken Bildes gezeigt. Foto aus [Ars11].

Besteht die eingangs erwähnte Beschreibung der turbulenten Konvektionsströmungen nun darin, jede sich windende Verästelung des Dampfes, jede noch so feine Auswölbung der Aschewolke vorherzusagen? Angesichts der hochkomplexen raum-zeitlichen Strukturen scheint dieses Vorhaben in der Tat schwer vorstellbar. Andererseits ist eine solche „punktweise“ Vorhersage oft auch nicht vonnöten – in den meisten Fällen ist man schon zufrieden, wenn die Wettervorhersage der nächsten drei Tage einigermaßen zuverlässig ist; der Ingenieur¹ wird sich häufig damit begnügen, das Ausmaß des Wärmetransports in seiner Maschine, nicht aber jede mikroskopische Einzelheit der zugrunde liegenden Konvektionsströmung zu kennen.

Die Beschreibung der Turbulenz wird deshalb auf einer statistischen Ebene angestrebt. Dazu denke man an eine ähnliche Situation der statistischen Mechanik, nämlich die Beschreibung eines idealen Gases: Es ist unmöglich, die mikroskopische Bewegung von typischerweise 10^{23} Gasmolekülen vorherzusagen; nichtsdestotrotz kann man Vorhersagen über statistisch gemittelte makroskopische Größen wie die Temperatur, den Druck, die Energie etc. machen, die das Gas schon hinreichend genau beschreiben.

Um eine solche statistische Beschreibung der Turbulenz zu entwickeln, geht man wie beim idealen Gas üblicherweise von idealisierten Systemen aus. Bei „reiner“ Turbulenz, d. h. in Abwesenheit eines Antriebs durch Temperaturunterschiede, ist die Idealisierung die Annahme homogener, isotroper Turbulenz, bei der alle Punkte und alle Richtungen im Raum gleichberechtigt sind. Als idealisierte Konvektionsströmung betrachtet man oft das sogenannte Rayleigh-Bénard-System, bei dem sich eine Flüssigkeit oder ein Gas zwischen zwei horizontalen Platten bewegt, von der die untere geheizt und die obere gekühlt wird, was für den Antrieb der Strömung sorgt.

Dies ist das System, das in dieser Arbeit untersucht und für das eine statistische Herangehensweise entwickelt werden soll. Um die dabei benötigten „Messungen“ an dem betrachteten System durchführen zu können, wird eine numerische Simulation idealisierter Rayleigh-Bénard-Konvektion benutzt. Diese hat gegenüber Experimenten mit realen

¹ Aus Gründen des Leseflusses wird die maskuline Form benutzt; Ingenieurinnen sind natürlich implizit mit eingeschlossen.



Abbildung 2: Aufsteigender Dampf des Heizkraftwerks der Universität Münster. Die Fotos sind in einem Abstand von 4 Sekunden aufgenommen worden.

Flüssigkeiten oder Gasen unter anderem den Vorteil, dass beliebige Messwerte erhalten werden können, ohne das System zu stören. Man muss sich zwar fragen, inwieweit man durch numerische Daten und aus ihnen gezogenen Aussagen auf das reale System, die „Wirklichkeit“, zurückschließen kann, oder weitergedacht, ob eine mathematische Erklärung der Realität möglich ist. Da wir aber wie die gesamte Physik einen beobachtenden und beschreibenden, nicht einen erklärenden Standpunkt einnehmen werden, sollen solche wissenschaftstheoretischen Fragen von uns an dieser Stelle ausgeblendet werden.

Die von uns angestrebte statistische Beschreibung des Rayleigh-Bénard-Systems wird zum einen direkt auf den Grundgleichungen der Konvektionsströmung, zum anderen auf gemittelten Größen und Wahrscheinlichkeitsverteilungen fußen. In „reiner“ Turbulenz ist dieser Weg ansatzweise bereits in den 1960er Jahren beschritten worden, und in der Tat werden wir uns in der vorliegenden Arbeit auf diese Ansätze berufen und sie auf das Rayleigh-Bénard-System ausweiten.

Der in dieser Arbeit eingeschlagene Weg zu einer statistischen Beschreibung turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion gestaltet sich wie folgt:

Kapitel 1 stellt eine Einführung in das Thema turbulenter Konvektionsströmungen dar. Das Rayleigh-Bénard-System wird anhand grundlegender Phänomene und Experimente präsentiert, und die mathematischen Grundlagen zur Beschreibung und Charakterisierung von Strömungen werden vorgestellt.

In Kapitel 2 wird unser „Experiment“, also die numerische Behandlung des Systems, entwickelt. Dazu werden mehrere bereits bekannte Algorithmen zu einem neuen Verfahren zur direkten numerischen Simulation der Grundgleichungen kombiniert, das im Rahmen dieser Diplomarbeit in einem Simulationscode implementiert wurde.

In Kapitel 3 werden wir anhand von Ergebnissen aus der numerischen Simulation das Rayleigh-Bénard-System phänomenologisch besser kennen lernen. Zunächst werden zur Anschauung einige Visualisierungen von verschiedenen Feldern gezeigt, die dann durch räumliche und zeitliche Mittelwerte verschiedener Größen vervollständigt werden. Das Verhalten einiger gemittelter Größen wird hier mit Ergebnissen aus der Literatur verglichen. Des Weiteren wird in diesem Kapitel auf die Videos der dieser Diplomarbeit beiliegenden DVD eingegangen, die das intuitive, phänomenologische Verständnis von Vorgängen in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion fördern sollen.

Nach diesen Vorbereitungen können wir uns in Kapitel 4 dem wissenschaftlichen Hauptteil dieser Arbeit widmen. Um zu einer statistischen Beschreibung des Rayleigh-Bénard-Systems zu gelangen, wird eine exakte Bewegungsgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung von Temperatur und Geschwindigkeit hergeleitet. Beschränken wir uns auf die Betrachtung der Temperatur, können wir mit Hilfe numerischer Ergebnisse tiefergehende Einblicke in das qualitative statistische Verhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion erhalten.

Kapitel 5 fasst schließlich die Ergebnisse der Arbeit zusammen, setzt sie in den wissenschaftlichen Kontext und gibt einen Ausblick für zukünftige Anstrengungen.

1 Grundlagen

A fluid I know
And since I so love
Is heated below
And cooled from above

(Bertus van Bilsen, 1958)

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen des Rayleigh-Bénard-Systems dargelegt werden. Zunächst wird in Abschnitt 1.1 das Phänomen der Rayleigh-Bénard-Konvektion anhand von (historischen) Experimenten und Visualisierungen vorgestellt und anschaulich beschrieben. Abschnitt 1.2 präsentiert die mathematische Formulierung des Systems durch partielle Differentialgleichungen. In Abschnitt 1.3 wird die analytisch berechenbare lineare Stabilitätsanalyse der Grundgleichungen präsentiert. Abschnitt 1.4 befasst sich schließlich mit der Charakterisierung des Antwortverhaltens des Systems.

1.1 *Heated from below and cooled from above* *oder: When the Higher Temperature is on the Under Side*

Beim Rayleigh-Bénard-System wird eine Flüssigkeit oder ein Gas zwischen zwei horizontalen Platten eingeschlossen.¹ Dem System wird von unten Wärme zugefügt, die durch die Fluidschicht an die obere Begrenzung transportiert und dort wieder abgegeben wird. Die Art dieses Wärmetransports hängt von den äußeren Bedingungen ab; das Fluid kann die Wärme durch Wärmeleitung, in Form geordneter Konvektionsstrukturen oder mittels chaotischer, turbulenter Konvektion von einer Platte zur anderen übertragen. Konvektion tritt auf, wenn sich das Fluid in einem äußeren Gravitationsfeld befindet, durch das erwärmte Fluid einen Auftrieb erhält; sind diese Auftriebskräfte groß genug, um die Zähigkeit des Fluids zu überwinden, kann der Wärmetransport durch die Bewegung des Fluids erhöht werden.

Wärmeübertragung durch die Konvektion eines Fluids ist außerordentlich effizient und überall in der Natur anzutreffen:

¹Da in Abwesenheit von Phasenübergängen kein Unterschied zwischen einer Flüssigkeit und einem Gas besteht, sprechen wir von nun an allgemein von einem Fluid.

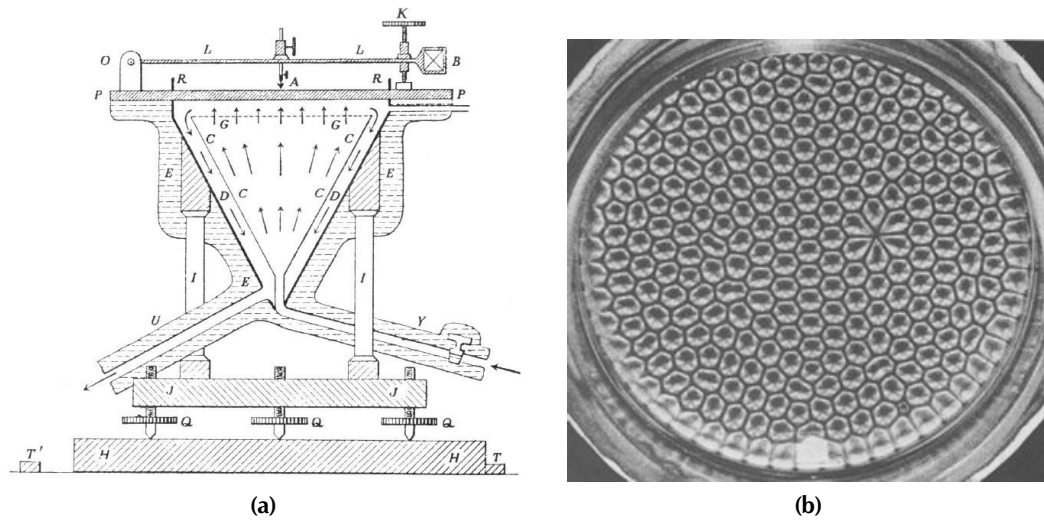


Abbildung 1.1: Das Original-Experiment von H. Bénard aus dem Jahr 1900. (a) Experimenteller Aufbau. Das konvektierende Fluid (in diesem Falle Öl) befindet sich auf der Platte P und ist in horizontaler Richtung durch die Begrenzungen R eingeschlossen; die Oberfläche des Öls ist frei. Durch die Pfeile (bei C, G und D) wird die Strömung der zur Erhitzung der Platte benutzten Flüssigkeit gezeigt. Abbildung aus [Bén00]. (b) Bénard-Zellen, wie sie im originalen Experiment auftreten, von oben betrachtet. Bild aus [Kos74].

- Die Luft in der Atmosphäre erwärmt sich an der Erdoberfläche und strahlt die Wärme in den oberen Schichten der Atmosphäre ins Weltall ab. Die dadurch angetriebene Konvektion ist für die großskaligen Wetterstrukturen wie beispielsweise die Passatwinde verantwortlich.
- Der Golfstrom stellt eine große Konvektionszelle dar. Das in der Karibik erwärmte Wasser des Atlantiks wird nach Norden getrieben und gibt dort seine Wärme ab; es sinkt dann in die Tiefe und fließt zurück nach Süden. Dieser Wärmetransport ist hauptverantwortlich für das relativ milde Klima in Europa.
- Die Tektonik der Kontinentalplatten wird durch die Konvektion von Magma zwischen dem heißen Erdkern und der kalten Erdkruste bewirkt.
- In der Sonne wird Wärme durch konvektierendes Plasma vom Inneren der Sonne an die Oberfläche transportiert. Die dabei entstehenden Konvektionszellen haben eine Größe von mehreren hundert Kilometern und sind als Granulation der Sonnenoberfläche beobachtbar.

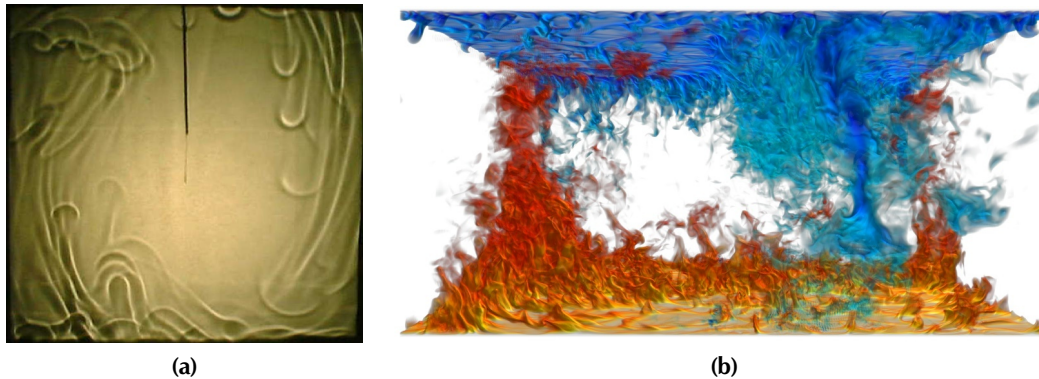


Abbildung 1.2: Beispiele des Rayleigh-Bénard-Systems. (a) *Shadowgraph*-Bild eines Fluids in einem geschlossenen Gefäß. Man erkennt sowohl einzelne aufsteigende und herabsinkende Strukturen (sog. *plumes*) als auch eine großskalige Zirkulation im Uhrzeigersinn. Bild aus [SQTX03]. (b) Volumetrische Darstellung des Temperaturfeldes einer numerischen Simulation bei periodischen Randbedingungen. Kaltes Fluid ist blau, warmes rot dargestellt.

Diese hier nur an einigen Beispielen gezeigte Allgegenwärtigkeit von Fluidströmungen, die durch Temperaturunterschiede angetrieben werden und dabei Wärme transportieren, macht ein genaueres Verständnis der Vorgänge wünschenswert. Dazu bietet sich die Untersuchung eines idealisierten Systems an, die zuerst von H. Bénard systematisch durchgeführt wurde [Bén00, Bén01]. Der Aufbau des Bénard-Experiments ist in Abbildung 1.1a gezeigt. Eine Flüssigkeit auf einer weit ausgedehnten horizontalen Platte wird von unten erhitzt und gibt die Wärme an der Oberfläche wieder ab. Bei nicht zu hohen Temperaturunterschieden bleibt die Flüssigkeit zunächst in Ruhe und die Wärme wird nur durch Konduktion (also Wärmeleitung) übertragen. Wird die Temperatur der unteren Platte nun schrittweise weiter erhöht, gibt es einen Punkt, an dem der Wärmetransport zu Konvektion umschlägt, d. h. die Flüssigkeit bewegt sich zwischen der warmen und kalten Begrenzung. Dabei organisiert sich die Flüssigkeit in den hexagonalen Strukturen (den sogenannten Bénard-Zellen), die in Abbildung 1.1b zu sehen sind.² Die erste theoretische Beschreibung dieses Experiments geht auf Lord Rayleigh zurück, der das Einsetzen der Konvektion berechnen konnte [Ray16]³ und der zusammen mit dem Bénard-Experiment dem in dieser Diplomarbeit betrachteten System seinen Namen gibt.

²Diese geordneten Zellen sind dabei stark von äußeren Einflüssen wie der Heizrate und der Geometrie des Experiments abhängig; zellenartige Strukturen können beispielsweise nur bei bestimmten Randbedingungen an der oberen Begrenzung entstehen.

³Veröffentlicht unter dem Titel „On Convection Currents in a Horizontal Layer of Fluid, when the Higher Temperature is on the Under Side“, daher der Titel dieses Abschnitts.

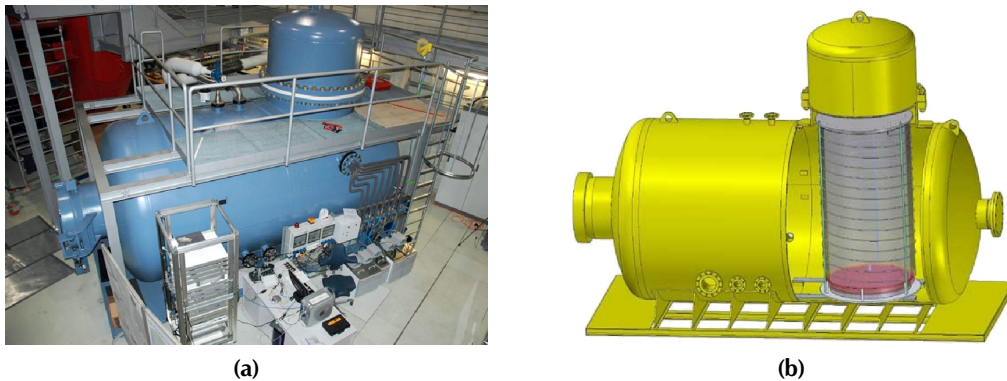


Abbildung 1.3: Das „Göttinger U-Boot“ des Max-Planck-Instituts für Dynamik und Selbstorganisation. Beide Bilder aus [AFB09]. (a) Foto des U-Boots mit Mess- und Regelungsinstrumenten. (b) Schematische Darstellung des U-Boots; der graue zylinderförmige Bereich ist das etwa zwei Meter hohe eigentliche Fluidvolumen.

Das Bénard-Experiment befasste sich mit der geordneten laminaren Konvektionsströmung; diese Situation war noch den analytischen Behandlungen Lord Rayleighs zugänglich. Wenn jedoch die Heizrate weiter erhöht wird und somit immer mehr Wärme durch die Fluidschicht transportiert werden muss, geht das System allmählich in einen ungeordneten, chaotischen Zustand über – die Strömung wird turbulent.

Bei den eingangs erwähnten Beispielen von in der Natur auftretender Konvektion handelt es sich um solche turbulenten Strömungen. Es ist damit sofort ersichtlich, dass auch die systematische Untersuchung turbulenter Konvektion anhand eines idealisierten Systems erstrebenswert ist. In Abbildung 1.2 sind Beispiele solcher idealisierter turbulenter Strömungen dargestellt. Abbildung 1.2a zeigt turbulente Konvektion in einem geschlossenen Zylinder; man kann sowohl die großskalige Rotationsbewegung im Uhrzeigersinn als auch einzelne pilzartige aufsteigende und absinkende Strukturen (sogenannte *plumes*) erkennen. Abbildung 1.2b zeigt eine Visualisierung des Temperaturfeldes einer numerischen Simulation des Rayleigh-Bénard-Systems, die im Rahmen dieser Diplomarbeit durchgeführt wurde. Beide Abbildungen lassen sofort erahnen, dass es sich bei turbulenter Konvektion um ein raum-zeitlich hochkomplexes Phänomen handelt, weshalb eine „direkte“ Lösung der zugrundeliegenden mathematischen Beschreibung nicht zu erwarten ist.

Um die in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion auftretenden Phänomene experimentell genauer untersuchen und sie so hoffentlich besser verstehen zu können, muss ein erheblicher Aufwand betrieben werden. So ist die in Abbildung 1.2b gezeigte numerische Simulation auf einem modernen Supercomputer mit mehreren tausend Prozessoren durchgeführt worden. Ein typischer Aufbau zur experimentellen Untersuchung ist mit

dem sogenannten „Göttinger U-Boot“ mit einem Gesamtgewicht von etwa zehn Tonnen in Abbildung 1.3 gezeigt; hier werden unter hohem Druck hochturbulente Konvektionsströmungen in Schwefelhexafluorid (SF_6) untersucht. In anderen Experimenten aktueller Forschung wird Helium als Fluid benutzt, das auf wenige Kelvin abgekühlt ist und unter hohem Druck steht [HCL87, CGH⁺89, NSSD00, SD01]; mit solchen Versuchen können sowohl große Parameterbereiche als auch die bislang turbulentesten Zustände unter kontrollierten Bedingungen erreicht werden.

Ein Ziel dieser Experimente zur turbulenten Rayleigh-Bénard-Konvektion ist es, die Vorgänge im Fluid auf einer statistischen Ebene zu verstehen; eine „punktweise“ Vorhersage der Konvektionsstrukturen wird aufgrund des chaotischen Verhaltens des Systems nicht möglich, aber wohl auch nicht nötig sein. Die theoretische Grundlage einer statistischen Beschreibung wird die mathematische Formulierung des Systems sein, die in den nächsten Abschnitten präsentiert wird.

1.2 Grundgleichungen

Bei den Grundgleichungen des Rayleigh-Bénard-Systems handelt es sich um partielle Differentialgleichungen für das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ und das Temperaturfeld $T(\mathbf{x}, t)$. Das Geschwindigkeitsfeld ist vektoriell und hat die drei Komponenten $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$; die Temperatur ist ein skalares Feld. Die beiden Felder hängen vom Ort $\mathbf{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ und von der Zeit $t \in \mathbb{R}$ ab; dabei sind x und y die horizontalen und z ist die vertikale Komponente des Ortsvektors.

1.2.1 Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen

Zur mathematischen Beschreibung eines Fluids, das durch Auftriebskräfte angetrieben wird, die aus Temperaturunterschieden resultieren, ziehen wir die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen heran:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \nu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \alpha g T(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla T(\mathbf{x}, t) = \kappa \Delta T(\mathbf{x}, t) \quad (1.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.1c)$$

Zusätzlich zum Geschwindigkeits- und Temperaturfeld des Fluids tritt das Druckfeld $p(\mathbf{x}, t)$ auf; des Weiteren enthalten die Gleichungen die folgenden Parameter:

ν – Kinematische Viskosität

α – Wärmeausdehnungskoeffizient

g – Schwerebeschleunigung

κ – Wärmediffusivität

Bei den Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen handelt es sich somit um ein gekoppeltes System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, die sich als Erhaltungssätze von Impuls (1.1a), Energie (1.1b) und Masse (1.1c) verstehen lassen.

Gleichung (1.1a) beschreibt die zeitliche Entwicklung des Geschwindigkeitsfeldes des Fluids; es handelt sich um die Navier-Stokes-Gleichung, die um den Term $\alpha g T(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z$ ergänzt wurde. Dieser Term koppelt das Geschwindigkeitsfeld an das Temperaturfeld und sorgt für den temperaturabhängigen Auftrieb; \mathbf{e}_z ist der Einheitsvektor in vertikaler Richtung. Der Term $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ wird auch als der advective Term bezeichnet. Diese unscheinbar anmutende Nichtlinearität stellt zusammen mit dem nichtlokalen Druckgradienten $-\nabla p(\mathbf{x}, t)$ die eigentliche Schwierigkeit in der Behandlung dieser Gleichungen dar und ist in gewissem Sinne für die vielfältigen Phänomene der gesamten Hydrodynamik verantwortlich.

Bei (1.1b) handelt es sich um eine Advektions-Diffusions-Gleichung, die beschreibt, wie die Temperatur durch das Geschwindigkeitsfeld advektiert wird und dabei gleichzeitig diffundiert.

Gleichung (1.1c) besagt, dass das Geschwindigkeitsfeld divergenzfrei ist, d. h. keine Quellen und Senken enthält. Da die Strömung des Fluids also als inkompressibel betrachtet wird, stellt diese Gleichung eine Kontinuitätsgleichung dar. Der Druckgradient $-\nabla p(\mathbf{x}, t)$ in der Geschwindigkeitsgleichung (1.1a) stellt sicher, dass die Divergenzfreiheit stets erfüllt ist.

1.2.2 Randbedingungen

Bei der mathematischen Beschreibung eines Fluids, das zwischen zwei horizontalen Platten eingeschlossen ist, müssen die betrachteten Felder natürlich gewisse Randbedingungen an diesen Begrenzungen erfüllen. Die horizontalen Platten sollen einen vertikalen Abstand von h haben und üblicherweise wird davon ausgegangen, dass sie sich bei $z = 0$ und $z = h$ befinden. Idealisierend wird angenommen, dass das Fluid in horizontaler Richtung unendlich weit ausgedehnt ist.

Wir gehen von Platten fester Temperatur aus; die Temperatur der unteren Platte möge $\delta T/2$, die der oberen $-\delta T/2$ betragen.⁴ Die Temperaturdifferenz der Platten ist damit δT ; für ein von unten geheiztes und von oben gekühltes Fluid gilt $\delta T > 0$. Das Geschwindigkeitsfeld soll an den Platten sogenannte *no slip*-Bedingungen erfüllen, was bedeutet, dass alle Komponenten der Geschwindigkeit an den begrenzenden Platten gleich null sind.

⁴Genau genommen sind diese Temperaturangaben dabei als die Abweichung von einer Referenztemperatur zu verstehen; z. B. würden negative Temperaturen auf der Kelvin-Skala wenig Sinn ergeben.

Zusammengefasst lauten die Randbedingungen an das Geschwindigkeits- und Temperaturfeld also

$$\mathbf{u}(z=0)=0 \quad \text{und} \quad \mathbf{u}(z=h)=0 \quad , \quad (1.2a)$$

$$T(z=0)=\delta T/2 \quad \text{und} \quad T(z=h)=-\delta T/2 \quad . \quad (1.2b)$$

Es handelt sich um Dirichlet-Randbedingungen. Dabei ist die Schreibweise „ $\mathbf{u}(z=0)$ “ als „ $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ für $z=0$ und \mathbf{x}, y, t beliebig“ zu lesen.

Eine zweite Art von Randbedingungen sind sogenannte (spannungs-)freie Ränder, bei denen das Fluid nicht an der Begrenzung haftet; die Bedingungen an das Geschwindigkeitsfeld am Rand (also bei $z=0$ und $z=1$) lauten dann [Cha81]

$$u_z=0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial u_x}{\partial z} = \frac{\partial u_y}{\partial z} = 0 \quad . \quad (1.3)$$

Vernachlässigt man die Oberflächenspannung, treten spannungsfreie Ränder unter anderem an der Oberfläche von Flüssigkeiten (also beispielsweise an der Grenze zwischen Luft und Wasser) auf. In dieser Diplomarbeit werden wir jedoch hauptsächlich mit *no slip*-Rändern arbeiten.

1.2.3 Die Boussinesq-Approximation

In die Grundgleichungen (1.1) geht die sogenannte Boussinesq-Approximation ein, die zuerst von V. J. Boussinesq eingeführt wurde [Bou03]; zusammen mit den Veröffentlichungen von A. Oberbeck über die Wärmeübertragung in Flüssigkeiten [Obe79] gibt sie den Grundgleichungen den hier benutzten Namen.⁵ Diese Approximation besagt, dass die Temperaturabhängigkeit der Dichte des Fluids fast immer vernachlässigt werden kann, wenn die Temperaturschwankungen und die aus ihnen resultierenden Dichteschwankungen genügend klein sind; lediglich in den Termen, in denen die Dichte mit einer von außen auf das Fluid wirkenden Kraft (also der Gravitationskraft) multipliziert wird, muss die Temperaturabhängigkeit der Dichte berücksichtigt werden. Des Weiteren kann durch die Boussinesq-Approximation auch die Temperaturabhängigkeit der restlichen Materialkonstanten (insbesondere ν und κ) vernachlässigt werden. Unter der Annahme einer im Auftriebsterm linear von der Temperatur abhängigen Dichte gelangt man dann zu obigen Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen. Eine exakte Herleitung dieser Gleichungen würde hier den Rahmen sprengen, weswegen an dieser Stelle auf entsprechende Lehrbücher [Cha81, Hak83] verwiesen sei.

Die Boussinesq-Approximation stellt eine in weiten Parameterbereichen zulässige und oft benutzte Näherung dar; ihre Gültigkeit wird in allen Untersuchungen dieser Diplomarbeit als gegeben betrachtet. Allerdings können sich bei hohen Temperaturdifferenzen

⁵ Anders als z. B. bei der Navier-Stokes-Gleichung hat sich für die Grundgleichungen des Rayleigh-Bénard-Systems in der Literatur keine einheitliche Benennung durchgesetzt.

sogenannte Nicht-Boussinesq-Effekte einstellen: Beispielsweise kann die vertikale Symmetrie gebrochen werden, sodass sich aufsteigendes warmes Fluid grundlegend anders verhält als absinkendes kaltes [WL91, ZCL97]. Für eine Diskussion verschiedener Nicht-Boussinesq-Effekte sei auf [AGL09] und die dort zu findenden Referenzen verwiesen.

1.2.4 Varianten des Auftriebsterm

Man hat eine gewisse Wahlfreiheit, ob man im Auftriebsterm der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen (1.1) die Temperatur oder die Temperaturabweichung vom linearen Temperaturprofil,

$$\theta(\mathbf{x}, t) = T(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta T}{h} \left(z - \frac{h}{2} \right) , \quad (1.4)$$

benutzt. Man kann sich aber klarmachen, dass die Wahl zwischen T und θ nur die genaue Bedeutung des Drucks etwas verändert und deshalb keine Rolle spielt.

Dazu betrachtet man den wärmeleitenden Grundzustand $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0$ und $T(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta T}{2} - \frac{\delta T}{h} z$ bzw. $\theta(\mathbf{x}, t) = 0$ der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen.⁶ Setzt man diesen in die von uns benutzte Variante (also mit T im Auftriebsterm) ein, erhält man das Druckfeld

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0 + \alpha g \left(\frac{\delta T}{2} z - \frac{\delta T}{h} \frac{z^2}{2} \right) . \quad (1.5)$$

Schreibt man dagegen den Auftriebsterm in (1.1a) mit θ als $\alpha g \theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z$ und berechnet dann den Druck des wärmeleitenden Grundzustandes, ergibt sich das konstante Druckfeld

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0 . \quad (1.6)$$

Alternativ kann man auch wie in [Bus78] erwähnt den Unterschied zwischen dem Auftriebsterm mit T oder θ im Gradienten des Drucks „verstecken“, sodass man einen „modifizierten“ Druck $p'(\mathbf{x}, t)$ erhält:

$$-\nabla p(\mathbf{x}, t) + \alpha g T(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \alpha g \left(\theta(\mathbf{x}, t) - \frac{\delta T}{h} \left(z - \frac{h}{2} \right) \right) \mathbf{e}_z \quad (1.7a)$$

$$= -\nabla \left(p(\mathbf{x}, t) + \alpha g \left(\frac{\delta T}{h} \frac{z^2}{2} - \frac{\delta T}{2} z \right) + p_0 \right) + \alpha g \theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \quad (1.7b)$$

$$= -\nabla p'(\mathbf{x}, t) + \alpha g \theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \quad (1.7c)$$

Die Wahl zwischen T und θ im Auftriebsterm verändert also nur den Druck um eine statische Komponente; verwendet man die Temperatur T im Auftriebsterm, enthält

⁶Dieser Grundzustand wird in der linearen Stabilitätsanalyse in Abschnitt 1.3 näher behandelt.

der Druck noch einen durch die Gravitation hervorgerufenen z -abhängigen Anteil. Da die „Aufgabe“ des Drucks in der Gleichung aber lediglich darin besteht, durch den Druckgradienten die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes sicherzustellen, spielt diese Unterscheidung für uns keine Rolle. Wir benutzen die Temperatur T im Auftriebsterm, da wir auch die Advektions-Diffusions-Gleichung in T formuliert haben; würde man stattdessen die Advektions-Diffusions-Gleichung für θ formulieren, würde sich ein θ im Auftriebsterm anbieten. In der Literatur finden sich sowohl Auftriebsterme mit T [Sig94, Ker96, ES08] als auch mit θ [Bus78, KvW97, Sch09].

1.2.5 Entdimensionalisierung

Die Anzahl der in den Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen (1.1) vorkommenden Parameter lässt sich durch eine Entdimensionalisierung der Gleichungen deutlich reduzieren. Dies geschieht, indem man die in den Gleichungen auftretenden Größen durch *charakteristische* Größen ausdrückt und so dimensionslos macht:

$$\frac{h}{\kappa} u \longrightarrow u \quad (1.8a)$$

$$\frac{1}{\delta T} T \longrightarrow T \quad (1.8b)$$

$$\frac{h^2}{\kappa^2} p \longrightarrow p \quad (1.8c)$$

$$\frac{1}{h} x \longrightarrow x \quad \text{bzw.} \quad h \nabla \longrightarrow \nabla \quad \text{bzw.} \quad h^2 \Delta \longrightarrow \Delta \quad (1.8d)$$

$$\frac{\kappa}{h^2} t \longrightarrow t \quad \text{bzw.} \quad \frac{h^2}{\kappa} \frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.8e)$$

Die dabei zum Entdimensionalisieren benutzten charakteristischen Größen lassen sich anschaulich interpretieren: Längenangaben erfolgen in Vielfachen der Höhe des Systems. Die Größe $\frac{h^2}{\kappa}$, durch die die Zeit dividiert und so einheitenlos gemacht wird, lässt sich als eine charakteristische Diffusionszeit auffassen, die benötigt wird, bis sich eine Störung oder allgemein Information über die Strecke h (also von einer zur anderen Platte) rein durch Wärmeleitung ausgebreitet hat; die Größe $\frac{\kappa}{h}$, mit der die Geschwindigkeit entdimensionalisiert wird, entspricht somit der Geschwindigkeit dieser Ausbreitung bei reiner Wärmeleitung. Die Temperatur wird in Vielfachen der Temperaturdifferenz von oberer und unterer Platte angegeben, was die größte im System auftretende Temperaturdifferenz ist.

Multipliziert man die Geschwindigkeitsgleichung (1.1a) mit $\frac{h^3}{\kappa^2}$ und erweitert den Auftriebsterm zusätzlich mit $\frac{\nu \delta T}{\nu \delta T}$, und multipliziert die Temperaturgleichung (1.1b) mit

$\frac{b^2}{\delta T}$, so erhält man durch die Zuordnungen (1.8) die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen in der folgenden entdimensionalisierten Form:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \frac{\nu}{\kappa} \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \frac{\nu}{\kappa} \frac{\alpha g \delta T b^3}{\nu \kappa} T(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \\ &= -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \text{Pr} \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \text{Pr} \text{Ra} T(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (1.9a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla T(\mathbf{x}, t) = \Delta T(\mathbf{x}, t) \quad (1.9b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.9c)$$

Als freie dimensionslose Parameter verbleiben damit nur die Prandtl- und die Rayleigh-Zahl

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa} \quad \text{und} \quad \text{Ra} = \frac{\alpha g \delta T b^3}{\nu \kappa} . \quad (1.10)$$

In die Prandtl-Zahl gehen mit den beiden Diffusionskonstanten ν und κ nur Materialeigenschaften ein, sodass Pr durch das benutzte Fluid festgelegt ist,⁷ während die Rayleigh-Zahl mit der Höhe des Systems und insbesondere der Temperaturdifferenz auch extern einstellbare Parameter enthält.

Durch die Entdimensionalisierung wird ein Fluid zwischen zwei Platten betrachtet, die den Abstand 1 und die Temperaturdifferenz 1 haben; die transformierten *no slip*-Randbedingungen lauten dann

$$\mathbf{u}(z=0) = 0 \quad \text{und} \quad \mathbf{u}(z=1) = 0 , \quad (1.11a)$$

$$T(z=0) = 1/2 \quad \text{und} \quad T(z=1) = -1/2 . \quad (1.11b)$$

In nicht-idealisierten Situationen, d. h. bei einem in horizontaler Richtung nicht unendlich ausgedehntem System, wird zu den beiden Eingabeparametern Ra und Pr oft noch das Seitenverhältnis Γ des Fluidvolumens hinzugenommen. Bei einem zylinderförmigen Volumen ist Γ der Quotient von Durchmesser zu Höhe; bei periodischen horizontalen Randbedingungen, wie sie in der numerischen Simulation oft angenommen werden, ist Γ das Verhältnis von horizontaler zu vertikaler Abmessung.

1.3 Lineare Stabilitätsanalyse

Bemerkenswert am Rayleigh-Bénard-System ist, dass sich die zugrunde liegenden Gleichungen bis zu einem gewissen Grad analytisch behandeln lassen; dies ist z. B. bei durch die Navier-Stokes-Gleichung beschriebener „reiner“ Fluidturbulenz nicht möglich. Bei

⁷Dies gilt nur im Rahmen der Boussinesq-Approximation; reale Fluide können temperaturabhängige Diffusionskonstanten und damit eine temperaturabhängige Prandtl-Zahl besitzen.

den Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen kann man mittels der linearen Stabilitätsanalyse bei kleinen Rayleigh-Zahlen die Konvektionsrollen und insbesondere die kritische Rayleigh-Zahl, bei der sich diese Rollenlösungen herausbilden, berechnen.

Dazu betrachtet man zunächst den Grundzustand des Systems, der reiner Wärmeleitung entspricht. Das Fluid befindet sich dann in Ruhe und die Wärmeübertragung erfolgt durch Konduktion; die entdimensionalisierten Geschwindigkeits- und Temperaturfelder lauten dann

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{und} \quad T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} - z \quad . \quad (1.12)$$

Ab der kritischen Rayleigh-Zahl wird dieser Grundzustand instabil, d. h. kleinste Störungen wachsen zu stabilen Lösungen heran. Führt man als neue Variable die Temperaturabweichung aus dem konduktiven Grundzustand ein, in entdimensionalisierter Form also

$$\theta(\mathbf{x}, t) = T(\mathbf{x}, t) + \left(z - \frac{1}{2} \right) \quad , \quad (1.13)$$

und betrachtet die Stabilität der für θ formulierten linearisierten Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen, gelangt man bei spannungsfreien Rändern zu Ausdrücken für die Felder von Geschwindigkeit und Temperaturabweichung sowie zu einem analytischen Ergebnis für die kritische Rayleigh-Zahl. Die exakte Rechnung soll an dieser Stelle nicht ausgeführt werden, da sie Bestandteil gängiger Lehrbücher ist [Cha81, Hak83, AFHF10].

Man kann folgende Lösungen in Form von sich in y -Richtung erstreckender Konvektionsrollen erhalten (vgl. [KvW97]):

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \varepsilon \begin{pmatrix} -k\pi \sin kx \cos \pi z \\ 0 \\ k^2 \cos kx \sin \pi z \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (1.14a)$$

$$\theta(\mathbf{x}) = \varepsilon(k^2 + \pi^2) \cos kx \sin \pi z + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (1.14b)$$

Dabei ist $\varepsilon > 0$ eine kleine Amplitude der Rollen und $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ fasst Terme der Ordnung ε^2 und höher zusammen. Die Wellenzahl k bzw. die Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ bezüglich der x -Richtung gibt die horizontale Größe der Konvektionsrollen an; eine einzelne Konvektionsrolle hat die Breite $\frac{1}{2}\lambda = \frac{1}{2}\frac{2\pi}{k}$ und die Höhe 1.

Die kritische Rayleigh-Zahl lautet

$$\text{Ra}_c = \frac{(k^2 + \pi^2)^3}{k^2} \quad (1.15)$$

und hängt ebenfalls von der Wellenzahl k und damit vom Seitenverhältnis der Konvektionsrollen ab. Sie wird minimal bei $k_{\min} = \frac{\pi}{\sqrt{2}}$ bzw. $\lambda_{\min} = 2\sqrt{2}$, also bei einem Seitenverhältnis der Konvektionsrollen von Breite : Höhe = $\sqrt{2} : 1$, und nimmt dann den

Wert $Ra_{c,\min} = \frac{27}{4}\pi^4 \approx 657.5$ an. Diese Ergebnisse hatte bereits Lord Rayleigh in den ersten theoretischen Arbeiten zum Bénard-Experiment erhalten [Ray16].

Prinzipiell lässt sich der Fall von *no slip*-Wänden analog zu dem der spannungsfreien Ränder behandeln, jedoch ergibt sich wegen der andersartigen Randbedingungen die kritische Rayleigh-Zahl aus den Nullstellen einer transzendenten Gleichung [Cha81, S. 36ff], die sich nicht analytisch lösen lässt. Bestimmt man numerisch die Nullstellen dieser Gleichung, erhält man die minimale kritische Rayleigh-Zahl $Ra_{c,\min} \approx 1707.8$ bei der Wellenzahl $k_{\min} \approx 3.117$, d. h. beim Seitenverhältnis 1.008 : 1 der Konvektionsrollen. Für von k_{\min} abweichende Wellenzahlen nimmt die kritische Rayleigh-Zahl monoton zu.

In Kapitel 3 werden diese theoretischen Vorhersagen für die kritische Rayleigh-Zahl dazu benutzt, die numerische Simulation der Grundgleichungen zu testen.

1.4 Response-Parameter

Überschreitet die Rayleigh-Zahl einen bestimmten Wert (die kritische Rayleigh-Zahl), „antwortet“ das System mit einer Fluidbewegung, durch die Wärme von einer Platte zur anderen transportiert wird. Das Ausmaß des Wärmetransports und der Fluidbewegung wird dabei von den Eingabeparametern, also der Prandtl- und der Rayleigh-Zahl, abhängen. Der Wärmetransport und der „Turbulenzgrad“ der Fluidbewegung werden durch zwei dimensionslose *response*-Parameter, die Nusselt- und die Reynolds-Zahl, beschrieben.

Die Nusselt-Zahl ist allgemein als das Verhältnis von konvektivem zu konduktivem Wärmetransport definiert. Für das von uns betrachtete System von Platten konstanter Temperatur berechnet sich die Nusselt-Zahl als

$$Nu = 1 + \frac{h}{\kappa \delta T} \langle u_z T \rangle_V, \quad (1.16)$$

vgl. z. B. [Bus78, Sch09]. Bei einem verschwindenden Geschwindigkeitsfeld, wenn also rein konduktiver Wärmetransport vorliegt, hat die Nusselt-Zahl einen Wert von 1. Dabei steht $\langle \cdot \rangle_V$ für eine Mittelung über das Fluidvolumen; analog ist $\langle \cdot \rangle_A$ ein von z abhängiger Mittelwert über horizontale Ebenen, $\langle \cdot \rangle_t$ ein zeitlicher Mittelwert und $\langle \cdot \rangle_{V,t}$ ein kombiniertes raum-zeitliches Mittel.

Die Reynolds-Zahl beschreibt das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften in einer Fluidströmung. Man kann sie allgemein als $Re = \frac{vL}{\nu}$ berechnen (vgl. [Dav04]), wobei v eine charakteristische Strömungsgeschwindigkeit und L eine charakteristische Länge des Systems ist; ν ist wieder die kinematische Viskosität des Fluids. Beim Rayleigh-Bénard-System bietet sich der Abstand h der Platten als charakteristische Länge an; als charakteristische Geschwindigkeit benutzen wir die quadratisch gemittelte Geschwindigkeit $u_{\text{rms}} = \sqrt{\langle u^2 \rangle_V}$, sodass unsere Definition der Reynolds-Zahl

$$Re = \frac{h u_{\text{rms}}}{\nu} \quad (1.17)$$

lautet. Bei dieser Definition und auch bei der Definition (1.16) der Nusselt-Zahl ist darauf zu achten, dass die Geschwindigkeiten und Temperaturen der nicht entdimensionalisierten Gleichungen (1.1) zu benutzen sind; ansonsten wären Re und Nu nicht einheitenlos.

1.4.1 Skalierungsverhalten mit steigender Rayleigh-Zahl

Die beiden *response*-Parameter Nu und Re sind *a priori* nicht bekannt, d. h. sie müssen aus dem Experiment oder aus der numerischen Simulation der Grundgleichungen bestimmt werden. Die Vorhersage der funktionalen Zusammenhänge $Nu(Ra, Pr)$ und $Re(Ra, Pr)$ spielt eine eminent wichtige Rolle in der Untersuchung des Rayleigh-Bénard-Systems. Es existieren einige auf unterschiedlichen Annahmen fußende theoretische Modelle sowie zahllose Veröffentlichungen, die das Skalierungsverhalten vor allem der Nusselt-Zahl mit der Rayleigh-Zahl untersuchen; eine Übersicht über die vorhandene Literatur ist in [AGL09] zu finden. Es zeigt sich, dass die Skalierung einem Potenzgesetz der Form $Nu = a Ra^b$ folgt, bei dem vor allem der Exponent b von Interesse ist.

Mit steigender Rayleigh-Zahl durchläuft das System verschiedene Stadien: Für kleine Rayleigh-Zahlen ist das Fluid in Ruhe und die Wärme wird nur durch Konduktion durch das System übertragen. Bei $Ra = \mathcal{O}(10^3)$ findet der Übergang zur laminaren Konvektion statt, das Fluid rotiert in Rollenform.⁸ Diese Rollen verformen sich mit steigender Rayleigh-Zahl, bis sich bei $Ra = \mathcal{O}(10^5)$ ein schmaler Bereich oszillierender und schließlich chaotischer Strukturen anschließt. Ab $Ra \gtrsim \mathcal{O}(10^5)$ geht die Fluidbewegung in den ungeordneten, turbulenten Zustand über. Bei $Ra = \mathcal{O}(10^7)$ wird oft der Übergang von sogenannter „weicher“ zu „harter“ Turbulenz beobachtet, der sich in einer Änderung des Exponenten des Potenzgesetzes manifestiert; im Bereich weicher Turbulenz wird für die Nusselt-Zahl eine Skalierung von etwa $Nu \sim Ra^{1/3}$ gemessen, während bei harter Turbulenz eher $Nu \sim Ra^{2/7}$ beobachtet wird.⁹ Eine Übersicht über die bisher genannten Stadien wird in [HCL87] gegeben. Im Bereich harter Turbulenz gibt es eine weitere Änderung des Exponenten bei $Ra = \mathcal{O}(10^{11})$; hier scheint der Exponent des Skalierungsgesetzes wieder größer zu werden, wobei jedoch die unterschiedlichen experimentellen Resultate stark schwanken [AFB09, RGKS10]. In Experimenten sind Rayleigh-Zahlen bis etwa $Ra = \mathcal{O}(10^{17})$ zu erreichen [NSSD00]. Weit über diesen Werten liegt das „ultimative Regime“, das sich einer Theorie R. Kraichnans zufolge bei $Ra = \mathcal{O}(10^{24})$ anschließen und einen Exponenten von $1/2$ haben soll [Kra62, NS10].

Nicht zuletzt aus ingenieurs- und anwendungsorientierter Sicht ist es wünschenswert, das Antwortverhalten des Systems *a priori* aus den Eingabeparametern bestimmen zu können, also funktionale Zusammenhänge $Nu(Ra, Pr)$ und $Re(Ra, Pr)$ zu finden. Hierfür

⁸ „ $Ra = \mathcal{O}(10^3)$ “ ist dabei als „eine Rayleigh-Zahl der Größenordnung 10^3 “ zu lesen.

⁹Die hier und im Folgenden angegebenen Werte sind dabei mit Vorsicht zu genießen und nicht als exakte Werte aufzufassen, da sie stark von der Geometrie des Experiments abhängen und in der Literatur kontrovers diskutiert werden.

existieren in der Literatur mehrere Ansätze, die unter verschiedenen Modellannahmen zu Skalierungen der *response*-Parameter in Form von Potenzgesetzen gelangen.

Das von S. Grossmann und D. Lohse entwickelte Modell [GL00] benutzt die gemittelten Dissipationsraten von kinetischer Energie und Wärme, die sich mit dem Wärmetransport in Verbindung bringen lassen. In dem Modell wird nun angenommen, dass sich die Dissipationsraten in Anteile der Grenzschichten des Fluids und in Anteile des sogenannten *bulks*¹⁰ zerlegen lassen. Geht man davon aus, dass in verschiedenen Bereichen des (Ra, Pr) -Parameterraumes verschiedene Anteile dominieren, gelangt man so zu verschiedenen Vorhersagen des Skalierungsverhaltens über einen sehr weiten (Ra, Pr) -Bereich. In dem Parameter-Bereich mit $Pr \approx 1$ und der Rayleigh-Zahl $Ra = 10^6 - 10^9$ im turbulenten Regime, in dem wir uns in dieser Diplomarbeit bewegen, sagt das Modell eine Skalierung gemäß

$$Nu(Ra, Pr) \sim Ra^{1/5} Pr^{1/5} \quad \text{und} \quad Re(Ra, Pr) \sim Ra^{2/5} Pr^{-3/5} \quad (1.18)$$

voraus [GL01].

In [CGH⁺89] wird ein Skalierungsgesetz unter anderen Annahmen hergeleitet. Dort wird davon ausgegangen, dass zwischen den Grenzschichten und dem *bulk* des Fluids ein weiterer Bereich, nämlich die sogenannte Durchmischungszone, existiert. In dieser Zone soll z. B. das sich von den Grenzschichten ablösende Fluid auf die großskalige Geschwindigkeit im *bulk* beschleunigt werden. Durch die Ausbalancierung weiterer Effekte wird dann die Skalierung

$$Nu(Ra) \sim Ra^{2/7} \quad \text{und} \quad Re(Ra) \sim Ra^{3/7} \quad (1.19)$$

erhalten. Da diese Theorie durch experimentelle Daten bei $Ra = 10^7 - 10^{12}$ und $Pr = 0.65 - 1.5$ motiviert wurde, bezieht sie sich auf einen kleineren Parameter-Bereich als die Grossmann-Lohse-Theorie und lässt insbesondere eine Pr -Abhängigkeit vermissen.

Eine Übersicht über weitere Skalierungstheorien findet sich in [AGL09, Tabelle 1]. Da die Validierung oder gar Entwicklung von Skalierungstheorien nicht das eigentliche Anliegen der vorliegenden Diplomarbeit ist, findet sich diesbezüglich nur eine kurze Untersuchung in Kapitel 3. Wir sehen wie oben erwähnt die Prandtl-Zahl als durch das benutzte Fluid gegeben an, weshalb wir insbesondere nur die Skalierung mit der Rayleigh-Zahl betrachten. Unsere Ergebnisse werden dann mit verschiedenen Ergebnissen der Literatur und den beiden soeben erwähnten Skalierungstheorien verglichen.

1.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die Grundlagen aufgeführt, die zur Behandlung des Rayleigh-Bénard-Systems benötigt werden.

¹⁰Engl. für Hauptteil, Masse; gemeint sind damit die Bereiche im Zentrum der Konvektionszelle.

Dazu wurde zunächst in Abschnitt 1.1 das grundlegende Phänomen einer durch Temperaturunterschiede und Auftriebskräfte angetriebenen Konvektionsströmung dargestellt; dies ist der Mechanismus, der hinter vielen in der Natur auftretenden Strömungen steckt. Es wurden die ersten systematischen Experimente von H. Bénard und die dazugehörigen mathematischen Analysen von Lord Rayleigh vorgestellt; diese Untersuchungen fanden im laminaren Regime zu Beginn des 20. Jahrhunderts statt. Danach haben wir ungeordnete, turbulente Konvektionströmungen und heutige Versuchsaufbauten zur Untersuchung dieses turbulenten Regimes gezeigt.

Die mathematische Beschreibung des Systems erfolgt durch gekoppelte partielle nichtlineare Differentialgleichungen für das Temperatur- und das Geschwindigkeitsfeld. Diese Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen wurden in Abschnitt 1.2 vorgestellt. Es wurde kurz die Boussinesq-Approximation beschrieben, die zur Herleitung der Grundgleichungen benutzt wird. Diese besagt, dass bei kleinen Temperaturdifferenzen die Temperaturabhängigkeit der Dichte des Fluids nur für den Auftrieb beachtet werden muss; des Weiteren hängen die Materialkonstanten nicht von der Temperatur ab. Die Konstanten lassen sich zu zwei dimensionslosen Parametern, der Rayleigh- und der Prandtl-Zahl, zusammenfassen; führt man eine Entdimensionalisierung der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen durch, hängen die Gleichungen nur noch von diesen beiden freien Parametern ab.

In Abschnitt 1.3 wurde kurz die lineare Stabilitätsanalyse der Grundgleichungen gezeigt. Durch diese kommt man zu einem analytischen Ergebnis für die kritische Rayleigh-Zahl, ab der das Fluid beginnt, in Rollenform zu rotieren. Für das Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld dieser Rollenlösung wurden ebenfalls analytische Ausdrücke angegeben.

Auf die Eingabe in Form der beiden dimensionslosen Parameter reagiert das System also mit einer Fluidbewegung, die einen erhöhten Wärmetransport zur Folge hat. Zur Charakterisierung dieses Antwortverhaltens wurden in Abschnitt 1.4 die Nusselt- und die Reynolds-Zahl eingeführt. Das Verhalten dieser *response*- bei gegebenen Eingabeparametern ist von großem Interesse, jedoch bisher *a priori* nicht exakt vorhersagbar. Experimentelle und numerische Studien zeigen, dass sowohl Nusselt- als auch Reynolds-Zahl über ein Potenzgesetz mit der Rayleigh-Zahl verbunden sind. Es existieren einige theoretische Ansätze, die unter Modellannahmen quantitative Vorhersagen über diesen Zusammenhang treffen; zwei solcher Modelle wurden kurz vorgestellt.

In Kapitel 3 werden wir unter anderem unsere Ergebnisse mit diesen Vorhersagen vergleichen; dazu müssen wir aber zunächst im folgenden Kapitel 2 ein numerisches Verfahren zur Simulation des Rayleigh-Bénard-Systems entwickeln. Im Kapitel 4 werden wir dann schließlich mit statistischen Methoden einen tieferen Einblick in die Mechanismen des Wärmetransports gewinnen.

2 Direkte Numerische Simulation

Computers are useless. They
can only give you answers.

(Pablo Picasso, 1968)

In diesem Kapitel wird eine Methode beschrieben, im Rahmen einer Direkten Numerischen Simulation (DNS) die vollen Oberbeck-Boussinesq-Grundgleichungen zu lösen. Die Ableitungen und Nichtlinearitäten werden durch das Pseudospektralverfahren berechnet, die Zeitintegration erfolgt durch ein Runge-Kutta-Verfahren, und die geforderten Randbedingungen werden über *volume penalization* erreicht.

2.1 Von Experimentellen und Numerischen Daten

Schon die Bilder der verschiedenen turbulenten Strömungen mit ihren komplexen Mustern in den einführenden Abschnitten lassen erahnen, dass es sehr schwierig, wenn nicht gar unmöglich sein wird, die Grundgleichungen, die diese Strömungen beschreiben, für beliebige Anfangsbedingungen analytisch zu lösen. Möchte man als Wissenschaftler trotzdem Aussagen oder besser noch Vorhersagen über Systeme treffen, die diesen Grundgleichungen gehorchen, ist man auf wie auch immer gearteten *input* in Form von Daten angewiesen. Dieser *input* kann zum einen aus experimentellen,¹ zum anderen aus numerischen Daten bestehen.

Experimentelle Daten haben vordergründig den Vorteil, dass es außer Frage steht, ob durch das Experiment die „richtigen“ Gleichungen realisiert werden, ob die „richtigen“ Randbedingungen erfüllt werden etc. – Fragen, die sich in der numerischen Behandlung der Grundgleichungen stets stellen bzw. die gestellt werden sollten. Des Weiteren sind für Experimente gegenüber der Numerik oft andere Parameterbereiche erreichbar, ganz einfach weil die Natur z. B. keine Rechenzeit- und Speicherplatzprobleme kennt.

Bei genauerer Betrachtung stellt sich ersterer Vorteil des Experimentes jedoch als Trugschluss heraus: Wird das Experiment denn tatsächlich durch die Grundgleichungen beschrieben, oder gelten diese nur in bestimmten Näherungen? Werden denn tatsächlich die gewünschten Randbedingungen im Experiment realisiert, oder sind auch diese nur Idealisierungen?

¹Experimentelle Daten meint hier und im Folgenden Daten, die aus realen Experimenten erhalten werden, im Gegensatz zu durch Simulationen gewonnenen *numerischen* Daten.

Entschließt man sich stattdessen, die benötigten Daten aus numerischen Simulationen der Grundgleichungen zu erhalten, steht man vor der Aufgabe, einen entsprechenden Simulationscode zu entwickeln (oder ein schon existierendes Programm zu benutzen und gegebenenfalls anzupassen). Während dieser gesamten Entwicklungsphase muss (oder zumindest sollte) man sich tatsächlich stets fragen, ob die Grundgleichungen richtig gelöst werden, die Randbedingungen richtig umgesetzt werden, etc. Es zeigt sich also, dass man sich als (Natur-)Wissenschaftler stets vergewissern muss, ob die Daten, die man zur Unterstützung von Aussagen über ein System heranzieht, auch wirklich das untersuchte System repräsentieren – seien es nun Daten experimenteller oder numerischer Natur.

Ist für die Numerik dieser Validierungsprozess dann aber einmal zufriedenstellend abgeschlossen und der Simulationscode idealerweise auch ausgiebig getestet worden, hat man in der numerischen Simulation den entscheidenden Vorteil, dass man (fast) beliebige Messdaten nichtinvasiv erhalten kann. Des Weiteren kann man davon ausgehen, dass die Simulationsdaten den geforderten Randbedingungen genügen und durch die Grundgleichungen beschrieben werden, mögen diese auch auf Näherungen beruhen (wie in unserem Fall den Boussinesq-Näherungen). Diese Eigenschaften machen numerische Simulationen zu einem geeigneten Werkzeug, um aus ersten Prinzipien hergeleitete Theorien zu unterstützen, d. h. Theorien, die direkt auf den Grundgleichungen fußen.

Der Aufbau des restlichen Kapitels gestaltet sich wie folgt: Zunächst wird in Abschnitt 2.2 das Pseudospektralverfahren inklusive Zeitintegrationsverfahren an der Navier-Stokes-Gleichung demonstriert; als alternative Darstellung wird die Wirbeltransportgleichung in Abschnitt 2.3 gezeigt. In Abschnitt 2.4 wird die *volume penalization*-Technik für diese beiden Gleichungen eingeführt. Damit haben wir alle „Werkzeuge“ beisammen, um in Abschnitt 2.5 ein Pseudospektralverfahren für die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen angeben zu können. Abschnitt 2.6 beschäftigt sich mit Details, die sich bei der Implementation der Gleichungen in einem Simulationscode ergeben. In Abschnitt 2.7 werden noch zwei Erweiterungen des Verfahrens angerissen, bevor in Abschnitt 2.8 eine Zusammenfassung gegeben wird.

2.2 Das Pseudospektralverfahren für die Navier-Stokes-Gleichung

Im Folgenden soll das Pseudospektralverfahren erläutert werden. Die Einführung erfolgt mehr oder weniger informell; für eine tiefergehende Behandlung sei der interessierte Leser auf entsprechende Lehrbücher (z. B. [CHQZ87, Boy01]) verwiesen.

Da bereits die Navier-Stokes-Gleichung, d. h. die Bewegungsgleichung (1.1a) für das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ ohne die Kopplung an die Temperatur $T(\mathbf{x}, t)$, alle relevanten

Probleme wie Nichlinearität und Nichtlokalität enthält, beschränken wir uns in unserer Beschreibung zunächst auf die Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \nu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad . \quad (2.1b)$$

Haben wir erst die entsprechenden Methoden erarbeitet, diese Gleichungen lösen zu können, stellt es ein Leichtes dar, die äquivalente Bewegungsgleichung für die Temperatur $T(\mathbf{x}, t)$ und die lineare Kopplung der Temperatur an die Bewegungsgleichung des Geschwindigkeitsfeldes zu behandeln.

2.2.1 Grundzüge des Spektralverfahrens

Das Spektralverfahren dient dazu, die Ableitungen in (2.1) exakt berechnen zu können. Dafür bedient es sich der Fouriertransformation

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}[g(\mathbf{x})](\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int d^3x \, g(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.2a)$$

$$g(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{g}(\mathbf{k})](\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int d^3k \, \tilde{g}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad , \quad (2.2b)$$

hier für eine beliebige² Funktion $g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ gezeigt. Der Vektor $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ wird dabei als der *Wellenzahlvektor* bezeichnet, und die Fouriertransformierte $\tilde{g}(\mathbf{k})$ ist die Amplitude der Fouriermode $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$. Es ist zu beachten, dass $\tilde{g}(\mathbf{k})$ im Allgemeinen komplex ist. Die Fouriertransformation ist eindeutig, d. h. man erhält nach Hin- und Rücktransformation wieder die ursprüngliche Funktion; durch die Fouriertransformation geht also keine Information verloren.

Wie man leicht durch partielle Integration sehen kann, ist die Fouriertransformation der Ableitung gegeben durch

$$\mathcal{F}[\nabla g(\mathbf{x})](\mathbf{k}) = i\mathbf{k} \mathcal{F}[g(\mathbf{x})](\mathbf{k}) = i\mathbf{k} \tilde{g}(\mathbf{k}) \quad , \quad (2.3)$$

in Worten: Die Fouriertransformation der Ableitung ist die Fouriertransformation der Funktion, multipliziert mit der imaginären Einheit und dem Wellenzahlvektor. Diese Relation erlaubt es, die Ableitungen in den zu lösenden Gleichungen exakt auszurechnen, indem man in den *Fourierraum* wechselt, d. h. die Fouriertransformation auf die Gleichungen wirken lässt.

²Hier und im Folgenden wird immer implizit angenommen, dass die betrachteten Funktionen „gutartig“ sind, das heißt z. B., dass Integrale wie in (2.2) auch definiert sind.

Wendet man dieses Prinzip auf die Navier-Stokes-Gleichung an, erhält man eine Entwicklungsgleichung für die Fouriertransformierte $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t)$ des Geschwindigkeitsfeldes:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) + \mathcal{F} [\mathbf{u}(x, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(x, t)](\mathbf{k}, t) = \mathcal{F} [-\nabla p(x, t)](\mathbf{k}, t) - \nu \mathbf{k}^2 \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) \quad (2.4)$$

Man sieht, dass im diffusiven Term $\nu \Delta \mathbf{u}$ der Laplace-Operator zu einer einfachen Multiplikation mit $-\mathbf{k}^2$ wird. Allerdings treten zwei Probleme mit dem nichtlinearen und dem nichtlokalen Term $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ bzw. $-\nabla p$ zu Tage, da man nicht weiß, wie die Fouriertransformation dieser beiden Terme als Funktional von $\tilde{\mathbf{u}}$ auszusehen hat. Diese Terme sollen nun behandelt werden.

2.2.2 Das *Pseudo* am Pseudospektralverfahren

Allgemein wird die Fouriertransformation eines Produkts zu der Faltung der Fouriertransformierten, d. h.

$$\mathcal{F} [f(x) \cdot g(x)](\mathbf{k}) = [\tilde{f} * \tilde{g}](\mathbf{k}) = \int d^3k' \tilde{f}(\mathbf{k}') \cdot \tilde{g}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.5)$$

Dadurch könnte man die Fouriertransformation des nichtlinearen Terms $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ in (2.4) durch die Faltung $\tilde{\mathbf{u}} * (i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}})$ der Fouriertransformierten ausdrücken.³

Allerdings ist eine Faltung numerisch aufwändig zu berechnen; für jeden Punkt \mathbf{k} muss das volle Integral $\int d^3k' \dots$ gelöst werden. Um diese numerisch „teure“⁴ Faltung umgehen zu können, benutzt man den Trick, statt der Faltung im Fourierraum eine punktweise Multiplikation im *Ortsraum* durchzuführen, indem man auf die Fouriertransformierte die Rücktransformation anwendet. Damit ergibt sich für die Faltung der Fouriertransformierten die Identität

$$\tilde{f} * \tilde{g} = \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1} [\tilde{f}] \cdot \mathcal{F}^{-1} [\tilde{g}] \right] \quad (2.6)$$

also wird die Faltung durch insgesamt drei Fouriertransformationen ersetzt. Die Fouriertransformation ist im Vergleich zur Faltung eine numerisch „billige“ Operation, daher lohnt sich dieser Tausch. Da das Verfahren nun nicht mehr rein im Fourierraum (der auch *Spektralraum* genannt wird) arbeitet, sondern für die Multiplikation in den Ortsraum wechselt, spricht man vom *Pseudospektralverfahren*.

Wendet man dieses Prinzip auf die Navier-Stokes-Gleichung (2.4) im Fourierraum an, erhält man die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{u}} + \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}] \cdot \mathcal{F}^{-1} [i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}] \right] = \mathcal{F} [-\nabla p] - \nu \mathbf{k}^2 \tilde{\mathbf{u}} \quad (2.7)$$

³Hier ist $\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}$ als dyadisches Produkt zu verstehen, im Gegensatz zum Skalarprodukt $\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{u}}$. Somit handelt es sich bei $\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}$ um einen Tensor zweiter Stufe.

⁴„Teuer“ heißt hier, dass die Operation auf einem Computer viel Rechenzeit benötigt, im Gegensatz zu einer numerisch „billigen“ Operation.

wobei die Orts- bzw. Wellenvektorabhängigkeiten aus Platzgründen ausgelassen worden sind; soweit nicht anders angegeben, ist im Folgenden immer $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ und $\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t)$ gemeint. Man hat nun also die Fouriertransformation der Nichtlinearität $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ rein als ein Funktional von $\tilde{\mathbf{u}}$ ausgedrückt.

Dieser Punkt, nämlich dass es sich bei der Nichtlinearität um ein *Funktional* von $\tilde{\mathbf{u}}$ handelt, muss betont werden: In die Nichtlinearität geht nicht nur der Wert von $\tilde{\mathbf{u}}$ für ein bestimmtes \mathbf{k} ein (wie es beim Zeitableitungs- und Laplace-Term der Fall ist), sondern das *gesamte Feld* $\tilde{\mathbf{u}}$. In der Nichtlinearität koppeln also die Moden verschiedener Wellenzahlvektoren aneinander.

2.2.3 Behandlung des Druckgradienten

Bleibt noch die Frage zu klären, wie man die Fouriertransformierte $\mathcal{F}[-\nabla p]$ des Druckgradienten als ein Funktional von $\tilde{\mathbf{u}}$ darstellen kann. Hierbei hilft die Divergenzfreiheit (2.1b) des Geschwindigkeitsfeldes weiter. Wendet man nämlich die Divergenz auf die Bewegungsgleichung (2.1a) der Geschwindigkeit an und nutzt Divergenzfreiheit und die Tatsache aus, dass Divergenz und Laplace-Operator bzw. Zeitableitung vertauschen, erhält man die Relation

$$\Delta p = -\nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \quad , \quad (2.8)$$

also eine Poisson-Gleichung für den Druck.

Diese Poisson-Gleichung taucht nicht nur im Pseudospektralverfahren auf. Man kann sie allgemein nutzen, um aus einem gegebenen Geschwindigkeitsfeld den Druck errechnen zu können. Unter geeigneten Randbedingungen, nämlich für ein im Unendlichen verschwindendes Geschwindigkeitsfeld, lautet eine Lösung

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{\nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x}', t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}', t))}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (2.9a)$$

$$= -\Delta^{-1} \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \quad . \quad (2.9b)$$

Dabei ist der Operator Δ^{-1} formal als das Poissonintegral (2.9a), also als Lösung der Poisson-Gleichung (2.8), zu verstehen.⁵

Hier erkennt man auch, warum es sich bei dem Druckgradienten in der Navier-Stokes-Gleichung um einen nichtlokalen Term handelt: Der Druck am Punkt \mathbf{x} hängt von den Geschwindigkeiten an allen anderen Punkten im Raum ab; Informationen breiten sich also instantan aus. Dies ist nebenbei bemerkt eine Folge der Inkompressibilität, die eine Idealisierung darstellt – instantante Informationsausbreitung, also eine unendlich große

⁵Genau genommen ist der Druck p durch das Poisson-Integral (2.9) nur bis auf eine additive Konstante bestimmt; da allerdings nur der Druckgradient in die Navier-Stokes-Gleichung eingeht, spielt dies keine Rolle.

Schallgeschwindigkeit, kann es in der Natur nicht geben. Jedoch ist die Inkompressibilität eine in weiten Bereichen gut erfüllte Näherung, nämlich immer dann, wenn die Strömungsgeschwindigkeit klein gegenüber der Schallgeschwindigkeit ist [Bat87].

Möchte man nun den Druckgradienten in der Navier-Stokes-Gleichung durch \mathbf{u} ausdrücken, wendet man den Gradienten auf (2.9b) an und erhält

$$-\nabla p = \nabla \Delta^{-1} \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \quad , \quad (2.10)$$

oder, wenn man auf diese Gleichung die Fouriertransformation anwendet,

$$\mathcal{F}[-\nabla p] = \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \mathcal{F}[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}] \quad (2.11a)$$

$$= \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \mathcal{F}[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \cdot \mathcal{F}^{-1}[\mathbf{i}\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}]] \quad . \quad (2.11b)$$

Diese Gleichung enthält wieder die dyadischen Produkte $\mathbf{k}\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}$. Die Fouriertransformierte des Druckgradienten für $\mathbf{k} = 0$ entspricht einer konstanten Kraft in der Navier-Stokes-Gleichung, die hier ausgeschlossen werden soll, d. h. es gilt $\mathcal{F}[-\nabla p](\mathbf{k}=0) = 0$.

Durch diese Gleichung hat man nun die Fouriertransformierte des Druckgradienten durch die Fouriertransformierte der Geschwindigkeit ausgedrückt. Setzt man diesen Ausdruck in die bisherige Form der Navier-Stokes-Gleichung (2.7) ein und sortiert die Terme um, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{u}} = - \left(\mathbf{E}_3 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right) \mathcal{F}[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \cdot \mathcal{F}^{-1}[\mathbf{i}\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}]] - \nu k^2 \tilde{\mathbf{u}} \quad , \quad (2.12)$$

also eine gewöhnliche Differentialgleichung für $\tilde{\mathbf{u}}$. Hier stellt \mathbf{E}_3 die Einheitsmatrix dar.

Der Projektionsoperator $\mathbf{P} = \left(\mathbf{E}_3 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right)$

Betrachten wir noch kurz den im Fourierraum wirkenden Operator $\mathbf{P} = \left(\mathbf{E}_3 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right)$ aus (2.12), oder in Indexschreibweise

$$P_{ij} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k_m^2} \quad . \quad (2.13)$$

Wie man in Einstein'scher Summenkonvention leicht sehen kann, projiziert dieser Operator im Fourierraum ein beliebiges Vektorfeld $\tilde{\mathbf{w}} = \mathcal{F}[\mathbf{w}]$ auf seinen divergenzfreien Anteil:

$$\mathbf{i}\mathbf{k} \cdot (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{w}}) = \mathbf{i}k_i P_{ij} \tilde{w}_j = \mathbf{i}k_i \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k_m^2} \right) \tilde{w}_j \quad (2.14a)$$

$$= \mathbf{i} \left(k_j - \frac{k_i^2 k_j}{k_m^2} \right) \tilde{w}_j = 0 \quad (2.14b)$$

Damit erhält man eine anschauliche Interpretation des Terms $\left(E_3 - \frac{kk}{k^2}\right) \mathcal{F}[\dots]$ aus (2.12). Startet man diese Entwicklungsgleichung mit einem divergenzfreien Feld als Anfangsbedingung, können nur durch den nichtlinearen Term $\mathcal{F}[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{u}] \cdot \mathcal{F}^{-1}[ik\tilde{u}]]$ Divergenzen im Feld erscheinen. Durch Anwendung des Projektionsoperators P auf den nichtlinearen Term werden diese Divergenzen wieder aus der Entwicklungsgleichung heraus genommen, sodass das Feld unter der zeitlichen Entwicklung durch (2.12) divergenzfrei bleibt. Der Druckgradient, aus dem der Operator P entsteht, sorgt somit dafür, dass das Feld stets divergenzfrei bleibt.

Nebenbei sei angemerkt, dass man von der Navier-Stokes- zur Burgersgleichung kommt, wenn man den Operator $P = E_3$ setzt, oder äquivalent den Druckgradienten aus der Navier-Stokes-Gleichung herausstreicht. Dies deckt sich mit den obigen Überlegungen zur Beziehung zwischen Druckgradient und Divergenzfreiheit – die Burgersgleichung beschreibt ein perfekt kompressibles Fluid, in dem es keinen Mechanismus gibt, der Divergenzen im Geschwindigkeitsfeld beseitigt.

2.2.4 Zeitintegration via Runge-Kutta-Verfahren

Die gewöhnliche Differentialgleichung (2.12) ist von der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{u} = \mathcal{N}[\tilde{u}] - \nu k^2 \tilde{u} \quad , \quad (2.15)$$

wobei $\mathcal{N}[\cdot]$ die nichtlinearen Terme zusammenfasst. Diese Gleichung soll nun mit einem beliebigen Zeitschrittverfahren integriert werden.

Man muss beachten, dass Zeitschrittverfahren die Gleichung nur näherungsweise lösen; ausgehend von einem zum Zeitpunkt t gegebenen Feld $\tilde{u}(t)$ errechnen sie eine Näherungslösung $\tilde{u}(t + \Delta t)$ zum späteren Zeitpunkt $t + \Delta t$. Die Güte dieser Näherung, der Abstand⁶ oder Fehler zwischen genäherter und „echter“ Lösung, wird dabei von der gewählten Schrittgröße Δt abhängen; ist beispielsweise der Fehler pro Zeitschritt proportional zu Δt^2 , spricht man von einem „Verfahren der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t)$ “ (dies trifft z. B. auf das einfache Euler-Verfahren zu).

Prinzipiell ist jedes Zeitschrittverfahren geeignet, um unsere Gleichung zu lösen; eine oft benutzt Methode wäre das klassische Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung, beschrieben z. B. in [But03]. Hier soll allerdings das in [SO88, SO89] gezeigte Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung (kurz: RK3) benutzt werden, ein explizites Einschrittverfahren. In der numerischen Implementation hat dieses spezielle Verfahren die Eigenschaften, Oszillationen zu unterdrücken und wenig Speicher zu benötigen. Details der Implementation werden in Abschnitt 2.6 diskutiert.

⁶Als „Abstand“ zwischen zwei Feldern könnte man beispielsweise die L^2 -Norm der punktwisen Differenz der Felder definieren.

Da der Laplace-Term $-\nu k^2 \tilde{u}$ linear ist, kann man diesen mit der Methode des *integrierenden Faktors* exakt behandeln; man spricht dann auch von einem semi-impliziten Verfahren, das im Folgenden kurz skizziert werden soll.

Führt man die Transformation

$$\bar{u} := \tilde{u} e^{\nu k^2 t} \quad (2.16)$$

ein, vereinfacht sich die Bewegungsgleichung (2.15) zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{u} = \mathcal{N}[\tilde{u}] e^{\nu k^2 t} \quad (2.17a)$$

$$= \mathcal{N}[\bar{u} e^{-\nu k^2 t}] e^{\nu k^2 t} \quad (2.17b)$$

$$=: \tilde{\mathcal{N}}[\bar{u}, t] \quad (2.17c)$$

mit der transformierten Nichtlinearität $\tilde{\mathcal{N}}$.

Sei $\bar{u}_0 = \bar{u}(t)$ das Feld zum Zeitpunkt t . Dann berechnet sich das genäherte Feld $\bar{u}(t + \Delta t)$ nach einem Zeitschritt der Größe Δt nach dem RK3-Schema⁷

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_0 + \Delta t \tilde{\mathcal{N}}[\bar{u}_0, t] \quad (2.18a)$$

$$\bar{u}_2 = \frac{3}{4} \bar{u}_0 + \frac{1}{4} \bar{u}_1 + \frac{1}{4} \Delta t \tilde{\mathcal{N}}[\bar{u}_1, t + \Delta t] \quad (2.18b)$$

$$\bar{u}(t + \Delta t) = \frac{1}{3} \bar{u}_0 + \frac{2}{3} \bar{u}_2 + \frac{2}{3} \Delta t \tilde{\mathcal{N}}[\bar{u}_2, t + \frac{1}{2} \Delta t] \quad (2.18c)$$

Dabei ist zu beachten, dass die Hilfsfelder \bar{u}_1 und \bar{u}_2 zu den Zeitpunkten $t + \Delta t$ und $t + \frac{1}{2} \Delta t$ gehören, vgl. [Hom06].

Da es zweckmäßiger erscheint, mit der Fouriertransformierten \tilde{u} selber anstatt mit der abgeleiteten Größe \bar{u} zu arbeiten, kann man in diesem Schema die Transformation (2.16) rückgängig machen und erhält ein Zeitschrittverfahren für \tilde{u} :

$$\tilde{u}_1 = \tilde{u}_0 e^{-\nu k^2 \Delta t} + \Delta t \mathcal{N}[\tilde{u}_0] e^{-\nu k^2 \Delta t} \quad (2.19a)$$

$$\tilde{u}_2 = \frac{3}{4} \tilde{u}_0 e^{-\nu k^2 \frac{\Delta t}{2}} + \frac{1}{4} \tilde{u}_1 e^{\nu k^2 \frac{\Delta t}{2}} + \frac{1}{4} \Delta t \mathcal{N}[\tilde{u}_1] e^{\nu k^2 \frac{\Delta t}{2}} \quad (2.19b)$$

$$\tilde{u}(t + \Delta t) = \frac{1}{3} \tilde{u}_0 e^{-\nu k^2 \Delta t} + \frac{2}{3} \tilde{u}_2 e^{-\nu k^2 \frac{\Delta t}{2}} + \frac{2}{3} \Delta t \mathcal{N}[\tilde{u}_2] e^{-\nu k^2 \frac{\Delta t}{2}} \quad (2.19c)$$

Das Zeitschrittverfahren lässt sich in dieser Form leicht in einem Simulationscode implementieren.

In diesem Abschnitt haben wir das Pseudospektralverfahren anhand der Navier-Stokes-Gleichung demonstriert. Durch das Pseudospektralverfahren konnten wir die Navier-Stokes-Gleichung zu einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen umformen, das

⁷Da Zeitschrittverfahren nur genäherte Lösungen berechnen, müsste man streng genommen zwischen der „echten“ und der genäherten Lösung unterscheiden, wie es z. B. in der Literatur über Zeitschrittverfahren auch gemacht wird. Wir verzichten aber aus Gründen der Übersichtlichkeit auf diese Unterscheidung, weil dieser Abschnitt nur eine mehr oder weniger informelle Übersicht geben soll, wie das von uns gewählte Zeitschrittverfahren aussieht.

dann mit einem expliziten Runge-Kutta-Verfahren näherungsweise integriert werden kann. Die Überlegungen bezüglich des Pseudospektralverfahrens sind dabei exakte analytische Umformungen; lediglich die zeitliche Integration durch das Runge-Kutta-Verfahren stellt eine Näherungslösung dar. Über die tatsächliche Implementation des Verfahrens und die dabei zu beachtenden Details haben wir uns bisher mit Verweis auf Abschnitt 2.6 ausgesprochen.

2.3 Umgehen des Druckterms: Die Wirbeltransportgleichung

Bei der Diskussion des Druckterms in Abschnitt 2.2.3 haben wir gesehen, dass dieser Term in dem etwas kompliziert anmutenden Operator P mündet. Dieser Projektionsoperator sorgt dafür, dass das Geschwindigkeitsfeld stets divergenzfrei bleibt.

Eine andere Möglichkeit, die Divergenzfreiheit sicher zu stellen, besteht darin, die Navier-Stokes-Gleichung (2.1) für die Vortizität $\omega(x, t) = \nabla \times \mathbf{u}(x, t)$ umzuformulieren; dies ergibt die sogenannte Wirbeltransportgleichung. Berechnet man die Rotation der Vortizität, erhält man wegen der Divergenzfreiheit von \mathbf{u} die Poissongleichung

$$\nabla \times \omega = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \Delta \mathbf{u} = -\Delta \mathbf{u} \quad , \quad (2.20)$$

die die Lösung

$$\mathbf{u} = -\Delta^{-1} \nabla \times \omega \quad (2.21)$$

hat; Δ^{-1} steht wieder formal für eine Lösung durch ein Poisson-Integral. Da der Gradient einer Rotation verschwindet und Gradient und Poisson-Integral vertauschen, sieht man leicht, dass das aus ω resultierende Geschwindigkeitsfeld „automatisch“ divergenzfrei ist:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = -\Delta^{-1} \nabla \cdot (\nabla \times \omega) = 0 \quad (2.22)$$

Wendet man die Rotation auf die Navier-Stokes-Gleichung an, entfällt der etwas „unhandliche“ Druckgradient, weil die Rotation eines Gradienten immer verschwindet. Unter Ausnutzung weiterer Vektoridentitäten (für Details siehe z. B. [Kam09]) gelangt man zur Wirbeltransportgleichung in der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega = \nabla \times (\mathbf{u} \times \omega) + \nu \Delta \omega \quad , \quad (2.23)$$

wobei sich das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} über die Poisson-Gleichung (2.21) berechnet.

Mit den Überlegungen aus Abschnitt 2.2 ist es nun ein Leichtes, ein entsprechendes Pseudospektralverfahren der Wirbeltransportgleichung für die Fouriertransformierten $\tilde{\omega}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}[\omega(\mathbf{x}, t)]$ und $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}[\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)]$ herzuleiten:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\omega} = i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \times \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\omega}] \right] - \nu k^2 \tilde{\omega} \quad (2.24a)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{i\mathbf{k} \times \tilde{\omega}}{k^2} \quad (2.24b)$$

Man sieht, dass der Projektionsoperator P nicht auftaucht.

Die Zeitintegration der Wirbeltransportgleichung (2.24a) im Fourierraum verläuft analog zu dem in (2.19) beschriebenen RK3-Schema. Aus diesem Grund wird das RK3-Schema hier nicht noch einmal für die Vortizität aufgeführt. Es muss lediglich für jede Auswertung der Nichtlinearität zunächst das Geschwindigkeitsfeld gemäß der Poisson-Gleichung (2.24b) aus dem jeweiligen Vortizitätsfeld errechnet werden.

Der Vorteil, das Pseudospektralverfahren für die Wirbeltransportgleichung zu formulieren, ist vor allem in zweidimensionalen Simulationen zu sehen. Da in zwei Dimensionen die Vortizität ein Skalar ist, muss man nur *ein* skalares Feld anstatt ein zweikomponentiges Vektorfeld wie im Falle der Navier-Stokes-Gleichung simulieren. Dabei enthalten beide Felder wegen der Äquivalenz von Navier-Stokes- und Wirbeltransportgleichung die gleiche Information;⁸ dies kann man sich z. B. daran klarmachen, dass im Gegensatz zur Vortizität das zweikomponentige Geschwindigkeitsfeld die weitere Bedingung der Divergenzfreiheit erfüllen muss. Man benötigt also in zwei Dimensionen für die Lösung der Wirbeltransportgleichung weniger Felder und weniger Fouriertransformationen als für die Navier-Stokes-Gleichung, und damit in der Numerik auch weniger Rechenaufwand; z. B. bedienen sich die in [Wil07] und [Kam09, Vos09] benutzten Simulationscodes dieses Vorteils der Wirbeltransportgleichung.

Da in drei Dimensionen sowohl Vortizität als auch Geschwindigkeit ein dreikomponentiges Vektorfeld sind, ist hier der Aufwand für beide Gleichungen in etwa gleich groß, d. h. es werden gleich viele Fouriertransformationen benötigt.⁹ Zusätzlich muss man im Falle der Navier-Stokes-Gleichung den Projektionsoperator P anwenden, während man für die Wirbeltransportgleichung das Geschwindigkeitsfeld über eine Poissongleichung aus der Vortizität berechnen muss. Beides sind lineare Operationen im Fourierraum, die vergleichbaren Rechenaufwand für die Numerik bedeuten.

2.4 Randbedingungen

Bisher haben wir implizit ein Strömungsfeld betrachtet, das sich im gesamten \mathbb{R}^3 ausdehnt. Dies ist im Prinzip eine Folge der Definition der Fouriertransformation (2.2), die sich auf eine im gesamten \mathbb{R}^3 definierte Funktion bezog. Ein Strömungsfeld, das sich auf den gesamten \mathbb{R}^3 erstreckt, ist natürlich eine nicht sehr anwendungsnahe Konfiguration des Strömungsfeldes; in der Natur ist jede Strömung in irgendeiner Weise durch Wände begrenzt, an denen gewisse Randbedingungen an das Strömungsfeld zu stellen sind. Auch für das Rayleigh-Bénard-Problem, für dessen Lösung in diesem Kapitel eine numerische

⁸Abgesehen von einem konstanten *mean flow* des Geschwindigkeitsfeldes, der bei der Rotationsbildung verloren geht.

⁹Es werden neun Fouriertransformationen benötigt. Bei der Vortizitätsformulierung (2.24a) ist das sofort ersichtlich. Bei der Geschwindigkeitsformulierung kann man es sich dadurch klar machen, dass man die Nichtlinearität unter Ausnutzung der Inkompressibilität als $\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})$ formuliert – $\mathbf{u}\mathbf{u}$ ist eine symmetrische Matrix mit sechs unabhängigen Einträgen.

Methode entwickelt werden soll, sind Randbedingungen in Form von kalter und heißer Platte natürlich essentiell wichtig.

Das Verhalten von Fluiden an Grenzflächen spielt z. B. auch in den Ingenieurwissenschaften eine große Rolle, die eher nach anwendungsnahen Verfahren als nach idealisierten Konfigurationen wie einem unendlich ausgedehnten Geschwindigkeitsfeld verlangen. In den Ingenieurwissenschaften werden Problemstellungen numerisch oft mit Verfahren wie den *finiten Elementen* oder *finiten Volumen* behandelt. Diese Verfahren sind auf das Einbeziehen von Grenzflächen zugeschnitten, allerdings schwieriger zu implementieren als das Pseudospektralverfahren, das, wie wir in den vorherigen Abschnitten gesehen haben, doch von recht überschaubarer Komplexität ist.

In diesem Abschnitt wollen wir deshalb eine Methode erarbeiten, wie wir das Pseudospektralverfahren der Navier-Stokes-Gleichung dahingehend erweitern können, dass beliebig geformte feste Wände¹⁰ behandelt werden können. An diesen Wänden soll das Geschwindigkeitsfeld *no slip*-Randbedingungen $\mathbf{u} = 0$ erfüllen, d. h. an den Wänden verschwinden alle Geschwindigkeitskomponenten.

2.4.1 Volume penalization

Ein geeignetes Verfahren zur Modellierung von festen Wänden nennt sich *volume penalization*. Die Grundzüge dieses Verfahrens, das in den 1990er Jahren entwickelt wurde, sollen in diesem Abschnitt motiviert werden; detaillierte Darstellungen sind in der Literatur zu finden, sowohl im Hinblick auf die mathematischen Details [ABF99] als auch auf die Anwendung auf fluiddynamische Problemstellungen [Sch05, KDK⁺07]. *Volume penalization* erweitert die Navier-Stokes-Gleichung (2.1a) um einen Term, der die geforderten Randbedingungen erzwingt; da dieser Term recht trivialer Gestalt ist, kann er ohne viel Aufwand in das bisherige Pseudospektralverfahren integriert werden.

Betrachten wir als einführendes Beispiel die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}y(t) = -\frac{1}{\eta}y(t) \quad , \quad (2.25)$$

deren Lösung wir mit der Anfangsbedingung $y_0 = y(t=0)$ natürlich schnell als

$$y(t) = y_0 \cdot e^{-\frac{1}{\eta}t} \quad (2.26)$$

angeben können. Man sieht also, dass in einer Entwicklungsgleichung der Form $\frac{d}{dt}y(t) = \dots$ ein Term der Form $-\frac{1}{\eta}y(t)$ für eine exponentielle Dämpfung sorgt, die umso stärker ist, je kleiner der Parameter η gewählt wird.

¹⁰Wir betrachten hier nur unbewegliche Wände, obwohl das im Folgenden beschriebene Verfahren durchaus bewegliche Wände erlaubt; z. B. wird in [KS09] durch die Luft wirbelndes Laub simuliert.

Überträgt man dieses Prinzip eines Terms, der eine exponentielle Dämpfung zur Folge hat, auf die Navier-Stokes-Gleichung, kommt man schnell zu den in obiger Literatur diskutierten modifizierten Gleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \nu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\eta} H(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (2.27a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.27b)$$

Hierbei ist $H(\mathbf{x})$ eine Maskierungsfunktion mit $H : \mathbb{R}^3 \rightarrow \{0, 1\}$, die das zugrundeliegende Gebiet (hier den gesamten \mathbb{R}^3) in Fluidbereiche, in denen $H = 0$ gilt, und feste Bereiche mit $H = 1$ unterteilt. Feste (oder Wand-) Bereiche und Fluidbereiche werden dabei mit Ω_w bzw. $\Omega_f \subset \mathbb{R}^3$ bezeichnet. Die Maskierungsfunktion macht nichts anderes, als den Dämpfungsterm $-\frac{1}{\eta} \mathbf{u}$ in den entsprechenden Gebieten an- bzw. abzuschalten. Das *volume penalization*-Verfahren hat damit die handliche Eigenschaft, dass man lediglich durch Anpassen der Maskierungsfunktion $H(\mathbf{x})$ fast beliebig geformte Wände erhalten kann, die ohne Modifikation des Pseudospektralverfahrens behandelt werden können; beispielsweise entspricht die Wahl der Maskierungsfunktion

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \sqrt{x^2 + y^2} < 1 \text{ und } 0 < z < 1 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.28)$$

einem zylindrischen Gefäß, vgl. Abbildung 2.1a.

Es wurde in [ABF99] gezeigt, dass im Limes $\eta \rightarrow 0$ das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} im Wandgebiet Ω_w gegen null konvergiert, dass also insbesondere auf dem Rand $\partial\Omega_w$, d. h. der eigentlichen Wand, die *no slip*-Randbedingung erfüllt wird. Die Konvergenzordnung von „echter“ und durch *volume penalization* erhaltener Lösung wurde in [CF03] zu $\sqrt{\eta}$ bestimmt. Allerdings stellt sich heraus, dass man es durch Hinzunehmen des Dämpfungsterms in (2.27a) mit einem sogenannten *steifen* Problem zu tun bekommt. Dies hat zur Folge, dass der Zeitschritt Δt des Runge-Kutta-Verfahrens vom gewählten η abhängt: Im Allgemeinen muss $\Delta t < \eta$ sein, was bedeutet, dass aus rein praktischen Gründen der Limes $\eta \rightarrow 0$ nicht durchgeführt werden kann. Dies wird später noch ausführlich diskutiert.

Wendet man die Fouriertransformation auf die um den Dämpfungsterm ergänzte Navier-Stokes-Gleichung an, muss man das *pseudospektrale* Prinzip beachten, damit der Term $-\frac{1}{\eta} H \cdot \mathbf{u}$ im Fourierraum nicht in einer Faltung resultiert. Die Entwicklungsgleichung der Geschwindigkeit im Fourierraum ist dann

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{u}} = -\mathcal{P} \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}] \cdot \mathcal{F}^{-1} [i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{u}}] \right] - \nu k^2 \tilde{\mathbf{u}} - \frac{1}{\eta} \mathcal{F} \left[H(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}] \right] \quad , \quad (2.29)$$

oder, wenn man statt der Navier-Stokes- die Wirbeltransportgleichung benutzen möchte,

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\omega} = \mathbf{i}k \times \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \times \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\omega}] - \frac{1}{\eta} H(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \right] - \nu k^2 \tilde{\omega} \quad . \quad (2.30)$$

Volume penalization bietet uns damit die Möglichkeit, das in Abschnitt 2.2 entwickelte Pseudospektralverfahren durch das Hinzufügen eines unkomplizierten Terms um beliebig geformte *no slip*-Wände erweitern zu können. Gerade beliebig geformte Wände waren bisher hauptsächlich den komplizierteren Methoden der finiten Elemente und finiten Volumen vorbehalten.

2.5 Anwendung auf die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir die Techniken eingeführt, die es uns ermöglichen, die Navier-Stokes-Gleichung mit *no slip*-Wänden numerisch zu lösen. Diese Techniken sollen nun dahingehend erweitert werden, dass mit ihnen auch ein numerisches Lösungsverfahren für die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen (1.1) angegeben werden kann.

2.5.1 Pseudospektralverfahren und *volume penalization*

Die Entwicklungsgleichung (1.1a) für das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u} lässt sich mit dem Pseudospektralverfahren gepaart mit dem Runge-Kutta-Verfahren behandeln. Die Randbedingungen (1.2) von zwei unendlich ausgedehnten horizontalen Platten im Abstand h , zwischen denen das Fluid eingeschlossen ist, lassen sich über die Maskierungsfunktion

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } 0 < z < h \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.31)$$

mittels *volume penalization* realisieren, vgl. Abbildung 2.1b. Den Auftriebsterm $\alpha g T \mathbf{e}_z$, also die Kopplung an die Temperatur, in das Verfahren zu integrieren, stellt keine weitere Schwierigkeit dar.

Gedanken machen muss man sich allerdings über die Entwicklungsgleichung (1.1b) des Temperaturfeldes. Man kann diese Gleichung zwar auch mit dem Pseudospektralverfahren in eine gewöhnliche Differentialgleichung für die Fouriertransformierte $\tilde{T} = \mathcal{F}[T]$ analog zu (2.12) umschreiben. Allerdings sind die Randbedingungen für die Temperatur, $T(z=0) = \delta T/2$ und $T(z=h) = -\delta T/2$, nicht direkt über *volume penalization* zu erreichen, da dieses Verfahren das Feld in der maskierten Region Ω_w nur auf den Wert null, nicht aber auf einen beliebigen Wert festlegen kann.

Dieses Problem lässt sich jedoch umgehen, indem man statt des Temperaturfeldes die Abweichungen $\theta(\mathbf{x}, t)$ vom konduktiven Temperaturprofil betrachtet:

$$\theta(\mathbf{x}, t) = T(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta T}{h} \left(z - \frac{h}{2} \right) \quad (2.32)$$

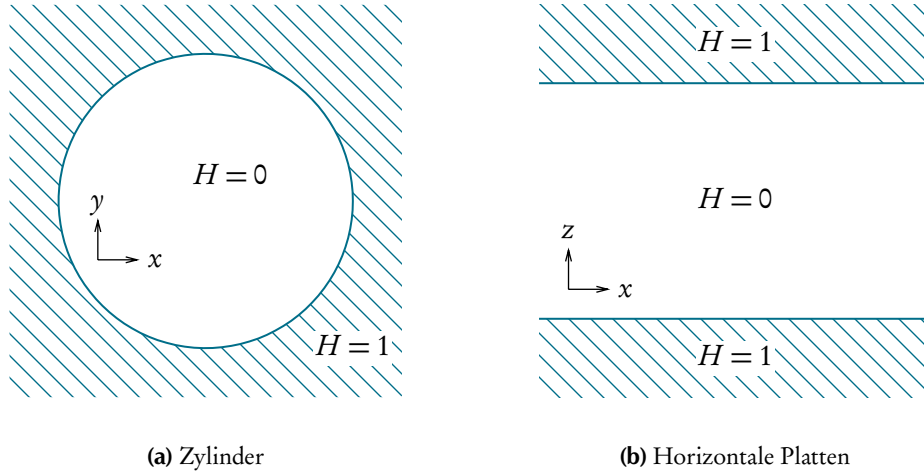


Abbildung 2.1: Beispiele für verschiedene Maskierungsfunktionen $H(\mathbf{x})$. An den Grenzen zwischen den Gebieten für $H = 0$ und $H = 1$ werden durch *volume penalization no slip*-Randbedingungen realisiert. (a) Zweidimensionale Darstellung der Maskierungsfunktion (2.28) für ein zylinderförmiges Gefäß. Gezeigt ist die Sicht auf den Zylinder von oben; die z -Achse zeigt aus der Papierebene hinaus. (b) Zweidimensionale Darstellung der Maskierungsfunktion (2.31) für unendlich ausgedehnte horizontale Platten. Die y -Richtung zeigt in die Papierebene hinein.

Wie man leicht sehen kann, transformieren sich die obigen Randbedingungen an die Temperatur zu den Randbedingungen $\theta(z=0) = \theta(z=h) = 0$ an die neue Variable. Diese Randbedingungen an θ kann man mittels *volume penalization* erreichen. Die Entwicklungsgleichung der Temperaturabweichung mit Dämpfungsterm lautet dann

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta + \mathbf{u} \cdot \nabla \theta = \kappa \Delta \theta + \frac{\delta T}{h} \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} H \cdot \theta \quad . \quad (2.33)$$

Damit haben wir alle Bestandteile zusammen, um das Pseudospektralverfahren der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen in der Form angeben zu können, in der es im Simulationsprogramm implementiert ist. Aus historisch gewachsenen Gründen, nämlich weil der Simulationscode zuerst in einer zweidimensionalen Variante geschrieben wurde, bevor er auf drei Dimensionen erweitert worden ist, arbeiten wir mit der Wirbeltransport- statt der Navier-Stokes-Gleichung. Damit lauten die Entwicklungsgleichungen für die Fourier-

transformierten der Vortizität $\tilde{\omega}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}[\omega(\mathbf{x}, t)]$ und der Temperaturabweichung $\tilde{\theta}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}[\theta(\mathbf{x}, t)]$ folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\omega} = & \mathbf{i} \mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \times \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\omega}] - \frac{1}{\eta} H \cdot \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \right] \\ & - \nu k^2 \tilde{\omega} + \alpha g \mathbf{i} \mathbf{k} \times (\tilde{\theta} \mathbf{e}_z) \end{aligned} \quad (2.34a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\theta} = & - \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \cdot \mathcal{F}^{-1}[\mathbf{i} \mathbf{k} \tilde{\theta}] - \frac{1}{\eta} H \cdot \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\theta}] \right] \\ & - \kappa k^2 \tilde{\theta} + \frac{\delta T}{h} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (2.34b)$$

Dabei ist die Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{u}}$ über (2.24b) gegeben. Des Weiteren ist zu beachten, dass im Auftriebsterm $\alpha g \mathbf{i} \mathbf{k} \times (\tilde{\theta} \mathbf{e}_z)$ die Temperatur durch die Temperaturabweichung ersetzt wurde. Da $\nabla \times (T \mathbf{e}_z) = \nabla \times (\theta \mathbf{e}_z)$ gilt (vgl. (2.32)), ist es zweckmäßiger, in den Auftriebsterm direkt $\tilde{\theta}$ eingehen zu lassen, statt \tilde{T} über (2.32) aus $\tilde{\theta}$ zu errechnen. Damit liest sich der Auftriebsterm im Fourierraum als $\alpha g \mathbf{i} \mathbf{k} \times (\tilde{\theta} \mathbf{e}_z)$.

2.5.2 Zeitliche Integration

Die Entwicklungsgleichungen (2.34) für die Fouriertransformierten müssen nun noch mit dem RK3-Verfahren analog zu (2.19) gelöst werden. Dies stellt bis auf die Länglichkeit der Ausdrücke keine weitere Schwierigkeit dar; um das Verfahren übersichtlich zu gestalten, fassen wir deshalb Vortizität und Temperaturabweichung zum Zustandsvektor

$$\tilde{\xi}(\mathbf{k}, t) := \begin{pmatrix} \tilde{\omega}_x(\mathbf{k}, t) \\ \tilde{\omega}_y(\mathbf{k}, t) \\ \tilde{\omega}_z(\mathbf{k}, t) \\ \tilde{\theta}(\mathbf{k}, t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \quad (2.35)$$

zusammen und definieren die Terme der Rechten-Hand-Seite (bis auf die Laplace-Terme) der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen im Fourierraum bezüglich des Zustandvektors als

$$\mathcal{R}[\tilde{\xi}] := \begin{pmatrix} \mathbf{i} \mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \times \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\omega}] - \frac{1}{\eta} H \cdot \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \right] + \alpha g \mathbf{i} \mathbf{k} \times (\tilde{\theta} \mathbf{e}_z) \\ - \mathcal{F} \left[\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}] \cdot \mathcal{F}^{-1}[\mathbf{i} \mathbf{k} \tilde{\theta}] - \frac{1}{\eta} H \cdot \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\theta}] \right] - \frac{\delta T}{h} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Fasst man die Parameter ν und κ zur Diagonalmatrix

$$\Xi := \text{diag}(\nu, \nu, \nu, \kappa) \in \mathbb{R}^{4 \times 4} \quad (2.37)$$

zusammen, lassen sich die Entwicklungsgleichungen kompakt als

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\xi} = \mathcal{R} [\tilde{\xi}] - k^2 \Xi \tilde{\xi} \quad (2.38)$$

schreiben. Damit kann man das RK3-Verfahren für die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen angeben, das in dieser kompakten Schreibweise zwar völlig analog zum RK3-Verfahren (2.19) der Navier-Stokes-Gleichung aussieht, aber dennoch hier noch einmal gezeigt werden soll, da es in dieser Form auch im Simulationscode implementiert worden ist:

$$\tilde{\xi}_1 = e^{-\Xi k^2 \Delta t} \tilde{\xi}_0 + \Delta t e^{-\Xi k^2 \Delta t} \mathcal{R} [\tilde{\xi}_0] \quad (2.39a)$$

$$\tilde{\xi}_2 = \frac{3}{4} e^{-\Xi k^2 \frac{\Delta t}{2}} \tilde{\xi}_0 + \frac{1}{4} e^{\Xi k^2 \frac{\Delta t}{2}} \tilde{\xi}_1 + \frac{1}{4} \Delta t e^{\Xi k^2 \frac{\Delta t}{2}} \mathcal{R} [\tilde{\xi}_1] \quad (2.39b)$$

$$\tilde{\xi}(t + \Delta t) = \frac{1}{3} e^{-\Xi k^2 \Delta t} \tilde{\xi}_0 + \frac{2}{3} e^{-\Xi k^2 \frac{\Delta t}{2}} \tilde{\xi}_2 + \frac{2}{3} \Delta t e^{-\Xi k^2 \frac{\Delta t}{2}} \mathcal{R} [\tilde{\xi}_2] \quad (2.39c)$$

Hierbei ist wieder $\tilde{\xi}_0 = \tilde{\xi}(t)$ und $\tilde{\xi}(t + \Delta t)$ der Zustandsvektor *vor* bzw. *nach* dem Zeitschritt. Da es sich bei der Parametermatrix Ξ um eine Diagonalmatrix handelt, lassen sich die auftretenden Matrixexponentiale gemäß

$$e^{-\Xi k^2 \Delta t} = \text{diag} \left(e^{-\nu k^2 \Delta t}, e^{-\nu k^2 \Delta t}, e^{-\nu k^2 \Delta t}, e^{-\kappa k^2 \Delta t} \right) \quad (2.40)$$

berechnen; die restlichen auftretenden Matrixexponentiale sind analog zu behandeln.

Es ist anzumerken, dass obige Darstellung mittels Zustandsvektor, Parametermatrix und Matrixexponential hier nur gewählt wurde, um das Zeitintegrationsverfahren möglichst kompakt schreiben zu können; im Simulationscode kommen Terme wie $e^{-\Xi k^2 \Delta t} \tilde{\xi}_0$, also Produkte der Form „Matrixexponential multipliziert mit Zustandsvektor“, natürlich direkt in ausmultiplizierter Form vor.

Man benötigt noch eine Anfangsbedingung für die Felder $\theta(x, t = 0)$ und $\omega(x, t = 0)$. Da das Rayleigh-Bénard-System für hohe Rayleigh-Zahlen chaotisch ist, spielen die Anfangsbedingungen nach einer gewissen Zeit keine Rolle mehr. Aus diesem Grund arbeiten wir größtenteils mit gaußschem Rauschen als Anfangsbedingung für die Felder.

2.6 Implementationsdetails

In den vorherigen Abschnitten haben wir schrittweise das Verfahren hergeleitet, das genutzt werden soll, um die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen numerisch zu lösen. Dabei sind wir rein mathematisch vorgegangen und haben (bis auf Randbemerkungen) die eigentliche Implementierung des Verfahrens nicht weiter thematisiert. Es zeigt sich allerdings, dass man in der Praxis einige Punkte beachten muss, die in diesem Abschnitt Erwähnung finden sollen.

2.6.1 Periodisches Simulationsgebiet

Bisher waren die Geschwindigkeits- und Temperaturfelder der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen im gesamten \mathbb{R}^3 definiert und damit theoretisch unendlich weit ausgedehnt. Solche Felder kann man natürlich in der Numerik nicht behandeln. Deshalb ist es nötig, die Felder auf ein endliches Raumgebiet $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z] \subset \mathbb{R}^3$ einzuschränken.

Als Randbedingungen auf $\partial\Omega$ benutzt man zunächst periodische Ränder, also

$$u(x=0) = u(x=L_x) \quad \text{und} \quad \theta(x=0) = \theta(x=L_x) \quad , \quad (2.41)$$

y, z analog. Durch die periodischen Randbedingungen wird aus der kontinuierlichen Fouriertransformation (2.2) eine diskrete Fouriertransformation, d. h. dass die Fouriertransformierten wie z. B. $\tilde{u}(\mathbf{k})$ nur an den abzählbar vielen Stellen

$$\mathbf{k} \in \left\{ \left(i \frac{2\pi}{L_x}, j \frac{2\pi}{L_y}, k \frac{2\pi}{L_z} \right) : (i, j, k) \in \mathbb{Z}^3 \right\} \quad (2.42)$$

ungleich null sind (vgl. z. B. [LP98]). Damit lässt sich beispielsweise die Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes mittels der Rücktransformation (2.2b) als die diskrete Summe

$$u(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{u}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad , \quad (2.43)$$

wobei die Summierung über die \mathbf{k} -Werte aus (2.42) geschieht.

Periodische Randbedingungen in horizontaler Richtung sind erwünscht, jedoch ergeben periodische Ränder in vertikaler Richtung für das Rayleigh-Bénard-Problem wenig Sinn, da das Fluid zwischen zwei Platten eingeschlossen sein soll. Deswegen muss man gemäß des *volume penalization*-Ansatzes das Gebiet $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_w$ in Fluid- und Wandbereiche zerlegen mit

$$\Omega_f = [0, L_x] \times [0, L_y] \times (d, h+d) \quad (2.44a)$$

$$\Omega_w = [0, L_x] \times [0, L_y] \times ([0, d] \cup [h+d, h+2d]) \quad , \quad (2.44b)$$

was der Maskierungsfunktion

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } d < z < h+d \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.45)$$

entspricht. Das Fluidvolumen Ω_f der Höhe h wird also oben und unten durch Wände der Dicke d erweitert; Wand- und Fluiddicke sollen dabei so gewählt sein, dass $h+2d = L_z$ ist. Dass das Fluidvolumen bei $z = d$ und nicht $z = 0$ anfängt, spielt keine Rolle, da die z -Koordinate in den Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen nicht explizit auftaucht; lediglich der Abstand h der horizontalen Platten ist entscheidend.

2.6.2 Diskretisierung der Felder

Um die Felder numerisch behandeln zu können, ist es nötig, die Felder nur an endlich vielen, diskreten Gitterpunkten (den sogenannten *Kollokationspunkten*) zu betrachten, d. h. man führt eine *Diskretisierung* des Raumgebietes ein. Löst man die x, y, z -Richtung äquidistant durch jeweils $N_{x,y,z}$ (also insgesamt $N = N_x \cdot N_y \cdot N_z$) Gitterpunkte auf, nimmt der Ortsvektor nur die Werte

$$\mathbf{x} \in \left\{ \left(i \frac{L_x}{N_x}, j \frac{L_y}{N_y}, k \frac{L_z}{N_z} \right) : 0 \leq i, j, k \leq N_{x,y,z} - 1 \right\} =: \Omega_N \quad (2.46)$$

an.¹¹ Die Gitterpunkte besitzen damit in Richtung der Koordinatenachsen zueinander einen Abstand $\Delta x = \frac{L_x}{N_x}$, Δy , Δz analog.

Diese Diskretisierung hat auch Auswirkungen auf die möglichen \mathbf{k} -Vektoren; von den abzählbar vielen Werten (2.42) bleiben nur endlich viele Vektoren

$$\mathbf{k} \in \left\{ \left(i \frac{2\pi}{L_x}, j \frac{2\pi}{L_y}, k \frac{2\pi}{L_z} \right) : -\frac{N_{x,y,z}}{2} + 1 \leq i, j, k \leq \frac{N_{x,y,z}}{2} \right\} =: \tilde{\Omega}_N \quad (2.47)$$

übrig, vgl. [CHQZ87]. Dies kann man sich dadurch verdeutlichen, dass ein im Ortsraum auf endlich vielen Gitterpunkten diskretisiertes Gebiet nur endlich viel Information enthält, was natürlich auch noch nach der Fouriertransformation im Spektralraum gelten muss.

Für das Beispiel eines periodischen Geschwindigkeitsfeldes, das an den Gitterpunkten $\mathbf{x} \in \Omega_N$ gegeben ist, werden die Fourierintegrale der Hin- und Rücktransformation also zu den endlichen Summen

$$\tilde{u}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \sum_{\mathbf{x} \in \Omega_N} u(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.48a)$$

$$u(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \sum_{\mathbf{k} \in \tilde{\Omega}_N} \tilde{u}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.48b)$$

2.6.3 Fast Fourier Transformation

Wir haben nun also sowohl den Orts- als auch den Fourierraum bzw. Felder in diesen diskretisiert. Damit konnten auch die Integrale der Fouriertransformation (2.2) durch diskrete Summen dargestellt werden.

Betrachten wir eine beliebige periodische Funktion $f : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$ und bezeichnen die diskreten Funktionswerte bzw. ihre diskrete Fouriertransformierte an N Gitterpunk-

¹¹Es wird angenommen, dass $N_{x,y,z}$ gerade Zahlen sind.

ten mit $f_i = f(x_i)$ und $\tilde{f}_i = \tilde{f}(k_i)$. Dann lautet eine oft in der Implementation der Fouriertransformation zu findende Darstellung dieser Summen

$$\tilde{f}_i = \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{-\frac{2\pi i}{N} i j} \quad (2.49a)$$

$$f_i = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{f}_j e^{\frac{2\pi i}{N} i j} \quad , \quad (2.49b)$$

vgl. [FJ10]. Um also die diskrete Fouriertransformierte (DFT) \tilde{f}_i für einen Punkt i auszurechnen, muss N -mal der Term $f_j e^{-\frac{2\pi i}{N} i j}$ berechnet werden; um die gesamte DFT \tilde{f}_i an allen N Punkten zu berechnen, würde man naiverweise also N^2 Berechnungen benötigen. Das Berechnen der DFT wäre damit ein „Problem der Ordnung $\mathcal{O}(N^2)$ “.

Hier kommt die Idee der *Fast Fourier Transformation* (FFT) zu Hilfe. Dabei handelt es sich um einen in den 1960er Jahren in [CT65] entwickelten Algorithmus, der vielfach als einer der wichtigsten Algorithmen des 20. Jahrhunderts angesehen wird [DS00, Roc00]. Der Algorithmus soll hier nicht im Detail dargestellt werden; er macht sich unter anderem zu Nutze, dass die Exponentialterme in (2.49) redundante Informationen enthalten, da $e^{-\frac{2\pi i}{N} i j}$ für verschiedene Kombinationen von i und j den gleichen Wert annehmen kann. Letztendlich ist es durch den Algorithmus möglich, die DFT mit $\mathcal{O}(N \log N)$ Rechenschritten, also auch in $\mathcal{O}(N \log N)$ Zeit zu berechnen.

Diese Verbesserung von $\mathcal{O}(N^2)$ nach $\mathcal{O}(N \log N)$ macht das Pseudospektralverfahren erst zu einem effizienten Verfahren. Außerdem erklärt sich dadurch, warum es sich lohnt, in Abschnitt 2.2.2 eine Faltung durch drei Fouriertransformationen zu ersetzen, da eine Faltung naiverweise $\mathcal{O}(N^2)$ Rechenschritte benötigt.¹²

Es existieren zahllose Implementationen des FFT-Algorithmus; wir haben uns für die „Fastest Fourier Transform in the West“ (FFTW) in der Version 2.1.5 entschieden [FJ10], ausführlich beschrieben in [Fri99]. Hierbei handelt es sich um eine frei verfügbare, quelloffene und hochoptimierte Implementierung des FFT-Algorithmus. Insbesondere ist die Version 2.1.5 mittels MPI parallelisiert, wodurch sich die in Abschnitt 2.6.7 beschriebene Parallelisierung unseres Simulationscodes erheblich vereinfacht.

Anordnung der Fourierkoeffizienten im Speicher

Viele Implementationen des FFT-Algorithmus ordnen die Fourierkoeffizienten im Speicher auf eine etwas kontraintuitive Art abweichend von (2.47) an. Da dies oft zu Verwirrungen führt, seien die zu den Fourierkoeffizienten \tilde{f}_i gehörenden Wellenzahlen k_i hier in

¹²Es existieren zwar sog. *Fast Convolution*-Algorithmen, die aber im Endeffekt auch nichts anderes machen, als die Faltung über FFTs und punktweise Multiplikation im Fourierraum zu umgehen.

der Reihenfolge dargestellt, wie sie in aufeinanderfolgenden Speicherstellen $i = 0 \dots N - 1$ stehen:

$$0 \frac{2\pi}{L}, 1 \frac{2\pi}{L}, \dots, N/2 \frac{2\pi}{L}, (-N/2 + 1) \frac{2\pi}{L}, (-N/2 + 2) \frac{2\pi}{L}, \dots, - \frac{2\pi}{L} \quad (2.50)$$

Nötige Symmetrien für reelle Felder

Ganz grundlegend muss in der Definition (2.2b) der Fouriertransformation die Fouriertransformierte die Symmetrie $\tilde{g}(k) = \tilde{g}^*(-k)$ erfüllen, damit es sich bei $g(x)$ um eine reellwertige Funktion handelt. Das bedeutet für den diskreten Fall, dass nur etwa die Hälfte der Fourierkoeffizienten gespeichert werden muss, da die restlichen durch komplexe Konjugation erhalten werden können. Deswegen können viele FFT-Implementationen rein reelle Funktionen speziell behandeln. Dies gilt auch für die FFTW, die für eine reelle Funktion nur die Fourierkoeffizienten der Wellenzahlen $k = 0 \frac{2\pi}{L}, 1 \frac{2\pi}{L}, \dots, N/2 \frac{2\pi}{L}$ speichert. Damit wird eine durch N reelle Zahlen diskretisierte Funktion im Fourierraum durch $N/2 + 1$ komplexe Zahlen beschrieben; da die Fourierkoeffizienten zu $k = 0$ und $k = N/2 \frac{2\pi}{L}$ rein reell bzw. rein imaginär sind, haben die Diskretisierungen im Orts- und Fourierraum den gleichen Informationsgehalt, es geht durch die diskrete Fouriertransformation also keine Information verloren.

Dreidimensionale Felder

Nun sind die betrachteten Geschwindigkeits- und Temperaturfelder aber keine eindimensionalen Funktionen, wie wir sie bisher zur Erläuterung der FFT betrachtet haben, sondern es handelt sich bei ihnen um dreidimensionale Funktionen. Das bedeutet nichts anderes, als dass sowohl Funktion als auch Fouriertransformierte auf einem dreidimensionalen Gitter diskretisiert sind, wie bereits durch (2.46) und (2.47) angedeutet. Mit solchen Feldern kann die FFTW ohne weiteres umgehen; lediglich die Anordnung der Fourierkoeffizienten bzw. des Wellenzahlvektors muss beachtet werden:

$$\mathbf{k}_{i,j,k} = \begin{pmatrix} \alpha_i \\ \beta_j \\ \gamma_k \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad 0 \leq i \leq N_x - 1, \quad 0 \leq j \leq N_y - 1, \quad 0 \leq k \leq N_z/2 \quad (2.51)$$

Die Komponenten des Wellenzahlvektors lauten dabei folgendermaßen:

$$\alpha_i = \begin{cases} i \frac{2\pi}{L_x} & \text{falls } 0 \leq i \leq N_x/2 \\ (i - N_x) \frac{2\pi}{L_x} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.52a)$$

$$\beta_j = \begin{cases} j \frac{2\pi}{L_y} & \text{falls } 0 \leq j \leq N_y/2 \\ (j - N_y) \frac{2\pi}{L_y} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.52b)$$

$$\gamma_k = k \frac{2\pi}{L_z} \quad (2.52c)$$

Hier sieht man die spezielle Anordnung der Fourierkoeffizienten analog zu (2.50) sowie die Tatsache, dass wegen der reellen Symmetrie nur die Hälfte der Fourierkoeffizienten γ_k bezüglich der z-Richtung gespeichert werden müssen. Im Simulationsprogramm werden die Komponenten α_i , β_j und γ_k des Wellenzahlvektors einmal vorberechnet und gespeichert, um nicht immer wieder die Terme in (2.52) berechnen zu müssen.

Für weitere Details ist die Dokumentation der FFTW zu konsultieren [FJ10]. Des Weiteren sei der interessierte Leser auf [Wil10] verwiesen, wo ein ähnlicher Simulationscode mittels der FFTW implementiert und diskutiert wird.

2.6.4 Dealiasing

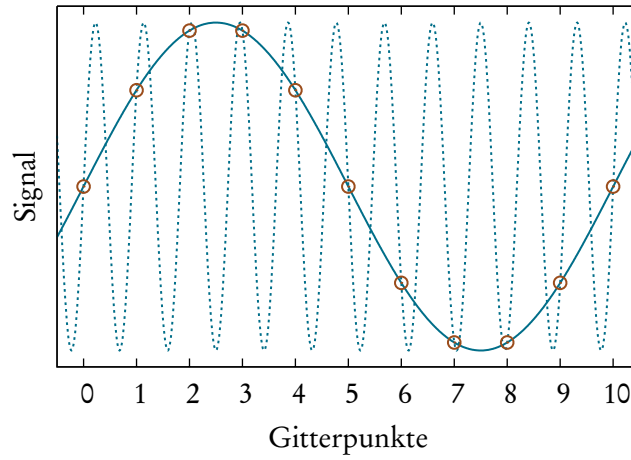
Durch die Diskretisierung der Felder bekommen wir es mit einer Spielart des Abtast- oder *sampling*-Theorems (zuerst diskutiert in [Sha49]) zu tun. Vergessen wir, was wir über das *Pseudo* am Pseudospektralverfahren gelernt haben, und berechnen die Nichtlinearität $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ in der diskreten Form über

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \sum_{\mathbf{k} \in \tilde{\Omega}_N} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \sum_{\mathbf{k} \in \tilde{\Omega}_N} i\mathbf{k} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right) \quad (2.53a)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \tilde{\Omega}_N} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) \cdot i\mathbf{k}' \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{k}', t) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \quad (2.53b)$$

Man sieht, dass die beiden Wellenzahlvektoren \mathbf{k} und \mathbf{k}' im Exponentialterm den größeren Wellenvektor $\mathbf{k} + \mathbf{k}'$ bilden, was einer größeren Frequenz entspricht. Dies stellt ein erhebliches Problem dar: Selbst wenn die höchsten in den Feldern \mathbf{u} und $\nabla \mathbf{u}$ vorkommenden Frequenzen durch das Gitter Ω_N aufgelöst werden, kann es passieren, dass durch die nichtlineare Kopplung Frequenzen entstehen, die so hoch sind, dass sie nicht mehr durch das Gitter aufgelöst werden können. Diese zu hohen Frequenzen werden dann als niedrigere Frequenzen missinterpretiert (vgl. Abbildung 2.2), wodurch im Endeffekt

Abbildung 2.2: Das *aliasing*-Phänomen beispielhaft dargestellt: Ein zu hochfrequent oszillierendes Signal (gestrichelte Linie) wird durch zu wenige Gitterpunkte (Kreise) aufgelöst und damit als ein niedrigfrequentes Signal (durchgezogene Linie) missinterpretiert.



Energie von den hohen in die niedrigen Moden transferiert wird. Man spricht auch vom *aliasing*-Phänomen.

Die Lösung dieses Problems gestaltet sich relativ simpel: Bevor man eine Nichtlinearität wie $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ ausrechnet, muss man dafür sorgen, dass das Feld keine zu hohen Frequenzen besitzt, die nach der Multiplikation nicht mehr durch das Gitter aufgelöst werden können. Setzt man also die Fouriermoden zu den entsprechenden \mathbf{k} -Werten gleich null, ist sichergestellt, dass durch nichtlineare Terme keine zu hohen Frequenzen entstehen können. Man bezeichnet diese Methode als *dealiasing*.

Für quadratische Nichtlinearitäten, wie sie in unserem Fall vorliegen, kann man dies z. B. dadurch erreichen, dass man die Fouriermoden zu \mathbf{k} -Werten größer als $2/3$ des maximalen \mathbf{k} gleich null setzt. Dies geht zurück auf [Ors71]; eine schöne Abbildung als Begründung findet sich in [Wil07, S. 118]. Man kann dazu eine Filterfunktion $S(\mathbf{k})$ einführen,¹³ mit der man die Fouriermoden multipliziert und dadurch zu hohe Moden „unschädlich macht“. Da unser diskreter Fourierraum $\tilde{\Omega}_N$ anisotrop, d. h. in die verschiedenen Richtungen verschieden weit ausgedehnt ist, definiert die Filterfunktion im \mathbf{k} -Raum ein Ellipsoid mit den drei Halbachsen $\frac{2}{3}k_{\max,x/y/z}$:

$$S(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \sqrt{\left(\frac{k_x}{k_{\max,x}}\right)^2 + \left(\frac{k_y}{k_{\max,y}}\right)^2 + \left(\frac{k_z}{k_{\max,z}}\right)^2} < \frac{2}{3} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.54)$$

Dabei ist $k_{\max,x} = \frac{N_x}{2} \frac{2\pi}{L_x}$ der maximale \mathbf{k} -Wert in x -Richtung, y, z analog.

¹³Das S deutet die Verknüpfung zum *sampling*-Theorem an.

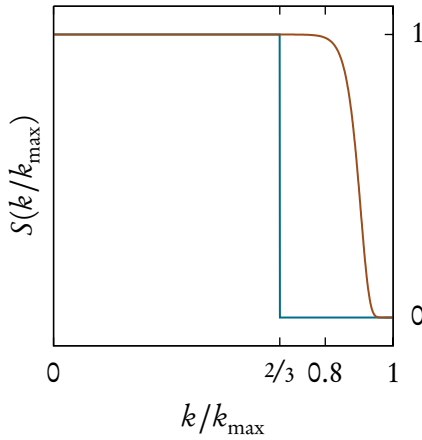


Abbildung 2.3: Vergleich von $2/3$ -Filter (blau) nach Orszag [Ors71] und glattem Fourierfilter (braun) nach [HL07]. Beim glatten Filter bleiben deutlich mehr Moden aktiv. Wegen des anisotropen Fourierraums ist in unserem Fall k/k_{\max} durch die Wurzel aus (2.54) zu ersetzen.

Wir haben uns jedoch für den in [HL07] beschriebenen glatten Filter entschieden:

$$S(\mathbf{k}) = \exp \left[-36 \left(\sqrt{\left(\frac{k_x}{k_{\max,x}} \right)^2 + \left(\frac{k_y}{k_{\max,y}} \right)^2 + \left(\frac{k_z}{k_{\max,z}} \right)^2} \right)^{36} \right] \quad (2.55)$$

Diese Filterfunktion hat den Vorteil, die bei unstetigen oder fast singulären Feldern entstehenden Oszillationen zu unterdrücken. Des Weiteren besitzt die Funktion erst bei ungefähr $k/k_{\max} \approx 0.8$ einen merklichen *cut-off*, sodass man mehr aktive Fouriermoden hat als beim $2/3$ -*cut-off*, vgl. Abbildung 2.3.

Da lediglich durch nichtlineare Terme verschiedene Wellenzahlen miteinander koppeln, können auch nur durch diese Terme problematische Frequenzen entstehen. Deswegen muss jeweils nach Berechnung der nichtlinearen Terme im Fourierraum der *dealiasing*-Filter angewendet werden, um die Felder von zu hohen Frequenzen zu „säubern“.

In der Implementation ist es vorteilhaft, die Funktion $S(\mathbf{k})$ einmal beim Start des Simulationsprogramms für alle \mathbf{k} -Werte (2.51) vorzuberechnen und zu speichern. Dadurch sparen wir uns die immer wieder gleiche Berechnung von $S(\mathbf{k})$ und können stattdessen auf die vorberechneten Werte zurückgreifen. Es zeigt sich, dass der eingesparte Rechenaufwand den für die Tabellierung benötigten zusätzlichen Speicher aufwiegt.

2.6.5 Wahl des *penalization*-Parameters

In Abschnitt 2.5.1 haben wir das Pseudospektralverfahren für die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen um die *volume penalization*-Technik erweitert. Führt man für den *penalization*-Parameter den Grenzwert $\eta \rightarrow 0$ aus, erfüllen die Felder die Randbedingungen einer *no slip*-Wand konstanter Temperatur. Aus praktischen Gründen ist dieser Grenzwert allerdings in der numerischen Implementation des Verfahrens nicht durchzuführen. Da

man also mit einem endlichen η arbeiten muss, entstehen Fehler gegenüber einer Lösung der Gleichungen mit den „echten“ *no slip*-Wänden konstanter Temperatur. Gleichzeitig entstehen aber auch schon Fehler durch die Darstellung der Felder mittels endlich vieler Fouriermoden.

Keetels et al. diskutieren in [KDK⁺07] das Verhältnis dieser beiden Fehler und kommen dadurch zu einer Abschätzung, wie der *penalization*-Parameter η in Abhängigkeit von der Anzahl der *aktiven* Fouriermoden N_F zu wählen ist:

$$\eta \approx \gamma N_F^{-3.6} \quad (2.56)$$

Dabei ist γ eine Konstante der Größenordnung 10^5 . Die Anzahl der Fouriermoden bezieht sich auf die Fouriermoden in Normalen-Richtung der Wand, also in unserem Fall die Fouriermoden in z -Richtung. „Aktiv“ sind die Moden, die durch die Anwendung des *dealiasing*-Filters nicht eliminiert werden, bei unserer Wahl von (2.55) also ca. 80 % der Moden. Damit lautet die hier relevante Anzahl aktiver Moden

$$N_F = 0.8 N_z \quad . \quad (2.57)$$

Ein endliches η hat des Weiteren zur Folge, dass wegen der unstetigen Maskierungsfunktion $H(x)$ Gibbs-Oszillationen¹⁴ an der Grenze zwischen Fluid und Wand entstehen. Man kann allerdings zeigen, dass diese Oszillationen dynamisch nicht aktiv sind, d. h. dass sie keinen Einfluss auf die zeitliche Entwicklung der Felder nehmen, vgl. [KDK⁺07]. Dort werden außerdem sog. *mollifier* benutzt, mit denen man die Felder glätten und Gibbs-Oszillationen entfernen kann; da die Gibbs-Oszillationen dynamisch nicht aktiv sind, kann dies als *postprocessing*-Schritt erfolgen. Ein solcher *mollifier* wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit allerdings nicht implementiert.

2.6.6 Wahl des Zeitschrittes

Um möglichst wenig Rechenzeit zum Simulieren der Gleichungen zu benötigen, möchte man den Zeitschritt Δt des RK3-Zeitschrittverfahrens möglichst groß wählen; jedoch unterliegt diese Wahl gewissen Beschränkungen, da das Zeitschrittverfahren sonst instabil wird.

Anschaulich gesprochen darf sich Information pro Zeitschritt nicht weiter als um einen Gitterpunkt ausbreiten, damit das Verfahren stabil bleibt. Stellen wir uns dazu ein Teilchen vor, das mit der Fluidströmung mitschwimmt, so bewegt sich dieses Teilchen zum einen durch Advektion, zum anderen durch Diffusion fort. Da der Diffusionsterm der Geschwindigkeitsgleichung durch das gewählte Zeitschrittverfahren implizit behandelt wird, entfällt die Beschränkung des Zeitschrittes bezüglich der Diffusion. Deshalb müssen wir nur fordern, dass der Zeitschritt Δt so klein ist, dass sich das gedachte Teilchen pro

¹⁴Gibbs-Oszillationen sind ein allgemeines Phänomen bei der Darstellung unstetiger Funktionen durch endlich viele Fouriermoden, zuerst beschrieben in [Gib98, Gib99].

Zeitschritt um weniger als einen Gitterpunkt durch Advektion fortbewegt. Dies ist dann sichergestellt, wenn für den Zeitschritt stets

$$\Delta t < \Delta t_{\text{adv}} := \min_{x \in \Omega_N} \left\{ \frac{\Delta x}{|u_x|}, \frac{\Delta y}{|u_y|}, \frac{\Delta z}{|u_z|} \right\} \quad (2.58)$$

erfüllt ist. Diese Bedingung ist nach [CFL28] auch als das CFL-Kriterium bekannt.

Behandelt man den exponentiellen Dämpfungsterm der *volume penalization*-Technik innerhalb des Zeitschrittverfahrens explizit, wie es bei uns der Fall ist, hat dies eine weitere Forderung an den Zeitschritt zur Folge (siehe [KS09]):

$$\Delta t < \Delta t_{\text{pen}} := \eta \quad (2.59)$$

Es ist zwar möglich, ein Zeitschrittverfahren zu konstruieren, das den *penalization*-Term implizit behandelt (vgl. [KDK⁺07]), sodass diese Beschränkung wegfällt; allerdings ist dies nur möglich, wenn man die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen für das Geschwindigkeitsfeld und nicht für die Vortizität formuliert. Auf diesen Umstand wurden wir leider zu spät aufmerksam, als der Simulationscode für die Vortizitätsformulierung schon implementiert war.

Da Δt_{adv} vom Geschwindigkeitsfeld abhängt und damit eine fluktuierende Größe ist, können wir den Zeitschritt Δt adaptiv an die Strömung anpassen. Benutzt man einen zusätzlichen „Sicherheitsfaktor“ $0 < \lambda < 1$ (den sog. CFL-Faktor), müssen wir den Zeitschritt nur stets als

$$\Delta t = \lambda \cdot \min \{ \Delta t_{\text{adv}}, \Delta t_{\text{pen}} \} \quad (2.60)$$

wählen, um ein stabiles Zeitschrittverfahren zu gewährleisten. Da so zwar stets die *Stabilität* gewährleistet ist, man aber auch ein möglichst *genaues* Verfahren haben möchte, ergibt eine etwas „konservativere“ Wahl wie z. B. $\lambda = 0.75$ Sinn. In der Praxis zeigt sich, dass für ein η , das die Forderung (2.56) erfüllt, stets die *penalization*-Beschränkung Δt_{pen} die entscheidende ist.

2.6.7 Parallelisierung

Bei einer dreidimensionalen direkten numerischen Simulation von fluiddynamischen Gleichungen hat man immer das Problem, dass man sehr viel Speicher für die Felder benötigt. Möchten wir beispielsweise die benötigten vier Felder für Geschwindigkeit und Temperatur mit jeweils 512^3 Gitterpunkten auflösen, wobei jede reelle Zahl im Computer als ein *float* der Größe 4Byte dargestellt werden soll, benötigen wir alleine für diese vier Felder schon 2GiB¹⁵ Speicher. Da wir im Simulationscode noch weitere Felder derselben Größe benötigen (als temporäre Zwischenspeicher für das Zeitschrittverfahren, für die Tabellierung der k -Werte (2.51) und der *dealiasing*-Funktion (2.55) etc.), kann man

¹⁵Das sind 2^{31} Byte.

davon ausgehen, dass man ein Problem dieser Größe allein schon aus Speichergründen nicht mehr auf einem einzelnen Desktop-PC bearbeiten kann. Gleichzeitig möchte man aber ein möglichst hoch aufgelöstes Gitter haben, um möglichst hohe Rayleigh-Zahlen erreichen zu können.

Mit dem Speicher- steigt natürlich auch der Zeitaufwand, da der Zeitaufwand unseres Algorithmus gemäß $\mathcal{O}(N \log N)$ mit der Gesamtzahl N der Gitterpunkte skaliert. Des Weiteren hat ein feiner aufgelöstes Gitter wegen des CFL-Kriteriums (2.58) einen kleineren Zeitschritt Δt zur Folge, sodass man insgesamt mehr Zeitschritte berechnen muss, um die gleiche Zeitspanne zu simulieren.¹⁶

Somit ist es aus Speicher- und Rechenzeitgründen notwendig, den Simulationscode zu parallelisieren, d. h. den Code so zu gestalten, dass er gleichzeitig von mehreren Prozessoren auf einem größeren Arbeitsspeicher bearbeitet werden kann. Dadurch verringert sich der pro Prozessor benötigte Speicher- und Rechenzeitaufwand.

Eine Methode ist die Parallelisierung mittels *OpenMP*. Dabei handelt es sich um eine *shared memory*-Parallelisierung, d. h. alle Prozessoren greifen auf den gleichen Arbeitsspeicher zu. Diese Methode ist relativ leicht zu implementieren, allerdings ist der Zeitgewinn recht bescheiden, und die mögliche Anzahl an Prozessoren ist stark beschränkt; *OpenMP* ist eher auf Systeme aus einigen wenigen Mehrkernprozessoren und Desktop-PCs zugeschnitten.

Stattdessen haben wir uns für die Parallelisierung mittels des *Message Passing Interfaces* (MPI) entschieden. MPI ist eine *distributed memory*-Parallelisierung, bei der jeder Prozessor seinen eigenen Speicher besitzt, und die einzelnen Prozessoren kommunizieren untereinander durch das Austauschen von Nachrichten. Diese Art der Parallelisierung kann mit den vielen tausend Prozessoren moderner Supercomputer umgehen und ist auf große Cluster von einzelnen Recheneinheiten zugeschnitten, die über ein schnelles Netzwerk untereinander kommunizieren.¹⁷ Viele der größten und „populärsten“ Berechnungen im Bereich Numerik und *computational physics* wurden mit MPI-parallelen Codes durchgeführt.¹⁸ Die Programmierung mit MPI gestaltet sich jedoch im Vergleich zu *OpenMP* etwas schwieriger.

Wir benutzen für die Berechnung der Fouriertransformationen die FFTW, da diese in Version 2.1.5 schon von Hause aus MPI-paralleliert ist. Die FFTW benutzt dabei eine sogenannte *slab decomposition*: Das gesamte Simulationsgebiet Ω_N , das auf $N_x \times N_y \times N_z$ Gitterpunkte diskretisiert ist, wird entlang der x -Dimension in N_C Teile zerschnitten, und jeder Teil wird von einer CPU bearbeitet, vgl. Abbildung 2.4. Jede CPU hat damit nur

¹⁶Eine Abschätzung in einer vergleichbaren Situation, nämlich wie für die Navier-Stokes-Gleichung der benötigte Rechenaufwand mit der Reynolds-Zahl skaliert, findet sich in [Wil10].

¹⁷Solch ein Cluster ist beispielsweise der im Jahr 2010 eingeweihte Supercomputer PALMA der Universität Münster, der über insgesamt 3136 Prozessorkerne verfügt und auf dem die Produktionsläufe der Simulationen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Näheres unter [PAL10]

¹⁸Beispielsweise die sogenannte *millennium simulation* [SWJ⁺05] und der GENE-Code [JD01].

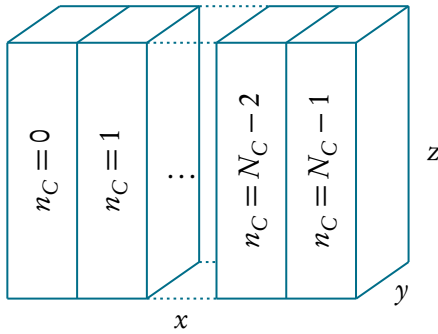


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der benutzten *slab decomposition*. Das kartesische Simulationsgebiet Ω_N ist entlang der x -Richtung in N_C Scheiben (engl.: *slabs*) unterteilt, die auf die Prozessoren mit Index $n_C = 0 \dots N_C - 1$ aufgeteilt werden. Jeder Prozessor verfügt damit nur über einen Teil des gesamten Gebietes.

einen Teil $N_x/N_C \times N_y \times N_z$ des Simulationsgebietes im eigenen Arbeitsspeicher vorliegen und damit auch nur Zugriff auf den „eigenen“ Teil des Gebietes.¹⁹

Hier ist es wichtig, zwischen dem lokalen und dem globalen Index i in x -Richtung zu unterscheiden. Wird den einzelnen CPUs ein Index $n_C = 0 \dots N_C - 1$ zugewiesen, geschieht die Umrechnung von lokalem in globalen x -Index über

$$i = i_{\text{lokal}} + n_C \frac{N_x}{N_C} \quad , \quad (2.61)$$

wobei $i_{\text{lokal}} = 0 \dots N_x/N_C - 1$ ist. Die y - und z -Richtung liegt auf den einzelnen Prozessoren jeweils vollständig vor.

Das Berechnen einer Fouriertransformation erfordert die Kenntnis des gesamten Simulationsgebietes, nicht nur die des eigenen Teils. Dazu müssen die einzelnen Prozessoren also untereinander kommunizieren und Daten austauschen. Diese Aufgabe übernimmt erfreulicherweise die FFTW, sodass man sich um das parallele Berechnen der Fouriertransformation nicht selber kümmern muss.

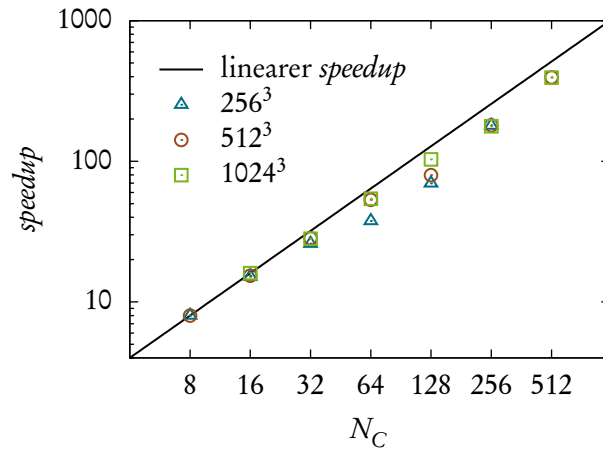
Man muss deshalb nur an wenigen Stellen selber für die Kommunikation der Prozessoren untereinander sorgen: Möchte man z. B. die globale maximale Geschwindigkeit u_{max} für das CFL-Kriterium (2.58) berechnen, berechnet zuerst jeder Prozessor sein lokales Maximum u_{max, n_C} . Die Prozessoren müssen dann untereinander kommunizieren, um aus den N_C lokalen Maxima das globale Maximum

$$u_{\text{max, global}} = \max_{n_C} \{ u_{\text{max}, n_C} \} \quad (2.62)$$

zu bestimmen. Zur Berechnung einer globalen Summe, wie man sie z. B. für eine Mittelwertbildung benötigt, geht man analog vor: Zuerst berechnet jeder Prozessor seine lokale Summe, und diese einzelnen Werte werden dann mittels MPI zur globalen Summe aufsummiert. Für solche oft benötigten Operationen wie globales Maximum, globale

¹⁹Der Einfachheit halber nehmen wir hier an, dass N_x ohne Rest durch N_C teilbar ist.

Abbildung 2.5: Skalierung des parallelen Simulationscodes für drei verschiedene Gitterauflösungen. Dargestellt ist der sog. *speedup*, d.h. die Geschwindigkeitszunahme²⁰ mit steigender Prozessorenzahl N_C , bezogen auf $N_C = 8$ (für 256^3 und 512^3) bzw. $N_C = 16$ (für 1024^3).



Summe, etc. stellt MPI entsprechende Routinen zur Verfügung, die die Kommunikation der Prozessoren untereinander übernehmen.

Möchte man z. B. Geschwindigkeitsfelder herauschreiben, also zur späteren Analyse auf der Festplatte speichern, muss man die *slab decomposition* beachten: Jeder Prozessor besitzt nur einen Teil des Geschwindigkeitsfeldes, jedoch möchte man das gesamte Geschwindigkeitsfeld als eine zusammenhängende Datei auf der Festplatte vorliegen haben. Aus diesem Grund muss jeder Prozessor seinen Teil des Geschwindigkeitsfeldes an eine bestimmte Position in die Datei schreiben, um so „Stück für Stück“ das Gesamtgeschwindigkeitsfeld zusammen zu setzen. Da dabei alle Prozessoren parallel auf die gleiche Datei zugreifen müssen, stellt MPI dafür entsprechende Methoden (die sog. MPI-IO, IO für engl. *input/output*) bereit. Die Parallelisierung dieser vorgenannten Punkte ist wegen der Unterstützung durch MPI also relativ einfach umzusetzen.

Etwas schwieriger gestaltet sich die wegen der Parallelisierung nötige Verteilung der Fourierkoeffizienten auf die einzelnen CPUs. Es stellt sich heraus, dass die FFTW viel Rechenzeit einsparen kann, wenn die Felder im Fourierraum in transponierter Form vorliegen, d. h. wenn die x - und y -Richtung im Fourierraum vertauscht sind.²¹ Der im Zuge dieser Arbeit entwickelte Simulationscode macht von dieser Möglichkeit Gebrauch, die Fourierkoeffizienten in transponierter Form darzustellen; allerdings würde eine tiefer gehende Erläuterung den Rahmen dieser Arbeit sprengen, weswegen der interessierte Leser auf die Online-Dokumentation der FFTW [FJ10] und auf [Wil10] verwiesen sei, wo die Anordnung der transponierten Felder erklärt wird.

²⁰Das Maß für die Geschwindigkeit ist die pro Zeitschritt benötigte Rechenzeit; für den „Grundpunkt“ bei $N_C = 8$ bzw. $N_C = 16$ sind diese Zeiten 4.3 s (256^3), 42.3 s (512^3) und 169.8 s (1024^3).

²¹Die mit dieser Transponierung verbundene Schwierigkeit ergibt sich dabei nur, weil man natürlich alle Möglichkeiten nutzen möchte, das Simulationsprogramm so schnell wie möglich zu machen, und ist deshalb nur eine indirekte Folge der Parallelisierung durch MPI.

Die *slab decomposition* der FFTW mittels MPI stellt sich als außerordentlich effizient dar; in [Dai09] wird für ein ähnliches Simulationsprogramm eine fast linear mit der Prozessorenanzahl skalierende Geschwindigkeitszunahme beobachtet. Diese nahezu optimale Skalierung erreicht unser Code nicht ganz, siehe Abbildung 2.5.

Es sei noch erwähnt, dass die mögliche Anzahl an CPUs bei der *slab decomposition* offensichtlich an die Beschränkung $N_C \leq N_x$ gebunden ist. Abhilfe schafft die sog. *pencil decomposition*, bei der das Feld entlang von zwei Dimensionen aufgeteilt wird. Dies soll hier nicht weiter diskutiert werden; es sei lediglich erwähnt, dass es Erweiterungen der FFTW gibt, die diese Art der Unterteilung beherrschen.²²

2.6.8 Code-Design

Die in den vorangegangenen Abschnitten erläuterten numerischen Methoden wurden im Rahmen dieser Diplomarbeit in einem C99-Code implementiert. Wir haben uns dabei für diese moderne Variante der Programmiersprache C entschieden, weil sie im Gegensatz zu „reinem“ C einige Vereinfachungen und vor allem eine native Unterstützung für das Rechnen mit komplexen Zahlen enthält – komplexe Zahlen sind natürlich für ein spektrales Verfahren außerordentlich wichtig. Auch handelt es sich bei C99 um eine im Vergleich zu beispielsweise C++ recht „schlanke“ Sprache, was uns bei den großen Speicher- und Rechenzeitanforderungen unseres Codes wichtig erschien.

Der Quelltext des Simulationsprogramms wird hier nicht weiter im Detail diskutiert; eine Übersicht über den groben Ablauf des Programms findet sich in Abschnitt A.3.1. In Abschnitt A.3.2 wird kurz aufgelistet, wie der Quelltext auf mehrere Dateien organisiert ist, und in Abschnitt A.3.3 werden die Parameter der Eingabedatei erläutert, mit der man das Simulationsprogramm steuert. Zusätzlich ist der Quelltext auf der dieser Diplomarbeit beiliegenden DVD enthalten. Damit können sämtliche in der vorliegenden Arbeit benutzten Datensätze reproduziert werden, da die Datensätze selber zu groß sind, um sie der Arbeit beizulegen. Der Inhalt der DVD wird in Abschnitt A.2 beschrieben.

2.7 Erweiterungen

Im Simulationscode wurden einige weitere optionale *features* implementiert. Da diese jedoch für die vorliegende Arbeit nur eine untergeordnete Rolle spielen, sollen sie hier nur kurz erwähnt werden.

2.7.1 Spannungsfreie Ränder

Bisher wurden an den Rändern des Fluidvolumens in vertikaler Richtung, also an den Platten oben und unten, *no slip*-Randbedingungen erfüllt. Eine andere oft getroffene Wahl

²²Beispielsweise die Softwarebibliothek P3DFFT [Pek10]; der in [Sch09] verwendete Simulationscode benutzt diese FFT-Routine.

sind sog. spannungsfreie (oder auch *stress-free*) Randbedingungen. Bei diesen Randbedingungen wird nur verlangt, dass die Geschwindigkeitskomponente in Normalen-Richtung der Wand verschwindet, für die Tangentialkomponenten gibt es keine explizite Einschränkung. Zusätzlich erfüllen die Ableitungen der Geschwindigkeitskomponenten dann die Bedingungen [Cha81, S. 21f]

$$\frac{\partial u_x}{\partial z} = \frac{\partial u_y}{\partial z} = 0 \quad (2.63a)$$

$$\frac{\partial^2 u_z}{\partial^2 z} = 0 \quad . \quad (2.63b)$$

Diese Art der Randbedingung hat zur Folge, dass sich keine Grenzschicht an der Wand ausbilden kann, weil anschaulich gesprochen das Fluid nicht an der Wand haftet. In [Sch09] werden solche Ränder im Rahmen einer numerischen Studie benutzt. Bemerkenswert ist zudem, dass man die lineare Stabilitätsanalyse der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen für diese Randbedingungen komplett analytisch lösen kann, vgl. [Cha81] und Abschnitt 1.3.

Es gibt nun eine einfache Möglichkeit, solche Randbedingungen simulieren zu können. Denken wir dazu zunächst an die Elektrodynamik zurück. Wollte man dort das Potential einer Ladungsverteilung berechnen, die sich vor einer geerdeten Metallplatte befand, konnte man sich der Methode der *Spiegelladungen* bedienen: Spiegelt man die Ladungsverteilung an der Ebene und dreht das Vorzeichen der Ladungsverteilung um, erfüllt diese neue Ladungskonfiguration die Randbedingung, die für das Potential durch die geerdete Metallplatte entsteht.

Das gleiche Prinzip lässt sich auf die Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen übertragen, bzw. in unserem Fall auf $\theta(\mathbf{x})$ und $\omega(\mathbf{x})$. Führt man eine Spiegelebene (z. B. die $z = L_z/2$ -Ebene) ein, und verlangt, dass die Felder bezüglich dieser Ebene spiegelsymmetrisch mit umgekehrten Vorzeichen sein müssen, also die Symmetrien

$$\theta(x, y, z) = -\theta(x, y, L_z - z) \quad (2.64a)$$

$$\omega(x, y, z) = -\omega(x, y, L_z - z) \quad (2.64b)$$

erfüllen sollen, gelangt man zu spannungsfreien horizontalen Wänden bei $z = L_z/2$ und $z = 0$ (wegen der periodischen Ränder in z -Richtung). In [Har04] wurde dieses Verfahren dazu genutzt, spannungsfreie Seitenwände simulieren zu können; in unserem Simulationscode beschränken wir uns auf die Möglichkeit von horizontalen Wänden. In Verbindung mit *volume penalization* und einer passenden Maskierungsfunktion lassen sich aber auch Kombinationen wie eine *no slip*-Bodenplatte und eine spannungsfreie obere Begrenzung simulieren. In Abschnitt 3.5 wird diese Technik validiert, indem numerische Ergebnisse mit solchen aus der analytisch berechenbaren linearen Stabilitätsanalyse verglichen werden.

Ein gewisser Nachteil dieses Verfahrens ist, dass man Rechenzeit für die Berechnung der redundanten Hälfte der Felder verschwendet. In obiger Arbeit wird zwar ein Weg gezeigt, wie man die Berechnung der redundanten Informationen vermeidet und so Rechenzeit einspart; diese Möglichkeit wurde aber in unserem Simulationscode nicht implementiert, da spannungsfreie Ränder in dieser Arbeit kaum benutzt werden. Da aber bei diesem Verfahren die Beschränkung $\Delta t < \Delta t_{\text{pen}}$ an den Zeitschritt entfällt und man außerdem auch bei *volume penalization* eigentlich überflüssige Bereiche (nämlich die maskierten Nicht-Fluid-Gebiete) mitberechnen muss, erscheint dieser Nachteil des „Spiegelverfahrens“ nicht so gravierend.

2.7.2 Vertikale *no flux*-Wände

Bisher haben wir das *volume penalization*-Verfahren dazu genutzt, das Fluidvolumen durch horizontale Platten oben und unten zu begrenzen. In den horizontalen Richtungen haben wir periodische Randbedingungen genutzt. Bei einem ausreichend großen *aspect ratio*, also für ein großes Verhältnis von horizontaler zu vertikaler Abmessung des Volumens, stellen periodische Ränder eine gute Näherung für den homogenen Bereich eines eingeschlossenen Fluids weit entfernt von den Seitenwänden dar.

Man könnte mit unserer Methode auch ein von allen Seiten eingeschlossenes Fluid simulieren, indem man Seitenwände in die Maskierungsfunktion des *volume penalization*-Verfahrens einbaut. Dadurch würden für die Geschwindigkeit *no slip*-Seitenwände realisiert. Da die Temperaturabweichungen $\theta(\mathbf{x})$ in den Seitenwänden ebenfalls null wären, hätten die Seitenwände einen linearen Temperaturverlauf vom heißen unteren zum kalten oberen Ende, d. h. also, dass nicht nur die horizontalen Platten, sondern auch die Seitenwände das Fluid heizen bzw. kühlen würden.

Dies entspricht jedoch nicht der Situation, wie sie oft in Experimenten realisiert wird; hier möchte man meistens wärmeisolierende Seitenwände haben. *Wärmeisolierend* heißt hier, dass es keinen Wärmefluss in Normalen-Richtung $\hat{\mathbf{n}}$ der Wand gibt, deswegen spricht man auch von *no flux*-Wänden. *No flux*-Wände stellen eine Forderung an die Ableitung der Temperatur dar:

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T = 0 \quad (2.65)$$

Damit handelt es sich um von-Neumann-Randbedingungen (im Gegensatz zu den Dirichlet-Randbedingungen von Platten konstanter Temperatur).

In [Kad09] wurde nun ein Verfahren vorgeschlagen, einen passiven Skalar in einem mittels *volume penalization* begrenzten Fluid zu simulieren, wobei es keinen Fluss des passiven Skalars in die Wände gibt. Dies stellt die Situation dar, die wir uns für wärmeisolierende Seitenwände wünschen. Das Verfahren arbeitet kurz gesagt so, dass die Wärmediffusion innerhalb der *no flux*-Wände unterdrückt wird, d. h. man benutzt eine inhomogene Wärmediffusivität $\kappa = \kappa(\mathbf{x})$, die innerhalb der *no flux*-Wand verschwindet. Setzt man zusätzlich das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ innerhalb der Wand identisch gleich

null, gibt es keinen Wärmefluss in die *no flux*-Wand. Für weitere Details sei der interessierte Leser zusätzlich auf die mathematische Analyse in [RAB07] verwiesen, wo das *volume penalization*-Verfahren um beliebige Dirichlet- und von-Neumann-Randbedingungen erweitert wird.

In unserem Fall haben wir es also mit zwei verschiedenen festen Gebieten zu tun: Oben und unten möchten wir weiterhin Platten konstanter Temperatur simulieren, die Seitenwände sollen *no flux*-Wände sein, vgl. Abbildung 2.6. Für die Geschwindigkeit sollen an beiden Arten von Wänden *no slip*-Randbedingungen herrschen. Gemäß [Kad09] ist dann die Bewegungsgleichung (2.33) der Temperaturabweichung zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \theta + \overbrace{((1 - H_{\text{ns}}) \mathbf{u}) \cdot \nabla \theta}^{\text{I}} &= \frac{\delta T}{h} \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} H \cdot \theta \\ &+ \nabla \cdot \left[\underbrace{(\kappa(1 - H_{\text{nf}}))}_{\text{II}} + \underbrace{\eta_{\text{nf}} H_{\text{nf}}}_{\text{III}} \nabla \theta \right] \end{aligned} \quad (2.66)$$

zu modifizieren. Durch Term I wird die Wärmeübertragung in die Wandgebiete durch Advektion „ausgeschaltet“, Term II schaltet die Wärmediffusion aus. Aus technischen Gründen kann die Wärmediffusion in den *no flux*-Wänden nicht auf identisch null gesetzt werden, weswegen Term III die Wärmediffusion dort auf η_{nf} mit $\eta_{\text{nf}} \ll \kappa$ setzt. Die Maskierungsfunktionen H und H_{nf} sollten disjunkte Gebiete definieren. Die Maskierungsfunktion H_{ns} sorgt für die *no slip*-Randbedingungen des Geschwindigkeitsfeldes und ist die „oder“-Verknüpfung der beiden anderen Maskierungsfunktionen:

$$H_{\text{ns}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{falls } H(\mathbf{x}) = 1 \text{ oder } H_{\text{nf}}(\mathbf{x}) = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.67)$$

In der Entwicklungsgleichung des Geschwindigkeitsfeldes ist dann ebenfalls H durch H_{ns} zu ersetzen. Durch diese Modifikationen erreicht man also, dass es keinen Fluss von θ in die Wand gibt. Die Form der vertikalen Seitenwände spielt dabei keine Rolle, und man benötigt auch keinen expliziten Ausdruck für die Normale $\hat{\mathbf{n}}$ der Wand.

In Experiment und Numerik wird oft eine zylindrische Containerform gewählt. Dies lässt sich durch die folgenden Maskierungsfunktionen simulieren, vgl. Abbildung 2.6:

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{falls } d < z < h + d \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.68a)$$

$$H_{\text{nf}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{falls } \sqrt{x^2 + y^2} \geq r \text{ und } d \leq z \leq h + d \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.68b)$$

Dabei ist r der Radius und h die Höhe des Zylinders.

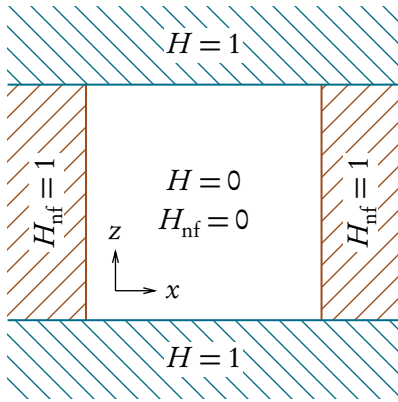


Abbildung 2.6: Beispiel einer Maskierungsfunktion mit Seitenwänden. Oben und unten im Gebiet $H = 1$ wird die Temperatur auf einem festen Wert gehalten, links und rechts im Gebiet $H_{\text{nf}} = 1$ werden *no flux*-Wände realisiert. Gezeigt ist eine zweidimensionale Ansicht der Maskierungsfunktion (2.68).

Durch dieses Verfahren ist es möglich, beliebig geformte vertikale *no flux*-Seitenwände zu simulieren. Die Stärke des Verfahrens ist, dass es auf einem leicht handhabbaren äquidistanten kartesischen Gitter aufbaut. Man muss am eigentlichen Pseudospektralverfahren fast nichts ändern, sondern nur die modifizierten Gleichungen implementieren. Andere numerische Methoden, um ein in einem Zylinder eingeschlossenes Fluid zu simulieren, gestalten sich weitaus komplizierter, da man es z.B. wie in [ES08] mit einem nicht äquidistanten Gitter in zylindrischen Koordinaten zu tun bekommt.

Ein Nachteil des Verfahrens ist, dass man sehr viel *overhead* durch die maskierten Bereiche hat, die nicht zum eigentlichen Fluidvolumen dazu gehören. Dies deutet sich schon in der Skizze in Abbildung 2.1a an. Dazu ein kleines Rechenbeispiel: Simuliert man einen Zylinder mit einem Verhältnis von Durchmesser zu Höhe gleich eins auf einem Gesamtgebiet $\Omega = [0, 2\pi]^3$ und wählt Radius und Höhe so, dass der Zylinder in allen Richtungen mindestens einen Abstand $0.05 \cdot 2\pi$ zu den periodischen Rändern von Ω hat (also Radius $r = \pi - 0.05 \cdot 2\pi$ und Höhe $h = 2\pi - 0.1 \cdot 2\pi$),²³ beträgt das Verhältnis vom Fluid- zum Gesamtvolumen

$$\frac{V_{\text{fluid}}}{V_{\text{gesamt}}} = \frac{\pi r^2 h}{(2\pi)^3} \approx 0.57 \quad . \quad (2.69)$$

Also fallen nur 57% des berechneten Volumens auf das eigentliche Fluidvolumen ab. Die Beantwortung der Frage, ob dieser Mehraufwand das Benutzen eines *volume penalization*-Ansatzes statt eines komplizierteren Verfahrens für zylindrische Geometrie rechtfertigt (d. h. eine Abwägung von Rechenzeit- und Entwicklungszeitaufwand), bleibt dem Leser überlassen.

Eine weitere Einschränkung ist, dass das Verfahren, so wie wir es implementiert haben, nur *vertikale no flux*-Wände erlaubt. Dies liegt daran, dass wir an den isolierenden *no*

²³Für die numerischen Simulationen in den späteren Kapiteln haben wir deutlich dickere Wände gewählt.

flux-Wänden zwar einen verschwindenden *Temperaturfluss* $\hat{n} \cdot \nabla T = 0$ haben möchten, aber durch das Verfahren den Fluss der *Temperaturabweichung* $\hat{n} \cdot \nabla \theta$ null werden lassen, vgl. (2.66). Aus diesem Grund erhält man nur dann wärmeisolierende Wände, wenn

$$\hat{n} \cdot \nabla T = \hat{n} \cdot \nabla \theta \quad (2.70)$$

gilt, wenn also der Fluss von Temperatur und Temperaturabweichung in Normalen-Richtung gleich ist. Das ist dann der Fall, wenn \hat{n} keine z-Komponente besitzt, also bei vertikalen Wänden.

2.8 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir die numerischen Methoden dargelegt, die wir benötigen, um die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen, also die Grundgleichungen des Rayleigh-Bénard-Systems, zu lösen. Da dabei keine Vereinfachungen der Gleichungen vorgenommen wurden, handelt es sich um eine direkte numerische Simulation.

Wir sind dabei so vorgegangen, dass wir in Abschnitt 2.2 zunächst nur die Navier-Stokes-Gleichung betrachtet haben, bei der bereits alle beim Pseudospektralverfahren zu beachtenden Punkte auftreten. Obwohl wir in den späteren Abschnitten mit der Vortizität statt der Geschwindigkeit gearbeitet haben, war es trotzdem lehrreich, den Druckterm der Navier-Stokes-Gleichung zu betrachten.

An der Navier-Stokes- und der Wirbeltransportgleichung haben wir dann in Abschnitt 2.4 das *volume penalization*-Verfahren demonstriert, mit dem sich beliebig geformte Berandungen des Fluids simulieren lassen. Dies ist ein mit etwa zwanzig Jahren recht junges Verfahren, das unseres Wissens nach bisher nicht auf das Rayleigh-Bénard-System angewandt worden ist.

Nach diesen Vorarbeiten hatten wir die entsprechenden Werkzeuge zusammen, um in Abschnitt 2.5 ein neuartiges pseudospektrales *volume penalization*-Verfahren für die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen herzuleiten. Unser Verfahren bietet den Vorteil, dass man ein leicht zu handhabendes äquidistantes Gitter nutzen kann.

Zum Ende des Kapitels haben wir in Abschnitt 2.6 einige Details bezüglich der Implementation des Verfahrens besprochen, wobei viele dieser Details sich auf die diskrete Darstellung der Felder im Computer zurückführen ließen. Auch die Notwendigkeit von Parallelisierung und der Bedarf nach der hohen Rechenleistung moderner Supercomputer wurden thematisiert.

Schließlich haben wir in Abschnitt 2.7 noch zwei mögliche Erweiterungen des Verfahrens besprochen. Diese Erweiterungen bezogen sich auf andere Randbedingungen, die in realen Experimenten oft vorliegen.

Wir haben in diesem Kapitel also unser „Experiment“ entwickelt, aus dem wir die Daten extrahieren können, die nötig sind, um unsere in den späteren Kapiteln ausgearbeiteten Theorien zu stützen. Obwohl die Entwicklung dieses „Experimentes“ eigentlich

nur eine eher technische Notwendigkeit der vorliegenden Diplomarbeit ist, hat sich die Beschäftigung mit der Numerik und der Implementation derselben als außerordentlich aufschlussreich für das Verständnis der zugrundeliegenden Mechanismen, sowohl numerischer als auch physikalischer Natur, erwiesen.

3 Phänomenologie

Ein Bild sagt mehr als tausend
Worte.

(Fred R. Barnard, 1921)

In den vorherigen Kapiteln wurden zunächst die Grundgleichungen des Rayleigh-Bénard-Systems vorgestellt und ein numerisches Verfahren zur Lösung dieser Gleichungen wurde entwickelt. An den Grundgleichungen allein kann man jedoch kaum die vielfältigen Phänomene erkennen, die in turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion auftreten. Aus diesem Grund soll das Rayleigh-Bénard-System in diesem Kapitel zunächst anhand von verschiedenen Visualisierungen und gemittelten Größen etwas „greifbarer“ gemacht werden, bevor wir es im nächsten Kapitel mit statistischen Methoden tiefergehend analysieren.

In Abschnitt 3.1 zeigen wir Visualisierungen verschiedener Größen wie Temperatur, Geschwindigkeit, Vortizität etc., die die verschiedenen Vorgänge in Konvektionsströmungen illustrieren. Abschnitt 3.2 präsentiert die zeitlichen Verläufe wichtiger Kenngrößen des Systems und Abschnitt 3.3 zeigt diese Größen vertikal aufgelöst, während sich Abschnitt 3.4 mit der Skalierung dieser Größen mit der Rayleigh-Zahl im turbulenten Regime beschäftigt. In Abschnitt 3.5 betrachten wir die Strukturen und Phänomene, die im laminaren Regime bei kleinen Rayleigh-Zahlen auftreten, was als ein *benchmark* der numerischen Methode benutzt wird; weitere Validierungen der Numerik werden in Abschnitt 3.6 durchgeführt. In Abschnitt 3.7 wird kurz das Verfahren zur Simulation von *no flux*-Seitenwänden demonstriert und Abschnitt 3.8 fasst das Kapitel zusammen.

Die in diesem und dem folgenden Kapitel benutzten Simulationen sind jeweils mit einem eindeutigen Bezeichner versehen worden. In den Abbildungen ist dieser Bezeichner mit angegeben, damit man schnell die benutzte Simulation identifizieren kann. Abschnitt A.1 gibt eine tabellarische Übersicht über die wichtigsten Simulationen. Des Weiteren sind auf der beiliegenden DVD unter dem jeweiligen Bezeichner die Eingabedateien im Ordner `simulations` zu finden.

3.1 Visualisierungen der Felder

In diesem Abschnitt werden die Felder verschiedener skalarer Größen wie Temperatur, Geschwindigkeits- und Vortizitätsbetrag etc. dreidimensional dargestellt. Diese Darstellungen wurden dabei durch sog. *volume rendering* erzeugt, wozu das Programm *Voreen*

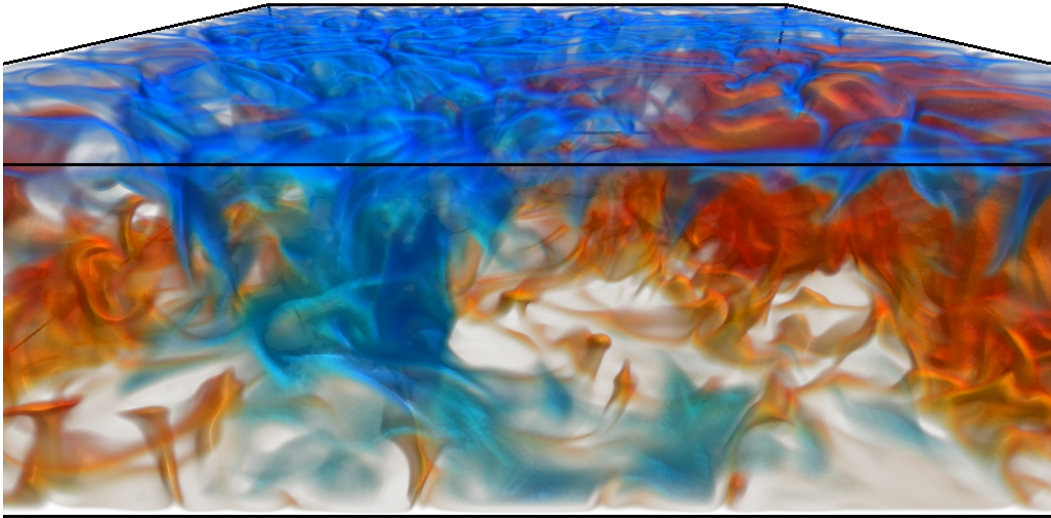


Abbildung 3.1: Visualisierung des Temperaturfeldes $T(\mathbf{x})$ bei $Ra = 2.44 \cdot 10^7$. Die Farbe rot/orange entspricht heißen, blau kalten Bereichen des Fluids. Bereiche mittlerer Temperatur sind durchsichtig dargestellt. Die Zeit ist $t/t_{\text{isc}} = 30$. [ra2e7_gamma4]

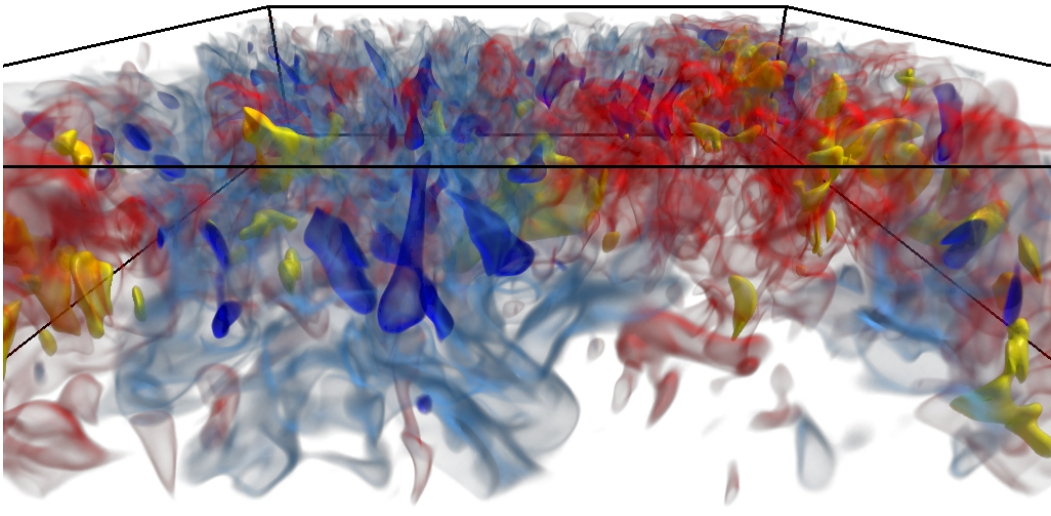


Abbildung 3.2: Visualisierung der vertikalen Geschwindigkeit $u_z(\mathbf{x})$. Die Farbe rot entspricht positiver, blau negativer Geschwindigkeit; die „Kerne“ hoher Geschwindigkeitsbeträge sind gelb bzw. dunkelblau dargestellt. Die Zeit ist $t/t_{\text{isc}} = 30$. [ra2e7_gamma4]

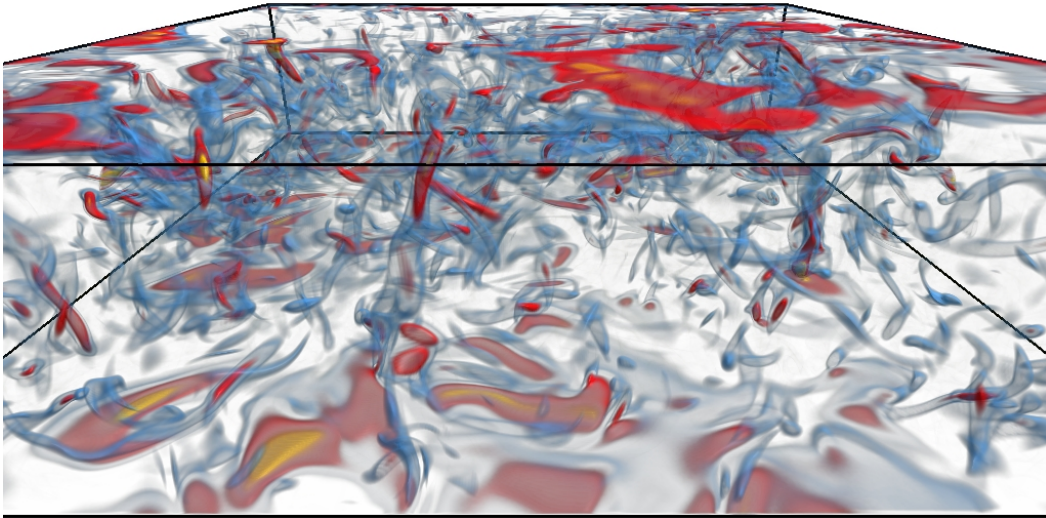


Abbildung 3.3: Visualisierung des Betrags der Vortizität, $|\omega(x)|$. Die Farben blau/rot/gelb sind dabei aufsteigenden Beträgen zuzuordnen. Die Zeit ist $t/t_{\text{isc}} = 30$.
[ra2e7_gamma4]

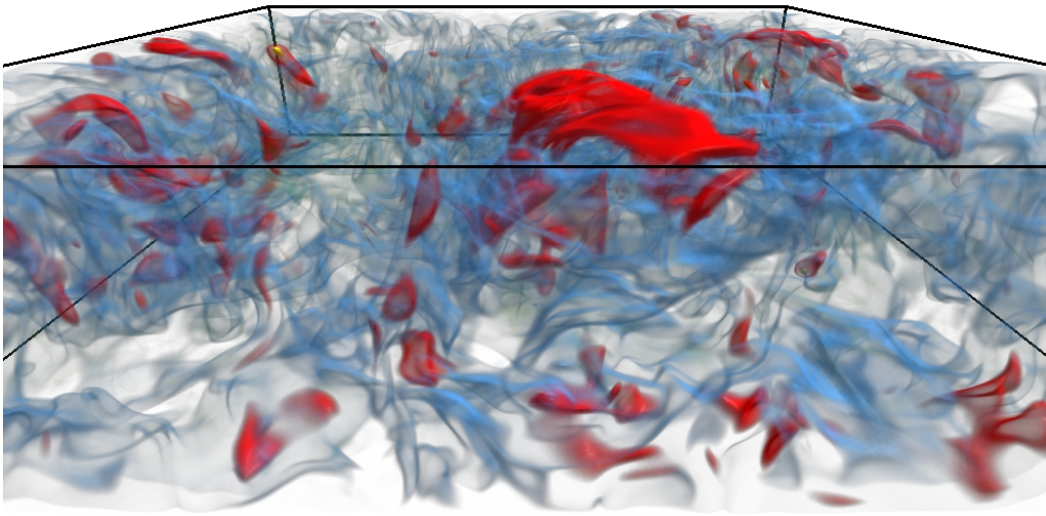


Abbildung 3.4: Visualisierung des Betrags der Geschwindigkeit, $|u(x)|$. Die Farben blau/rot/gelb sind aufsteigenden Beträgen zuzuordnen. Die Zeit ist $t/t_{\text{isc}} = 30$.
[ra2e7_gamma4]

benutzt wurde. Dabei handelt es sich um ein an der Universität Münster entwickeltes Open-Source-Programm, das eigentlich für volumetrische Datensätze aus der Computertomografie gedacht ist; es eignet sich aber auch hervorragend für die Visualisierung unserer Daten, da es qualitativ hochwertige Bilder erzeugt. Für nähere Informationen siehe z. B. [Rop10, MSRMH09, Men10].

Es muss an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die im Folgenden diskutierten Visualisierungen zwar einen qualitativen Eindruck der Vorgänge im Fluid vermitteln, es jedoch schwierig ist, quantitative Aussagen aus ihnen zu ziehen: Beim *volume rendering* werden die Werte eines skalaren Feldes auf eine Farb- und eine Durchsichtigkeitskala (die sogenannte Transferfunktion) abgebildet und dann dargestellt. Die Wahl dieser beiden Skalen bleibt dem Nutzer überlassen und ist deswegen im weitesten Sinne willkürlich. Wir haben die Skalen so gewählt, dass „wichtige“, „interessante“ Bereiche gezeigt werden, um einen qualitativen Eindruck der Fluidströmung zu erhalten; direkte quantitative Zuordnungen Farbe \leftrightarrow Wert sind allerdings schwer möglich. Aus diesem Grund verzichten wir bei den volumetrischen Darstellungen in diesem Kapitel auch auf die Angabe einer Farbskala.

3.1.1 Schnappschüsse der Felder im stationären Bereich

In den Abbildungen 3.1 bis 3.4 sind Schnappschüsse der verschiedenen Größen nach der transienten Einschwingphase zum Zeitpunkt $t/t_{\text{isc}} = 30$ dargestellt.¹ Die Schnappschüsse stammen aus derselben Simulation `ra2e7_gamma4` zum selben Zeitpunkt; die dimensionslosen Parameter lauten $Ra = 2.44 \cdot 10^7$ und $Pr = 1$. Wegen des hohen Seitenverhältnisses $\Gamma = 4$ wurden zum Zwecke einer besseren Darstellung links und rechts Teile des Fluidvolumens „abgeschnitten“, d. h. nicht gezeigt. Des Weiteren ist das Volumen leicht gekippt dargestellt, sodass man die an der Oberseite entstehenden Strukturen sehen kann; die begrenzenden Platten oben und unten sind nicht gezeigt.

In Abbildung 3.1 ist das Temperaturfeld dargestellt. Man kann erkennen, wie das an der oberen Platte abgekühlte Fluid vorne/links „klumpt“, während analog Bündel warmen Fluids an der unteren Platte (z. B. rechts der Mitte) zu entdecken sind. Im Video der gesamten Simulation (auf der beiliegenden DVD zu finden unter `ra2e7_gamma4/T.avi` im Ordner `videos`; eine Beschreibung der auf der DVD enthaltenen Videos wird in Abschnitt A.2.2 gegeben) kann man erkennen, dass das warme Fluid von der unteren Platte aufsteigt, während das kalte Fluid von der oberen Platte absinkt, wie man es natürlich durch die physikalische Erfahrung erwartet.

Vergleicht man die vertikale Geschwindigkeitskomponente in Abbildung 3.2, die dem Temperaturfeld aus Abbildung 3.1 entspricht, kann man diese physikalische Erfahrung qualitativ bestätigt sehen: Heiße Anteile des Fluids weisen eine positive, kalte eine negative vertikale Geschwindigkeit auf. Die größten Bereiche hoher positiver Geschwindigkeit

¹Die *large-scale current*-Zeit t_{isc} wird in Abschnitt 3.2.1 definiert.

(erkennbar durch die gelben Kerne) finden sich dabei nahe der oberen Platte und analog Bereiche großer negativer Geschwindigkeit nahe der unteren Platte. Diese Tendenz ist noch deutlicher im entsprechenden Video `ra2e7_gamma4/uz.avi` zu sehen. Die Korrelation von Temperatur und vertikaler Geschwindigkeit wird eine zentrale Rolle im folgenden Kapitel 4 spielen, wo sie innerhalb eines theoretischen Ansatzes auftaucht.

Abbildung 3.3 zeigt den Betrag der Vortizität, Abbildung 3.4 den Betrag der Geschwindigkeit; die zugehörigen Videos finden sich auf der DVD unter `ra2e7_gamma4/vort.avi` bzw. `ra2e7_gamma4/vel.avi`. Hohe absolute Geschwindigkeiten sieht man vor allem dort, wo es ausgeprägte Bereiche von aufsteigendem heißen Fluid bzw. absinkendem kalten Fluid gibt, siehe z. B. den großen roten Fleck in der Mitte an der oberen Begrenzung. An derselben Stelle zeigen sich hohe Vortizitätswerte, die in dünnen Schichten an der begrenzenden Platte organisiert sind. Diese dünne Vortizitätsschicht ist typisch für *no slip*-Ränder und bildet sich immer dann aus, wenn Fluid gegen eine *no slip*-Wand „prallt“.² Nebenbei bemerkt stellt diese dünne Grenzschicht hoher Vortizität eine erhebliche Herausforderung an die Numerik dar, und es ist wichtig, sie gut aufzulösen; dieser Umstand wird in Abschnitt 3.6.2 validiert.

Vergleicht man Vortizitäts- und Geschwindigkeitsfeld, sieht man, dass sich die Vortizität in dünnen, länglichen Wirbelröhren organisiert, und dass sie verglichen mit dem Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld stärker lokalisiert scheint. Die Geschwindigkeit hingegen zeigt viel großskaligere Strukturen (sowohl die einzelne vertikale Komponente, als auch der Betrag der Geschwindigkeit). Das Auftreten von kohärenten Strukturen in Form von Wirbelröhren wird oftmals als Argument angesehen, warum die Vortizität intermittent ist und eine sehr nicht-gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung aufweist, während die Geschwindigkeit eine nahezu gaußförmige Verteilung besitzt [SJO90, JWSR93]. Für eine Diskussion der Vortizitäts- und Geschwindigkeitsverteilung im Falle homogener, isotroper Turbulenz sei der Leser z. B. auf [WF09] für die Vortizität bzw. [WDF10] für die Geschwindigkeit verwiesen.

Der Vergleich von Abbildung 3.3 und 3.4 zeigt, dass die Korrelation von Vortizität und Geschwindigkeit nicht trivial ist. An den Abbildungen lässt sich erkennen, dass in Bereichen hoher Geschwindigkeit eine hohe Vortizität wahrscheinlich ist; jedoch können scheinbar hohe Vortizitäten auch in Bereichen kleiner Geschwindigkeiten auftreten. Diese qualitativen Beobachtungen sind jedoch nicht eigentlicher Bestandteil dieser Arbeit und sollen deswegen nicht weiter quantitativ ausgeführt werden; stattdessen sei auf das Video `ra2e7_gamma4/4panels.avi` auf der DVD verwiesen, in dem die vier in den Abbildungen 3.1 bis 3.4 dargestellten Größen nebeneinander gezeigt werden.

3.1.2 Visualisierungen im zeitlichen Verlauf

In Abbildung 3.5 ist der zeitliche Verlauf der Temperatur zu Beginn der Simulation `ra2e7_gamma4` dargestellt. Von einem homogenen Temperaturfeld startend ist hier

²Dies gilt nicht nur an Berandungen in Rayleigh-Bénard-, sondern auch in „reiner“ Fluid-Turbulenz.

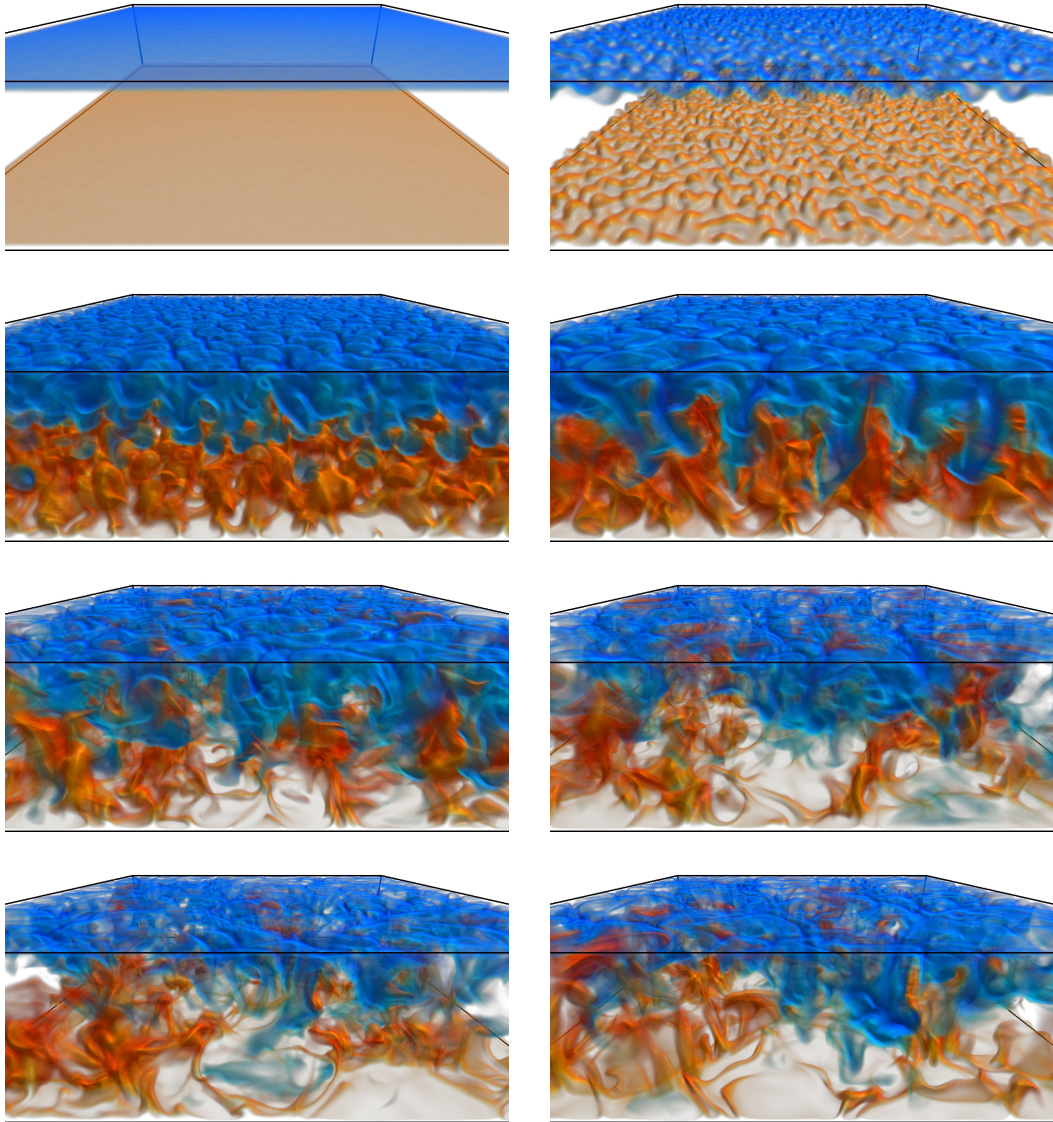


Abbildung 3.5: Visualisierungen des Temperaturfeldes zu verschiedenen Zeiten. Zeilenweise von oben/links nach unten/rechts sind die Zeitpunkte $t/t_{\text{lsc}} \in \{0.75, 1.5, 2.25, \dots, 6\}$ gezeigt. [ra2e7_gamma4]

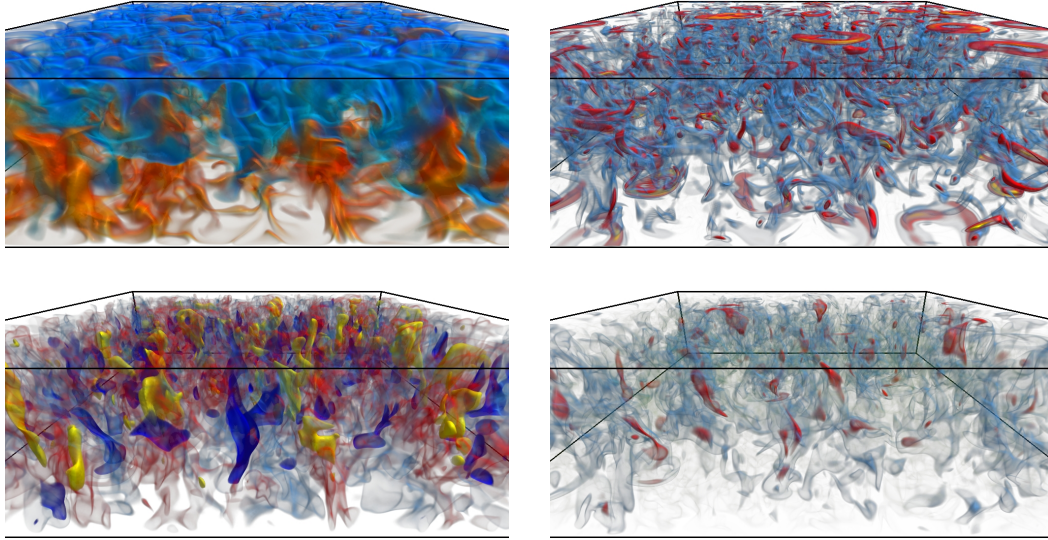


Abbildung 3.6: Visualisierungen von Temperatur, absoluter Vortizität, vertikaler Geschwindigkeit und absoluter Geschwindigkeit (zeilenweise von links/oben nach rechts/unten). Farbskalen wie in Abbildung 3.1–3.4. Der dargestellte Zeitpunkt ist $t/t_{\text{isc}} = 3.75$. [ra2e7_gamma4]

also der Aufheizvorgang des Fluids gezeigt. Im ersten Schnappschuss der Simulation sieht man, wie das Fluid beginnt, sich an der unteren Platte zu erwärmen und an der oberen Platte abzukühlen; erste Störungen wachsen an, wie man an der leichten Unebenheit der blauen und orangefarbenen Fläche sehen kann. Im zweiten Bild sind diese Störungen zu ausgeprägten *blobs* herangewachsen, die anfangen aufzusteigen bzw. abzusinken. Diese *plumes* von aufsteigendem bzw. absinkendem Fluid werden immer stärker, und im dritten Bild prallen die warmen und kalten Bereiche aufeinander und durchdringen einander im vierten Bild. Im dritten und vierten Bild sind zudem die typischen zellenartigen Strukturen an der Oberseite des Fluids zu sehen. Im fünften Bild scheint dieser Durchdringungsprozess fast abgeschlossen, und die Bilder sechs bis acht unterscheiden sich qualitativ kaum noch.

Die Bilder in Abbildung 3.5 stammen aus dem Video `T.avi` im Ordner `videos/ra2e7_gamma4` auf der beiliegenden DVD. In diesem Ordner sind noch weitere Videos derselben Simulation zu finden, in denen die restlichen Größen $|\mathbf{u}|$ (`vel.avi`), u_z (`uz.avi`) und $|\boldsymbol{\omega}|$ (`vort.avi`) gezeigt werden. Diese Videos geben einen qualitativen Einblick in die Dynamik des Rayleigh-Bénard-Systems und seien deswegen dem geneigten Leser empfohlen. Des Weiteren enthält der Ordner zwei Videos, in denen die vier Größen nebeneinander gezeigt werden, sowie mehrere Videos, in denen in der linken und rechten Hälfte des Fluids zwei verschiedene Größen dargestellt werden. Mit diesen Videos kann

man sich einen qualitativen Überblick über die Korrelationen zwischen den verschiedenen Feldern verschaffen.

In Abbildung 3.6 sind die vier bisher besprochenen Größen zur Zeit $t/t_{\text{isc}} = 3.75$ dargestellt. Dies ist der Zeitpunkt, an dem sich die heißen und kalten *plumes* durchdrungen haben und auf den jeweils gegenüberliegenden Platten aufprallen. Daher entstehen starke Vortizitäten an der oberen und unteren Platte, erkennbar durch die roten Flecken mit gelbem Kern im rechten/oberen Bild von Abbildung 3.6. Im nächsten Abschnitt schauen wir uns die Zeitverläufe verschiedener gemittelter Größen an und werden zu diesem Zeitpunkt in der Tat ein Maximum in den verschiedenen Größen beobachten.

3.2 Zeitliche Verläufe gemittelter Größen

Nach den Visualisierungen im vorherigen Abschnitt wollen wir uns nun dem zeitlichen Verlauf verschiedener räumlich gemittelter Größen zuwenden. Diese Größen sind die quadratisch gemittelte Temperatur T_{rms} , Geschwindigkeit \mathbf{u}_{rms} und Vortizität ω_{rms} sowie die Nusselt-Zahl Nu . Das quadratische Mittel (engl. *root mean square*, daher die Bezeichnung mit „rms“) einer Größe A ist definiert als

$$A_{\text{rms}} := \sqrt{\langle A^2 \rangle} \quad ; \quad (3.1)$$

für vektorielle Größen ist A^2 als Skalarprodukt aufzufassen. Welche genaue Mittelung mit $\langle \cdot \rangle$ gemeint ist (Mittelungen über das Volumen, über horizontale Ebenen, in der Zeit etc.), wird in den folgenden Abschnitten jeweils angegeben werden, wenn es nicht schon aus dem Kontext heraus klar ist. Im Folgenden werden wir die durch (1.8) entdimensionalisierten Größen betrachten.

3.2.1 Die *large-scale current*-Zeit

Wegen der Entdimensionalisierung ist die Zeit t in Vielfachen von $\frac{h^2}{\kappa}$ gegeben. Da diese Zeiteinheit etwas unanschaulich ist, möchten wir die Zeit zusätzlich in einer etwas „handlicheren“ Einheit angeben. Dazu führen wir die *large-scale current*-Zeit t_{isc} ein, die ein Maß für die Zeitskala der großskaligen Bewegung des Fluids sein soll. Es stellt sich die Frage, wie t_{isc} geschickt zu wählen ist; t_{isc} sollte nur von den Parametern der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen abhängen, damit es *a priori* berechenbar ist. Da zwischen der charakteristischen Zeit und der charakteristischen Geschwindigkeit der großskaligen Bewegung der Zusammenhang $t_{\text{isc}} = \frac{h}{u_{\text{isc}}}$ besteht, ist eine äquivalente Frage, wie sich eine *large-scale current*-Geschwindigkeit u_{isc} definieren lässt, die die tatsächliche mittlere Geschwindigkeit des Fluids beschreibt, für die also $u_{\text{isc}} \approx \sqrt{\langle \mathbf{u}^2 \rangle_V}$ gilt.

Wie in [BCES10, vRJH08] bemerkt, ist die sogenannte Freifall-Geschwindigkeit

$$u_f = \sqrt{g\alpha\delta T h} \quad (3.2)$$

zu groß im Vergleich zur großskaligen mittleren Geschwindigkeit $\sqrt{\langle \mathbf{u}^2 \rangle_V}$; stattdessen wird eher der Zusammenhang $\sqrt{\langle \mathbf{u}^2 \rangle_V} \approx \frac{u_f}{5}$ beobachtet. Aus diesem Grund definieren wir die *large-scale current*-Geschwindigkeit als

$$u_{\text{lsc}} = \frac{u_f}{5} = \frac{\sqrt{g \alpha \delta T h}}{5} \quad , \quad (3.3)$$

bzw. die *large-scale current*-Zeit als

$$t_{\text{lsc}} = \frac{h}{u_{\text{lsc}}} = 5 \sqrt{\frac{h}{\alpha g \delta T}} \quad . \quad (3.4)$$

Führen wir an dieser Größe noch gemäß Abschnitt 1.2.5 die Entdimensionalisierung $t_{\text{lsc}} \rightarrow t_{\text{lsc}} \frac{\kappa}{h^2}$ durch, erhalten wir die entdimensionalisierte *large-scale current*-Zeit

$$t_{\text{lsc}} = 5 \sqrt{\frac{h}{\alpha g \delta T} \frac{\kappa}{h^2}} \quad . \quad (3.5)$$

Geben wir nun Zeiten bzw. Zeitdifferenzen als Vielfache von t_{lsc} an, kann man diese Zeitangaben leicht anschaulich interpretieren, da eine *large-scale current*-Zeit in etwa einer „Umwälzung“ des Fluids entspricht.

3.2.2 Zeitreihen

In den Abbildungen 3.7 bis 3.10 sind die Zeitreihen von T_{rms} , Nu , \mathbf{u}_{rms} und $\boldsymbol{\omega}_{\text{rms}}$ gezeigt. Dabei wurden die entdimensionalisierten Größen benutzt. Die Mittelung erfolgt zu jedem Zeitpunkt über das ganze Volumen, d. h. $T_{\text{rms}} = \sqrt{\langle T^2 \rangle_V}$, \mathbf{u}_{rms} und $\boldsymbol{\omega}_{\text{rms}}$ analog. Die vertikale braune Linie deutet den Anfangsbereich der Simulation an, der im *inset* vergrößert dargestellt ist. Die Größe des *insets* ist so gewählt, dass es der Länge der Videos im Ordner `videos/ra2e7_gamma4` der DVD entspricht. Die gestrichelten grünen Linien im *inset* deuten die Zeitpunkte der Schnappschüsse aus Abbildung 3.5 an; die gestrichelte schwarze Linie zeigt an, ab wann wir die Simulation als stationär ansehen.

Im *inset* der quadratisch gemittelten Temperatur in Abbildung 3.7 kann man sehen, dass T_{rms} ab etwa $t/t_{\text{lsc}} \approx 22$ stationär wird; ab diesem Zeitpunkt ist der zeitliche Mittelwert³ $T_{\text{rms}} \approx 0.0878$. Die Simulationsdauer ist sehr viel größer als dieser Einschwingvorgang

³Der zeitliche Mittelwert von T_{rms} wurde dabei als $\sqrt{\langle T^2 \rangle_{V,t}}$ berechnet (\mathbf{u}_{rms} , $\boldsymbol{\omega}_{\text{rms}}$ analog); da es sich bei den rms-Größen um *quadratische* Mittelwerte handelt, ist zu beachten, dass dies etwas anderes ist als die Berechnung über $\langle T_{\text{rms}} \rangle_t = \left\langle \sqrt{\langle T^2 \rangle_V} \right\rangle_t$. Es zeigt sich aber, dass in der Praxis die Abweichung zwischen $\sqrt{\langle T^2 \rangle_{V,t}}$ und $\left\langle \sqrt{\langle T^2 \rangle_V} \right\rangle_t$ minimal ist.

Abbildung 3.7: Zeitlicher Verlauf der Temperatur T_{rms} . Die gestrichelte braune Linie deutet den im *inset* vergrößerten Bereich an. Die obere Abszisse ist mit der *large-scale current*-Zeit reskaliert.

[ra2e7_gamma4]

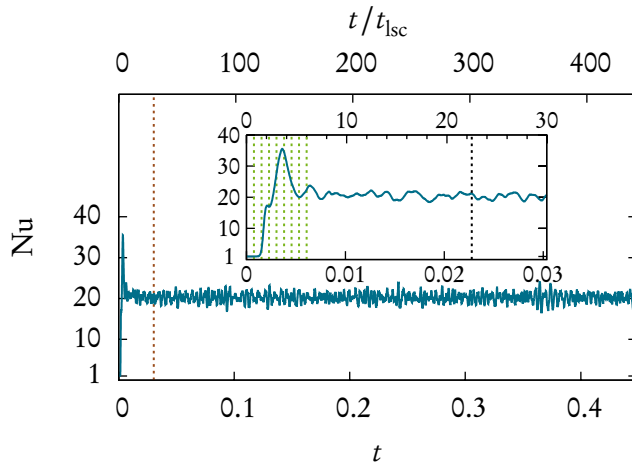
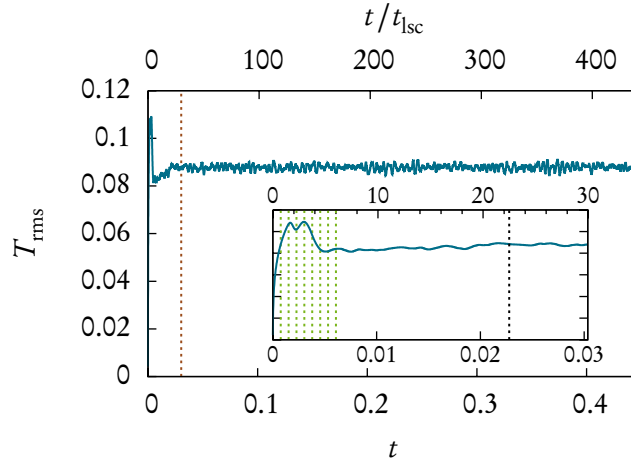


Abbildung 3.8: Zeitlicher Verlauf der Nusselt-Zahl. Die Größe des *insets* ist so gewählt, dass es die Zeitspanne der Videos im Ordner `videos/ra2e7_gamma4` auf der beiliegenden DVD zeigt.

[ra2e7_gamma4]

gewählt und deckt eine Zeitspanne von mehreren hundert *large-scale current*-Zeiten ab, um ein genügend großes Ensemble für die statistischen Auswertungen des folgenden Kapitels zu erhalten. Man kann weiterhin erkennen, dass T_{rms} zweimal bei ungefähr $t/t_{\text{lsc}} \in \{1.5, 3\}$ maximal wird. Diese Zeiten entsprechen den Zeitpunkten in Bild zwei und Bild vier der Abbildung 3.5, an denen sich die ersten *plumes* von den Platten lösen bzw. an denen sich die heißen und kalten *plumes* gegenseitig durchdringen. Bei $t/t_{\text{lsc}} \approx 5$ hat T_{rms} ein Minimum und steigt dann langsam bis zum Beginn des stationären Bereichs an (besser zu erkennen in der nicht-vergrößerten Darstellung).

Die Nusselt-Zahl in Abbildung 3.8 zeigt ein Maximum bei $t/t_{\text{lsc}} \approx 3.5$. Da die Nusselt-Zahl ein Maß für den Wärmetransport ist, lässt sich dies so deuten, dass die ersten *plumes*, die sich von den Platten ablösen, eine große Wärmemenge transportieren (vgl. dazu auch Bild vier ($t/t_{\text{lsc}} = 3$) und fünf ($t/t_{\text{lsc}} = 3.75$) in Abbildung 3.5, die dem Moment entsprechen,

Abbildung 3.9: Zeitlicher Verlauf der Geschwindigkeit u_{rms} . Die gestrichelten grünen Linien im *inset* entsprechen den Zeitpunkten der Schnappschüsse in Abbildung 3.5. Die gestrichelte graue Linie zeigt u_{lsc} .
[ra2e7_gamma4]

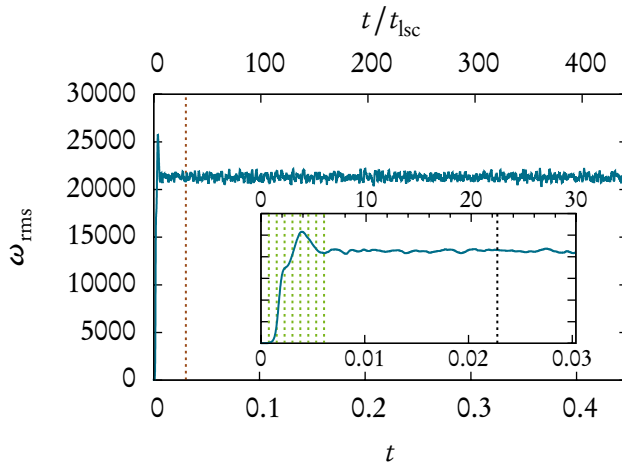
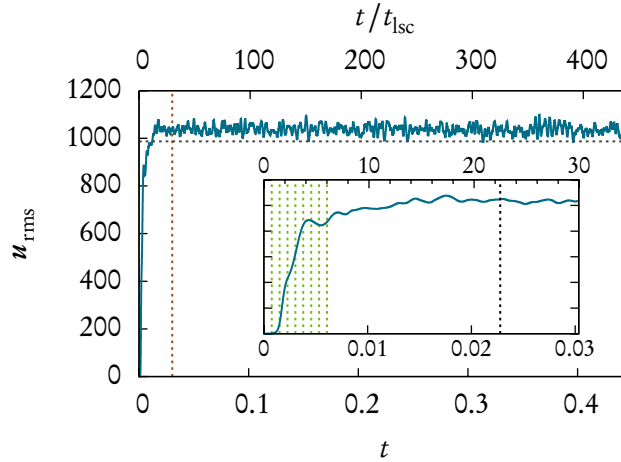


Abbildung 3.10: Zeitlicher Verlauf der Vortizität ω_{rms} . Die gestrichelte schwarze Linie im *inset* deutet den Zeitpunkt an, ab dem die Simulation stationär ist.
[ra2e7_gamma4]

wenn sich die *plumes* gegenseitig durchdringen). Die Nusselt-Zahl wird etwas früher als die Temperatur im Bereich $t/t_{\text{lsc}} \approx 16\text{--}20$ stationär mit einem mittleren Wert von $\text{Nu} = 20.22$.

In Abbildung 3.9 ist der zeitliche Verlauf der rms-Geschwindigkeit gezeigt.⁴ Der stationäre Zustand wird hier bei $t/t_{\text{lsc}} \approx 20$ mit $u_{\text{rms}} \approx 1037$ erreicht. Der bei den restlichen Größen zu Beginn vorhandene *peak* fehlt hier, und insgesamt läuft der Übergang von u_{rms} in den stationären Zustand etwas langsamer ab. Dies ist auch im entsprechenden Video ra2e7_gamma4/vel.avi der DVD zu sehen: Während die restlichen Größen schon eher einen stationären Zustand erreichen, dauert es bei der Geschwindigkeit länger, bis ausgedehnte Bereiche hoher Geschwindigkeit auftreten. Die gestrichelte horizontale Linie in Abbildung 3.9 gibt die oben vorgeschlagene *large-scale current*-Geschwindigkeit

⁴Da die rms-Geschwindigkeit durch (1.8a) entdimensionalisiert wurde und die Prandtl-Zahl $\text{Pr} = 1$ beträgt, ist u_{rms} nichts anderes als die Reynolds-Zahl, vgl. (1.17).

$u_{\text{lsc}} \approx 987$ an; u_{lsc} stellt eine gute Approximation für die tatsächlich gemessenen Geschwindigkeiten dar, wenn sie den Wert von u_{rms} auch systematisch leicht zu unterschätzen scheint.

Abbildung 3.10 zeigt den zeitlichen Verlauf der quadratisch gemittelten Vortizität. Die Zeitreihe der rms-Vortizität wird im Gegensatz zu den anderen Größen schon früher (bei $t/t_{\text{lsc}} \approx 9$) stationär; wir sehen die gesamte Simulation trotzdem erst ab $t/t_{\text{lsc}} \gtrsim 22$ als stationär an (vgl. die schwarze gestrichelte Linie im *inset*), da die anderen Größen eine längere Einschwingphase besitzen. Bei $t/t_{\text{lsc}} \approx 3.75$ ist ein Maximum von ω_{rms} zu erkennen. Dies entspricht dem in Abbildung 3.6 dargestellten Zeitpunkt, an dem die ersten sich ablösenden *plumes* an den jeweils gegenüberliegenden Platten angekommen sind. Wegen der *no slip*-Randbedingungen entstehen die im rechten/oberen Bild dieser Abbildung zu sehenden starken Vortizitäten, die die dünne *boundary layer* an den begrenzenden Platten erzeugen (zu erkennen durch die ausgedehnten roten Flecken mit gelbem Kern). Diese starken Vortizitäten erzeugen das Maximum im Zeitverlauf von ω_{rms} in Abbildung 3.10.

3.3 Vertikal aufgelöste Mittelwerte

Nach den Zeitreihen im vorherigen Abschnitt, für die verschiedene Größen über das gesamte Fluidvolumen gemittelt wurden, betrachten wir nun die vertikal aufgelösten Mittelwerte der Größen im stationären Bereich der Simulation. Die Mittelung $\langle \cdot \rangle_A$ über horizontale Ebenen ist dabei als ein kombiniertes raum-zeitliches Mittel zu verstehen, da die Simulation im statistischen Sinne stationär in der Zeit ist und innerhalb von horizontalen Ebenen räumliche Homogenität vorliegt. Eine genauere Diskussion dieser statistischen Symmetrien findet in Abschnitt 4.2.4 statt.

Im z-aufgelösten Mittelwert der Temperatur in Abbildung 3.11 kann man erkennen, dass der Übergang von der festen Temperatur $T(z=0) = 1/2$ der unteren Platte zur fluktuierenden Fluidtemperatur in einer schmalen Schicht am Rand stattfindet; ab etwa $z \approx 4\delta_T$ bleibt der Temperaturmittelwert $\langle T \rangle_A$ nahezu konstant, bis sich symmetrisch bei $z \approx 1 - 4\delta_T$ der Mittelwert an die Temperatur der oberen Platte angleicht. Dabei ist $\delta_T = \frac{1}{2\text{Nu}}$ die Dicke der thermischen Grenzschicht, vgl. z. B. [Sch09]. In dieser Referenz wird ebenfalls eine alternative geometrische Konstruktion zur Bestimmung von δ_T erwähnt, die das mittlere Temperaturprofil am Rand linear extrapoliert und δ_T als den Schnittpunkt mit der $\langle T \rangle_A = 0$ -Achse definiert. Im *inset* von Abbildung 3.11 ist diese geometrische Konstruktion angedeutet; die beiden alternativen Definitionen von δ_T zeigen eine zufriedenstellende Übereinstimmung.

Abbildung 3.12 zeigt die z-aufgelöste, quadratisch gemittelte Geschwindigkeit und Vortizität; die Geschwindigkeit ist nichts anderes als eine z-aufgelöste Reynolds-Zahl, siehe Fußnote 4 auf Seite 67. Die Geschwindigkeit verschwindet an den *no slip*-Begrenzungen, steigt dann rapide zum Maximum zwischen $2\delta_T$ und $4\delta_T$ an, und hat in der Mitte der Konvektionszelle bei $z = 1/2$ ein lokales Minimum. Dieses Verhalten von $\sqrt{\langle u^2 \rangle_A}$

Abbildung 3.11: Vertikal aufgelöster Mittelwert der Temperatur, $\langle T \rangle_A$. Das *inset* vergrößert den Bereich $[0, 4\delta_T]$ und deutet eine geometrische Konstruktion zur Bestimmung der Dicke der thermischen Grenzschicht an, vgl. Text.

[ra2e7_gamma4]

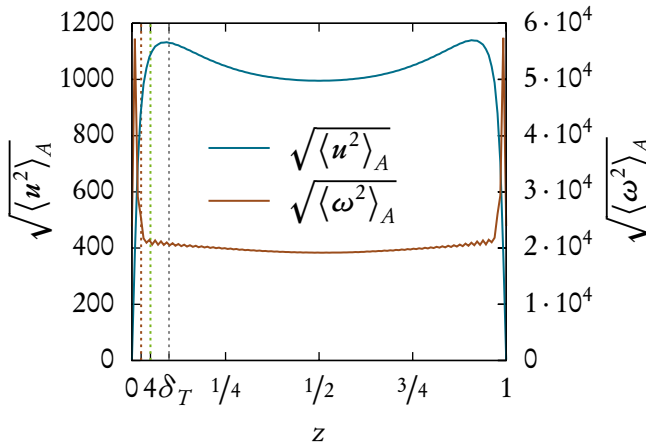
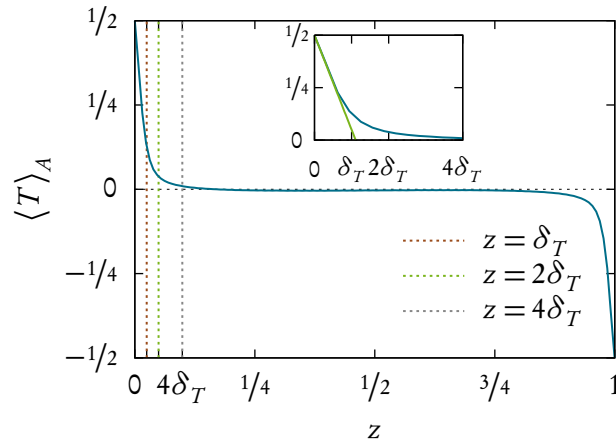


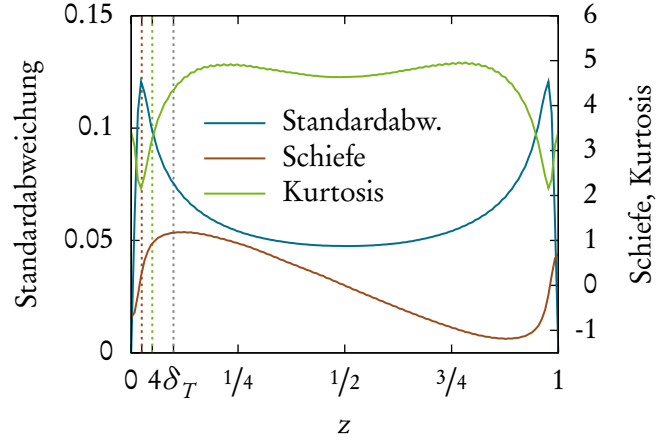
Abbildung 3.12: Vertikal aufgelöste rms-Werte von Geschwindigkeit (linke Ordinate) und Vortizität (rechte Ordinate). Die gestrichelten Linien befinden sich bei $z \in \{\delta_T, 2\delta_T, 4\delta_T\}$ mit der Dicke der thermischen Grenzschicht $\delta_T = \frac{1}{2\text{Nu}}$.

[ra2e7_gamma4]

außerhalb der Grenzschichten (also im Bereich $2\delta_T \lesssim z \lesssim 1 - 2\delta_T$) kann man durch die Dynamik von *plumes* erklären: Stellt man sich einen *plume* als ein „Paket“ heißen Fluids vor, das sich von der unteren Platte löst (oder analog sich von der oberen Platte lösendes kaltes Fluid), so erfährt dieses Fluidpaket eine nach oben gerichtete Auftriebskraft. Diese Kraft bewirkt eine beschleunigte Bewegung, d. h. der *plume* erreicht seine Maximalgeschwindigkeit kurz bevor er an der oberen Platte ankommt. Analog erreichen die kalten *plumes* ihre Maximalgeschwindigkeit, wenn sie an der unteren Platte ankommen. Dies erklärt die Maxima von $\sqrt{\langle u^2 \rangle_A}$ nahe der unteren und oberen Platte. In der Mitte der Konvektionszelle haben weder heiße noch kalte *plumes* ihre Maximalgeschwindigkeit erreicht, was sich im lokalen Minimum von $\sqrt{\langle u^2 \rangle_A}$ bei $z = 1/2$ widerspiegelt. Diese Interpretation ist etwas mit Vorsicht zu genießen, da sie die komplexe Rayleigh-Bénard-Dynamik stark vereinfacht (man kann z. B. die Bewegung aufsteigender *plumes* sicherlich

Abbildung 3.13: Vertikal aufgelöste Standardabweichung (linke Ordinate), Schiefe und Kurtosis (beide rechte Ordinate) der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur. Gestrichelte vertikale Linien wie in Abbildung 3.12.

[ra2e7_gamma4]



nicht als eine einfache beschleunigte Bewegung ansehen), jedoch kann man so die grobe Form der z -aufgelösten rms-Geschwindigkeit anschaulich erklären.

Die vertikal aufgelöste, quadratisch gemittelte Vortizität in Abbildung 3.12 lässt eindeutig die schmalen Schichten hoher Vortizität bei $z \lesssim 2\delta_T$ erkennen, die auch schon in den Visualisierungen des Vortizitätsfeldes zu sehen waren, vgl. Abbildung 3.3. Zwischen $2\delta_T$ und $1 - 2\delta_T$ ist $\sqrt{\langle \omega^2 \rangle_A}$ nahezu konstant, während der hohe *peak* bei $z \lesssim \delta_T$ rund 275 % über dem Wert in der Mitte des Fluids liegt. Diese hohen Vortizitätswerte stellen eine Herausforderung an die Numerik dar, und in der Tat kann man im Bereich $z \lesssim 1/4$ Gibbs-Oszillationen in der quadratisch gemittelten Vortizität entdecken; wie aber bereits im vorherigen Kapitel und in [KDK⁺07] bemerkt, sind diese Oszillationen nicht dynamisch aktiv. Da des Weiteren die Oszillationen nur in der Vortizität und nicht in der Geschwindigkeit aufzutreten scheinen und wir in den folgenden Kapiteln nur mit der Geschwindigkeit arbeiten werden, müssen wir uns keine weiteren Sorgen wegen dieser Oszillationen machen.

In Abbildung 3.13 sind die höheren Momente der Temperaturverteilung z -aufgelöst gezeigt. Die Standardabweichung ist die Quadratwurzel des zentrierten zweiten Moments,

$$\sigma = \sqrt{\langle (T - \langle T \rangle_A)^2 \rangle_A} \quad , \quad (3.6)$$

und die Schiefe und Kurtosis sind das dritte bzw. vierte zentrierte Moment, normiert durch die Standardabweichung, also $\frac{\langle (T - \langle T \rangle_A)^3 \rangle_A}{\sigma^3}$ bzw. $\frac{\langle (T - \langle T \rangle_A)^4 \rangle_A}{\sigma^4}$ (vgl. [AS72, S. 928]). Die Schiefe ist ein Maß dafür, wie asymmetrisch eine Verteilung ist. Die Kurtosis gibt Auskunft über die „Spitzheit“ einer Verteilung; eine gaußsche Normalverteilung hat eine Kurtosis von 3. Bemerkenswert ist der nahezu lineare Verlauf der Schiefe zwischen $z = 1/4$ und $3/4$; der Nulldurchgang bei $z = 1/2$ ist aus Symmetriegründen zu erwarten.

ten. Die Standardabweichung, also die Breite der Temperaturverteilung, ist maximal bei $z = \delta_T$ und minimal bei $z = 0$; zumindest das Minimum lässt sich *a priori* erwarten, da die Temperatur am Rand fest vorgegeben ist, d. h. dass dort die Temperatur eine sehr schmale Verteilung besitzt. Die Kurtosis hat bei $z = \delta_T$ ein Minimum, dort ist damit die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur am flachsten. Für $z \gtrsim 2\delta_T$ ist die Kurtosis größer als 3, also hat die Temperatur dort eine nicht-gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung. In [Ker96] werden bei periodischen Rändern die gleichen höheren Momente z -aufgelöst bestimmt; die dortigen Ergebnisse stimmen mit unseren überein. Auch durch [ES08] werden unsere Ergebnisse bestätigt.⁵ Eine tiefergehende Analyse der vertikal aufgelösten Statistik und insbesondere der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur findet im folgenden Kapitel 4 statt.

3.4 Skalierung mit der Rayleigh-Zahl

In den vorherigen Abschnitten haben wir zunächst Visualisierungen, dann Mittelwerte verschiedener Größen betrachtet. Die dazu verwendeten Daten stammten alle aus derselben Simulation `ra2e7_gamma4`. Man interessiert sich jedoch oft auch dafür, wie verschiedene Größen (insbesondere die Nusselt-Zahl) mit steigender Rayleigh-Zahl skalieren. Aus diesem Grund haben wir die Simulationen der Gruppe `nu_vs_ra` bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen durchgeführt, die den Bereich $Ra = 10^5 - 5 \cdot 10^8$ des turbulenten Regimes abdecken; die weiteren dimensionslosen Parameter lauten $Pr = 1$ und $\Gamma = 4$. Die detaillierten Parameter dieser Simulationen finden sich in Abschnitt A.1. Für die Durchführung dieser Simulationen war ein erheblicher Rechenzeitaufwand nötig, weswegen die Simulationsdauer nicht so lang wie die der „Hauptsimulation“ `ra2e7_gamma4` ist; dennoch wurden für alle Simulationen der Gruppe `nu_vs_ra` mehrere *large-scale current*-Zeiten im stationären Bereich simuliert, sodass sich die gemittelten Größen hinreichend genau schätzen lassen.

Um zunächst einen Eindruck über das Aussehen der Felder zu vermitteln, werden in Abschnitt 3.4.1 Visualisierungen des Temperaturfeldes bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen gezeigt und diskutiert. In Abschnitt 3.4.2 wird dann das Skalierungsverhalten der gemittelten Größen mit der Rayleigh-Zahl besprochen.

3.4.1 Visualisierungen bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen

In Abbildung 3.14 sind Visualisierungen des Temperaturfeldes im stationären Bereich bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen dargestellt. Die Simulationen entstammen der Gruppe `nu_vs_ra` und zeigen deren gesamten Rayleighzahlen-Bereich $Ra = 10^5 - 5 \cdot 10^8$. Für alle Visualisierungen wurde dieselbe Transferfunktion benutzt, sodass man die einzelnen Bilder direkt vergleichen kann.

⁵Es sei angemerkt, dass dort eine andere Strömungskonfiguration, nämlich ein geschlossener Zylinder mit isolierenden Seitenwänden, betrachtet wird.

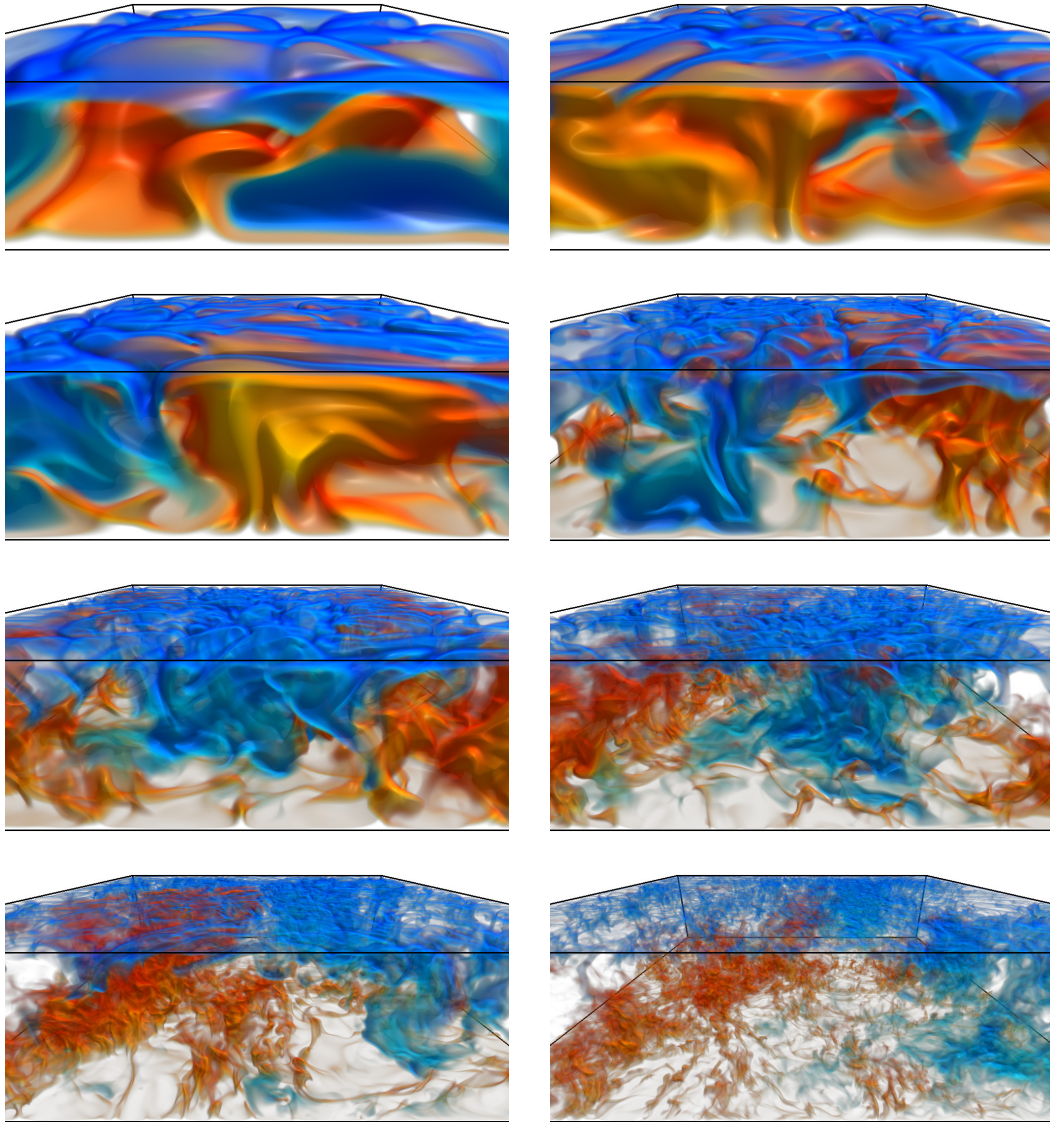


Abbildung 3.14: Visualisierungen des Temperaturfeldes bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen. Zeilenweise von oben/links nach unten/rechts sind die Simulationen rale5, ra5e5, rale6, ra5e6, rale7, ra5e7, rale8, ra5e8 der Gruppe nu_vs_ra gezeigt. Für alle Visualisierungen wurde dieselbe Transferfunktion benutzt. [nu_vs_ra]

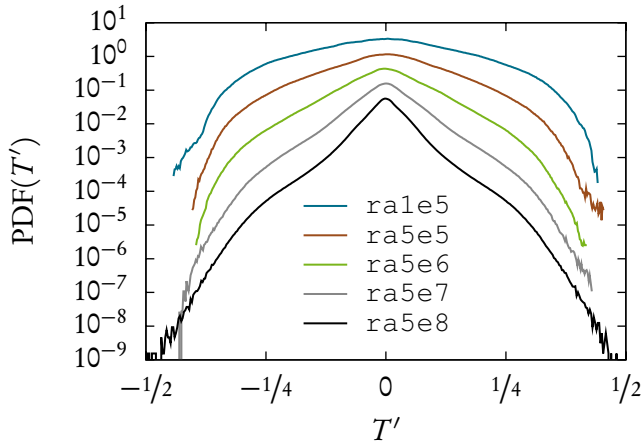
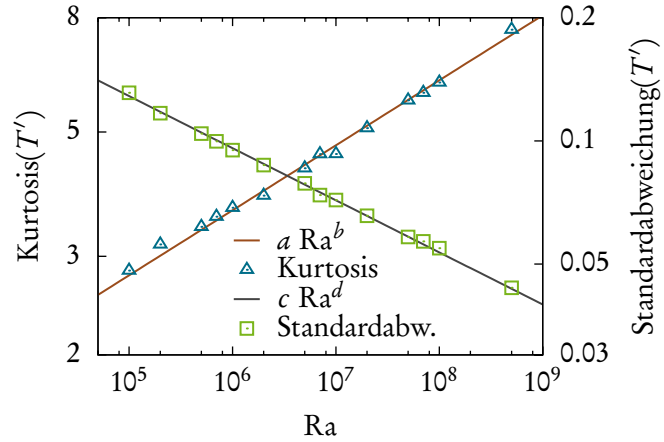


Abbildung 3.15: Verteilungsfunktionen der Temperaturfluktuationen $T'(x) = T(x) - \langle T \rangle_A$ bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen. Zur besseren Darstellung wurden die Verteilungsfunktionen vertikal gegeneinander verschoben.
[nu_vs_ra]

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Strukturen des Temperaturfeldes für steigende Rayleigh-Zahlen immer feiner werden. Während bei den relativ kleinen Rayleigh-Zahlen $Ra = 10^5$ und $Ra = 5 \cdot 10^5$ der ersten beiden Bilder das gesamte Fluidvolumen nur von einigen wenigen *plume*-artigen Strukturen ausgefüllt wird, findet zu höheren Rayleigh-Zahlen hin ein gradueller Übergang zu feinskaligeren Strukturen statt; besonders deutlich ist dies im direkten Vergleich der letzten beiden Bilder bei $Ra = 10^8$ und $Ra = 5 \cdot 10^8$ mit den ersten beiden zu erkennen. Der interessierte Leser sei zusätzlich auf das Video `misc/rale9_T_flight.avi` verwiesen, das einen Kameraflug durch ein „eingefrorenes“ Temperaturfeld bei $Ra = 10^9$ zeigt und in dem man eindrucksvoll die filigranen Strukturen beobachten kann, die bei solch hohen Rayleigh-Zahlen entstehen; im Video `misc/2d_rale10_T.avi` ist eine zweidimensionale Simulation bei noch höherer Rayleigh-Zahl $Ra = 10^{10}$ gezeigt.

Gleichzeitig kann man in Abbildung 3.14 bemerken, dass das Fluidvolumen insgesamt „durchsichtiger“ wird; während man bei $Ra = 10^5$ fast ausschließlich Strukturen an der Vorder- und Oberseite des Volumens sehen kann, zeigt sich bei $Ra = 5 \cdot 10^8$ viel mehr „leerer Raum“. Die Transferfunktion, also die Zuordnung Temperatur \leftrightarrow (Farbe, Durchsichtigkeit), ist so gewählt, dass vor allem hohe Werte (in rot-orange) und niedrige Werte (in blau) dargestellt werden, während Werte nahe der mittleren Temperatur $T = 0$ durchsichtig sind. Daraus kann man bereits schließen, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur mit steigender Rayleigh-Zahl schmaler wird, sodass also größere Bereiche der Wahrscheinlichkeitsverteilung in den durchsichtigen Bereich der Transferfunktion fallen. Da gleichzeitig für hohe Rayleigh-Zahlen die feinen Strukturen deutlicher hervortreten, lässt sich darauf schließen, dass seltene „extreme“ Ereignisse häufiger auftreten, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur also zunehmend einen nicht-gaußschen Charakter annimmt.

Abbildung 3.16: Kurtosis (linke Ordinate) und Standardabweichung (rechte Ordinate) der Temperaturfluktuationen T' doppelt-logarithmisch gegen die Rayleigh-Zahl aufgetragen. Die *fit*-Parameter betragen $a = 0.729$, $b = 0.116$ und $c = 0.557$, $d = -0.127$.
[nu_vs_ra]



Diese groben Überlegungen kann man quantifizieren, indem man die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Temperaturfelder bestimmt. Da dazu über das gesamte Fluidvolumen gemittelt wird und die mittlere Temperatur in den verschiedenen Bereichen des Volumens variiert (vgl. Abbildung 3.11), ergibt es Sinn, stattdessen mit der Temperaturabweichung vom mittleren Temperaturprofil zu arbeiten, also die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $T'(x) = T(x) - \langle T \rangle_A$ zu bestimmen.

Für fünf verschiedene Rayleigh-Zahlen ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung (PDF, von engl. *probability density function*) von T' in Abbildung 3.15 gezeigt. Die PDFs wurden dabei vertikal gegeneinander verschoben, indem sie von einer Rayleigh-Zahl zur nächsten jeweils mit dem Faktor $1/4$ multipliziert wurden. Wie bereits durch die Visualisierungen vermutet, kann man erkennen, dass die PDFs für steigende Rayleigh-Zahlen in der Nähe von $T' = 0$ einen „Höcker“ entwickeln, dass sich also die Temperatur zunehmend öfter in diesem Bereich befindet. Gleichzeitig entwickeln die Ausläufer der PDFs für hohe Beträge von T' einen flacheren, exponentiellen Verlauf, was bedeutet, dass die „extremere“ Ereignisse, die den Flügeln der PDFs entsprechen, häufiger auftreten. Die Temperatur-PDF nimmt insgesamt mit steigenden Rayleigh-Zahlen einen exponentiellen, nicht-gaußschen Charakter an, wird also zunehmend spitzer.

Diese Tatsache wird durch die in Abbildung 3.16 gegen die Rayleigh-Zahl aufgetragene Kurtosis bestätigt. Wie bereits erwähnt ist die Kurtosis das vierte normierte Moment einer Verteilung und ein Maß für die „Spitzheit“ einer Wahrscheinlichkeitsverteilung; die gaußsche Normalverteilung hat eine Kurtosis von 3. In der Abbildung kann man erkennen, dass die Kurtosis der Temperaturverteilung diesen Wert für Rayleigh-Zahlen $Ra \gtrsim 10^5$ überschreitet. Dementsprechend sieht man in Abbildung 3.15, dass sich von $Ra = 10^5$ nach $Ra = 5 \cdot 10^5$ bei $T' = 0$ allmählich der Höcker ausbildet, der die PDF spitzer werden lässt. Die Messwerte der Kurtosis schwanken vergleichsweise stark, was daran liegt, dass bei der Schätzung des vierten Moments aus der Numerik einzelne „Ausreißer“ einen

erheblichen Einfluss auf das Endergebnis haben. Man könnte diese Schwankungen unterdrücken, indem man die statistischen Größen aus deutlich mehr Ensemble-Mitgliedern schätzt; da der Parameter *scan* der Simulationsgruppe *nu_vs_ra* aber aus vielen einzelnen Simulationen besteht, konnten wir aus Speicher- und Rechenzeitgründen die Anzahl an einzelnen Ensemble-Mitgliedern nicht drastisch erhöhen.

In Abbildung 3.16 ist des Weiteren die Standardabweichung der Wahrscheinlichkeitsverteilung von T' als Funktion der Rayleigh-Zahl gezeigt; sie stellt ein Maß für die Breite der Verteilung dar. Wie zu erkennen ist, nimmt die Standardabweichung mit steigender Rayleigh-Zahl ab, die Wahrscheinlichkeitsverteilungen werden also wie vermutet mit zunehmender Rayleigh-Zahl insgesamt schmaler. Die Abnahme der Standardabweichung ist bei steigender Kurtosis (und damit verbundenen breiter werdenden Flügeln der PDF) zu erwarten: Da die PDF einen kompakten Träger hat, muss sie bei breiter werdenden Ausläufern insgesamt schmaler werden, um in das Intervall $[-1/2, 1/2]$ zu passen. Bemerkenswert ist weiterhin, dass sowohl Kurtosis als auch Standardabweichung einem Potenzgesetz folgen, dessen Parameter in Abbildung 3.16 angegeben sind.

Diese letzten Absätze über die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur sind dabei an dieser Stelle nur als kleine Randbemerkung zu verstehen, da sie in Verbindung mit den Visualisierungen bei steigender Rayleigh-Zahl (Abbildung 3.14) eine erste anschauliche Interpretation der statistischen Eigenschaften des Rayleigh-Bénard-Systems erlauben. Im folgenden Kapitel 4 werden wir verschiedene statistische Größen, unter anderem auch die Verteilungsfunktion der Temperatur, im Rahmen eines theoretischen Ansatzes ausführlich diskutieren.

3.4.2 Skalierung der gemittelten Größen mit der Rayleigh-Zahl

Wie bereits im vorherigen Abschnitt begonnen, wollen wir nun die Skalierung der quadratisch gemittelten Temperatur sowie der Nusselt- und Reynolds-Zahl mit der Rayleigh-Zahl untersuchen. Die dazu nötigen Mittelungen wurden über das gesamte Fluidvolumen und in der Zeit vorgenommen. Vor allem die Nusselt- und die Reynolds-Zahl als dimensionslose Kenngrößen des Wärmetransports bzw. des „Turbulenzgrades“ des Fluids sind dabei auch in der Literatur stets von Interesse; für diese beiden Größen wurden z. B. die in Abschnitt 1.4.1 erwähnten Skalierungsgesetze anhand von Modellannahmen hergeleitet.

Zur Bestimmung der Skalierungsgesetze wurden die vierzehn Simulationen der Gruppe *nu_vs_ra* durchgeführt. Die Simulationsparameter sind in Abschnitt A.1 zu finden. In Abschnitt 3.2 haben wir gesehen, dass von den gemittelten Größen die rms-Temperatur als letztes stationär wird. Deswegen sind die Zeitreihen von T_{rms} zu allen Rayleigh-Zahlen in Abbildung 3.17 dargestellt, um zu verifizieren, dass die gemittelten Größen im stationären Bereich der Simulationen bestimmt werden. Die schwarze vertikale Linie in der Abbildung gibt an, ab wann wir die Simulationen als stationär ansehen, was im Übrigen der gleiche Zeitpunkt ist wie in der Simulation *ra2e7_gamma4*, vergleiche Abbildung 3.7. Gleichzeitig kann man in diesem Vergleich sehen, dass die Simulationen

Abbildung 3.17: Zeitreihen der quadratisch gemittelten Temperatur für verschiedene Rayleigh-Zahlen. Von oben nach unten entsprechen die Zeitreihen den aufsteigenden Rayleigh-Zahlen $Ra = 10^5, 5 \cdot 10^5, \dots, 5 \cdot 10^8$. Ab der senkrechten Linie sind die Simulationen stationär.
[nu_vs_ra]

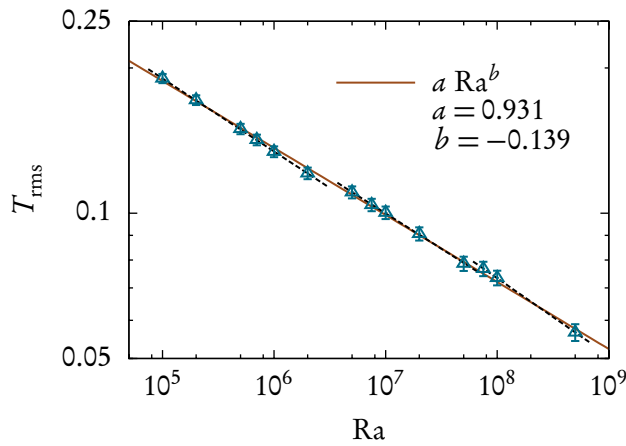
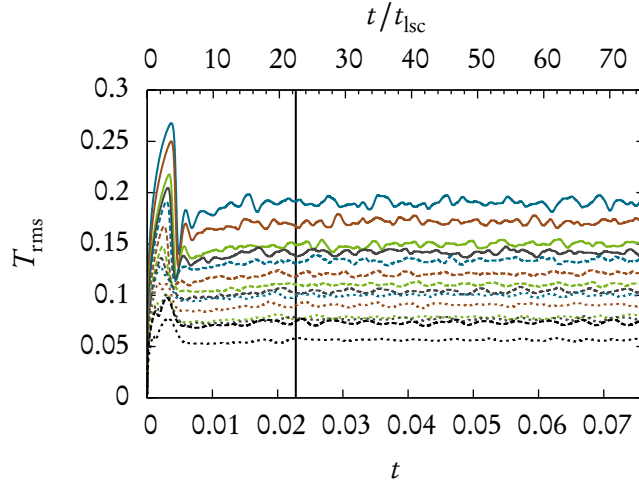


Abbildung 3.18: T_{rms} gegen die Rayleigh-Zahl aufgetragen. Die einzelnen Messwerte sind mit vertikalen Fehlerbalken versehen. Die gestrichelten schwarzen Linien sind *fits* mit den Exponenten $-0.151, -0.147$ und -0.161 (von kleinen zu großen Ra).
[nu_vs_ra]

nu_vs_ra deutlich kürzer sind als die Simulation ra2e7_gamma4. Dies hat wie bereits erwähnt praktische Gründe, die in der begrenzten Rechenzeit liegen. Nichtsdestotrotz beträgt die Zeitspanne im stationären Bereich von nu_vs_ra über fünfzig *large-scale current*-Zeiten, sodass sich die gemittelten Größen recht zuverlässig schätzen lassen.

Abbildung 3.18 zeigt die Skalierung der quadratisch gemittelten Temperatur mit der Rayleigh-Zahl in doppelt-logarithmischer Darstellung. Die Messwerte werden näherungsweise durch ein Potenzgesetz beschrieben, die Skalierung lautet $T_{\text{rms}} \sim Ra^{-0.139}$. Wie schon die Standardabweichung der Temperaturfluktuationen in Abbildung 3.16 nimmt die rms-Temperatur mit steigender Rayleigh-Zahl ab; es ist jedoch zu beachten, dass diese beiden Größen nicht identisch sind (auch wenn sie durch ähnliche Potenzgesetze beschrieben werden, vgl. die Parameter -0.127 und -0.139 im Exponenten der *fits* aus Abbildung 3.16 und 3.18). Vergleichbare experimentelle Resultate finden sich z. B. in [WL92]

mit $T_{\text{rms}} \sim \text{Ra}^{-0.14 \pm 0.01}$ und $T_{\text{rms}} \sim \text{Ra}^{-0.144 \pm 0.005}$ bei einem zylindrischen Container mit Seitenverhältnis $\Gamma = 1$ bzw. $\Gamma = 1/2$ und der Prandtl-Zahl $\text{Pr} = 0.7$; in [CGH⁺89] wird ein Turbulenzmodell entwickelt, das den Exponenten $-1/7 \approx -0.143$ vorhersagt.

Betrachtet man in Abbildung 3.18 die Streuung der einzelnen Datenpunkte um die Gerade des Potenzgesetzes etwas genauer, scheint diese Streuung systematisch mit der Auflösung der Simulationen zusammenzuhängen: Die Simulationen für die drei Gruppen $\text{Ra} = 10^5 - 2 \cdot 10^6$, $\text{Ra} = 5 \cdot 10^6 - 5 \cdot 10^7$ und $\text{Ra} = 7 \cdot 10^7 - 5 \cdot 10^8$ sind bei jeweils denselben Auflösungen durchgeführt worden. Die Messwerte innerhalb einer Gruppe (also Simulationen der gleichen Auflösung) lassen sich mit weitaus weniger Schwankungen durch ein Potenzgesetz beschreiben, vgl. die gestrichelten schwarzen Linien, die Potenzgesetz-*fits* innerhalb einer Gruppe darstellen (die *fit*-Parameter der Exponenten finden sich in der Bildbeschreibung). Der genaue Grund für dieses scheinbar systematische Verhalten ist nicht klar. Da aber die im Folgenden präsentierten weiteren Größen dieses Verhalten nicht aufweisen und des Weiteren der *fit* durch ein einziges Potenzgesetz innerhalb der Fehlerbalken der einzelnen Messwerte liegt⁶ und mit in der Literatur bestimmten Werten übereinstimmt, scheint diese „Anomalie“ keine weitreichenden Konsequenzen zu haben. Trotzdem wäre eine tiefergehende Analyse durchaus zweckmäßig; sie konnte jedoch in dieser Diplomarbeit nicht mehr durchgeführt werden.

Die Skalierung der Nusselt- mit der Rayleigh-Zahl in Abbildung 3.19 zeigt eindeutig den Zusammenhang über ein Potenzgesetz; vor allem der Exponent 0.279 ist dabei von Interesse. Dieser stimmt gut mit in der Literatur zu findenden Potenzgesetzen überein, z. B. geben [Ker96, vRJH08] den Zusammenhang $\text{Nu} = 0.186 \text{ Ra}^{0.276}$ für die gleichen dimensionslosen Parameter, also für $\text{Pr} = 1$ und $\Gamma = 4$ bei periodischen Rändern, an; [WL92] finden $\text{Nu} = 0.146 \text{ Ra}^{0.286 \pm 0.003}$ für ein zylindrisches Gefäß mit Seitenverhältnis $\Gamma = 6.7$ bei der Prandtl-Zahl $\text{Pr} = 0.7$. Das Turbulenzmodell in [CGH⁺89] liefert für den Exponenten die Vorhersage $2/7 \approx 0.286$, was gut mit unserem Wert übereinstimmt; die von S. Grossmann und D. Lohse entwickelten Skalierungstheorien [GL00, GL01] sagen dagegen das Verhalten $\text{Nu} \sim \text{Ra}^{1/5}$ voraus, von dem unsere Daten abweichen. Der oft beobachtete Phasenübergang von sogenannter „weicher“ zu „harter“ Turbulenz in der Nähe von $\text{Ra} \gtrsim 10^7$, der sich in einer Änderung des Potenzgesetzes manifestiert (siehe z. B. [HCL87]), tritt bei uns nicht auf; dies stimmt jedoch mit den Beobachtungen von [Ker96] überein, die die periodischen Randbedingungen in horizontaler Richtung und das hohe Seitenverhältnis von $\Gamma = 4$ dafür verantwortlich machen, dass verglichen mit Experimenten bei kleinem Seitenverhältnis und festen Seitenwänden der Übergang zu harter Turbulenz bei sehr viel kleineren Rayleigh-Zahlen stattfindet.

⁶Im Übrigen sind nur bei der rms-Temperatur in Abbildung 3.18 Fehlerbalken angegeben, da diese bei den übrigen Größen so klein sind, dass sie mit den Datenpunkten zusammenfallen würden.

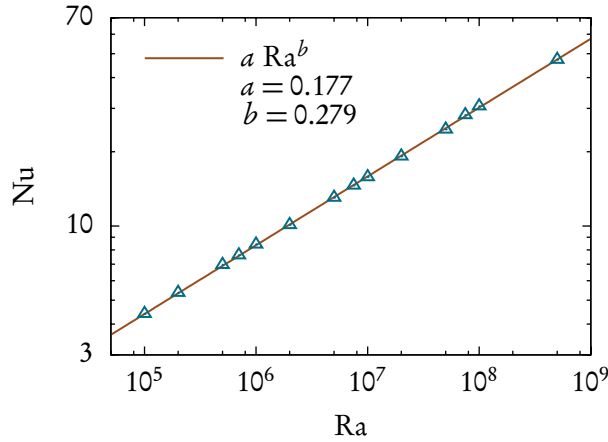
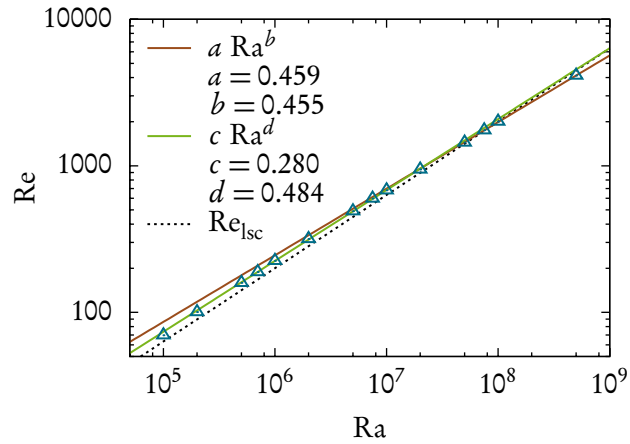


Abbildung 3.19: Skalierung der Nusselt-Zahl mit der Rayleigh-Zahl in doppelt-logarithmischer Darstellung. Die einzelnen Datenpunkte werden durch ein Potenzgesetz beschrieben, siehe *fit*.
[nu_vs_ra]

Abbildung 3.20: Skalierung der Reynolds-Zahl $Re = \frac{b \cdot u_{rms}}{\nu}$ mit der Rayleigh-Zahl. Re_{lsc} ist die auf die *large-scale current*-Geschwindigkeit bezogene Reynolds-Zahl, siehe Text.
[nu_vs_ra]



Die Reynolds-Zahl (bei uns als $Re = \frac{b \cdot u_{rms}}{\nu}$ definiert⁷) als Maß für den „Turbulenzgrad“ der Fluidströmung skaliert ebenfalls gemäß eines Potenzgesetzes mit der Rayleigh-Zahl, siehe Abbildung 3.20. Die Datenpunkte suggerieren hier zusätzlich eine subtile Änderung des Potenz-Gesetzes bei $Ra \approx 10^7$; die beiden *fits* der Abbildung wurden für die Messwerte $Ra \leq 10^7$ bzw. $Ra \geq 10^7$ durchgeführt. In [Ker96, vRJH08] wird die Reynolds-Zahl durch $Re = 0.17 Ra^{0.49}$ beschrieben; bei [WL92] wird die Skalierung $Re \sim Ra^{0.485 \pm 0.005}$ für einen Zylinder mit Seitenverhältnis $\Gamma = 1$ angegeben. Diese beiden Potenzgesetze stehen damit in guter Übereinstimmung zu unseren Ergebnissen, während die Abweichung zur Vorhersage $Re \sim Ra^{2/5}$ von Grossmann und Lohse größer ist. Setzt man nebenbei bemerkt die *large-scale current*-Geschwindigkeit u_{lsc} in die Definition der Reynolds-Zahl ein, erhält

⁷Dabei ist die nicht entdimensionalisierte Geschwindigkeit für u_{rms} zu benutzen; andernfalls wäre Re keine dimensionslose Größe.

man den Zusammenhang $Re = \frac{1}{5} Pr^{-1/2} Ra^{1/2}$, bei fester Prandtl-Zahl also eine Skalierung $Re \sim Ra^{1/2}$. Für $Ra \lesssim 10^7$ werden die Datenpunkte durch diesen Zusammenhang recht gut beschrieben, wie die gestrichelte Linie in Abbildung 3.20 zeigt.

3.5 Kleine Rayleigh-Zahlen

Nachdem wir in den vorherigen Abschnitten dieses Kapitels das Rayleigh-Bénard-System im turbulenten Regime betrachtet haben, wollen wir uns nun dem Bereich kleiner Rayleigh-Zahlen $Ra \lesssim 10^4$ zuwenden. In diesem Bereich liegt eine laminare Strömung vor und man kann die zugrunde liegenden Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen bis zu einem gewissen Grad analytisch behandeln: Beispielsweise kann man mit der linearen Stabilitätsanalyse den Bifurkationspunkt erhalten, d. h. die kritische Rayleigh-Zahl Ra_c , bei der die Wärmeübertragung durch die Fluidzelle von Wärmeleitung zu Konvektion übergeht; Details wurden in Abschnitt 1.3 besprochen.

Dieser analytisch bestimmbare Bifurkationspunkt eignet sich als Test der von uns benutzten numerischen Methode. Dazu wird ein Parameter-*scan* durchgeführt, bei dem unterschiedliche Rayleigh-Zahlen rund um Ra_c simuliert werden. Von jeder Simulation wird dann im stationären Bereich die Nusselt-Zahl als Maß für die Wärmeübertragung bestimmt. Für Rayleigh-Zahlen kleiner der kritischen Rayleigh-Zahl nimmt die Nusselt-Zahl den Wert 1 an, der reiner Wärmeleitung, also dem konduktiven Grundzustand, entspricht; für Werte $Ra > Ra_c$ wird $Nu > 1$. Aus dem Punkt, an dem $Nu > 1$ wird, kann nun Ra_c bestimmt und mit dem theoretisch vorhergesagten Wert verglichen werden.

Bei kleinen Rayleigh-Zahlen bildet sich eine laminare Strömung in Form von Konvektionsrollen aus, siehe Abbildung 3.21. Die kritische Rayleigh-Zahl ist abhängig vom Verhältnis von Breite zu Höhe dieser Rollen. Da wir mit periodischen Randbedingungen in horizontaler Richtung arbeiten, bestimmt das Seitenverhältnis Γ der periodischen Box implizit das Seitenverhältnis der Konvektionsrollen: Die Rollen werden stets das Seiten-

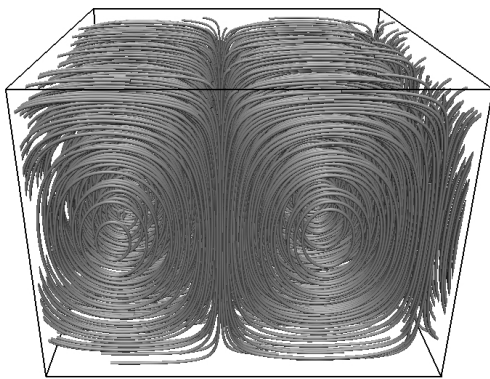


Abbildung 3.21: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes bei $Ra = 4931$, $Pr = 1$ und $\Gamma = 4/3$. Es bilden sich zwei Konvektionsrollen mit Seitenverhältnis Breite : Höhe = 2 : 3. Ein Teil der linken Rolle ragt über den periodischen Rand hinaus und tritt von rechts wieder in das Volumen ein. Die Visualisierung der Stromlinien wurde mit *Vapor* [Cly11, CR05, CMNR07] erstellt.

[bif/gamma4_3]

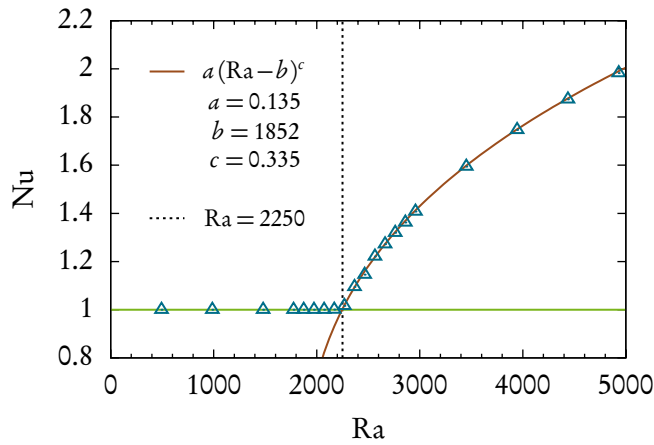
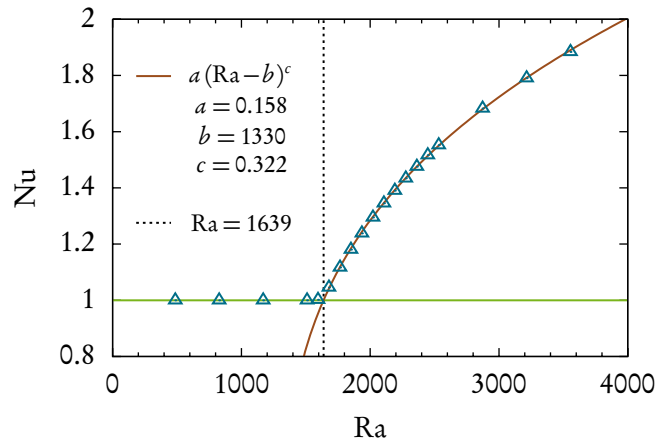


Abbildung 3.22: Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion beim Seitenverhältnis $\Gamma = 4/3$; die Prandtl-Zahl ist $Pr = 1$. Die gestrichelte vertikale Linie markiert den Bifurkationspunkt.
[bif/gamma4_3]

Abbildung 3.23: Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion beim Seitenverhältnis $\Gamma = 2$. Die Datenpunkte für $Ra > Ra_c$ lassen sich durch ein Potenzgesetz beschreiben.
[bif/gamma2]⁹



verhältnis annehmen, bei dem die kleinste kritische Rayleigh-Zahl erreichbar ist, da diese Rollen beim Übergang aus dem konduktiven Grundzustand als erstes instabil werden. Für eine periodische Box mit $\Gamma = 2$ bedeutet das beispielsweise, dass die Box von zwei Rollen mit Seitenverhältnis Breite : Höhe = 1 : 1 statt von vier Rollen mit Seitenverhältnis 1 : 2 ausgefüllt wird, da beim Seitenverhältnis 1 : 1 die kritische Rayleigh-Zahl geringer ist, vgl. Abschnitt 1.3.⁸

⁸Drei Rollen mit Seitenverhältnis 2 : 3 sind aus „topologischen“ Gründen nicht mit den periodischen Randbedingungen vereinbar, da dann zwei in gleicher Richtung rotierende Rollen aneinandergrenzen würden.

⁹Aufgrund von Computerproblemen sind leider die originalen Eingabedateien verloren gegangen, die für die Simulation `bif/gamma2` benutzt wurden; der entsprechende Ordner auf der DVD enthält aber Eingabedateien, die die in der Simulation `bif/gamma2` benutzten dimensionslosen Parameter reproduzieren.

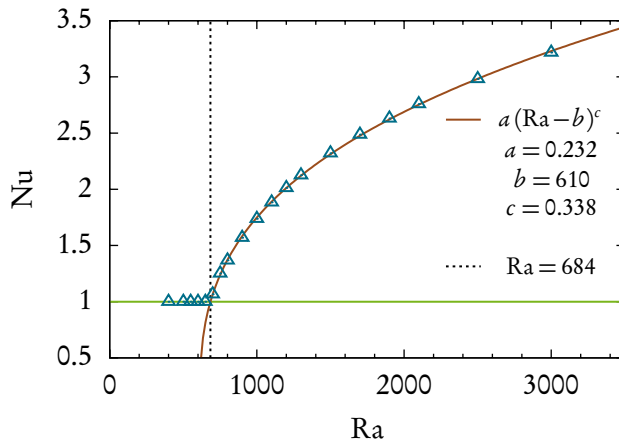


Abbildung 3.24: Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion bei spannungsfreien Randbedingungen. Das Seitenverhältnis beträgt $\Gamma = 2\sqrt{2}$, die Prandtl-Zahl $Pr = 1$. Die gestrichelte vertikale Linie markiert den Bifurkationspunkt.
[bif/mirror_gamma2 sqrt2]

Abbildung 3.25: Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion bei spannungsfreien Randbedingungen. Das Seitenverhältnis beträgt $\Gamma = 2$, die Prandtl-Zahl $Pr = 1$. Die gestrichelte vertikale Linie markiert den Bifurkationspunkt.
[bif/mirror_gamma2]

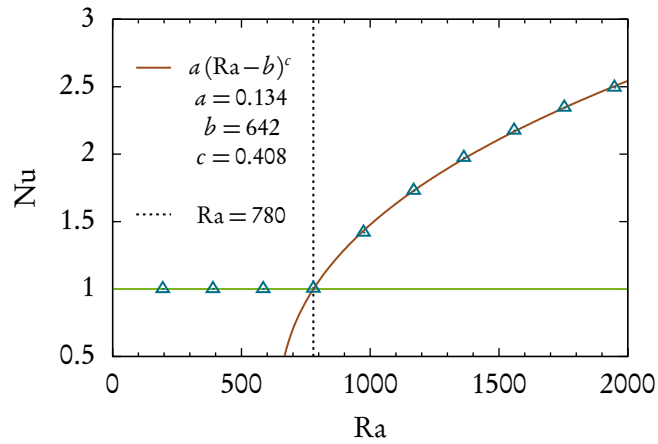


Abbildung 3.22 zeigt das Bifurkationsdiagramm für ein Seitenverhältnis der periodischen Box von $\Gamma = 4/3$. In dieser Konfiguration bilden sich zwei Konvektionsrollen mit einem Seitenverhältnis Breite : Höhe = 2 : 3 aus; die theoretisch zu erwartende kritische Rayleigh-Zahl beträgt dann $Ra_c = 2238.5$. Der Bifurkationspunkt in der Abbildung ist durch die gestrichelte vertikale Linie markiert. Die Bifurkation befindet sich bei $Ra = 2250$, was den theoretisch erwarteten Wert mit einem Fehler von weniger als 1% recht gut trifft.

Bei einer periodischen Box mit Seitenverhältnis $\Gamma = 2$ entstehen zwei Rollen mit Seitenverhältnis 1 : 1, und die kritische Rayleigh-Zahl beträgt $Ra_c = 1707.9$.¹⁰ Das

¹⁰Dies ist nicht ganz die Konfiguration, bei der man die kleinste kritische Rayleigh-Zahl erhält: Die minimale kritische Rayleigh-Zahl ist $Ra_{c,min} = 1707.76$ und entsteht bei einem Seitenverhältnis der Konvektionsrollen von Breite : Höhe = 1.0079 : 1.

entsprechende Bifurkationsdiagramm ist in Abbildung 3.23 dargestellt. Die Bifurkation in den konvektiven Zustand findet hier bei $Ra = 1639$ statt, die Abweichung zum theoretischen Wert ist hier also größer als bei $\Gamma = 4/3$. Trotzdem ist der gefundene Wert zufriedenstellend; die Abweichung zum theoretischen Wert liegt unter 5%.

An dieser Stelle können wir auch das „Spiegelverfahren“ testen, das in Kapitel 2 als eine optionale Erweiterung des numerischen Verfahrens präsentiert wurde. Dieses Verfahren erzeugt spannungsfreie Randbedingungen in vertikaler Richtung, d. h. spannungsfreie horizontale Platten oben und unten. Die kritische Rayleigh-Zahl und das Seitenverhältnis der Konvektionsrollen bei spannungsfreien Rändern unterscheiden sich vom Fall der *no slip*-Ränder, aber auch hier können theoretisch zu erwartende Werte durch die lineare Stabilitätsanalyse der Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen erhalten werden.¹¹

Die kleinste kritische Rayleigh-Zahl beträgt bei spannungsfreien Randbedingungen $Ra_{c,\min} = \frac{27\pi^4}{4} \approx 657.5$ bei einem Seitenverhältnis der Konvektionsrollen von Breite : Höhe = $\sqrt{2} : 1$. In Abbildung 3.24 sind die entsprechenden Simulationen als Bifurkationsdiagramm dargestellt, die Bifurkation findet bei $Ra = 684$ statt. Die Abweichung zum theoretischen Wert beträgt etwa 4%.

Bei einem Seitenverhältnis der Konvektionsrollen von 1 : 1 beträgt die kritische Rayleigh-Zahl $Ra_c = 8\pi^4 \approx 779.3$. Dieser Wert wird in dem Bifurkationsdiagramm in Abbildung 3.25 mit $Ra = 780$ sehr gut reproduziert, was aber auch daran liegt, dass zufälligerweise genau in dem neutral-stabilen Punkt $Ra = Ra_c$ eine Simulation durchgeführt wurde.

Nebenbei bemerkt haben wir bei spannungsfreien Rändern und Rayleigh-Zahlen kurz über den hier untersuchten ein oszillatorisches Verhalten der Felder beobachtet. Das Video `misc/oscillating_rolls.avi` zeigt Konvektionsrollen bei $Ra = 3500$, $Pr = 1$ und $\Gamma = 2\sqrt{2}$, die in Form stehender Wellen in horizontaler Richtung oszillieren. Dieses Verhalten tritt auch in Experimenten auf, vgl. [BPA00] und die darin genannten Referenzen.

3.6 Validierungen der Numerik

Zusätzlich zu der in gewissem Sinne statistischen Validierung der Numerik im vorherigen Abschnitt, in dem aus dem Simulationscode gewonnene Mittelwerte mit analytischen Vorhersagen verglichen wurden, werden in diesem Abschnitt weitere Validierungen durchgeführt. Insbesondere soll das Verhalten der Felder innerhalb bzw. in der Nähe der maskierten Wandgebiete und das Auflösungskriterium betrachtet werden.

¹¹Genau genommen ist der Fall spannungsfreier Ränder sogar besser zu handhaben, da man die kritische Rayleigh-Zahl komplett analytisch erhalten kann; bei *no slip*-Rändern müssen zur Bestimmung von Ra_c die Nullstellen einer transzendenten Funktion näherungsweise (z. B. numerisch) bestimmt werden.

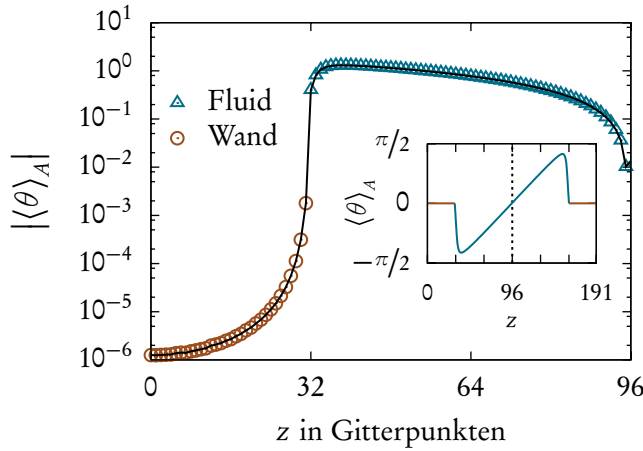
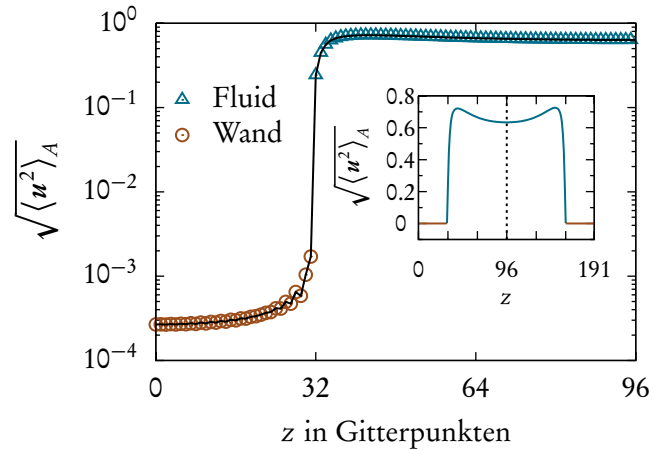


Abbildung 3.26: Horizontal gemittelte Temperaturabweichung θ vom linearen Profil in logarithmischer Darstellung. Sowohl Gitterpunkte innerhalb als auch außerhalb der maskierten Regionen sind gezeigt. Nicht-logarithmische Darstellung im *inset*.

[ra2e7_gamma4]

Abbildung 3.27: Horizontal gemittelte rms-Geschwindigkeit in logarithmischer Skalierung. Das *inset* zeigt das volle Simulationsgebiet. Es wurden die nicht entdimensionalisierten Größen benutzt.

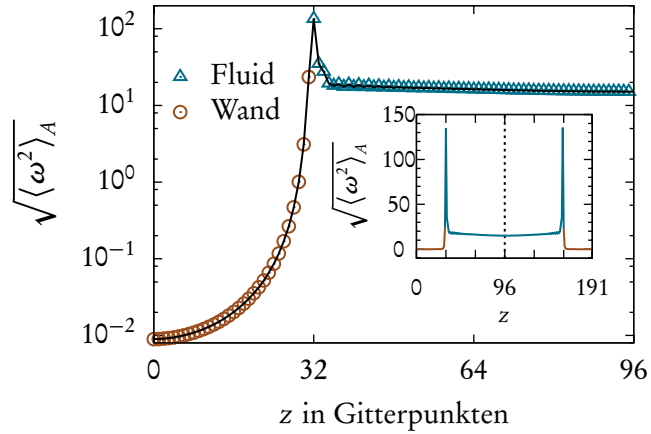
[ra2e7_gamma4]



3.6.1 Horizontal gemittelte Profile

In Abbildung 3.26 und 3.27 ist die in horizontaler Richtung und in der Zeit gemittelte Temperaturabweichung θ vom linearen Temperaturprofil (vgl. (2.32) auf Seite 33) und die Geschwindigkeit der Simulation ra2e7_gamma4 dargestellt. Dies sind die beiden Größen, auf die in der Numerik die *penalization*-Terme wirken; in den Abbildungen sind deshalb auch die nicht entdimensionalisierten Größen dargestellt, da die Numerik mit diesen Größen arbeitet. In beiden Abbildungen erkennt man, dass es zwischen den Gitterpunkten innerhalb des Fluidgebietes und denen in den Wandgebieten einen Sprung über mehrere Größenordnungen gibt. Der *penalization*-Parameter beträgt $\eta = 10^{-3}$, und sowohl die Temperaturabweichung als auch die Geschwindigkeit nehmen innerhalb der Wand Werte der Größenordnung η an (bzw. Werte kleiner als η weiter im Inneren der Wand), wie es in [KDK⁺07] vorhergesagt wird. In Abschnitt 2.6.5 wurde diskutiert,

Abbildung 3.28: Horizontal gemittelte rms-Vortizität in logarithmischer Skalierung. Das *inset* zeigt das volle Simulationsgebiet. Es wurden die nicht entdimensionalisierten Größen benutzt.
[ra2e7_gamma4]



welche Größenordnung für den *penalization*-Parameter zu wählen ist; durch (2.56) wird für diesen $\eta \approx 1.3 \cdot 10^{-3}$ gefordert, was durch unsere Wahl erfüllt ist.

In Abbildung 3.28 ist die *z*-aufgelöste gemittelte rms-Vortizität gezeigt. Die höchsten Werte nimmt die Vortizität an den unmittelbar an der Wand liegenden Gitterpunkten (d. h. in der letzten Fluidschicht vor der Wand) an. Da der *penalization*-Term nicht unmittelbar auf die Vortizität, sondern auf die Geschwindigkeit wirkt, fällt die Vortizität innerhalb der Wand nicht so stark ab wie die Geschwindigkeit und die Temperaturabweichung. Trotzdem ist die Vortizität bei den periodischen Rändern (d. h. bei $z = 0$) um etwa drei Größenordnungen gegenüber den Werten im Fluidgebiet abgesunken, sodass kein „Durchschlagen“ durch die Wand zu befürchten ist. Dieses „Durchschlagen“ könnte auftreten, wenn Information von der unteren Begrenzung des Fluids durch die Wandregion und den periodischen Rand an den oberen Rand des Fluids transportiert wird, was eine unphysikalische Kopplung des Fluids an der unteren und oberen Platte bedeuten würde. Auch die Geschwindigkeit ist in der Mitte der Wand (also bei $z = 0$) um mehr als drei Größenordnungen abgefallen, die Temperaturabweichung sogar um etwa fünf Größenordnungen (vgl. Abbildung 3.27 und 3.26).

3.6.2 Auflösungskriterium der Felder

Um sicherzustellen, dass die feinsten Strukturen der Felder durch das Gitter aufgelöst werden, wird die Kolmogorov-Länge herangezogen. Diese ist ein Maß für die kleinsten auftretenden Strukturen des Geschwindigkeitsfeldes und ist definiert als

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (3.7)$$

mit der kinematischen Viskosität ν und der kinetischen Dissipationsrate ϵ des Geschwindigkeitsfeldes, die sich als

$$\epsilon = \frac{\nu}{2} \left\langle \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle \quad (3.8)$$

berechnet [Pop00]; die Einstein'sche Summenkonvention muss hier beachtet und die nicht entdimensionalisierte Geschwindigkeit benutzt werden. Um Verwechslungen mit dem *penalization*-Parameter zu vermeiden, wurde die Kolmogorov-Länge mit dem Index K versehen. An den Gitterabstand Δx wird nun die Forderung gestellt, dass die Kolmogorov-Länge aufgelöst werden kann, was bei

$$\frac{\eta_K}{\Delta x} \geq \frac{1}{2.1} \quad (3.9)$$

sichergestellt ist, siehe [PLLW10]. Diese Bedingung wird oft auch alternativ als

$$k_{\max} \eta_K \geq \frac{\pi}{2.1} \approx 1.5 \quad (3.10)$$

geschrieben, wobei k_{\max} die größte Wellenzahl ist.¹²

Eigentlich müsste man an dieser Stelle auch ein η_T äquivalent zu (3.7) als die kleinste Längenskala des Temperaturfeldes definieren und verlangen, dass auch dieses η_T durch das Gitter fein genug aufgelöst wird. Wie jedoch in [VC03] erwähnt, gilt für Prandtl-Zahlen $\text{Pr} \leq 1$ die Abschätzung $\eta_K \leq \eta_T$; da in dieser Diplomarbeit stets mit $\text{Pr} = 1$ gearbeitet wird, reicht es daher aus, lediglich das Auflösungskriterium der Geschwindigkeit, also (3.9) bzw. (3.10), zu beachten.

In Abbildung 3.29 ist der zeitliche Verlauf des Auflösungskriteriums (3.10) dargestellt; hier ist die Mittelung aus (3.8) also als eine Mittelung über das gesamte Fluidvolumen zu verstehen. Zum Zeitpunkt $t/t_{\text{isc}} \approx 4$ hat das Auflösungskriterium ein Minimum; dies ist der Zeitpunkt, an dem die stärksten Vortizitäten durch die auf die Platten treffenden ersten *plumes* entstehen, vgl. Abbildung 3.10. Nach diesem kritischen Punkt pendelt sich das Auflösungskriterium auf einen konstanten Wert ein; im stationären Bereich gemittelt beträgt dieser $k_{\max} \eta_K = 2.75$.

Abbildung 3.30 zeigt das z-aufgelöste Auflösungskriterium im gesamten Simulationsgebiet; hier wurde der Mittelwert in (3.8) also als raum-zeitliches Mittel über horizontale Ebenen und den stationären Teil der Simulation berechnet. Man kann erkennen, dass das Auflösungskriterium direkt an den Begrenzungen des Fluids am geringsten ist, während es außerhalb der Grenzschichten nahezu konstant ist. Da das Auflösungskriterium in allen

¹²In den Log-Dateien des Simulationscodes wird für das Auflösungskriterium statt der größten Wellenzahl die größte *aktive* Wellenzahl $0.8 k_{\max}$ benutzt (der von uns benutzte glatte *dealiasing*-Filter besitzt einen *cut-off* bei etwa 80%). Dementsprechend sind Simulationen fein genug aufgelöst, wenn in den Log-Dateien das Auflösungskriterium einen Wert von $0.8 \frac{\pi}{2.1} \approx 1.2$ überschreitet.

Abbildung 3.29: Zeitlicher Verlauf des Auflösungskriteriums; $k_{\max}\eta_K > 1.5$ muss erfüllt sein. Darstellung analog zu Abbildung 3.7–3.10.

[ra2e7_gamma4]

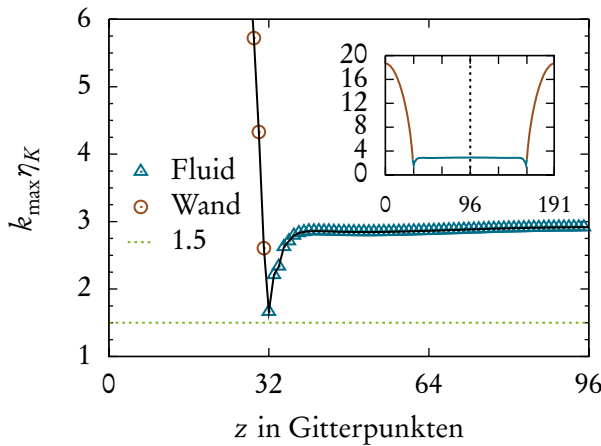
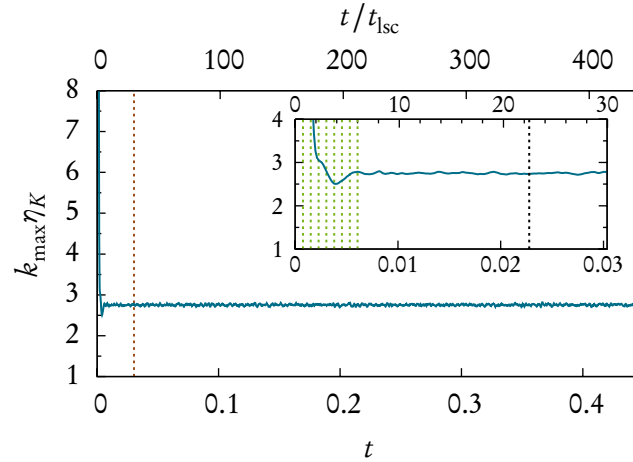


Abbildung 3.30: Vertikal aufgelöstes Auflösungskriterium. Auch am Rand des Fluids ist $k_{\max}\eta_K > 1.5$ erfüllt.

[ra2e7_gamma4]

Bereichen des Fluids erfüllt sein muss, muss die Gitterauflösung so gewählt werden, dass die Grenzschichten korrekt aufgelöst werden; dadurch wird der *bulk* des Fluids „zu gut“ aufgelöst, was natürlich außer einer etwas erhöhten Rechenzeitanforderung kein Problem darstellt. Nebenbei bemerkt gibt es bei Chebyshev-Verfahren ein ähnliches Problem: Wegen der in vertikaler Richtung nicht äquidistanten Verteilung der Gitterpunkte liegen die Gitterpunkte in den Grenzschichten enger zusammen als im *bulk* des Fluids. Löst man nun den *bulk* fein genug auf, sind die Grenzschichten über-aufgelöst (vgl. z. B. [BCES10]); bei Chebyshev-Verfahren tritt also diesbezüglich ein umgekehrtes Problem auf.

3.6.3 Randverhalten der laminaren Felder

Bei den bisherigen Validierungen haben wir räumlich gemittelte Größen untersucht. Nun sollen noch einzelne Felder im laminaren Regime betrachtet werden, indem wir

Abbildung 3.31: Horizontale und vertikale Geschwindigkeit und Temperaturabweichung im laminaren Regime bei $Ra = 4931$. Die Wandregionen sind durch die gestrichelten vertikalen Linien abgegrenzt. Es werden die nicht entdimensionalisierten Größen dargestellt.

[bif/gamma4_3]

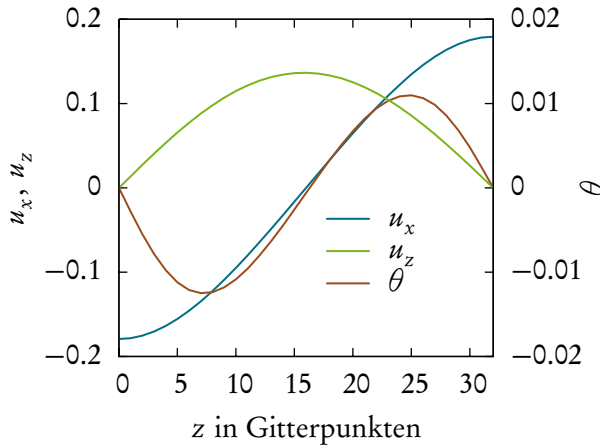
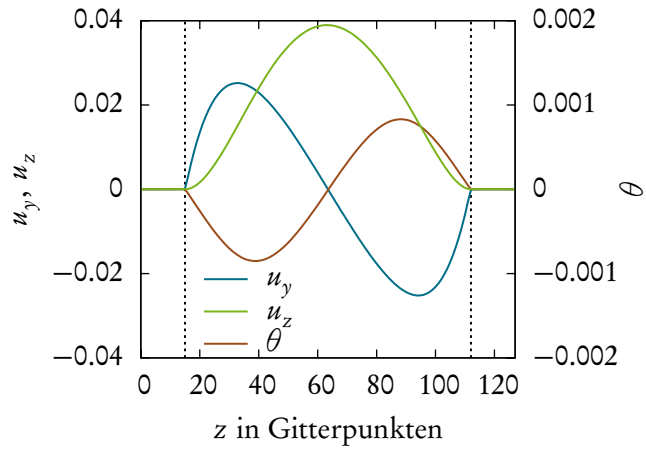


Abbildung 3.32: Horizontale und vertikale Geschwindigkeit und Temperaturabweichung im laminaren Regime ($Ra = 2100$) bei spannungsfreien Rändern. Gezeigt sind die instantanen z -Profile bei festem x, y und t .

[bif/mirror_gamma2_sqrt2]

bei festgehaltenem x, y und t den Verlauf der Felder entlang der z -Richtung darstellen. So kann insbesondere das Verhalten der Geschwindigkeits- und Temperaturfelder am Rand gegen analytische Vorhersagen (vgl. [Cha81, Hak83]) getestet werden: An *no slip*-Wänden müssen alle Geschwindigkeitskomponenten verschwinden; zusätzlich muss die Normalenableitung der Normalkomponente des Geschwindigkeitsfeldes verschwinden, was bei horizontalen Wänden $\frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$ bedeutet. Für spannungsfreie horizontale Wände muss das Geschwindigkeitsfeld die Bedingungen $u_z = 0$, $\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} = 0$ und $\frac{\partial u_x}{\partial z} = \frac{\partial u_y}{\partial z} = 0$ erfüllen. Bei Wänden fester Temperatur muss zudem für die Temperaturabweichung $\theta = 0$ gelten.

In Abbildung 3.31 und 3.32 sind eindimensionale Schnitte der Felder in vertikaler Richtung bei festem x, y und t gezeigt. Da sich die Konvektionsrollen parallel zu den

periodischen Rändern ausrichten (vgl. Abbildung 3.21), ist jeweils nur eine horizontale Komponente des Geschwindigkeitsfeldes gezeigt; die zweite horizontale Komponente verschwindet. Die x - und y -Koordinaten der Schnitte wurden für die drei Felder unterschiedlich und jeweils so gewählt, dass die maximalen Amplituden der Felder gezeigt werden; die horizontale Geschwindigkeitskomponente hat in der Mitte einer Konvektionsrolle die größte Variation, die vertikale Geschwindigkeit zwischen zwei Rollen (vgl. Abbildung 3.21). Die Temperaturabweichung wird ebenfalls in der Mitte einer Konvektionsrolle gezeigt. Der Zeitpunkt t ist im stationären Bereich gewählt.

Abbildung 3.31 zeigt den Fall der *no slip*-Ränder. Man kann erkennen, dass u_y , u_z und θ am Rand verschwinden. Zusätzlich hat die vertikale Geschwindigkeit am Rand die Steigung null, also gilt dort $\frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$. Damit erfüllen die Felder die obigen Forderungen. Zusätzlich ist es interessant zu sehen, dass die Felder bei der gezeigten Rayleigh-Zahl beginnen, von einfachen Sinus- bzw. Kosinus-Formen abzuweichen. Besonders deutlich ist dies an den Geschwindigkeitskomponenten u_y und u_z zu sehen. Durch die lineare Stabilitätsanalyse werden zwar sinusförmige Felder vorhergesagt, jedoch befinden wir uns mit $Ra = 4931$ schon relativ weit oberhalb der kritischen Rayleigh-Zahl $Ra_c = 2238.5$.

Die Analyse der spannungsfreien Randbedingungen ist in Abbildung 3.32 zu finden. Die vertikale Geschwindigkeitskomponente u_z ist am Rand null; des Weiteren hat sie am Rand einen linearen Verlauf, was auf eine verschwindende zweite Ableitung hindeutet. Die erste Ableitung der horizontalen Komponente u_x verschwindet am Rand, während u_x selber dort einen Wert ungleich null annimmt. Auch hier ist an der Wand $\theta = 0$. Die Felder erfüllen damit die Forderungen an spannungsfreie Ränder fester Temperatur.

Betrachtet man die horizontale Geschwindigkeitskomponente u_x genauer, sieht man, dass sie am Rand betragsmäßig maximal wird. Mittels dieser Beobachtung kann man anschaulich erklären, warum die Konvektionsrollen bei spannungsfreien Rändern und kleinen Rayleigh-Zahlen bevorzugt ein Seitenverhältnis größer als 1 annehmen, also „breiter als hoch“ sind:¹³ Das Fluid ist am Rand am schnellsten, wird also relativ schnell von den Platten weg-advectiert. Um trotzdem an den Platten eine große Menge Wärme aufnehmen bzw. abgeben und so die Wärmeübertragung durch die Fluidzelle maximieren zu können, ist es für das System vorteilhaft, breite Rollen auszubilden; dann steht nämlich anteilmäßig ein größerer Teil einer Konvektionsrolle in Kontakt mit der Wand als in Kontakt mit einer benachbarten Rolle.

3.7 No flux-Seitenwände

In Abschnitt 2.7.2 haben wir als Erweiterung des numerischen Verfahrens vertikale *no flux*-Wände eingeführt, also isolierende Seitenwände, in die es keinen Wärmefluss gibt. Durch eine geeignete Wahl der Maskierungsfunktionen können so beliebig geformte vertikale *no flux*-Seitenwände implementiert werden, was hier demonstriert werden soll.

¹³Vgl. Abschnitt 3.5, die minimale kritische Rayleigh-Zahl findet sich bei einem Seitenverhältnis $\sqrt{2} : 1$.

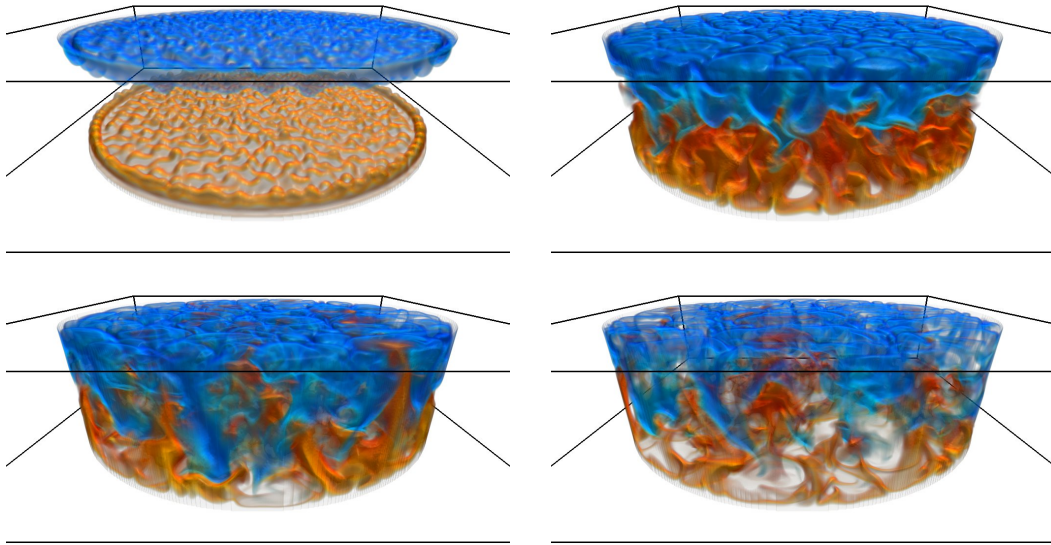


Abbildung 3.33: Visualisierungen des Temperaturfeldes mit zylindrischen *no flux*-Wänden zu den Zeitpunkten $t/t_{\text{isc}} \in \{1.5, 2.625, 3.75, 4.875\}$ (zeilenweise von oben/links nach unten/rechts). [noflux/cyl_ra2e7]

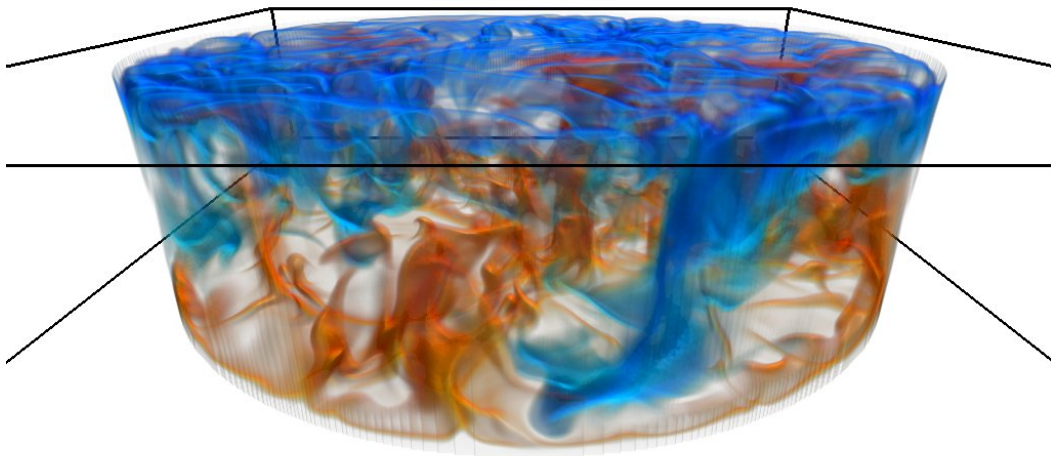


Abbildung 3.34: Visualisierung des Temperaturfeldes mit zylindrischen *no flux*-Wänden zum Zeitpunkt $t/t_{\text{isc}} = 15$. [noflux/cyl_ra2e7]

Die Ausführungen und Visualisierungen dieses Abschnitts sind dabei lediglich als ein *proof of principle* zu verstehen, quantitative Analysen werden nicht durchgeführt – isolierende Seitenwände sind kein eigentlicher zentraler Bestandteil dieser Diplomarbeit.

In Abbildung 3.33 und Abbildung 3.34 sind Visualisierungen des turbulenten Temperaturfeldes bei $Ra = 2.44 \cdot 10^7$ und $Pr = 1$ gezeigt. Dabei wurden die Maskierungsfunktionen so gewählt, dass ein zylindrisches Gefäß mit Seitenverhältnis Durchmesser : Höhe = 3.5 : 1 simuliert wird, vgl. (2.68) auf Seite 52. Abbildung 3.33 zeigt den von einem homogenen Temperaturfeld startenden Aufheizvorgang des Fluids. Im ersten Bild der Abbildung kann man erkennen, dass sich in den „Ecken“ des Fluidvolumens, also beim Übergang zwischen Boden und Wand, das erste aufsteigende Fluid löst. Der restliche Aufheizvorgang des Fluids sieht analog zu dem Fall periodischer Ränder aus, der in Abbildung 3.5 gezeigt wurde; man kann allerdings die Tendenz erkennen, dass aufsteigende bzw. absinkende *plumes* sich bevorzugt entlang der vertikalen Seitenwände bewegen. Diese Tendenz ist auch in der größeren Abbildung 3.34 und im entsprechenden Video `noflux/cyl_ra2e7_T.avi` zu sehen. Dieses Verhalten ist leicht anschaulich zu erklären: An der oberen Platte wird kaltes Fluid von aufsteigendem warmen Fluid zur Seite gedrängt; trifft dieses verdrängte Fluid auf die Seitenwände, muss es die Bewegungsrichtung ändern und bewegt sich entlang der vertikalen Begrenzung nach unten. Die Aufwärtsbewegung von warmem Fluid entlang der Wand erfolgt analog.

Schaut man sich die Abbildung 3.34 genauer an, erkennt man an der unteren Kante des Fluidvolumens einen sogenannten Treppenstufeneffekt, der durch die Rasterung der zylindrischen Maskierungsfunktion auf das kartesische Gitter entsteht; die Maskierungsfunktion nimmt bei uns nur die diskreten Werte 0 und 1 an. In [RAB07, KS09] wird vorgeschlagen, diesen Treppeneffekt durch *antialiasing* (also Kantenglättung, nicht zu verwechseln mit dem *dealiasing* des Abschnitts 2.6.4) zu vermindern, was wir aber nicht durchgeführt haben.

Während eine zylinderförmige Geometrie noch mit anderen (in Teilen) pseudospektralen numerischen Verfahren zu simulieren ist (siehe z. B. [VC03, BCES10]), ist man für komplizierte Geometrien üblicherweise auf die Verfahren der finiten Differenzen, finiten Volumen und finiten Elemente angewiesen. Unser Verfahren für *no flux*-Wände erlaubt es jedoch, ohne viel Aufwand fast beliebige Geometrien mit einem pseudospektralen Verfahren simulieren zu können.

In Abbildung 3.35 und 3.36 wird dies an zwei Geometrien veranschaulicht: Zum einen wird eine quaderförmige Box, zum anderen ein Zylinder mit elliptischer Grundfläche simuliert. Die in den beiden Bildern dargestellten Simulationen sind im laminaren Regime bei $Ra = 10^4$ und $Pr = 1$ durchgeführt worden; die bei laminarer Strömung entstehenden Konvektionsrollen sind oft auch wegen der auftretenden Musterbildung von Interesse, vgl. z. B. [BPA00]. Um die Konvektionsrollen besser identifizieren zu können, sind in den Abbildungen die Stromlinien der Geschwindigkeitsfelder statt wie bisher die farbkodierten Temperaturfelder dargestellt worden. Auf der DVD finden sich die Videos der beiden Simulationen (`noflux/box_ra1e4_streamlines.avi` und

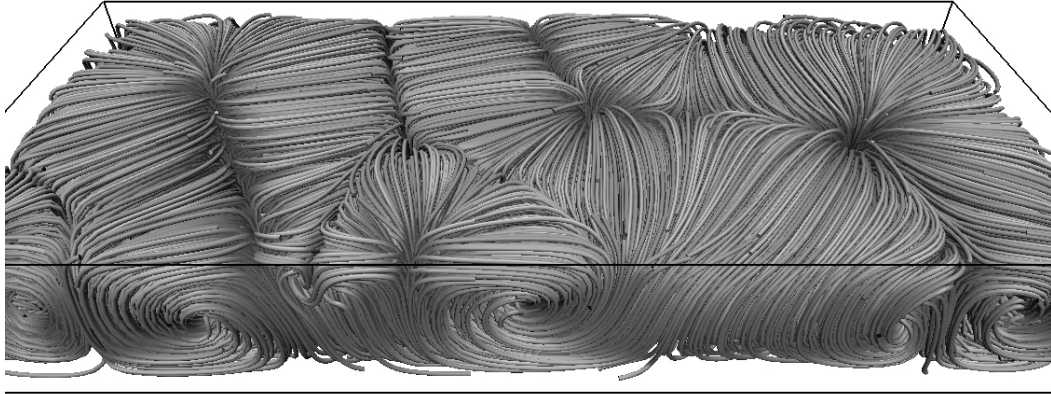


Abbildung 3.35: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes in einem quaderförmigen Behälter mit *no flux*-Seitenwänden und Seitenverhältnis Breite : Tiefe : Höhe = 7 : 3 : 1. Die Rayleigh-Zahl ist $Ra = 10^4$, der Zeitpunkt ist $t/t_{\text{lsc}} = 12$. [noflux/box_rale4]

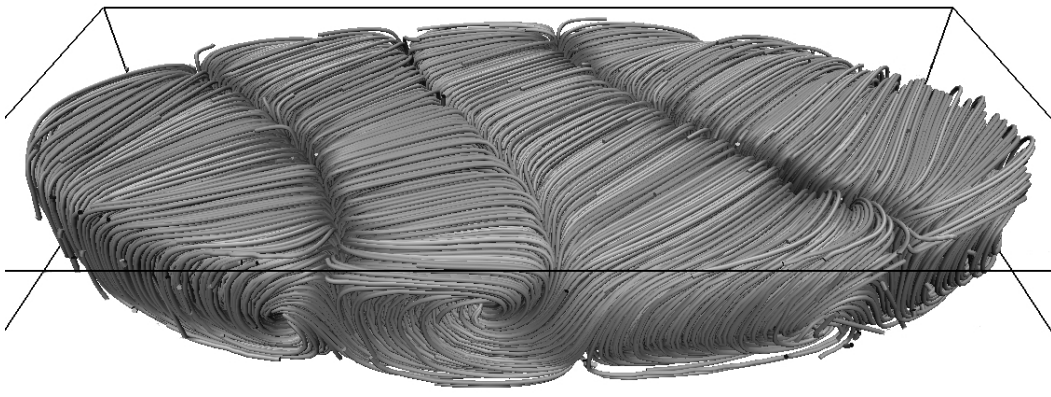


Abbildung 3.36: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes in einem elliptischen Zylinder mit *no flux*-Seitenwänden und Seitenverhältnis Hauptachse : Nebenachse : Höhe = 7 : 3 : 1. Die Rayleigh-Zahl ist $Ra = 10^4$, der Zeitpunkt ist $t/t_{\text{lsc}} = 12$. [noflux/cyl_rale4]

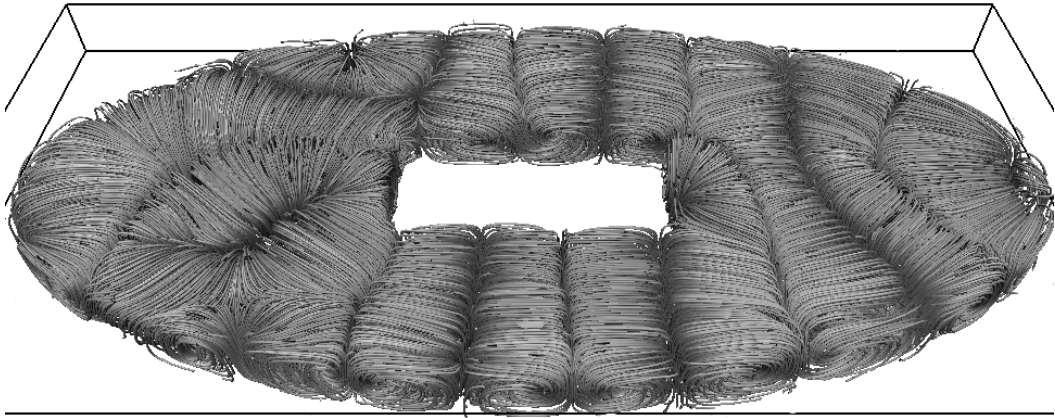


Abbildung 3.37: Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes in einem elliptischen Zylinder mit quaderförmigem „Loch“. Die dimensionslosen Parameter sind $Ra = 10^4$ und $Pr = 1$. Das Seitenverhältnis des Zylinders ist Breite : Tiefe : Höhe = 15 : 7 : 1, das des Lochs 4 : 2 : 1. Der Zeitpunkt ist $t/t_{isc} = 15$.

noflux/cyl_rale4_streamlines.avi), sowie zwei Varianten der Videos, in denen die Stromlinien entsprechend der Temperatur eingefärbt worden sind (noflux/box_rale4_streamlines_color.avi und noflux/cyl_rale4_streamlines_color.avi). In diesen Videos ist zu sehen, dass sich nach einer kurzen transienten Einschwingphase schnell Konvektionsrollen ausbilden, die sich dann in einem eher langsamen Prozess anordnen; dabei verschmelzen auch mehrfach benachbarte Rollen in der Nähe der Seitenwände miteinander. Gegen Ende der Videos wird ein nahezu stationärer Zustand erreicht.¹⁴ Bemerkenswert ist, dass die Konvektionsrollen sowohl in der rechteckigen als auch in der elliptischen Geometrie die Tendenz zeigen, senkrecht auf den Seitenwänden zu stehen. Sowohl in Experimenten [BPA00] als auch in anderer DNS [BCES10] wird dieses Verhalten ebenfalls beobachtet; auch numerische Simulationen der Swift-Hohenberg-Gleichung [SH77, CH93], die ein Modell des Rayleigh-Bénard-Systems im laminaren Regime darstellt, bestätigen dies, siehe [GC84].

Abbildung 3.37 ist schließlich noch als eine letzte Demonstration einer komplizierten Geometrie zu verstehen; hier ist in die Mitte eines flachen elliptischen Zylinders eine quaderförmige Wand eingefügt worden. Wie schon in den Abbildungen zuvor kann man auch hier die Tendenz sehen, dass die Konvektionsrollen senkrecht

¹⁴Bisher war „stationär“ immer als „statistisch stationär“ aufzufassen; an dieser Stelle ist aber wirklich ein zeitlich unveränderlicher Zustand gemeint.

auf den vertikalen *no flux*-Wänden stehen. Die entsprechenden Videos sind auf der DVD unter `noflux/cylbox_rale4_streamlines.avi` bzw. `noflux/cylbox_rale4_streamlines_color.avi` zu finden.¹⁵

3.8 Zusammenfassung

Das Anliegen dieses Kapitels war es, eine grundlegende Anschauung für die Phänomene des Rayleigh-Bénard-Systems zu entwickeln, da die Phänomene zwar durch die Grundgleichungen beschrieben, jedoch nicht direkt an diesen abgelesen werden können.

In Abschnitt 3.1 wurden deswegen zunächst die turbulenten Temperatur-, Geschwindigkeits- und Vortizitätsfelder volumetrisch dargestellt, die aus der im vorherigen Kapitel entwickelten DNS gewonnen wurden. Zuerst wurden die Felder im statistisch stationären Bereich der Simulationen gezeigt, und nennenswerte Merkmale und Korrelationen zwischen den Feldern wurden hervorgehoben. Danach wurden Visualisierungen des Temperaturfeldes während des Aufheizvorgangs des Fluids diskutiert. Um die dynamischen Effekte besser erkennen zu können, wurde der Diplomarbeit eine DVD beigelegt, auf der sich unter anderem einige Videos der Visualisierungen befinden und auf die bei der Diskussion der zu beobachtenden Phänomene oft hingewiesen wurde.

Im Abschnitt 3.2 wurden die zuvor phänomenologisch diskutierten zeitlichen Vorgänge dann in quantitativerer Form betrachtet, indem die zeitlichen Verläufe gemittelter Größen gezeigt wurden. Dazu wurde zunächst eine *large-scale current*-Zeit definiert, die eine anschauliche Zeiteinheit darstellt. Anschließend wurden die Zeitreihen verschiedener gemittelter Größen diskutiert. Im stationären Bereich der Simulation sind diese Größen bis auf Fluktuationen konstant. Während der transienten Einschwingphase, d. h. während des Aufheizvorganges, konnten bestimmte Merkmale auf die Visualisierungen des vorherigen Abschnitts bezogen und so interpretiert werden; vor allem die Effekte, die durch die ersten sich ablösenden *plumes* auftreten, wurden dabei diskutiert.

Für die in den Zeitreihen gezeigten Größen wurde über das gesamte Fluidvolumen gemittelt; in Abschnitt 3.3 wurden stattdessen die Mittelwerte in verschiedenen Regionen des Fluids gezeigt, indem über horizontale Ebenen statt über das gesamte Volumen gemittelt wurde. Vor allem die qualitativen Unterschiede zwischen den Grenzschichten und dem *bulk* waren dabei von Interesse. Die z-aufgelösten höheren Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur wurden gezeigt, was als ein erster Vorgeschmack auf die tiefergehenden statistischen Ansätze des nachfolgenden Kapitels zu verstehen ist.

In den bisherigen Abschnitten hatten wir eine einzige Simulation, also insbesondere eine einzige Rayleigh-Zahl, betrachtet. In Abschnitt 3.4 wurde dann die Skalierung verschiedener Effekte mit der Rayleigh-Zahl untersucht. Dazu wurden zunächst Visualisierungen des Temperaturfeldes bei unterschiedlichen Rayleigh-Zahlen gezeigt und mit

¹⁵Da für diese Geometrie eine „von Hand“ angefertigte Maskierungsfunktion benutzt wurde, steht für diese Simulation keine Eingabedatei zur Verfügung.

den entsprechenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Temperatur verglichen; daran anschließend wurden die höheren Momente dieser Verteilung in Abhängigkeit von der Rayleigh-Zahl gezeigt. Die Untersuchung von solchen Skalierungsverhalten wurde dann weiter fortgesetzt, indem gemittelte Größen, insbesondere die Nusselt- und Reynolds-Zahl als dimensionslose Kenngrößen der Konvektionsströmung, gegen die Rayleigh-Zahl aufgetragen und die Skalierungsgesetze bestimmt wurden. Alle Größen skalieren gemäß Potenzgesetzen, die durch Vergleiche mit der Literatur bestätigt wurden.

Nach den vorherigen Betrachtungen im turbulenten Regime schlossen sich in Abschnitt 3.5 Untersuchungen der laminaren Strömung bei kleinen Rayleigh-Zahlen an. Da für diesen Parameterbereich durch die lineare Stabilitätsanalyse analytische Vorhersagen zur Verfügung stehen, konnten wir diese zur statistischen Validierung unserer Numerik benutzen. Dazu wurde für mehrere Szenarien durch Parameter-scans numerisch der Bifurkationspunkt bestimmt, an dem die Wärmeübertragung von Konduktion zu Konvektion umschlägt, und mit dem analytisch vorhergesagten Wert verglichen. Die Abweichung zwischen den Werten beträgt in allen untersuchten Fällen unter 5 %, was wir als eine erste Validierung unserer Numerik verbuchen.

Die Validierung der Numerik wurde in Abschnitt 3.6 weiter ausgeführt. Insbesondere wurde betrachtet, wie die Felder gemäß des *penalization*-Ansatzes innerhalb der maskierten Regionen gedämpft werden; die Größenordnungen der gedämpften Felder wurden durch Literaturangaben bestätigt. Des Weiteren wurde die Auflösung der Felder durch das diskrete Gitter der Numerik näher untersucht. Dazu wurde ein auf die Kolmogorov-Länge aufbauendes Auflösungskriterium definiert und es wurde sichergestellt, dass dieses Kriterium sowohl im zeitlichen Verlauf als auch in allen Bereichen des Fluids stets erfüllt ist. Dabei zeigte sich, dass besonderes Augenmerk auf die Auflösung der Grenzschichten gerichtet werden muss, da hier das Auflösungskriterium am ehesten verletzt wird. Schließlich wurden die Bedingungen, die das Geschwindigkeitsfeld an *no slip*- und spannungsfreien Rändern erfüllen muss, im laminaren Regime untersucht und bestätigt.

Die bisherigen Untersuchungen bezogen sich auf Simulationen, bei denen in horizontaler Richtung periodische Randbedingungen vorliegen. Jedoch wurde in Kapitel 2 auch kurz eine Möglichkeit skizziert, mit der wärmeisolierende Seitenwände simuliert werden können. In Abschnitt 3.7 wurden als ein *proof of principle* Visualisierungen von Simulationen mit solchen *no flux*-Wänden gezeigt. Dabei wurde sowohl das turbulente als auch das laminare Regime gezeigt, wobei sich in letzterem interessante Strukturbildungseffekte beobachten ließen. Des Weiteren wurde die Möglichkeit der Simulation ausgefallener Geometrien am Beispiel eines elliptischen Zylinders gezeigt.

An dieser Stelle sei nochmal explizit auf die Videos der beiliegenden DVD hingewiesen. Im Laufe dieser Diplomarbeit hat sich die Betrachtung von Visualisierungen und der in ihnen zu findenden Details als außerordentlich hilfreich und intuitionsbildend erwiesen. Zusammen mit den vielen Darstellungen sollte dieses Kapitel damit einen ersten Einblick in das Rayleigh-Bénard-System vermitteln und auf die tiefergehenden theoretischen Ansätze des folgenden Kapitels vorbereiten.

4 Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Entwicklungsgleichungen

Statistical thinking will one day be as necessary for efficient citizenship as the ability to read or write.

(H. G. Wells, 1954)

In diesem Kapitel wird eine Entwicklungsgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung von Temperatur und Geschwindigkeit hergeleitet und diskutiert. Dazu benutzen wir ein Konzept, das in den 1960er Jahren für die Geschwindigkeits-PDF der Navier-Stokes-Gleichung erarbeitet wurde, und erweitern es auf unsere Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen. Die Ergebnisse dieses Kapitels sind in Zusammenarbeit mit Michael Wilczek entstanden und in [LWF11] veröffentlicht worden.

4.1 Einführung

Die Grundzüge des Verfahrens, das in diesem Kapitel benutzt werden soll, gehen auf drei Veröffentlichungen von T. S. Lundgren [Lun67], A. S. Monin [Mon67] und E. A. Novikov [Nov68] zurück, weswegen das Verfahren, wie in [Wil10] vorgeschlagen, als die *LMN-Hierarchie* bezeichnet werden soll. Innerhalb dieser Methode wird eine Entwicklungsgleichung, also eine partielle Differentialgleichung, für eine Einpunkt-PDF direkt aus den Grundgleichungen hergeleitet. Diese Gleichung enthält *ungeschlossene* Terme, d. h. Terme, die man *a priori* nicht berechnen kann. Gemäß des Hierarchie-Gedankens kann man diese Terme behandeln, indem man sie durch eine Kopplung an die Zweipunkt-PDF ausdrückt; dadurch erhält man jedoch auch eine Entwicklungsgleichung für diese Zweipunkt-PDF, die wiederum ungeschlossene Terme enthält. Diese ungeschlossenen Terme behandelt man über die Dreipunkt-PDF und erhält so eine weitere Entwicklungsgleichung für diese Dreipunkt-PDF, etc. Diese Hierarchie von Entwicklungsgleichungen von Mehrpunkt-PDFs setzt sich beliebig weit fort.

Unser Ansatz besteht nun darin, diese unendliche Hierarchie auf einer beliebigen Stufe abzubrechen, indem die ungeschlossenen Terme durch bedingte Mittelwerte ausgedrückt werden. Diese bedingten Mittelwerte sind zwar immer noch ungeschlossen, d. h. man kann sie nicht direkt durch Kenntnis der Grundgleichungen ausdrücken. Jedoch kann

man bedingte Mittelwerte leicht mittels DNS bestimmen, wofür wir den in Kapitel 2 entwickelten Simulationscode benutzen. Dieser Ansatz ist in [WF09] für die Vortizitäts-PDF und in [WDF10] für die Geschwindigkeits-PDF der Navier-Stokes-Gleichung benutzt worden und soll hier auf die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen ausgeweitet werden.

Das Kapitel ist folgendermaßen aufgebaut: Zunächst wird in Abschnitt 4.2 die Entwicklungsgleichung der Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung hergeleitet, deren Komplexität dann durch statistische Symmetrien reduziert wird. Dieses volle Problem der Verbund-PDF wird dann weiter heruntergebrochen auf die Temperatur-PDF, die in Abschnitt 4.3 behandelt wird. Dort werden die Temperatur-PDF und die bedingten Mittelwerte aus der Numerik extrahiert und diskutiert, und es wird ein Weg gezeigt, die Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF zu lösen. In Abschnitt 4.4 werden kurz einige Verknüpfungen zum Wärmetransport und zu anderen in der Literatur zu findenden Methoden dargestellt. In Abschnitt 4.5 wird schließlich eine Zusammenfassung gegeben.

4.2 Eine Entwicklungsgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung

Wir möchten eine Entwicklungsgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeit $f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t)$ herleiten. Diese PDF $f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t)$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der man zum Zeitpunkt t am Ort \mathbf{x} die Temperatur τ und die Geschwindigkeit \mathbf{v} vorfindet. Die Notation deutet dabei einen Unterschied zwischen den Ereignisraum- oder *sample space*-Variablen τ und \mathbf{v} und den Koordinaten \mathbf{x} und t an – die PDF ist bezüglich τ und \mathbf{v} normiert, also $\int d\tau d^3v f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t) = 1$, während die Koordinaten nur Parameter sind.

Die PDF $f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t)$ lässt sich als ein Mittel über die sogenannte *feinkörnige Verteilung*

$$\hat{f}(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t) = \delta(\tau - T(\mathbf{x}, t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \quad (4.1)$$

erhalten. Dabei sind $T(\mathbf{x}, t)$ und $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ einzelne Realisierungen des Temperatur- und Geschwindigkeitsfeldes. Damit kann man die feinkörnige Verteilungsfunktion \hat{f} als die Wahrscheinlichkeit einer speziellen Realisierung der Felder verstehen: $\hat{f}(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t)$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, am Ort \mathbf{x} zur Zeit t die Temperatur $T(\mathbf{x}, t)$ und die Geschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ vorzufinden.

Zur vollen Wahrscheinlichkeitsverteilung f gelangt man, indem man über alle möglichen Realisierungen des Temperatur- und Geschwindigkeitsfeldes mittelt, also das Ensemble-Mittel $\langle \cdot \rangle$ der feinkörnigen Verteilung berechnet:

$$f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t) = \langle \hat{f}(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t) \rangle = \langle \delta(\tau - T(\mathbf{x}, t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \rangle \quad (4.2)$$

Dies ist eine Definition der PDF, mit der wir gut umgehen können, da sie die tatsächlichen Realisierungen $T(\mathbf{x}, t)$ und $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ enthält, die den Oberbeck-Boussinesq-Grundgleichungen gehorchen.

4.2.1 Ableitungen der feinkörnigen Verteilung

Als nächsten Schritt möchten wir die Verteilungsfunktionen so bearbeiten, dass man die Grundgleichungen einsetzen kann. Dazu berechnen wir zunächst den Gradienten der feinkörnigen Verteilung, der in Indexschreibweise

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \hat{f} = \delta(v - u(x, t)) \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\tau - T(x, t)) + \delta(\tau - T(x, t)) \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(v - u(x, t)) \quad (4.3a)$$

$$= - \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial T(x, t)}{\partial x_i} \hat{f} + \nabla_v \cdot \frac{\partial u(x, t)}{\partial x_i} \hat{f} \right] \quad (4.3b)$$

lautet. Dabei wurde für die zweite Gleichheit die Kettenregel der Differentiation und die Tatsache ausgenutzt, dass die *sample space*-Variablen τ, v nicht von x_i und die Realisierungen T, u nicht von den *sample space*-Variablen abhängen, was ein Umsortieren der Terme erlaubt. Zu beachten ist also, dass die Ableitungen nach x_i auf die Realisierung wirken, während die Ableitungen nach den *sample space*-Variablen auf \hat{f} wirken. Eine völlig analoge Rechnung ergibt die zeitliche Ableitung der feinkörnigen Verteilung als

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{f} = - \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \hat{f} + \nabla_v \cdot \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \hat{f} \right] \quad (4.4)$$

Da keine Verwechslungen zu befürchten sind, werden im Folgenden die Abhängigkeiten der verschiedenen Funktionen ausgelassen.

Multiplizieren wir den Gradienten (4.3b) mit u_i , beachten die Einstein'sche Summenkonvention und addieren die zeitliche Ableitung (4.4), erhalten wir für die feinkörnige Verteilung die Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{f} + u \cdot \nabla \hat{f} = - \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) \hat{f} + \nabla_v \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) \hat{f} \right] \quad (4.5a)$$

$$= - \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \Delta T \hat{f} + \nabla_v \cdot (-\nabla p + \text{Pr} \Delta u + \text{Pr} \text{Ra} T e_z) \hat{f} \right] \quad (4.5b)$$

Dabei wurden im zweiten Schritt die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen (1.9) eingesetzt, da die Terme in runden Klammern in (4.5a) genau den Linke-Hand-Seiten dieser Gleichungen entsprechen – bei T und u handelt es sich ja um Realisierungen der Felder, die den Grundgleichungen gehorchen sollen. Wir haben die entdimensionalisierten Versionen der Gleichungen benutzt, weil diese kompakter aufzuschreiben sind; eine Umrechnung zwischen den verschiedenen Versionen stellt durch die Überlegungen in Abschnitt 1.2.5 keine Schwierigkeit dar. Wir haben nun also ausgehend von den Grundgleichungen eine Entwicklungsgleichung für die feinkörnige Verteilungsfunktion abgeleitet.

4.2.2 Ensemble-Mittel der feinkörnigen Verteilung: Das Schließungsproblem

Um zu einer Entwicklungsgleichung für die volle PDF f zu gelangen, müssen wir nun das Ensemble-Mittel der Entwicklungsgleichung (4.5) der feinkörnigen Verteilung \hat{f} berechnen:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T \hat{f} \rangle - \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \langle (-\nabla p + \text{Pr} \Delta \mathbf{u} + \text{Pr} \text{Ra} T \mathbf{e}_z) \hat{f} \rangle \quad (4.6)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass das Ensemble-Mittel eine lineare Operation ist und mit den zeitlichen und räumlichen Ableitungen und den Ableitungen nach den *sample space*-Variablen vertauscht. Des Weiteren konnte das Ensemble-Mittel $\langle \mathbf{u} \cdot \nabla \hat{f} \rangle$ des advektiven Terms wegen der Inkompressibilität des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u} und der Siebeigenschaft¹ der δ -Funktion als $\mathbf{v} \cdot \nabla f$ geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u} \cdot \nabla \hat{f} \rangle &= \langle \nabla \cdot (\mathbf{u} \hat{f}) \rangle = \langle \nabla \cdot (\mathbf{v} \hat{f}) \rangle \\ &= \langle \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{f} \rangle = \mathbf{v} \cdot \nabla \langle \hat{f} \rangle = \mathbf{v} \cdot \nabla f \end{aligned} \quad (4.7)$$

In (4.6) tritt nun das sogenannte *Schließungsproblem* zu Tage, da die verbleibenden Ensemble-Mittelwerte nicht als eine Funktion rein von τ und \mathbf{v} ausgedrückt werden können. Diese Terme sind somit *ungeschlossen*, da man sie nicht aus dieser Gleichung allein bestimmen kann; zu ihrer Behandlung muss man also zusätzlichen *input* in die Gleichung hineingeben. Diese ungeschlossenen Terme kann man auf verschiedene Weisen behandeln.

Die LMN-Hierarchie

Der Hierarchie-Ansatz, der in den ursprünglichen Arbeiten zur sog. LMN-Hierarchie [Lun67, Mon67, Nov68] benutzt wurde, behandelt die ungeschlossenen Terme, indem sie durch eine Kopplung an die Zweipunkt-PDF² f_2 ausgedrückt werden. Bei Kenntnis von f_2 hat man damit die ungeschlossenen Terme in (4.6) geschlossen.³

Um allerdings f_2 bestimmen zu können, muss für die Zweipunkt-PDF eine weitere Entwicklungsgleichung der Form $\frac{\partial}{\partial t} f_2 + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} f_2 + \mathbf{v}_2 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_2} f_2 = \dots$ gelöst werden. Diese Entwicklungsgleichung enthält wiederum ungeschlossene Terme der Form $\langle \dots \hat{f}_2 \rangle$, die sich durch eine Kopplung an die Dreipunkt-PDF f_3 behandeln lassen, was eine weitere

¹Die Siebeigenschaft der δ -Funktion lautet allgemein $g(x) \delta(x-a) = g(a) \delta(x-a)$.

²Die Zweipunkt-PDF $f_2 = f_2(\tau_1, \mathbf{v}_1, \tau_2, \mathbf{v}_2; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, an zwei verschiedenen Orten $\mathbf{x}_{1,2}$ jeweils die Temperaturen $\tau_{1,2}$ und die Geschwindigkeiten $\mathbf{v}_{1,2}$ zu finden.

³Eine exakte Berechnung dieser Terme würde hier den Rahmen sprengen und soll deshalb nicht durchgeführt werden; in [Dai09] wurde beispielsweise für die Navier-Stokes-Gleichung die Kopplung des Terms $\langle -\nabla p \hat{f} \rangle$ an die Zweipunkt-PDF berechnet.

Entwicklungsgleichung für f_3 nötig macht, etc. Es zeigt sich allgemein, dass sich die ungeschlossene Entwicklungsgleichung der n -Punkt-PDF f_n durch eine Kopplung an die $n+1$ -Punkt-PDF f_{n+1} sowie durch Einführung einer Entwicklungsgleichung für f_{n+1} behandeln lässt. Man erhält also eine unendliche Hierarchie von Mehrpunkt-PDFs und der zugehörigen Gleichungen.

Es ist natürlich unmöglich, diese Hierarchie von unendlich vielen Gleichungen zu lösen. Eine Möglichkeit, diese Hierarchie näherungsweise zu behandeln, ist es, auf einer beliebigen Ebene der Hierarchie die ungeschlossenen Terme durch geeignete Ansätze zu modellieren und damit zu schließen, wie z. B. von Pope durchgeführt [Pop84]. Wir verfolgen jedoch den Ansatz, die ungeschlossenen Terme durch bedingte Mittelwerte auszudrücken und diese aus DNS-Daten zu bestimmen, da wir so im Gegensatz zum Modellieren nicht auf Näherungen angewiesen sind.

4.2.3 Einführung von bedingten Mittelwerten

Man kann die in (4.6) verbleibenden Ensemble-Mittel durch bedingte Mittelwerte ausdrücken. Allgemein kann man einen Mittelwert der Form $\langle A \hat{f} \rangle$ für eine beliebige Größe A gemäß

$$\langle A \hat{f} \rangle = \int dA \int dT d^3u g(A, T, \mathbf{u}) A \delta(\tau - T) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \quad (4.8a)$$

$$= \int dA g(A, \tau, \mathbf{v}) A = f(\tau, \mathbf{v}) \int dA \frac{g(A, \tau, \mathbf{v})}{f(\tau, \mathbf{v})} A \quad (4.8b)$$

$$= f(\tau, \mathbf{v}) \int dA p(A|\tau, \mathbf{v}) A = \langle A|\tau, \mathbf{v} \rangle f(\tau, \mathbf{v}) \quad (4.8c)$$

in einen bedingten Mittelwert umformulieren; dabei ist $g(A, T, \mathbf{u})$ die Verbundwahrscheinlichkeit von A , T und \mathbf{u} , und $p(A|\tau, \mathbf{v})$ ist die bedingte Wahrscheinlichkeit, dass A unter der Voraussetzung von τ , \mathbf{v} eintritt. Die Abhängigkeit der verschiedenen Größen von den Koordinaten \mathbf{x} , t wurde hier aus Gründen der Übersichtlichkeit unterdrückt.

Damit kann man die ungeschlossenen Terme in (4.6) durch die bedingten Mittelwerte

$$\langle \Delta T \hat{f} \rangle = \langle \Delta T|\tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \quad (4.9a)$$

$$\langle -\nabla p \hat{f} \rangle = \langle -\nabla p|\tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \quad (4.9b)$$

$$\langle \Delta \mathbf{u} \hat{f} \rangle = \langle \Delta \mathbf{u}|\tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \quad (4.9c)$$

$$\langle T \hat{f} \rangle = \langle T|\tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f = \tau f \quad (4.9d)$$

ausdrücken, wobei zu beachten ist, dass man $\langle T \hat{f} \rangle$ exakt berechnen kann und dass alle bedingten Mittelwerte zusätzlich vom Ort \mathbf{x} und von der Zeit t abhängen. Die Abhängigkeiten von $f = f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t)$ und analog \hat{f} wurden dabei ausgelassen.

Setzen wir diese bedingten Mittelwerte in (4.6) ein, können wir schließlich die Entwicklungsgleichung der Einpunkt-PDF als

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f + \mathbf{v} \cdot \nabla f = & - \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\langle \Delta T | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \right] \\ & - \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left[\left(\langle -\nabla p | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle + \text{Pr} \langle \Delta \mathbf{u} | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle + \text{Pr} \text{Ra} \tau \mathbf{e}_z \right) f \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

angeben. Die Entwicklungsgleichung enthält drei ungeschlossene Terme in Form von bedingten Mittelwerten. Diese Mittelwerte hängen wie die PDF auch von insgesamt acht Variablen ab, was es sehr schwierig macht, sie mittels DNS zu bestimmen; die benötigte Datenmenge zum Schätzen der Mittelwerte steigt exponentiell mit der Anzahl der Variablen, von denen die Mittelwerte abhängen. Deswegen muss die Entwicklungsgleichung zunächst noch weiter bearbeitet werden, um sie für die Numerik zugänglich zu machen.

4.2.4 Statistische Symmetrien

Die Strömungskonfiguration, für die wir uns interessieren, unterliegt gewissen Symmetrien. Diese Symmetrien gelten dabei im statistischen Sinne, d. h. eine einzelne Realisierung der Felder $T(\mathbf{x}, t)$ und $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ wird diese Symmetrien nicht aufweisen; sie gelten vielmehr nur im Ensemble-Mittel. Diese Symmetrien wollen wir nun nutzen, um gemittelte Größen vereinfachen zu können.

Unser System weist eine ausgezeichnete Richtung aus, nämlich die vertikale \mathbf{e}_z -Richtung; die horizontalen Richtungen sind gleichberechtigt. Das bedeutet, dass wir in horizontalen Ebenen Homogenität und Isotropie ausnutzen können. Gleichzeitig interessieren wir uns für die statistisch stationäre Situation, in der alle Zeitpunkte gleichberechtigt sind. Im folgenden Abschnitt wollen wir uns anschauen, wie sich diese drei Symmetrien auf eine beliebige gemittelte vektorielle Größe $\mathbf{a}(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t)$ auswirken, die von Geschwindigkeit, Position und Zeit abhängt.

Homogenität

Homogenität in horizontalen Ebenen bedeutet, dass Größen sich bei Translation in horizontaler Richtung nicht ändern; bei Einpunkt-Größen, wie sie bei uns vorliegen, heißt das, dass sie nicht von den horizontalen Koordinaten abhängen können, also gilt

$$\mathbf{a}(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t) = \mathbf{a}(\mathbf{v}, z, t) \quad . \quad (4.11)$$

Isotropie

Eine Größe ist isotrop in horizontalen Ebenen, wenn sie invariant unter Drehungen in der Ebene ist; alle Richtungen in der horizontalen Ebene sind gleichberechtigt. Für skalare Größen bedeutet das, dass sie nur vom Betrag, nicht aber von der Richtung der horizontalen Geschwindigkeitskomponente abhängen können; die Abhängigkeit von der Geschwindigkeit in vertikaler z -Richtung bleibt erhalten.

4.2 Eine Entwicklungsgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung

Eine vektorielle Größe wie \mathbf{a} , die isotrop bezüglich der horizontalen Richtungen sein soll und von der Geschwindigkeit abhängt, lässt sich als

$$\mathbf{a}(\mathbf{v}, z, t) = \mathbf{a}(v_h, v_z, z, t) \quad (4.12)$$

schreiben (vgl. z. B. [Bat93, S. 43]), wobei v_h und v_z die Geschwindigkeitskomponenten in horizontaler und vertikaler Richtung sind. Der dreikomponentige Vektor \mathbf{a} kann dann in Richtung der aus dem Geschwindigkeitsvektor \mathbf{v} gebildeten Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{v}}_h$, $\hat{\mathbf{v}}_z$ und $\hat{\mathbf{v}}_\varphi = \hat{\mathbf{v}}_h \times \hat{\mathbf{v}}_z$, also in horizontale, vertikale und azimutale Richtung zeigen. Der Vektor \mathbf{a} lässt sich damit in der Form

$$\mathbf{a}(v_h, v_z, z, t) = a_h(v_h, v_z, z, t) \hat{\mathbf{v}}_h + a_z(v_h, v_z, z, t) \hat{\mathbf{v}}_z + a_\varphi(v_h, v_z, z, t) \hat{\mathbf{v}}_\varphi \quad (4.13)$$

schreiben, wobei die horizontale, vertikale und azimutale Komponente (hier mit a_h , a_z und a_φ bezeichnet) wegen der Orthogonalität der obigen Einheitsvektoren durch Projektion auf die jeweilige Richtung erhalten werden kann.

Stationarität

Bei Stationarität sind Größen invariant unter Zeittranslation. Werden wie bei uns die Größen nur an einem Zeitpunkt betrachtet, hängen sie also nicht von der Zeit ab, da alle Zeitpunkte äquivalent sind; der Vektor \mathbf{a} vereinfacht sich somit weiter zu

$$\mathbf{a}(v_h, v_z, z, t) = \mathbf{a}(v_h, v_z, z) \quad . \quad (4.14)$$

Anwendung auf bedingte Mittelwerte und PDF

Wendet man diese drei statistischen Symmetrien auf die bedingten Mittelwerte (4.9) an, vereinfachen sie sich durch die Ausnutzung von Stationarität, Homogenität und Isotropie schrittweise zu

$$\langle -\nabla p | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle = \langle -\nabla p | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle \quad (4.15a)$$

$$= \langle -\nabla p | \tau, \mathbf{v}, z \rangle \quad (4.15b)$$

$$= \langle -\hat{\mathbf{u}}_h \cdot \nabla p | \tau, v_h, v_z, z \rangle \hat{\mathbf{v}}_h + \langle -\hat{\mathbf{u}}_z \cdot \nabla p | \tau, v_h, v_z, z \rangle \hat{\mathbf{v}}_z + \langle -\hat{\mathbf{u}}_\varphi \cdot \nabla p | \tau, v_h, v_z, z \rangle \hat{\mathbf{v}}_\varphi \quad (4.15c)$$

hier am Beispiel des Druckgradienten (also einer vektoriellen Größe) gezeigt. Im letzten Schritt wurden die einzelnen Komponenten durch Projektion auf die Einheitsvektoren bestimmt; aufgrund der Definition der bedingten Mittelwerte und der Siebeigenschaft der δ -Funktion kann des Weiteren der Einheitsvektor $\hat{\mathbf{v}}_h$ als $\hat{\mathbf{u}}_h$ in den bedingten Mittelwert hineingezogen werden, $\hat{\mathbf{u}}_z$, $\hat{\mathbf{u}}_\varphi$ analog.

Für die restlichen bedingten Mittelwerte ergeben sich mit der Abkürzung $\star \hat{=} \tau, v_h, v_z, z$ die Ausdrücke

$$\langle \Delta T | \tau, v_h, v_z, z \rangle =: \Theta(\tau, v_h, v_z, z) \quad (4.16a)$$

$$\begin{aligned} \langle -\nabla p | \tau, v_h, v_z, z \rangle &= \langle -\hat{u}_h \cdot \nabla p | \star \rangle \hat{v}_h + \langle -\hat{u}_z \cdot \nabla p | \star \rangle \hat{v}_z + \langle -\hat{u}_\varphi \cdot \nabla p | \star \rangle \hat{v}_\varphi \\ &=: \Pi_h(\star) \hat{v}_h + \Pi_z(\star) \hat{v}_z + \Pi_\varphi(\star) \hat{v}_\varphi \end{aligned} \quad (4.16b)$$

$$\begin{aligned} \langle \Delta \mathbf{u} | \tau, v_h, v_z, z \rangle &= \langle \hat{u}_h \cdot \Delta \mathbf{u} | \star \rangle \hat{v}_h + \langle \hat{u}_z \cdot \Delta \mathbf{u} | \star \rangle \hat{v}_z + \langle \hat{u}_\varphi \cdot \Delta \mathbf{u} | \star \rangle \hat{v}_\varphi \\ &=: \Lambda_h(\star) \hat{v}_h + \Lambda_z(\star) \hat{v}_z + \Lambda_\varphi(\star) \hat{v}_\varphi, \end{aligned} \quad (4.16c)$$

wobei die Abkürzungen Θ sowie $\Pi_{h,z,\varphi}$ und $\Lambda_{h,z,\varphi}$ für die bedingten Mittelwerte bzw. deren horizontale, vertikale und azimutale Komponenten eingeführt wurden.

Auf die Verbund-PDF $f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t)$ als gemittelte Größe kann man natürlich die gleichen Symmetrieüberlegungen anwenden. Geht man zunächst von der PDF $g(\mathbf{v})$ der vollen Geschwindigkeit zur PDF $\tilde{g}(v_h, v_z)$ der Komponenten über, hängen diese gemäß

$$\tilde{g}(v_h, v_z) = 2\pi v_h g(\mathbf{v}) \quad (4.17)$$

zusammen, was man sich z. B. durch den Vergleich zu Zylinderkoordinaten leicht klar machen kann. Des Weiteren bleibt für die Verbund-PDF von der Orts- und Zeitabhängigkeit nur die z -Abhängigkeit erhalten. Wir erhalten also

$$\tilde{f}(\tau, v_h, v_z; z) = 2\pi v_h f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t) \quad (4.18)$$

als die Verbund-PDF der Temperatur und der Geschwindigkeitskomponenten. Durch Ausnutzung der statistischen Symmetrien hängen die bedingten Mittelwerte und die PDF nur noch von vier statt von acht Variablen ab.

Die Entwicklungsgleichung unter statistischen Symmetrien

Da die PDF und die bedingten Mittelwerte nur noch von τ, v_h, v_z und z abhängen, fallen viele Terme in der bisherigen Bewegungsgleichung (4.10) der PDF weg. Auf der linken Seite verschwindet zunächst die Zeitableitung $\frac{\partial}{\partial t} f$, und vom advektiven Term $\mathbf{v} \cdot \nabla f$ bleibt nur der z -Anteil $v_z \frac{\partial}{\partial z} f$ übrig. Ersetzt man gemäß (4.18) die PDF f durch \tilde{f} und formuliert die Divergenz bezüglich \mathbf{v} in Zylinderkoordinaten, erhält man nach einigen trivialen Umformungsschritten die Entwicklungsgleichung von \tilde{f} :

$$\begin{aligned} v_z \frac{\partial}{\partial z} \tilde{f} &= - \frac{\partial}{\partial \tau} [\Theta \tilde{f}] - \text{PrRa} \tau \frac{\partial}{\partial v_z} \tilde{f} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial v_h} [(\Pi_h + \text{Pr}\Lambda_h) \tilde{f}] - \frac{\partial}{\partial v_z} [(\Pi_z + \text{Pr}\Lambda_z) \tilde{f}] \end{aligned} \quad (4.19)$$

Die bedingten Mittelwerte können zwar in azimutale Richtung zeigen, hängen aber nicht von der azimutalen Geschwindigkeit v_φ ab (vgl. (4.16)); deswegen fallen alle azimutalen Terme bei der Divergenzbildung bezüglich v weg.

An den Rändern des Fluidvolumens (im entdimensionalisierten Fall also bei $z = 0$ und $z = 1$) sind sowohl Temperatur als auch Geschwindigkeit fest vorgegeben, was sich in den Randwerten

$$\tilde{f}(\tau, v_b, v_z; z=0) = \delta(\tau - 1/2) \delta(v_b) \delta(v_z) \quad (4.20a)$$

$$\tilde{f}(\tau, v_b, v_z; z=1) = \delta(\tau + 1/2) \delta(v_b) \delta(v_z) \quad (4.20b)$$

der PDF widerspiegelt. Es sei hier betont, dass in der Herleitung keine Näherungen gemacht wurden und dass die obigen Gleichungen unter der Voraussetzung der geforderten Symmetrien exakt sind. Bei gegebenen Ausdrücken für die bedingten Mittelwerte hätten wir nun also eine Gleichung, die die Form unserer Verbundverteilungsfunktion \tilde{f} vollständig bestimmt.

Leider kann man *a priori* nicht sagen, wie die bedingten Mittelwerte aussehen, da es sich bei ihnen wie oben besprochen um ungeschlossene Terme handelt. Wir sind also darauf angewiesen, die Form der Mittelwerte entweder zu modellieren oder durch DNS-Daten zu schätzen, wobei wir letzteren Ansatz verfolgen. Durch Symmetrieüberlegungen konnten wir zwar die Abhängigkeiten der statistischen Größen von acht auf vier Variablen reduzieren, was allerdings nichts am Grundproblem ändert, dass man zum verlässlichen Schätzen dieser hochdimensionalen Größen immense Datenmengen benötigt. Deswegen werden wir zunächst die Problemstellung weiter vereinfachen, um sie für die Numerik zugänglich zu machen.

4.3 Die Temperatur-PDF

Im Folgenden werden wir unsere Aufmerksamkeit auf die Verteilungsfunktion der Temperatur und die dazugehörige Entwicklungsgleichung richten. Wie sich zeigen wird, werden viele Eigenschaften von Rayleigh-Bénard-Konvektion schon durch diese Gleichung hinreichend beschrieben, und die verringerte Dimensionalität des Problems ermöglicht die Bestimmung der ungeschlossenen Terme durch die Numerik.

4.3.1 Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF

Die PDF der Temperatur ist schon in der Verbund-PDF von Temperatur und Geschwindigkeit enthalten; man gelangt zur Temperatur-PDF, indem man den Geschwindigkeitsanteil „ausintegriert“. Die Temperatur-PDF unterliegt dabei den gleichen Symmetrieüberlegungen, sodass wir

$$h(\tau; z) = \int d^3v f(\tau, v; z) = \int dv_b dv_z \tilde{f}(\tau, v_b, v_z; z) \quad (4.21)$$

als die Verteilungsfunktion der Temperatur erhalten. Dabei spielt es keine Rolle, ob h aus f oder \tilde{f} erhalten wird.

Integriert man die bisherige Bewegungsgleichung (4.19) für \tilde{f} über die Geschwindigkeiten und führt die bedingt gemittelte z -Geschwindigkeit ein, erhält man die Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial z} [\langle u_z | \tau, z \rangle h] = -\frac{\partial}{\partial \tau} [\langle \Delta T | \tau, z \rangle h] \quad (4.22)$$

für die Temperatur-PDF $h(\tau; z)$. Da die Rechnung etwas länglich ist, ist es alternativ auch möglich, die in Abschnitt 4.2 durchgeführte Herleitung für die feinkörnige Temperaturverteilung $\hat{h}(\tau; \mathbf{x}, t) = \delta(\tau - T(\mathbf{x}, t))$ zu wiederholen.

Die Temperatur-PDF wird also durch die bedingt gemittelte vertikale Geschwindigkeit und die bedingt gemittelte Wärmediffusion bestimmt. Analog zu (4.20) müssen am Rand die Werte $h(\tau; z=0) = \delta(\tau - 1/2)$ und $h(\tau; z=1) = \delta(\tau + 1/2)$ angenommen werden. Aus der Numerik bestimmte Messwerte werden im folgenden Abschnitt 4.3.2 vorgestellt.

Lösen wir uns aber zunächst etwas von den theoretischen Herleitungen und betrachten die beiden verbleibenden Mittelwerte $\langle u_z | \tau, z \rangle$ und $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ mit physikalischer Intuition. Denken wir an turbulente Konvektion, die durch Auftriebskräfte angetrieben wird, können wir bestimmte Merkmale von diesen beiden Mittelwerten erwarten: Die bedingt gemittelte vertikale Geschwindigkeit sollte positiv mit der Temperatur korreliert sein, was der natürlich wohlbekannten Tatsache entspricht, dass heißes Fluid aufsteigt und kaltes Fluid herabsinkt. Des Weiteren sollten die Berandungen des Fluids bei $z \gtrsim 0$ und $z \lesssim 1$ durch eine verschwindende vertikale Geschwindigkeit erkennbar sein, da die Ränder für das Fluid undurchdringlich sind. Der Betrag des Wärmediffusionsterms $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ sollte am Rand am größten sein, da er mit einer zweiten Ableitung verknüpft ist und da sich am Rand die Temperatur von fester Wand- auf fluktuierende Fluidtemperatur stark ändert. Im nächsten Abschnitt werden diese Größen anhand von numerisch bestimmten Ergebnissen untersucht.

4.3.2 Aus DNS bestimmte Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die bedingten Mittelwerte und die Temperatur-PDF aus DNS-Daten bestimmt und diskutiert. Es werden dazu die Daten der Simulation `ra2e7_gamma4` benutzt, deren genaue Parameter in Abschnitt A.1 dargestellt werden; die dimensionslosen Parameter betragen $Ra = 2.44 \cdot 10^7$, $Pr = 1$ und $\Gamma = 4$, und die Nusselt-Zahl wird zu $Nu = 20.22$ bestimmt.

Gemäß der Herleitungen in den vorherigen Abschnitten stellen sich die gemittelten Größen als Ensemble-Mittelungen über alle möglichen Realisierungen der Geschwindigkeits- und Temperaturfelder dar. Dieses Ensemble-Mittel ist natürlich in der Praxis nicht ausführbar, da die Menge der möglichen Realisierungen überabzählbar und somit nicht durch DNS-Daten abdeckbar ist. Deswegen wird das Mittel über das volle Ensemble

durch ein kombiniertes Volumen- und Zeitmittel über eine endliche Teilmenge aller Ensemble-Mitglieder ersetzt: Aus Homogenitätsgründen können wir über horizontale Ebenen, und wegen der Stationarität gleichzeitig über mehrere Zeitschritte mitteln. Wir nehmen dabei implizit an, dass wir es mit einem ergodischen System zu tun haben.

Die hier benutzten Daten der Simulation `ra2e7_gamma4` bestehen aus 571 statistisch unabhängigen „Schnappschüssen“ der Felder, vgl. Tabelle A.3. Die PDF und die bedingten Mittelwerte werden geschätzt, indem die DNS-Daten z -aufgelöst *gebinnt* werden, d. h. alle Datenpunkte einer z -Ebene werden bezüglich der zugehörigen Temperaturwerte τ in Klassen (engl. *bins*) zerlegt. Die τ -Richtung wird mit 400 *bins* aufgelöst.

Aus DNS bestimmte Temperatur-PDF

In Abbildung 4.1 ist ein Farbdigramm der Temperatur-PDF $b(\tau; z)$ gezeigt. Die schwarze Linie entspricht dem z -abhängigen Mittelwert

$$\langle T \rangle_A = \int d\tau \tau b(\tau; z) \quad , \quad (4.23)$$

und die graue Linie steht für die Standardabweichung $\left\langle (T - \langle T \rangle_A)^2 \right\rangle_A^{1/2}$, die ebenfalls von z abhängt. Der z -aufgelöste Mittelwert und die Standardabweichung wurden bereits in Abschnitt 3.3 gezeigt. Die horizontalen gestrichelten Linien im Farbplot stehen für Schnitte durch die PDF in τ -Richtung bei festen Werten von $z \in \{\delta_T, 2\delta_T, 4\delta_T, 1/4, 1/2\}$. Dabei ist $\delta_T = \frac{1}{2N_u}$ die Dicke der thermischen Grenzschicht, vgl. z. B. [ES08]. Die eindimensionalen Temperatur-PDFs für diese festen z -Werte werden in Abbildung 4.2 gezeigt.

Im Farbdigramm kann man sehr schön sehen, wie sich die PDF innerhalb der Grenzschicht von einer δ -Funktion am Rand auf eine Verteilung mit breiteren Flügeln im sog. *bulk* (engl. für Hauptteil, Masse) ausbreitet. „Grenzschicht“ und „*bulk*“ sind dabei etwas lose definierte Begrifflichkeiten, die die unterschiedlichen Regionen am Rand und in der Mitte des Fluids beschreiben; der Übergang zwischen den beiden Gebieten findet etwa im Bereich $\delta_T \lesssim z \lesssim 4\delta_T$ statt. Neben den Flügeln der PDF ist ein weiteres deutliches Merkmal der „Höcker“ in der Nähe der $\tau = 0$ -Linie, gut durch den rötlichen Kern im Farbdigramm und in der Linien-Darstellung in Abbildung 4.2 zu erkennen. Es drängt sich die Vermutung auf, dass zwei verschiedene dynamische Effekte der Strömung für diese Form verantwortlich sind, z. B. dass der Höcker bei $\tau \approx 0$ durch das „Hintergrundfeld“ mittlerer Temperatur entsteht, und dass die Flügel für große $|\tau|$ von seltenen Ereignissen herrühren, bei denen Fluid transportiert wird, das viel heißer bzw. kälter als das umgebende Fluid ist (sog. *plumes*). Diese Vermutung wird von der Form der PDF in der Nähe der Ränder (aber noch außerhalb der Grenzschichten) unterstützt: Bei der PDF für $z = 4\delta_T$, also an der heißen Bodenplatte, ist der wahrscheinlichste Temperaturwert (das Maximum der PDF) etwas zu niedrigeren Temperaturen verschoben, während es einen breiten Flügel

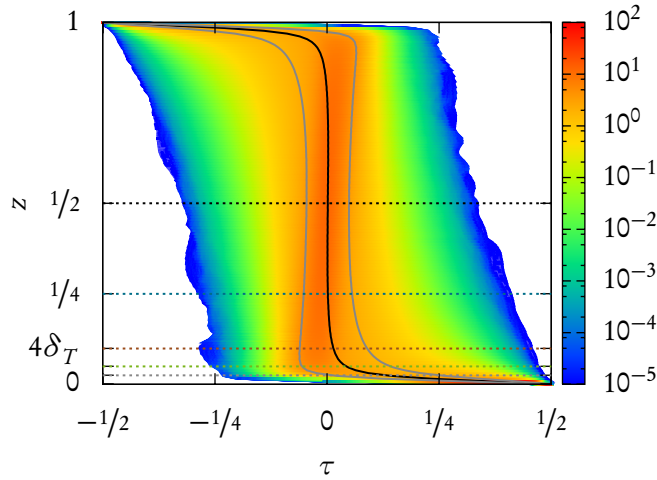
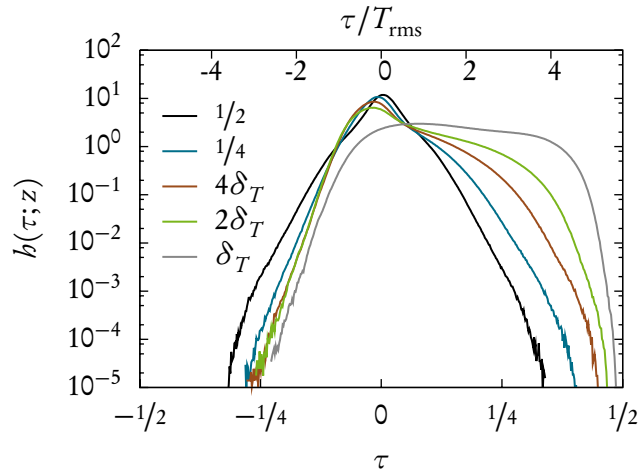


Abbildung 4.1: Farblich koordinierte, logarithmisch dargestellte Temperatur-PDF $h(\tau; z)$. Die durchgezogene schwarze Linie markiert den Mittelwert der Temperatur, die graue die Standardabweichung; die gestrichelten Linien symbolisieren Schnitte in τ -Richtung, vgl. Text.
[ra2e7_gamma4]

Abbildung 4.2: Temperatur-PDF $h(\tau; z)$ in logarithmischer Darstellung für verschiedene, feste z -Werte, vgl. Text und Abbildung 4.1. Die obere Abszisse ist durch die globale Standardabweichung der Temperatur, $T_{\text{rms}} := \sqrt{\langle T^2 \rangle_V}$, reskaliert.

[ra2e7_gamma4]



bei hohen Temperaturen gibt. Diese Beobachtung ließe sich so interpretieren, dass sich in den unteren Regionen des *bulks* größtenteils kaltes Fluid sammelt, das fast in Ruhe ist (vgl. den Bereich von $\langle u_z | \tau, z = 4\delta_T \rangle$ in Abbildung 4.4, der dem Höcker entspricht), während sehr heißes Fluid seltener auftritt, weil es wegen der *plume*-Dynamik schnell nach oben advektiert wird (u_z steigt für große τ rapide an, vgl. Abbildung 4.4). Den Grund, warum das heiße Fluid größere Temperaturwerte (bezogen auf den Absolutwert) als das kalte Fluid annimmt, kann man darin sehen, dass sich das sehr kalte Fluid, das von der oberen Platte herabsinkt, bereits auf dem Weg nach unten etwas aufgeheizt hat.

In [ES08] werden ebenfalls z -aufgelöste Temperatur-PDFs aus DNS-Daten für Rayleigh-Zahlen ähnlich unseren bestimmt.⁴ Die PDFs in den verschiedenen Höhen entsprechen

⁴Eigentlich wird in dieser Referenz nicht die Temperatur betrachtet, sondern die Abweichungen der Temperatur vom mittleren Temperatur-Profil $\langle T \rangle_A$. Dies bedeutet aber nur eine Verschiebung, nicht eine Änderung der Form der PDFs.

den von uns beobachteten Formen, insbesondere findet sich auch der charakteristische Höcker in der Nähe von $\tau = 0$. Gleichzeitig kann man in dieser Referenz wie auch in Abschnitt 3.4.1 erkennen, dass die PDF mit steigender Rayleigh-Zahl eine exponentiellere Form bekommt, bei der der Höcker immer weniger ausgeprägt erscheint; für die extremen Rayleigh-Zahlen von $Ra = 5.8 \cdot 10^{14}$ in [Chi93] lässt sich überhaupt kein Höcker mehr erkennen, und die gesamte PDF zeigt ein exponentielles Verhalten. An obige Interpretationen anknüpfend legt das die Vermutung nahe, dass es für steigende Rayleigh-Zahlen keine Unterscheidung mehr zwischen zwei verschiedenen Einflüssen auf die Dynamik gibt, sondern dass die Dynamik des Fluids in allen Temperatur-Bereichen *plume*-dominiert ist. Jedoch sind diese Interpretationen mit Vorsicht zu genießen, da sie sich hier nur schlecht quantitativ überprüfen lassen.

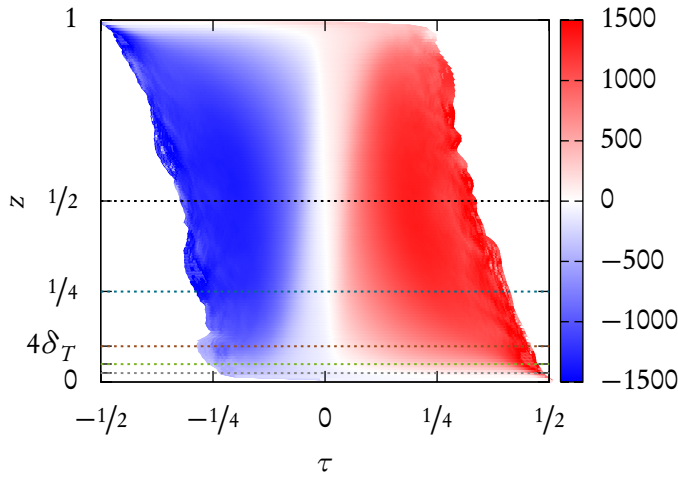
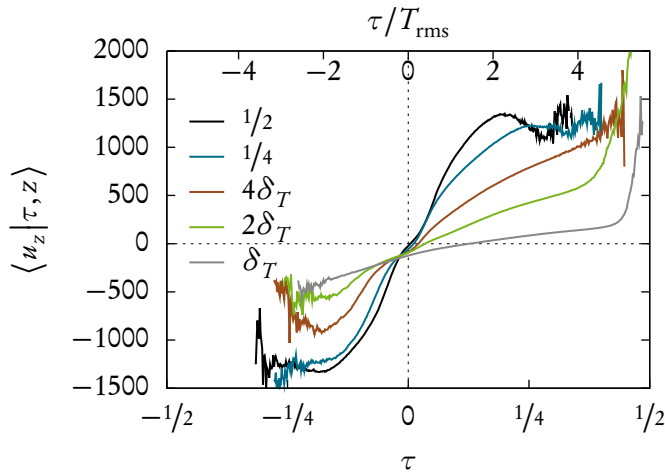


Abbildung 4.3: Farbliche Darstellung der bedingten vertikalen Geschwindigkeit $\langle u_z | \tau, z \rangle$. Wegen der Form des bedingten Mittelwertes wurde eine um 0 zentrierte Farbpalette gewählt, um Bereiche mit $\langle u_z | \tau, z \rangle \approx 0$ leichter erkennen zu können.
[ra2e7_gamma4]

Abbildung 4.4: Die bedingt gemittelte vertikale Geschwindigkeit $\langle u_z | \tau, z \rangle$ für verschiedene Werte von z . Die Zahlenwerte ergeben sich durch die Entdimensionalisierung $u \rightarrow \frac{h}{\kappa} u$, vgl. Abschnitt 1.2.5.
[ra2e7_gamma4]



Die beiden aus der Numerik bestimmten bedingten Mittelwerte

Analog zur Darstellung der Temperatur-PDF ist in Abbildung 4.3 die bedingt gemittelte vertikale Geschwindigkeit $\langle u_z | \tau, z \rangle$ in einem Farbplot gezeigt. Die gestrichelten Linien entsprechen Schnitten bei festen z -Werten, die in Abbildung 4.4 dargestellt sind.

In den Graphen lassen sich die intuitiv erwarteten Merkmale wiederfinden. Die bedingte Geschwindigkeit ist groß (klein) für heißes (kaltes) Fluid, und die *no slip*-Ränder zeigen sich dadurch, dass für $z \gtrsim 0$ und $z \lesssim 1$ die Geschwindigkeit $\langle u_z | \tau, z \rangle \approx 0$ ist. In der Farbdarstellung sieht man zusätzlich nahe der $\tau = 0$ -Linie einen Streifen verschwindender Geschwindigkeit, der mit dem rötlichen Kern der Temperatur-PDF aus Abbildung 4.1, also mit der wahrscheinlichsten Temperatur, zusammenfällt. Die Interpretation ist, dass Teile des Fluids, die die gleiche mittlere Temperatur haben wie das umgebende Fluid,

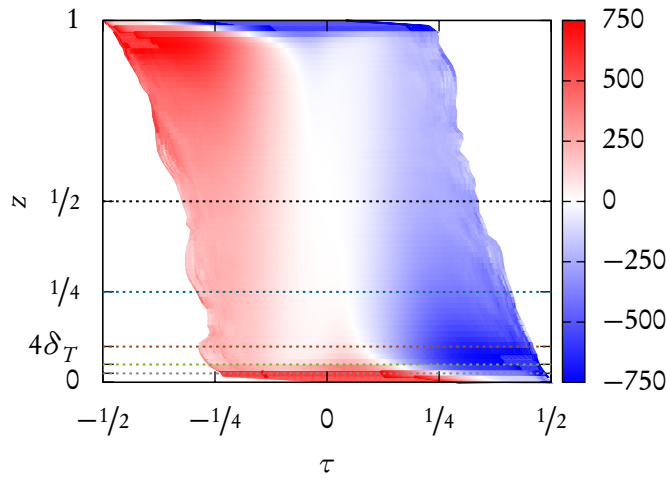
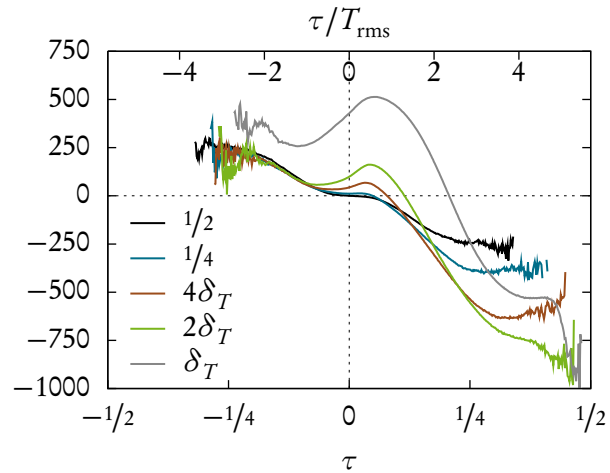


Abbildung 4.5: Farbliche Darstellung des bedingten Wärmediffusionsterms $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$. Auch hier wurde wegen des symmetrischen bedingten Mittelwertes eine um 0 zentrierte Farbpalette gewählt.

[ra2e7_gamma4]

Abbildung 4.6: Der bedingt gemittelte Wärmediffusionsterm $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ für verschiedene Werte von z . Die Ordinate ist durch die Entdimensionalisierung in Einheiten von $\frac{\delta T}{b^2}$ gegeben, vgl. Abschnitt 1.2.5.

[ra2e7_gamma4]



im Mittel keinen Auftrieb erfahren und sich damit auch nicht auf- oder abbewegen. Weiter auffällig ist der steile Anstieg der Geschwindigkeit für hohe Temperaturen nahe der Grenzschicht (vgl. die Kurven für $z = \delta_T$ und $z = 2\delta_T$ in Abbildung 4.4), den wir aufsteigenden *plumes* zuschreiben. Dies deckt sich mit den Überlegungen, dass es sich bei *plumes* um seltenere Ereignisse handelt, da dort, wo die vertikale Geschwindigkeit steil ansteigt, die Temperatur-PDF stark abfällt. Es sei hier daran erinnert, dass solche Interpretationen natürlich nur in einem gemittelten Sinne zulässig sind, da wir gemittelte Größen betrachten.

In den Abbildungen 4.5 und 4.6 ist der bedingte Wärmediffusionsterm $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ dargestellt; die Darstellung ist analog zu der von $\langle u_z | \tau, z \rangle$ in Abbildung 4.3 und 4.4 gewählt. Nebenbei bemerkt werden in beiden Darstellungen alle *bins* gezeigt, in die mindestens ein Ereignis einsortiert wurde. Über das dadurch entstehende Rauschen in den Bereichen, in denen es wenige Ereignisse gibt (also in den Flügeln der PDF), kann man „nach Augenmaß“ abschätzen, in welchen Bereichen die Statistik konvergiert ist.

Der bedingte Mittelwert $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ entspricht der von uns erwarteten Form. Nahe der Bodenplatte, etwa für $z \lesssim 4\delta_T$, zeigt der bedingt gemittelte Wärmediffusionsterm die betragsmäßig größten Werte; der Term ist dabei positiv für mittlere Temperaturen und negativ für hohe Temperaturen, vgl. den roten Streifen bei $-1/4 \lesssim \tau \lesssim 1/4$ und den blauen Bereich für $\tau \gtrsim 1/4$ in Abbildung 4.5. Die Schnitte in τ -Richtung zeigen einen Über- und Unterschwinger nahe $\tau = 0$, gut zu sehen in der Liniendarstellung in Abbildung 4.6. Die genauen Gründe für diese charakteristischen Merkmale und die Bedeutung für die Rayleigh-Bénard-Dynamik müssen noch näher untersucht und verstanden werden.

4.3.3 Methode der Charakteristiken

In den vorherigen Abschnitten wurde zunächst die Entwicklungsgleichung (4.22) für die Temperatur-PDF hergeleitet; die dort in Form der bedingten Mittelwerte $\langle u_z | \tau, z \rangle$ und $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ auftretenden ungeschlossenen Terme wurden aus der Numerik bestimmt. Zusätzlich wurde die Temperatur-PDF direkt aus der Numerik bestimmt, und die speziellen Formen der verschiedenen Terme wurden auf Merkmale und Strukturen der Fluidströmung zurückgeführt.

In diesem Abschnitt soll nun die Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF mit Hilfe der *Methode der Charakteristiken* weiter analysiert werden. Hierbei handelt es sich um ein allgemeines Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen der Form

$$a(x, t) \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) + b(x, t) \frac{\partial}{\partial t} g(x, t) + c(x, t) g(x, t) = 0 \quad ; \quad (4.24)$$

diese Form hat auch unsere Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF. Die Methode identifiziert Trajektorien im x, t -Phasenraum, entlang derer die partielle in eine gewöhnliche Differentialgleichung transformiert wird.

Ein einführendes Beispiel

Um einen Einblick in dieses Lösungsverfahren zu geben, soll es zunächst an einem einfachen Beispiel demonstriert werden; für eine mathematisch exakte Einführung sei der interessierte Leser auf die entsprechende Literatur (z. B. [CH62, Sar03]) verwiesen.

Wir betrachten die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} g(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (x g(x, t)) = 0 \quad (4.25)$$

mit der Anfangsbedingung $g(x, t=0) = g_0(x)$. Durch Anwenden der Produktregel auf $\frac{\partial}{\partial x} \dots$ sieht man leicht, dass diese partielle Differentialgleichung von der oben geforderten Form ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} g(x, t) + x \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) = -g(x, t) \quad (4.26)$$

Eine charakteristische Kurve (oder einfach Charakteristik) ist nun eine Trajektorie durch den x, t -Phasenraum, die durch $s > 0$ parametrisiert ist und entlang derer sich die partielle DGL in den Variablen x, t in eine gewöhnliche DGL in der Variablen s transformiert. Diese Trajektorien wollen wir mit $(x(s, x_0), t(s))$ bezeichnen, wobei x_0 die Anfangsbedingung für $s = 0$ darstellt, also gilt

$$x(s=0, x_0) = x_0 \quad , \quad t(s=0) = 0 \quad . \quad (4.27)$$

Die Charakteristiken „starten“ damit alle auf der $t = 0$ -Linie. Berechnen wir die totale s -Ableitung der Funktion g entlang einer Trajektorie,

$$\frac{d}{ds} g(x(s, x_0), t(s)) = \frac{dx}{ds} \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{dt}{ds} \frac{\partial g}{\partial t} \quad , \quad (4.28)$$

erhalten wir durch einen Koeffizientenvergleich mit (4.26) das DGL-System

$$\frac{dt}{ds} = 1 \quad , \quad \frac{dx}{ds} = x \quad , \quad \frac{dg}{ds} = -g \quad . \quad (4.29)$$

Wir haben nun also drei gewöhnliche Differentialgleichungen vorliegen; die ersten beiden DGLen beschreiben die Trajektorien im Phasenraum, also die Charakteristiken, und die dritte DGL beschreibt, wie sich die Funktion entlang dieser Charakteristiken verändert. In diesem Fall lassen sich diese DGLen leicht lösen:

$$t(s) = s + t(s=0) \quad \Rightarrow \quad t = s \quad (4.30a)$$

$$x(s, x_0) = x(s=0, x_0) \cdot e^s \quad \Rightarrow \quad x(t) = x_0 e^t \quad (4.30b)$$

$$g(s) = g(s=0) \cdot e^{-s} \quad \Rightarrow \quad g(x, t) = g_0(x_0) \cdot e^{-t} = g_0(xe^{-t}) \cdot e^{-t} \quad (4.30c)$$

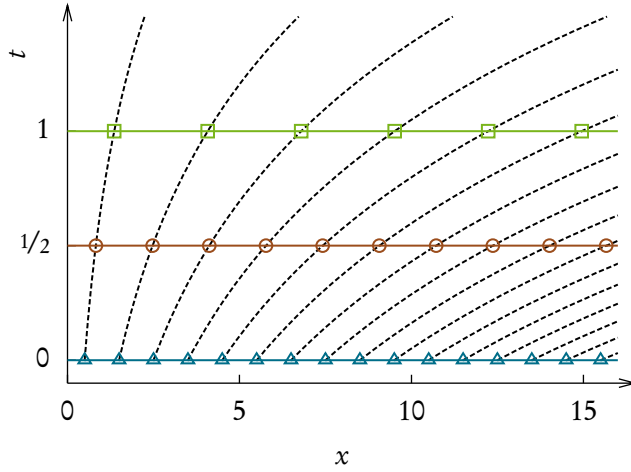


Abbildung 4.7: Einige Charakteristiken (4.30b) für die Anfangswerte $x_0 \in \{1/2, 3/2, \dots\}$ (schwarz gestrichelt). Die farbigen Linien und die Symbole auf den Charakteristiken deuten an, wie eine Anfangsbedingung entsprechend des Terms $g_0(xe^{-t})$ gestreckt wird, vgl. (4.30c). Entlang der Charakteristiken gehorcht g einer gewöhnlichen DGL (4.29) und wird exponentiell gedämpft.

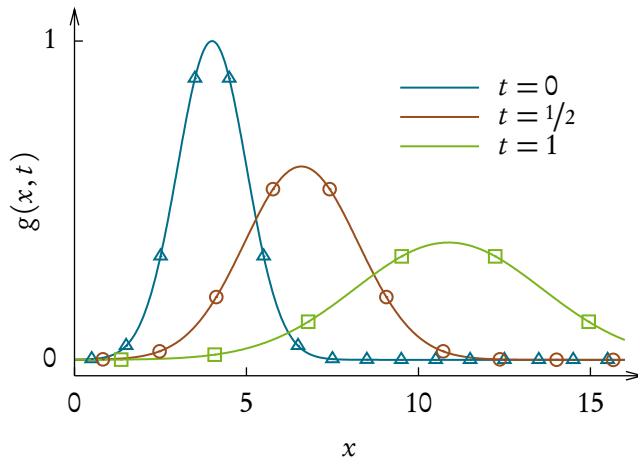


Abbildung 4.8: Lösungen $g(x, t)$ für die Anfangsbedingung $g_0(x) = e^{-\frac{(x-4)^2}{2}}$ zu verschiedenen Zeiten $t \in \{0, 1/2, 1\}$. Die farbigen Symbole entsprechen denen aus obiger Abbildung 4.7. Die Anfangsbedingung wird im Laufe der Zeit gestreckt und in der Amplitude gedämpft, vgl. (4.30c).

Im letzten Schritt in (4.30c) wurde dabei die Startposition x_0 der charakteristischen Kurve durch xe^{-t} ersetzt, da man durch (4.30b) vom Punkt x, t der Trajektorie auf den Startpunkt x_0 zurückschließen kann. Dies ist nur möglich, solange die Startposition x_0 eindeutig durch die Trajektorie bestimmt ist; sobald sich Charakteristiken also schneiden oder vereinigen, bricht die Beschreibung zusammen.⁵ In diesem Beispiel bleiben die Charakteristiken jedoch eindeutig, sodass $g(x, t) = g_0(xe^{-t}) \cdot e^{-t}$ für alle $t \geq 0$ eine Lösung der partiellen Differentialgleichung (4.25) ist.

⁵Dies ist z. B. bei der nichtviskosen Burgersgleichung $\frac{\partial}{\partial t} g + g \frac{\partial}{\partial x} g = 0$ der Fall: Hier entwickelt die Gleichung Unstetigkeitsstellen (sog. Schocks), wenn die Charakteristiken sich schneiden.

In Abbildungen 4.7 und 4.8 sind die Charakteristiken (4.30b) und die Lösung $g(x, t)$ für die Anfangsbedingung $g_0(x) = e^{-\frac{(x-4)^2}{2}}$ als Beispiel gezeigt. Man kann erkennen, wie die Anfangsbedingung in die Breite gezogen und gleichzeitig in der Höhe verringert wird. Die Dämpfung in der Höhe ist nötig, weil die zugrundeliegende DGL (4.25) eine Kontinuitätsgleichung ist, d. h. das Integral $\int dx g(x, t)$ muss eine Erhaltungsgröße sein. Die farbigen Symbole in den Abbildungen stehen für Punkte auf bestimmten Charakteristiken. An ihnen kann man sehr anschaulich die Wirkungsweise der DGL bzw. die Beschreibung dieser durch die Methode der Charakteristiken verstehen: Im zeitlichen Verlauf wandern die Punkte auf den Charakteristiken nach rechts, also wird die Anfangsbedingung in x -Richtung gestreckt. Gleichzeitig wird die Anfangsbedingung entlang der Charakteristiken exponentiell gedämpft, d. h. die Höhe der Kurve $g(x, t)$ wird verringert, was der Erhaltung des Integrals $\int dx g(x, t) = \text{const.}$ entspricht.

Die Methode der Charakteristiken lässt sich natürlich nicht für beliebige Differentialgleichungen der Form (4.24) so abschließend behandeln, wie wir es hier an diesem Beispiel gezeigt haben. Die Voraussetzung für das Gelingen dieser Methode ist, dass man das (4.29) entsprechende DGL-System lösen kann und dass man von einem Punkt x, t einer Charakteristik *eindeutig* auf den Startpunkt x_0 dieser Charakteristik zurückschließen kann. Dies ist nicht mehr möglich, wenn sich Charakteristiken im Phasenraum schneiden.

Anwendung der Methode der Charakteristiken auf die Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF

Die im vorherigen Abschnitt an einem Beispiel gezeigte Methode der Charakteristiken soll nun auf die Entwicklungsgleichung (4.22) der Temperatur-PDF angewandt werden. Dazu schreiben wir diese Gleichung zunächst unter Ausnutzung der Produktregel in der Form

$$\langle \Delta T | \tau, z \rangle \frac{\partial h}{\partial \tau} + \langle u_z | \tau, z \rangle \frac{\partial h}{\partial z} = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T | \tau, z \rangle + \frac{\partial}{\partial z} \langle u_z | \tau, z \rangle \right) h \quad . \quad (4.31)$$

Die Charakteristiken sind durch s parametrisierte Trajektorien $(\tau(s), z(s))$ im τ, z -Phasenraum, und entlang einer solchen Charakteristik berechnet sich die Ableitung der PDF $h(s) = h(\tau(s); z(s))$ als

$$\frac{d}{ds} h(\tau(s); z(s)) = \frac{\partial h}{\partial \tau} \frac{d\tau}{ds} + \frac{\partial h}{\partial z} \frac{dz}{ds} \quad . \quad (4.32)$$

Der Koeffizientenvergleich dieser beiden Gleichungen ergibt nun, dass die Charakteristiken durch die Gleichungen

$$\frac{d}{ds} \tau(s) = \langle \Delta T | \tau, z \rangle \Big|_{\substack{\tau=\tau(s) \\ z=z(s)}} \quad , \quad \frac{d}{ds} z(s) = \langle u_z | \tau, z \rangle \Big|_{\substack{\tau=\tau(s) \\ z=z(s)}} \quad (4.33)$$

gegeben sind, während sich entlang einer Charakteristik die PDF gemäß

$$\frac{d}{ds}h(s) = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T | \tau, z \rangle + \frac{\partial}{\partial z} \langle u_z | \tau, z \rangle \right)_{\substack{\tau=\tau(s) \\ z=z(s)}} h(s) \quad (4.34)$$

ändert. Es ist also darauf zu achten, dass die bedingten Mittelwerte am jeweiligen Punkt $(\tau(s), z(s))$ der Charakteristik ausgewertet werden müssen. Entlang einer Charakteristik kann die obige DGL für $h(s)$ integriert werden, und man erhält die Lösung

$$h(s) = h(s_0) \exp \left[- \int_{s_0}^s ds \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T | \tau, z \rangle + \frac{\partial}{\partial z} \langle u_z | \tau, z \rangle \right)_{\substack{\tau=\tau(s) \\ z=z(s)}} \right]. \quad (4.35)$$

Diese Gleichung beschreibt die PDF am Punkt $(\tau(s), z(s))$, wenn sie sich entlang einer Charakteristik entwickelt hat, die bei $(\tau(s_0), z(s_0))$ startet.

Die Variable s in der Parametrisierung der Trajektorien hat bisher keine physikalische Bedeutung. Dies können wir aber leicht beheben, wie kurz skizziert werden soll: Wenn man eine „künstliche“ Zeitabhängigkeit $h(\tau; z) \rightarrow h(\tau; z, t)$ der Temperatur-PDF wieder einführt, erhält man zum einen den zusätzlichen Term $\frac{\partial h}{\partial t}$ in der Bewegungsgleichung (4.31) der Temperatur-PDF, zum anderen den Term $\frac{\partial h}{\partial t} \frac{dt}{ds}$ in der totalen s -Ableitung (4.32) der Temperatur-PDF $h(s)$. Der Koeffizientenvergleich liefert dann $\frac{dt}{ds} = 1$, was zeigt, dass die „unphysikalische“ Variable s nichts anderes als die Zeit des Systems ist. Eine starke Änderung der Phasenraumposition $(\tau(s), z(s))$ mit dem Parameter s entspricht also einem tatsächlich schnell ablaufenden Prozess.

Der Formalismus der Methode der Charakteristiken hat damit den Vorteil, dass man die statistischen Größen physikalisch anschaulich interpretieren kann, da eine Bewegung entlang einer Charakteristik der gemittelten zeitlichen Entwicklung des physikalischen Prozesses entspricht. Vergleicht man jedoch die jetzige Situation, also die DGLen (4.33) der Charakteristiken und das Integral (4.35), mit dem einführenden Beispiel, stehen wir vor dem Problem, dass man erstens das Integral $\int ds \dots$ nicht lösen kann, und zweitens, dass man eine Trajektorie nicht bestimmen und somit auch nicht durch ihren Startpunkt identifizieren kann, weil die auftretenden bedingten Mittelwerte nicht analytisch bekannt sind. Um die Charakteristiken zu bestimmen, müsste man also die numerisch bestimmten bedingten Mittelwerte bezüglich s integrieren; dies ist allerdings nicht einfach möglich, da es sich bei den numerisch bestimmten Mittelwerten um *gebinnte* Daten handelt, die ein gewisses Maß an Rauschen aufweisen. Deswegen ist zunächst nicht zu erwarten, dass man die numerischen bedingten Mittelwerte zu eindeutigen Trajektorien integrieren kann. Man könnte zwar versuchen, die Form der bedingten Mittelwerte anhand der numerisch bestimmten Mittelwerte in den Abbildungen 4.3 und 4.5 zu modellieren, um dann die Charakteristiken und das Integral exakt zu berechnen; dies ist aber im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht durchgeführt worden.

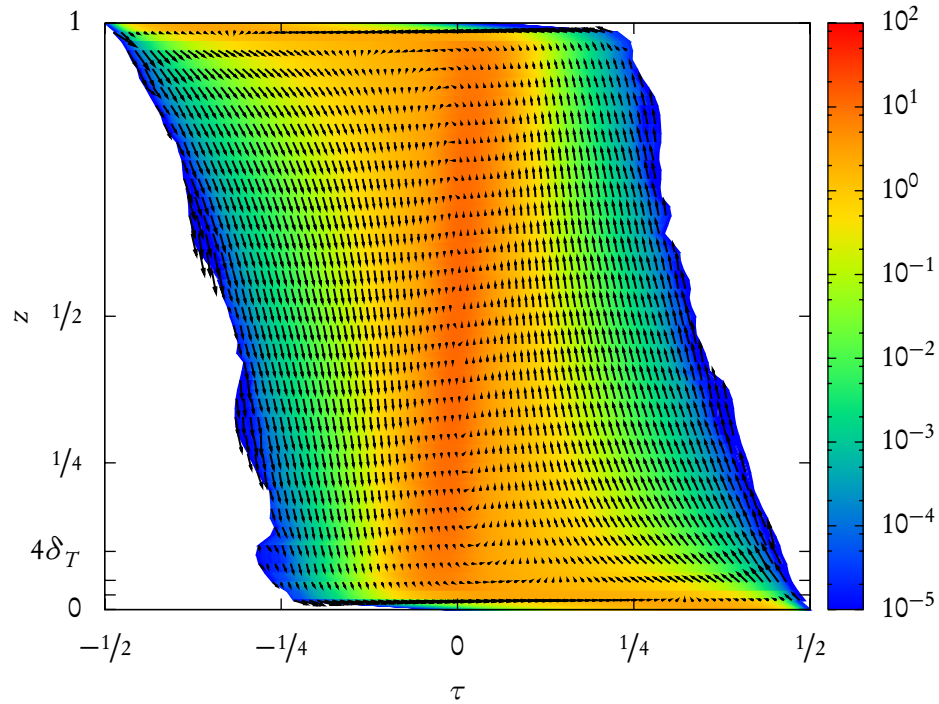


Abbildung 4.9: Das Vektorfeld $(\frac{d\tau}{ds}, \frac{dz}{ds})$ der Charakteristiken, hinterlegt mit der farbkodierten logarithmischen Temperatur-PDF. Das Vektorfeld wurde reskaliert, da hier nur die relative, nicht aber die absolute Länge der Vektorpfeile von Interesse ist. [ra2e7_gamma4]

Stattdessen wollen wir das Vektorfeld, das die Charakteristiken (4.33) definiert, näher betrachten. Dieses Vektorfeld ist in Abbildung 4.9 dargestellt. Die Charakteristiken sind Kurven, die tangential an dieses Vektorfeld anliegen, weswegen man die Form der Charakteristiken gut „nach Augenmaß“ am Vektorfeld erkennen kann. Verfolgt man das Vektorfeld, startend z. B. an der unteren Platte, bewegt man sich zuerst in τ -Richtung, was eine Erwärmung des Fluids bedeutet. Ab Temperaturen $\tau \gtrsim 1/4$ tritt eine Bewegung in z -Richtung ein, das Fluid fängt an aufzusteigen. Dieses Aufsteigen ist mit einer leichten Bewegung in negativer τ -Richtung verbunden, d. h. das aufsteigende Fluid kühlt sich leicht ab. Der Aufstieg endet an der oberen Platte, wo es eine starke Bewegung in negativer τ -Richtung, also eine starke Abkühlung, gibt. Nun wiederholt sich der Prozess symmetrisch an der oberen Platte: Fluid kühlt sich in der Grenzschicht bis $\tau \lesssim -1/4$ ab und fängt an abzusinken (verbunden mit einer leichten Erwärmung), bis es an der unteren Platte und damit am Ausgangspunkt des durch die Charakteristiken gegebenen Zyklus ankommt. Weiterhin kann man am Vektorfeld der Charakteristiken anschaulich erkennen, dass der

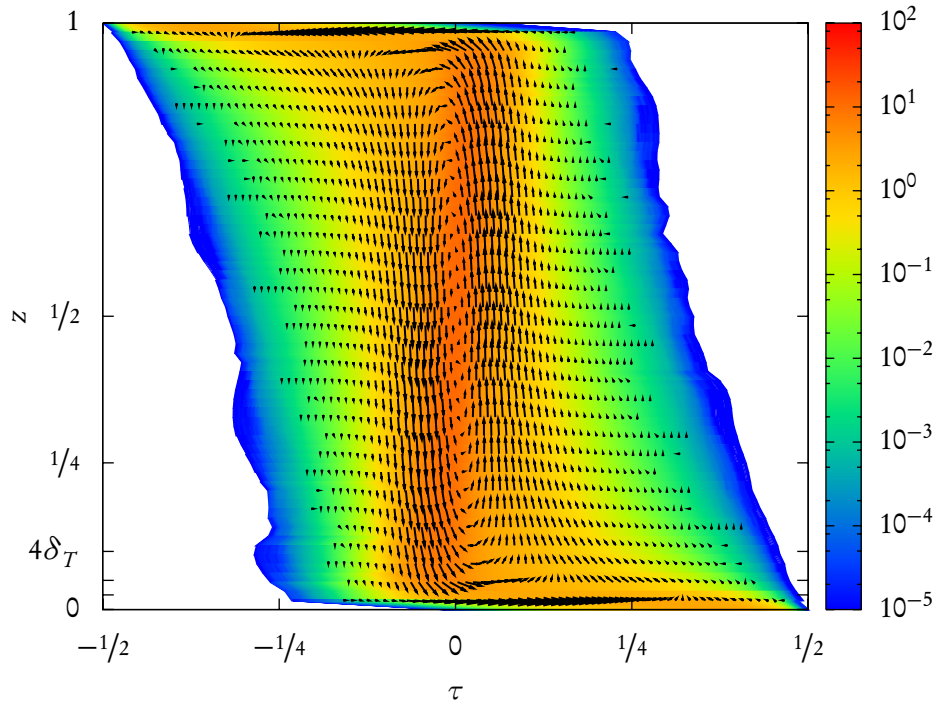


Abbildung 4.10: Das Vektorfeld $(\frac{d\tau}{ds}, \frac{dz}{ds})$ der Charakteristiken, multipliziert mit der Temperatur-PDF $h(\tau; z)$. Dieses Vektorfeld definiert einen Wahrscheinlichkeitsstrom. [ra2e7_gamma4]

größte Anteil von Aufheizen und Abkühlen (also die größte Bewegung in τ -Richtung) in den Grenzschichten stattfindet, während der größte Transport in vertikaler Richtung im *bulk* geschieht. Auch wenn wir sie nicht abschließend bis zu Ende durchrechnen können, erlaubt die Methode der Charakteristiken uns also, den typischen *Rayleigh-Bénard-Zyklus* von Erhitzen, Aufsteigen, Herunterkühlen und Absinken zu rekonstruieren, und stellt somit eine Verbindung zwischen den physikalischen Mechanismen und der Statistik des Systems her.

Man muss jedoch beachten, dass eine starke Bewegung entlang einer Charakteristik (also ein betragsmäßig großes Vektorfeld) nicht automatisch auch dem größten Transport im Phasenraum entspricht, da die verschiedenen Ereignisse verschieden oft auftreten; aus diesem Grund wurde das Vektorfeld mit der Temperatur-PDF $h(\tau; z)$ unterlegt. Schaut man sich z. B. den rechten Rand des Vektorfeldes in Abbildung 4.9 an, sieht man, dass dort die Vektorpfeile den größten Betrag haben, was einem hohen Wärmetransport bei sehr hohen Temperaturen entspricht. Diese Ereignisse tragen aber nicht sehr viel zum gesamten Wärmetransport bei, da sie sehr selten auftreten, vgl. die farbig hinterlegte

Temperatur-PDF. In Abbildung 4.10 ist deswegen das Vektorfeld der Charakteristiken mit der Temperatur-PDF multipliziert worden, sodass wir einen Wahrscheinlichkeitsstrom erhalten. Hier sieht man, dass ein Großteil des Wärmetransports im *bulk* durch Fluid geschieht, das etwas kälter bzw. wärmer ist als der Temperaturmittelwert, während Fluid mittlerer Temperatur kaum Wärme transportiert (vgl. das verschwindende Vektorfeld nahe der $\tau = 0$ -Linie). Die starke Bewegung in τ -Richtung in den Grenzschichten ist auch in diesem Vektorfeld vorhanden, jedoch an der heißen (kalten) Platte etwas zu höheren (niedrigeren) Temperaturen verschoben.

Mit den Charakteristiken, die durch die bedingten Mittelwerte $\langle u_z | \tau, z \rangle$ und $\langle \Delta T | \tau, z \rangle$ bestimmt werden, haben wir damit ein Werkzeug an der Hand, das es uns erlaubt, die mittlere zeitliche Entwicklung des Systems zu betrachten. Auch wenn die Bewegung entlang von Charakteristiken an die Lagrange'sche Beschreibungsweise von fluiddynamischen Prozessen erinnert, muss jedoch beachtet werden, dass Charakteristiken deterministische Trajektorien durch den τ, z -Phasenraum sind, während es sich bei der Bewegung eines Lagrange'schen Teilchens durch die Konvektionszelle um einen chaotischen Prozess handelt. In einem gewissen Sinne beschreiben die Charakteristiken ein Ensemble-Mittel von Teilchen, die an einem bestimmten Punkt des τ, z -Phasenraums starten.

Um die Methode der Charakteristiken wie im einführenden Beispiel weiter zu verfolgen, wäre es nun zunächst nötig, die Charakteristiken durch Integration der zugehörigen DGLen (4.33) zu erhalten, um den tatsächlichen Verlauf der Trajektorien im τ, z -Phasenraum erkennen zu können – bisher haben wir durch das Verfolgen der Vektorfelder die DGLen nur „nach Augenmaß“ gelöst. Danach könnte man versuchen, die Verformung der PDF entlang der Charakteristiken über das Integral (4.35) zu rekonstruieren. Dies ist im Rahmen dieser Diplomarbeit allerdings wegen der bereits erwähnten Probleme in Bezug auf verrauschte *gebinnte* Daten nicht durchgeführt worden, sodass wir uns mit der hier durchgeführten, phänomenologischen Interpretation der Form der PDF und der die Charakteristiken definierenden Vektorfelder begnügen.

4.4 Verknüpfungen zum Wärmetransport: Die Homogenitätsrelation

In diesem Abschnitt wollen wir kurz auf eine interessante Verknüpfung zwischen der Bewegungsgleichung der PDF und dem Wärmetransport, ausgedrückt durch die Nusselt-Zahl, eingehen. Dazu gehen wir zurück zur Bewegungsgleichung (4.6) der Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung und werden für den Spezialfall $Pr = 1$ die Laplace-Terme dieser Gleichung durch den Laplace der Verteilungsfunktion ausdrücken.

4.4.1 Homogenitätsrelation für die Verbund-PDF

Ausgehend von der Definition der feinkörnigen PDF $\hat{f}(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}, t) = \delta(\tau - T(\mathbf{x}, t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))$ berechnen wir zuerst den Laplace von f als

$$\begin{aligned} \Delta f = & -\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T \hat{f} \rangle - \nabla_v \cdot \langle \Delta \mathbf{u} \hat{f} \rangle \\ & + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \langle (\nabla T)^2 \hat{f} \rangle + 2 \frac{\partial^2}{\partial \tau \partial v_j} \langle \nabla T \cdot \nabla u_j \hat{f} \rangle + \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} \langle \nabla u_i \cdot \nabla u_j \hat{f} \rangle \quad . \quad (4.36) \end{aligned}$$

Falls $\text{Pr} = 1$ ist, können wir durch diese sogenannte *Homogenitätsrelation* in der Bewegungsgleichung (4.6) der Verbund-PDF den Ausdruck $-\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T \hat{f} \rangle - \nabla_v \cdot \langle \Delta \mathbf{u} \hat{f} \rangle$ ersetzen und erhalten durch anschließende Einführung von bedingten Mittelwerten die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f + \mathbf{v} \cdot \nabla f = & \Delta f - \nabla_v \cdot \left[\left(\langle -\nabla p | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle + \text{Ra} \tau \mathbf{e}_z \right) f \right] \\ & - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left[\langle (\nabla T)^2 | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \right] \\ & - 2 \frac{\partial^2}{\partial \tau \partial v_j} \left[\langle \nabla T \cdot \nabla u_j | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \right] \\ & - \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} \left[\langle \nabla u_i \cdot \nabla u_j | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle f \right] \quad . \quad (4.37) \end{aligned}$$

Als nächstes könnte man analog zu Abschnitt 4.2.4 statistische Symmetrien ausnutzen, um die auftretenden gemittelten Größen weiter zu vereinfachen. Da wir allerdings obige Gleichung gar nicht weiter behandeln wollen, wird diese Vereinfachung hier nicht durchgeführt; stattdessen bemerken wir nur, dass durch Ausnutzen der Homogenitätsrelation die bedingten Mittelwerte $\langle (\nabla T)^2 | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle$ und $\langle \nabla u_i \cdot \nabla u_j | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x}, t \rangle$ in unseren Gleichungen auftreten. Diese Terme sind mit der Dissipation von Wärme und kinetischer Energie verknüpft. Gleichzeitig existieren für die Dissipationsraten von Wärme und kinetischer Energie die exakten Relationen

$$\epsilon_T = \langle (\nabla T)^2 \rangle_V = \text{Nu} \quad (4.38a)$$

$$\epsilon_u = \langle (\nabla \mathbf{u})^2 \rangle_V = \text{Ra}(\text{Nu} - 1) \quad , \quad (4.38b)$$

vgl. [SS90]. Wenn wir das Volumenmittel in (4.38b) durch eine Integration der bedingten Mittelwerte und die Nusselt-Zahl durch die Wärmedissipationsrate ersetzen, kommen wir zu der Relation⁶

$$\int d^3x \int d\tau d^3v f(\tau, \mathbf{v}; \mathbf{x}) \left[\text{Ra} \left(\langle (\nabla T)^2 | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - 1 \right) - \langle (\nabla \mathbf{u})^2 | \tau, \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle \right] = 0 \quad , \quad (4.39)$$

die von den bedingten Mittelwerten erfüllt werden muss und die die Verbindung von unserer Theorie zu den beiden Dissipationsraten zeigt. Da es sich hier um eine exakte Relation handelt, könnte man diese Gleichung als eine Art *benchmark*-Test der numerisch bestimmten Mittelwerte benutzen. Das punktweise Verschwinden des Terms in eckigen Klammern ist *a priori* nicht zu erwarten.

Die Ausdrücke (4.38) für die beiden Dissipationsraten bilden den Ausgangspunkt der von S. Grossmann und D. Lohse entwickelten Theorie zur Skalierung von Nusselt- und Rayleigh-Zahl [GL92, GL00]. Die Theorie zerlegt die Dissipationsraten in Anteile der Grenzschichten und des *bulks* und gelangt so zu dem in Abschnitt 1.4.1 erwähnten Skalierungsverhalten; in einem gewissen Sinne tritt diese Zerlegung bei uns völlig natürlich auf, da wir die bedingten Mittelwerte Orts- bzw. z-aufgelöst betrachten (müssen).

4.4.2 Homogenitätsrelation für die Temperatur-PDF

Für den Fall der Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF können wir eine analoge Homogenitätsrelation nutzen, indem wir den Laplace der feinkörnigen PDF $\hat{h}(\tau; \mathbf{x}, t) = \mathcal{L}(\tau - T(\mathbf{x}, t))$ berechnen:

$$\Delta h = \langle \Delta \hat{h} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \Delta T \hat{h} \rangle + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \langle (\nabla T)^2 \hat{h} \rangle \quad (4.40)$$

Mit dieser Relation und der Einführung von bedingten Mittelwerten wird die Bewegungsgleichung der Temperatur-PDF $h(\tau; \mathbf{x}, t)$ zu

$$\frac{\partial}{\partial t} h + \nabla \cdot \left[\langle \mathbf{u} | \tau, \mathbf{x}, t \rangle h \right] = \Delta h - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left[\langle (\nabla T)^2 | \tau, \mathbf{x}, t \rangle h \right] \quad , \quad (4.41)$$

was sich unter Ausnutzung von Stationarität und Homogenität zu

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\langle u_z | \tau, z \rangle h(\tau; z) \right] = \frac{\partial^2}{\partial z^2} h(\tau; z) - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left[\langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle h(\tau; z) \right] \quad (4.42)$$

vereinfachen lässt. Wir haben also verglichen mit der Entwicklungsgleichung (4.22) eine erste Ableitung $\frac{\partial}{\partial \tau} \dots$ durch zwei zweite Ableitungen nach τ und z „eingetauscht“

⁶Es wurde Stationarität ausgenutzt, um die Zeitabhängigkeit zu eliminieren; ebenso gut könnte man hier Homogenität in horizontalen Ebenen ausnutzen. Die generelle Form der Gleichung würde sich dadurch allerdings nicht ändern.

und mussten dafür den bedingten Wärmedissipationsterm $\langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle$ einführen. Im Gegensatz zur Verbund-PDF ist keine Einschränkung auf $\text{Pr} = 1$ nötig.

Die Darstellung (4.38a) der Nusselt-Zahl als das Volumenmittel der Wärmedissipation erlaubt es uns, die Nusselt-Zahl als

$$\text{Nu} = \int dz \int d\tau h(\tau; z) \langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle \quad (4.43)$$

durch die bedingt gemittelte Wärmedissipation auszudrücken; wegen Homogenität und des durch die Entdimensionalisierung gegebenen Bereichs $0 < z < 1$ der vertikalen Koordinate vereinfacht sich das Volumen-Mittel zu einer Integration über z . Aufgrund dieser Relation kann man den Mittelwert $\langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle$ als eine Art bedingte Nusseltzahl-Dichte auffassen. Dieser Mittelwert, der auch schon bei der Homogenitätsrelation der Verbund-PDF aufgetaucht ist, kann aus DNS-Daten geschätzt werden und ist in den Abbildungen 4.11 und 4.12 dargestellt.

Die logarithmische Farbdarstellung in Abbildung 4.11 lässt ein Minimum nahe der $\tau = 0$ -Linie erkennen, das mit dem rötlichen Kern der Temperatur-PDF zusammenfällt. In den Grenzschichten findet sich an der heißen (kalten) Platte ein starkes Maximum bei hohen (niedrigen) Temperaturen, was man wegen der Interpretation von $\langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle$ als Nusseltzahl-Dichte als einen hohen Beitrag der Grenzschichten zum Wärmetransport auffassen kann.

Der Schnitt in τ -Richtung bei $z = 1/2$ in Abbildung 4.12 zeigt eine parabelförmige Gestalt des bedingten Mittelwertes in der Umgebung von $\tau = 0$.⁷ Dies steht in Verbindung zu einer von V. Yakhot in [Yak89] entwickelten Theorie über Temperatur-PDFs: Ausgehend von einem etwas anderen Ansatz als bei uns wird dort eine Differentialgleichung für die PDF der Temperaturfluktuationen $T'(x) := T(x) - \langle T \rangle_A$ hergeleitet, in der ebenfalls ungeschlossene Terme in Form bedingter Mittelwerte, insbesondere auch der Mittelwert einer „modifizierten“ Wärmedissipation $(\nabla T')^2$, vorkommen. Yakhot nähert nun den bedingten Mittelwert von $(\nabla T')^2$ durch eine Parabel an und kommt unter weiteren (relativ schwachen) Annahmen zu dem Ergebnis, dass die PDF der Temperaturfluktuationen eine exponentielle Form hat. Im Gegensatz zu unseren Gleichungen fehlt bei Yakhot allerdings die Orts- bzw. z -Abhängigkeit von PDF und bedingten Mittelwerten, d. h. er erhält eine über die gesamte Konvektionszelle bestimmte PDF. Aus unseren Ergebnissen schließen wir aber, dass die Abhängigkeit der statistischen Größen von der vertikalen Position eine große Rolle spielt und somit nicht vernachlässigt werden sollte.⁸ Die fehlende z -Abhängigkeit bei Yakhot lässt sich (wie in [Chi93] bemerkt) dadurch erklären, dass in

⁷Wir zeigen diesen bedingten Mittelwert in einer logarithmischen Skalierung, um die verschiedenen Größenordnungen für verschiedene z -Werte darstellen zu können; in der hier nicht gezeigten nicht-logarithmischen Darstellung erkennt man eindeutig die Parabelform.

⁸Dass wir hier die Temperatur-PDF mit der PDF von Temperaturfluktuationen vergleichen, stellt kein Problem dar, da die PDFs dieser beiden Größen nur gegeneinander verschoben sind; die Form der beiden PDFs ist gleich.

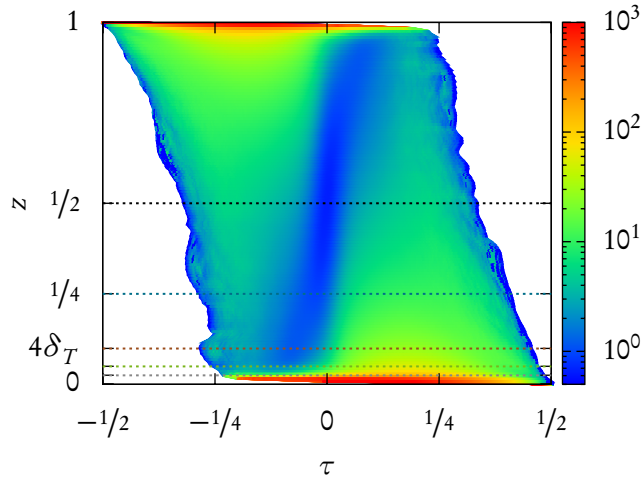
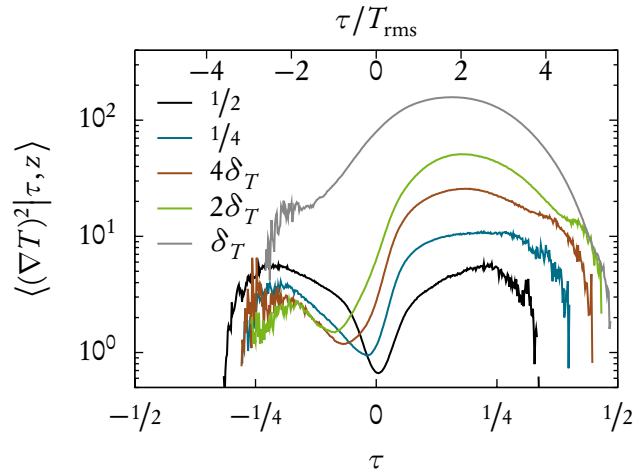


Abbildung 4.11: Farbliche Darstellung des bedingten Wärmedissipationsterms $\langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle$ in logarithmischer Skalierung. Die zu den gestrichelten Linien korrespondierenden Schnitte in τ -Richtung sind in Abbildung 4.12 dargestellt.

[ra2e7_gamma4]

Abbildung 4.12: Der bedingt gemittelte Wärmedissipationsterm $\langle (\nabla T)^2 | \tau, z \rangle$ für verschiedene Werte von z . Die Zahlenwerte der Ordinate sind durch die Entdimensionalisierung $\nabla T \rightarrow \frac{b}{\delta_T} \nabla T$ gegeben, vgl. Abschnitt 1.2.5.

[ra2e7_gamma4]



der dortigen Herleitung ein nichtkonstantes mittleres Temperaturprofil angenommen wird, um die z -Anhängigkeit zu eliminieren; unsere Daten zeigen jedoch eindeutig ein im *bulk* konstantes mittleres Temperaturprofil, vgl. Abbildung 4.1.

Des Weiteren ist die Näherung des bedingten Mittelwertes von $(\nabla T')^2$ durch eine Parabel fraglich. In Abbildung 4.13 ist dieser Mittelwert für verschiedene z -Werte dargestellt; für $z \in \{4\delta_T, 1/4, 1/2\}$ sieht man fast keinen Unterschied zu Abbildung 4.12, weil hier $\langle T \rangle_A \approx 0$ ist, und erst für $z \in \{\delta_T, 2\delta_T\}$, wo $\langle T \rangle_A \neq 0$ ist, unterscheiden sich die Kurven (vgl. Abbildung 4.1 für $\langle T \rangle_A$). Auch wenn sich bei $z = 1/2$ (und in geringerem Maße bei $z = 1/4$) ein parabelförmiger Verlauf beobachten lässt, ist doch eine eindeutige z -Abhängigkeit dieser Größe zu erkennen; die Asymmetrie nimmt mit der Entfernung von $z = 1/2$ zu. Nahe der Grenzschicht lässt sich die Größe nicht mehr durch eine Parabel

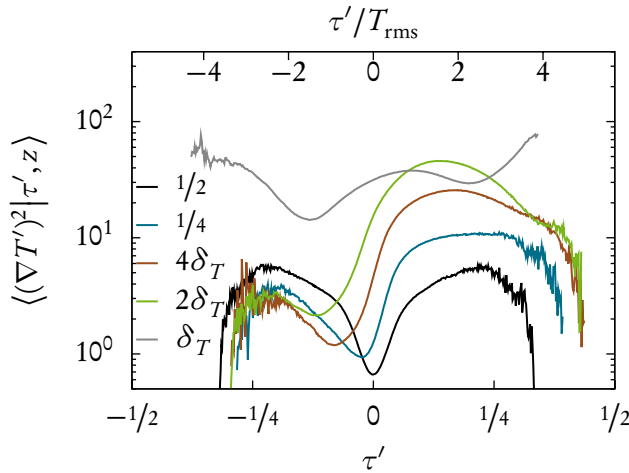
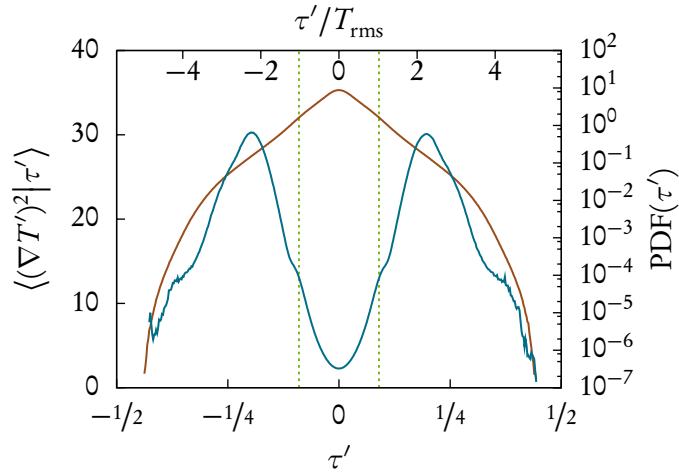


Abbildung 4.13: Der z-aufgelöste „wärmedissipationsartige“ Mittelwert $\langle (\nabla T')^2 | \tau', z \rangle$ mit den Temperaturfluktuationen $T'(x) = T(x) - \langle T \rangle_A$ für verschiedene Werte von z ; τ' ist die *sample space*-Variable zu $T'(x)$.
[ra2e7_gamma4]

Abbildung 4.14: $(\nabla T')^2$ bedingt über das gesamte Fluidvolumen gemittelt (blau, linke Ordinate); zusätzlich ist eine für das gesamte Fluidvolumen bestimmte PDF der Temperaturfluktuationen gezeigt (braun, rechte Ordinate).

[ra2e7_gamma4]



beschreiben, und auch bei $z = 1/2$ gilt die Parabelnäherung nur in einem kleinen Gebiet um $\tau' = 0$.

Vernachlässigen wir wie Yakhot die z -Abhängigkeit des bedingten Mittelwertes von $(\nabla T')^2$ und der PDF der Temperatur(fluktuationen), bestimmen wir also den bedingten Mittelwert $\langle (\nabla T')^2 | \tau' \rangle$ und die PDF von T' durch eine Mittelung über das gesamte Fluidvolumen, erhalten wir die in Abbildung 4.14 gezeigten Formen dieser beiden Größen. Der bedingte Mittelwert zeigt im Bereich von $\tau' = 0$ eine Parabelform; dieser Bereich ist grob durch die beiden vertikalen Linien gekennzeichnet. Vergleicht man den korrespondierenden Bereich der PDF, sieht man einen exponentiellen Verlauf, wobei sich diese Tendenz noch ein Stück weiter zu größeren Beträgen von τ' fortsetzt. Die nicht-ortsaufgelösten Größen scheinen also die Theorie von Yakhot zu unterstützen, da

in dem parabelförmigen Bereich des bedingten Mittelwertes die PDF wie in [Yak89] vorhergesagt ein exponentielles Verhalten zeigt. Es stellt sich die Frage, wie die Größe dieses Bereichs mit steigender Rayleigh-Zahl skaliert, da Yakhot seine Theorie für asymptotisch „große“ Rayleigh-Zahlen entwickelt; hier wäre ein in dieser Arbeit nicht mehr durchzuführender systematischer Parameter-*scan* vonnöten. Auf einer allgemeineren Ebene ist fraglich, ob durch eine sich auf das gesamte Fluidvolumen beziehende PDF nicht wichtige Merkmale der Konvektionsströmung wie z. B. der oft diskutierte Unterschied zwischen Grenzschicht- und *bulk*-Verhalten vernachlässigt werden.

Die bei uns vorhandene z -Abhängigkeit unterscheidet damit unseren Ansatz von den bereits in der Literatur zu findenden Theorien, da sie es uns erlaubt, die Temperatur-PDF in Bezug auf die verschiedenen Effekte in verschiedenen Bereichen der Konvektionszelle zu untersuchen; wir konnten z. B. verschiedene Statistiken in den Grenzschichten und im *bulk* und die Verbindung zu den verschiedenen bedingten Mittelwerten und die Abhängigkeit dieser von der z -Koordinate diskutieren. Dies ist mit den in der obigen Literatur zu findenden Methoden nicht möglich. Für eine weitere Diskussion unserer Methode in Bezug auf Herangehensweisen vergleichbar zu der von Yakhot sei der interessierte Leser auf [LWF11] verwiesen, wo die in diesem Kapitel dargestellten Ergebnisse veröffentlicht und in den Kontext der bisherigen Literatur gesetzt wurden.

Näherungen im Rahmen der Homogenitätsrelation?

Gehen wir zurück zur modifizierten Bewegungsgleichung (4.42) der Temperatur-PDF. Wie bereits erwähnt, haben wir durch die Homogenitätsrelation eine erste durch zwei zweite Ableitungen ersetzt. Man kann sich nun fragen, ob man überhaupt einen Nutzen aus diesem Tausch ziehen kann – unsere Gleichung enthält z. B. nach wie vor zwei ungeschlossene Terme. Wenn man aber die zweiten Ableitungen an bestimmten Stellen näherungsweise vernachlässigen könnte, wäre dieser Tausch eventuell vorteilhaft. Wir wollen deshalb kurz eine Betrachtung des Terms $\frac{\partial^2}{\partial z^2} h(\tau; z)$ anschneiden.

In Abbildung 4.15 sind Schnitte durch die Temperatur-PDF in z -Richtung bei festen Werten von τ dargestellt; die τ -Werte wurden dabei so gewählt, dass die z -Schnitte durch den rötlichen Kern der PDF verlaufen. Für eine verschwindende zweite Ableitung müssten die Schnitte einen linearen Verlauf zeigen; dies scheint im Allgemeinen jedoch nicht der Fall zu sein. Für den Schnitt bei $\tau = 0$ ist beispielsweise ein eher parabelförmiger Verlauf im *bulk* zu erkennen, was dort $\frac{\partial^2}{\partial z^2} h(\tau = 0; z) \approx \text{const.} \neq 0$ bedeuten würde. Bei den anderen τ -Werten zeigt sich ein irregulärer Verlauf, sodass im Allgemeinen nicht zu erwarten ist, dass die zweite z -Ableitung der PDF verschwindet. Es stellt sich jedoch die Frage, ob sie klein gegenüber den anderen Termen der Bewegungsgleichung (4.42) ist. Hier wäre ein tiefergehender Vergleich der verschiedenen Terme, sowie allgemein eine tiefergehende Analyse der Gleichung (4.42) von Interesse, was aber aus Zeitgründen im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht durchgeführt werden kann.

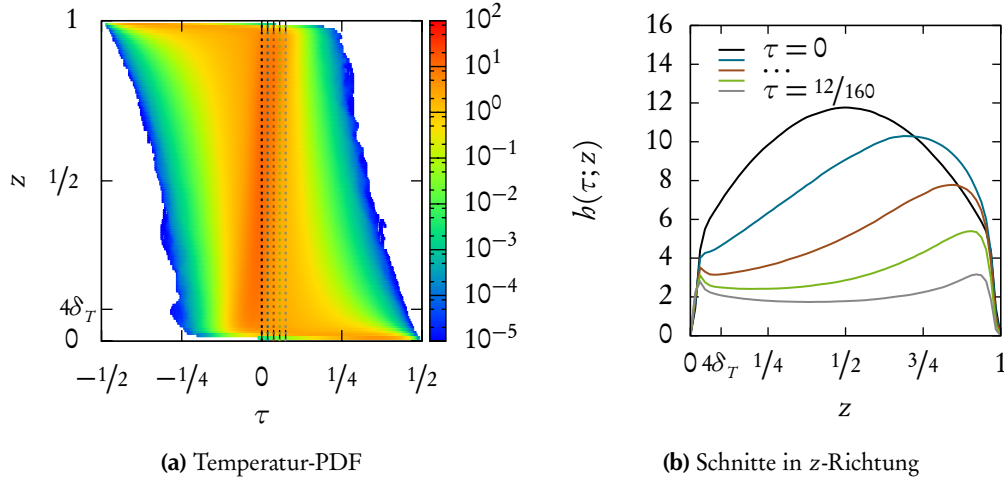


Abbildung 4.15: Darstellung der Temperatur-PDF und Schnitte durch diese in z -Richtung. (a) Farbkodierte, logarithmische Temperatur-PDF. Die vertikalen gestrichelten Linien deuten die Positionen der Schnitte in z -Richtung bei festem $\tau \in \{0, 3/160, 6/160, 9/160, 12/160\}$ an. Die τ -Werte sind dabei durch die Positionen der *bins* entstanden und liegen im Bereich des rötlichen Kerns der PDF. (b) Eindimensionale, nicht-logarithmische Darstellung der z -Schnitte bei den festen τ -Werten entsprechend der gestrichelten Linien aus der zweidimensionalen Farbdarstellung. [ra2e7_gamma4]

4.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel, das den eigentlichen wissenschaftlichen Hauptteil der vorliegenden Diplomarbeit ausmacht, haben wir uns im Rahmen eines theoretischen Konzepts verschiedene statistisch gemittelte Größen turbulenter Konvektion angeschaut und sie auf Merkmale der zugrunde liegenden Strömung bezogen.

Zunächst haben wir in Abschnitt 4.2 ausgehend von den Oberbeck-Boussinesq-Grundgleichungen eine Gleichung hergeleitet, die die zeitliche Entwicklung der Verbund-PDF von Temperatur und Geschwindigkeit bestimmt. Wir sind dabei einem Ansatz gefolgt, der in den 1960er Jahren durch die LMN-Hierarchie für die Navier-Stokes-Gleichung gelegt wurde, wobei wir die in diesem Ansatz auftretenden ungeschlossenen Terme durch bedingte Mittelwerte ausgedrückt haben. Die hohe Dimensionalität des Problems (die verschiedenen Größen hängen naiverweise von acht Variablen ab) konnten wir zwar durch Ausnutzung statistischer Symmetrien etwas verringern; trotzdem blieb das Problem aber noch so komplex, dass wir es in dieser umfassenden Form der Verbund-PDF nicht weiter behandeln konnten, unter anderem weil sich die hochdimensionalen bedingten Mittelwerte schlecht aus der Numerik schätzen lassen.

Deswegen sind wir in Abschnitt 4.3 dazu übergegangen, das volle Problem der Verbund-PDF auf die Temperatur-PDF zu reduzieren. Die Bewegungsgleichung, die die Temperatur-PDF bestimmt, ist schon in der Gleichung der Verbund-PDF enthalten; in ihr kommen nur noch skalare Größen vor, die nach Ausnutzung statistischer Symmetrien von zwei Variablen abhängen. Damit konnten wir die beiden in der Gleichung auftretenden bedingten Mittelwerte aus der in Kapitel 2 entwickelten Numerik bestimmen. Diese beiden Mittelwerte und die ebenfalls aus der Numerik direkt bestimmte Temperatur-PDF haben wir zunächst phänomenologisch diskutiert, wobei wir unter anderem auf unterschiedliches Verhalten des Fluids in den Grenzschichten und im *bulk* sowie auf die Dynamik von *plumes* eingegangen sind. Um dann die Bewegungsgleichung der Temperatur-PDF weiter behandeln zu können, haben wir zunächst an einem Beispiel die Methode der Charakteristiken demonstriert, die es erlaubt, gewisse partielle Differentialgleichungen entlang von bestimmten Trajektorien auf gewöhnliche Differentialgleichungen zu reduzieren. Angewandt auf die Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF konnten wir das Vektorfeld identifizieren, das die Trajektorien bestimmt; die Bewegung entlang dieser Trajektorien ließ sich sehr anschaulich als der typische Rayleigh-Bénard-Zyklus des Fluids von Erhitzen, Aufsteigen, Herunterkühlen und Absinken interpretieren. Die Entwicklung der Temperatur-PDF entlang der Trajektorien konnten wir durch ein Integral ausdrücken, dessen Lösung sich allerdings schwierig gestaltet und die deswegen in dieser Diplomarbeit nicht weiter durchgeführt werden konnte; hier ist ein eindeutiger Ansatzpunkt für zukünftige Anstrengungen zu sehen.

An den vorherigen Hauptaspekt anknüpfend haben wir in Abschnitt 4.4 noch kurz die Entwicklungsgleichungen von Verbund- und Temperatur-PDF in einer etwas anderen Form dargestellt, wobei durch eine sogenannte Homogenitätsrelation zweite Ableitungen in den Gleichungen eingeführt worden sind. Im Fall der Temperatur-PDF erscheint dadurch der bedingte Mittelwert der Wärmedissipation in der Gleichung. Über diesen Mittelwert tritt zum einen eine Verknüpfung zum durch die Nusselt-Zahl ausgedrückten Wärmetransport auf. Zum anderen haben wir diesen Term zum Anlass genommen, unsere Methode mit anderen in der Literatur präsentierten Methoden zu vergleichen, da in diesen ein ähnlicher bedingter Mittelwert vorkommt. Dabei haben wir die orts aufgelöste Beschreibung als Herausstellungsmerkmal unserer Methode gegenüber den in der Literatur bereits vorhandenen angesehen. Wie oben erwähnt, erlaubt es die Ortsauflösung, qualitativ unterschiedliche Merkmale der Konvektionsströmung in verschiedenen Regionen zu identifizieren und zu beschreiben.

Als kleiner Ausblick wurde anschließend noch kurz untersucht, inwieweit man durch die Homogenitätsrelation Terme erhält, an denen Näherungen durchgeführt werden können; eine tiefergehende Analyse war jedoch in diesem Rahmen nicht möglich, könnte allerdings für die Zukunft angedacht werden.

Abschließend lässt sich sagen, dass wir in diesem Kapitel durch das Übertragen eines bereits an anderer Stelle verwendeten Formalismus auf unser System eine Methode erarbeiten konnten, die sowohl qualitative als auch quantitative Einblicke in die Vorgänge in turbulenter Konvektionsströmung erlaubt.

5 Zusammenfassung und Ausblick

I have approximate answers and possible beliefs in different degrees of certainty about different things, but I'm not absolutely sure of anything, and of many things I don't know anything about, but I don't have to know an answer. I don't feel frightened by not knowing things, by being lost in the mysterious universe without having any purpose which is the way it really is as far as I can tell possibly. It doesn't frighten me.

(Richard Feynman, 1981)

Das Anliegen dieser Diplomarbeit war es, die turbulenten Konvektionsströmungen des idealisierten Rayleigh-Bénard-Systems mit statistischen Methoden zu untersuchen und so tiefergehend zu verstehen.

Dazu wurde zum einen ein neues numerisches Verfahren zur direkten numerischen Simulation der Grundgleichungen entworfen und von Grund auf in einem parallelen Simulationscode implementiert. Das Verfahren baut auf pseudospektralen Ansätzen auf und benutzt die *volume penalization*-Technik zur Modellierung der Begrenzungen und Wände. Die Kombination dieser beiden Ansätze ist so vorher noch nicht auf das Rayleigh-Bénard-System angewandt worden.

Zum anderen wurde die in den 1960er Jahren für „reine“ Fluidturbulenz entwickelte LMN-Hierarchie auf die statistische Behandlung des turbulenten Rayleigh-Bénard-Systems ausgeweitet. Im Rahmen dieses theoretischen Konzeptes ist es uns möglich, mittels Wahrscheinlichkeitsverteilungen und exakter Gleichungen, die diese Verteilungen bestimmen, Aussagen über die statistischen Vorgänge im System und insbesondere über die Interna des Wärmetransport zu treffen. Die LMN-Hierarchie wurde hier zum ersten Mal auf turbulente Rayleigh-Bénard-Konvektion übertragen.

Der Weg zu diesen beiden Punkten gestaltete sich folgendermaßen: In Kapitel 1 wurde das System anhand einiger Experimente und Phänomene vorgestellt, und die Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen wurden eingeführt. Eine typische Behandlung dieser Grundgleichungen besteht zum einen in der linearen Stabilitätsanalyse, zum anderen in der experimentellen Bestimmung von Skalierungsverhalten.

Das neu entwickelte numerische Verfahren wurde in Kapitel 2 detailliert besprochen. Dazu wurde zunächst das Pseudospektral-, dann das *volume penalization*-Verfahren eingeführt; bei letzterem werden durch zusätzliche Terme die Geschwindigkeits- und Temperaturfelder in der Wand exponentiell gedämpft, was die gewünschten Randbedingungen erzeugt. Schließlich wurden noch Details der parallelen Implementierung sowie mögliche Erweiterungen des Verfahrens besprochen und untersucht.

Diese Numerik wurde in Kapitel 3 dazu benutzt, grundlegende Untersuchungen an dem System durchzuführen. Neben der Intuitionsbildung, die vor allem durch Visualisierungen und die zugehörigen Videos sowie durch die Diskussion gemittelter Größen vorangetrieben wurde, war in diesem Kapitel ein wichtiger Punkt die Validierung der Numerik. Dazu wurden Ergebnisse des Simulationscodes zum einen mit analytischen Vorhersagen der eingangs erwähnten linearen Stabilitätsanalyse, zum anderen mit den in der Literatur oft diskutierten Skalierungsverhalten verglichen und bestätigt.

In Kapitel 4 haben wir uns dann der Entwicklung einer statistischen Theorie des Rayleigh-Bénard-Systems zugewandt. Diese Theorie fußt auf der Verbundwahrscheinlichkeitsverteilung von Geschwindigkeit und Temperatur, für die direkt aus den Oberbeck-Boussinesq-Gleichungen eine Entwicklungsgleichung hergeleitet wurde. Das berühmte „Schließungsproblem der Turbulenz“, das sich hier in Form ungeschlossener Mittelwerte zeigte, behandelten wir durch die Einführung bedingter Mittelwerte, die aus der Numerik bestimmt werden müssen. Die Beschränkung auf die Verteilungsfunktion der Temperatur machte die bedingten Mittelwerte für die Numerik zugänglich; diese Verteilungsfunktion erlaubt bereits weitreichende Beschreibungen des Systems. Zunächst wurden die Temperatur-PDF sowie die bedingten Mittelwerte aus der Numerik bestimmt und mit Hinblick auf das unterschiedliche Verhalten der Grenzschichten und des *bulks* sowie auf die Dynamik von *plumes* diskutiert; mit Hilfe der Methode der Charakteristiken wurde dann die Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF anschaulich behandelt. So konnten wir Trajektorien identifizieren, die im Ensemble-Sinn die mittlere zeitliche Entwicklung eines Fluidpakets beschreiben und die tiefere Einblicke in die statistischen Vorgänge des Systems erlauben: Unter anderem konnten wir den typischen Rayleigh-Bénard-Zyklus von Erhitzen, Aufsteigen, Herunterkühlen und Absinken reproduzieren. Der Ansatz der LMN-Hierarchie erlaubte es uns damit, innerhalb eines mathematisch stringenten Konzepts eine Verknüpfung zwischen der Dynamik und der Statistik von turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion herzustellen.

An mehreren Stellen dieser Diplomarbeit haben wir Anknüpfungspunkte für zukünftige Arbeiten aufgezeigt. So musste eine quantitative Untersuchung der von uns entwickelten *no flux*-Wände ausgespart werden; es bleibt also noch zu bestätigen, dass das von uns benutzte Verfahren tatsächlich den Temperaturfluss in Normalenrichtung der Wand vollständig unterbindet. Des Weiteren wurden die Auswirkungen, die das Ausnutzen der Homogenitätsrelation auf die Entwicklungsgleichung der Wahrscheinlichkeitsverteilung hat, nur kurz angesprochen; die Verbindungen zum Wärmetransport sowie die Nähe-

rungsmöglichkeiten, die sich an dieser Stelle auftaten, sollten noch detaillierter untersucht werden.

Der wichtigste Ansatzpunkt für zukünftige Anstrengungen ist allgemein in der Weiterentwicklung der statistischen Methoden zu sehen. Zwar konnten wir durch die Entwicklungsgleichung der Temperatur-PDF und deren Analyse mithilfe der Methode der Charakteristiken qualitative Einblicke in die dynamischen Vorgänge des Systems erlangen; jedoch erlaubte uns dieser Ansatz bisher noch nicht, quantitative Aussagen zu erhalten. Eine weiterführende Ausarbeitung der in Kapitel 4 dargestellten Methoden kann jedoch für die Zukunft angedacht werden. Auch sollte die Verbundverteilung von Geschwindigkeit und Temperatur nicht vernachlässigt werden; insbesondere durch die Verbund-PDF von Temperatur und vertikaler Geschwindigkeit sollte man Einblicke in die Dynamik von aufsteigendem und absinkendem Fluid und somit in die Dynamik von *plumes* erhalten können.

Des Weiteren muss noch näher verstanden werden, welche Aussagen über die Details des Wärmetransports wir durch den von uns benutzten Formalismus gewinnen können; wie in den einführenden Kapiteln dieser Arbeit erwähnt, ist der genaue Mechanismus des Wärmetransports eine der großen unbeantworteten Fragen in der Untersuchung des Rayleigh-Bénard-Systems.

Das Ziel dieser Diplomarbeit war es, die Phänomene turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion besser zu begreifen. Durch numerische und statistische Methoden konnten wir Einblicke in das System gewinnen und es auf einer statistischen Ebene tiefergehend verstehen, womit wir hoffentlich einen Beitrag zum großen Puzzle des „Turbulenzproblems“ liefern konnten.

A Anhang

Ach, Luise, laß... das ist ein zu weites Feld.

(Theodor Fontane. Effi Briest)

Der Anhang stellt in Form von Tabellen und Listen einige Details von den eher technischen Hilfsmitteln dieser Diplomarbeit dar. In Abschnitt A.1 werden die Parameter der verschiedenen Simulationen aufgelistet. Abschnitt A.2 beschreibt den Inhalt der beiliegenden DVD sowie die auf ihr enthaltenen Videos. Abschnitt A.3 dokumentiert schließlich grob den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationscode und dessen Handhabung.

A.1 Eckdaten der benutzten Simulationen

Hier sollen die wichtigsten Parameter der in der Diplomarbeit benutzten Simulationen dargestellt werden. Die genauen Eingabedateien finden sich in den entsprechenden Ordnern der beiliegenden DVD. In Tabelle A.1 sind die drei freien dimensionslosen Eingabeparameter Ra , Pr und Γ und die *response*-Parameter Nu , Re und T_{rms} dargestellt. Tabelle A.2 zeigt, wie dazu die verschiedenen Parameter der nicht-entdimensionalisierten Gleichungen gewählt wurden (da in der Numerik die nicht-entdimensionalisierten Gleichungen gelöst werden), und in Tabelle A.3 sind die Simulation betreffende technische Parameter dargestellt (beispielsweise die Anzahl Gitterpunkte, das Auflösungskriterium (3.10) der Simulation, die Angabe, wie oft binäre Felder herausgeschrieben werden, etc.).

Es würde an dieser Stelle den Rahmen sprengen, die vollen Parameterlisten der Parameter-scans bei kleinen Rayleigh-Zahlen aus Abschnitt 3.5 anzugeben; in diesen Simulationen wurde nach der kritischen Rayleigh-Zahl gesucht (vgl. Abbildungen 3.22–3.25), weswegen sehr viele Simulationen durchgeführt werden mussten. Die Eingabedateien sind jedoch auf der beiliegenden DVD im Ordner `simulations/bif` zu finden.

	Ra	Pr	Γ	Nu	Re	T_{rms}
ra2e7_gamma4	$2.44 \cdot 10^7$	1	4	20.22	1037.6	0.0878
nu_vs_ra/ra1e5	$1 \cdot 10^5$	1	4	4.40	69.8	0.1902
nu_vs_ra/ra2e5	$2 \cdot 10^5$	1	4	5.36	100.4	0.1716
nu_vs_ra/ra5e5	$5 \cdot 10^5$	1	4	6.95	159.0	0.1495
nu_vs_ra/ra7e5	$7 \cdot 10^5$	1	4	7.61	188.2	0.1419
nu_vs_ra/ra1e6	$1 \cdot 10^6$	1	4	8.42	224.5	0.1341
nu_vs_ra/ra2e6	$2 \cdot 10^6$	1	4	10.09	316.9	0.1210
nu_vs_ra/ra5e6	$5 \cdot 10^6$	1	4	13.03	489.5	0.1105
nu_vs_ra/ra7e6	$7.5 \cdot 10^6$	1	4	14.60	597.4	0.1040
nu_vs_ra/ra1e7	$1 \cdot 10^7$	1	4	15.78	681.2	0.1003
nu_vs_ra/ra2e7	$2 \cdot 10^7$	1	4	19.16	943.3	0.0906
nu_vs_ra/ra5e7	$5 \cdot 10^7$	1	4	24.63	1442.6	0.0786
nu_vs_ra/ra7e7	$7.5 \cdot 10^7$	1	4	28.31	1752.6	0.0768
nu_vs_ra/ra1e8	$1 \cdot 10^8$	1	4	30.64	1997.7	0.0734
nu_vs_ra/ra5e8	$5 \cdot 10^8$	1	4	47.24	4129.4	0.0566

Tabelle A.1: Dimensionslose Eingabeparameter und die daraus resultierenden *response*-Parameter. T_{rms} bezieht sich auf die entdimensionalisierten Gleichungen (1.9). Für die Definition der *response*-Parameter siehe Abschnitt 1.4.

	L_x, L_y	L_z	h	α, g, β	ν, κ	η	Δt
ra2e7_gamma4	4π	$3/2\pi$	π	1	$2.000 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra1e5	4π	$3/2\pi$	π	1	$3.121 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra2e5	4π	$3/2\pi$	π	1	$2.206 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra5e5	4π	$3/2\pi$	π	1	$1.396 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra7e5	4π	$3/2\pi$	π	1	$1.180 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra1e6	4π	$3/2\pi$	π	1	$9.870 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra2e6	4π	$3/2\pi$	π	1	$6.979 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra5e6	4π	$3/2\pi$	π	1	$4.414 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra7e6	4π	$3/2\pi$	π	1	$3.604 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra1e7	4π	$3/2\pi$	π	1	$3.121 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra2e7	4π	$3/2\pi$	π	1	$2.207 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra5e7	4π	$3/2\pi$	π	1	$1.396 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra7e7	4π	$3/2\pi$	π	1	$1.140 \cdot 10^{-3}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra1e8	4π	$3/2\pi$	π	1	$9.870 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$
nu_vs_ra/ra5e8	4π	$3/2\pi$	π	1	$4.414 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$7.5 \cdot 10^{-4}$

Tabelle A.2: Eingabeparameter der Gleichungen, die in der Numerik gelöst werden, vgl. Abschnitt 2.5. Dabei ist $\beta = \frac{\delta T}{h}$ der Temperaturgradient. Teilweise wurden ähnliche Parameter mit gleichen Werten aus Platzgründen zusammengefasst (L_x, L_y und α, g, β und ν, κ).

	N_x, N_y	N_z	N_t	$N_{t,\text{out}}$	#Ens	t_{lsc}	$\frac{\Delta t \cdot N_{t,\text{out}}}{t_{\text{lsc}}}$	$k_{\text{max}} \eta_\epsilon$
ra2e7_gamma4	512	192	$3 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^3$	571	5.0	0.75	2.75
nu_vs_ra/ra1e5	256	96	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	8.4
nu_vs_ra/ra2e5	256	96	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	6.64
nu_vs_ra/ra5e5	256	96	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	4.89
nu_vs_ra/ra7e5	256	96	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	4.38
nu_vs_ra/ra1e6	256	96	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	3.89
nu_vs_ra/ra2e6	256	96	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	3.11
nu_vs_ra/ra5e6	512	192	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	4.60
nu_vs_ra/ra7e6	512	192	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	4.03
nu_vs_ra/ra1e7	512	192	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	3.68
nu_vs_ra/ra2e7	512	192	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	2.94
nu_vs_ra/ra5e7	512	192	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	2.19
nu_vs_ra/ra7e7	768	288	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	2.86
nu_vs_ra/ra1e8	768	288	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	2.60
nu_vs_ra/ra5e8	768	288	$5 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^4$	8	5.0	7.5	1.56

Tabelle A.3: Technische Eingabeparameter des Simulationsprogramms: $N_{x,y,z}$ - Anzahl Gitterpunkte (da für alle Simulationen $N_x = N_y$ gilt, wurden diese beiden Parameter in einer Spalte zusammengefasst); N_t - Gesamtanzahl Zeitschritte; $N_{t,\text{out}}$ - alle $N_{t,\text{out}}$ Zeitschritte wird ein binäres Feld vom Simulationsprogramm geschrieben; #Ens - Anzahl der binär gespeicherten „Schnappschüsse“ der Felder im stationären Bereich der Simulation, also die Anzahl an Ensemble-Mitgliedern; t_{lsc} - Zeitskala, auf der sich die großskalige Bewegung abspielt, vgl. Abschnitt 3.2.1 (t_{lsc} ist nicht entdimensionalisiert); $\frac{\Delta t \cdot N_{t,\text{out}}}{t_{\text{lsc}}}$ - zeitlicher Abstand zweier aufeinanderfolgender Schnappschüsse, gemessen in *large-scale current*-Zeiten; $k_{\text{max}} \eta_K$ - Auflösungskriterium, vgl. Abschnitt 3.6.2.

A.2 Beiliegende DVD

Um die Reproduzierbarkeit der in der Diplomarbeit benutzten Simulationen zu gewährleisten, sind sowohl der benutzte Simulationscode (im Ordner `code`) als auch die Eingabedateien (im Ordner `simulations`) für die verschiedenen Simulationen der Diplomarbeit auf DVD beigelegt.¹ Eine genaue Dokumentation der Hilfsprogramme in den Ordnern `code/rnb/cna` und `code/rnb/conv` wird an dieser Stelle nicht gegeben; bei Fragen ist sich an den Autor der vorliegenden Arbeit zu wenden. Der Ordner `videos` enthält eine Zusammenstellung von verschiedenen im Rahmen dieser Diplomarbeit entstandenen Visualisierungen der Strömungsfelder.

A.2.1 Ordnerstruktur

dvd	
├── code	Quelltexte der in der Diplomarbeit benutzten Programme
│ ├── rnb	Simulationscode
│ ├── cna	Programme zum Berechnen bedingter Mittelwerte
│ ├── conv	Programme um binär gespeicherte Felder zu konvertieren
│ └── input_files	Beispiele für Eingabedateien
├── simulations	Eingabe- und Log-Dateien der benutzten Simulationen
│ ├── bif	Bifurkationen bei kleinem Ra
│ ├── gamma2	Simulationen für $\Gamma = 2$
│ ├── gamma4_3	Simulationen für $\Gamma = 4/3$
│ ├── mirror_gamma2	Sim. mit Spiegeltechnik und $\Gamma = 2$
│ └── mirror_gamma2sqrt2	Sim. mit Spiegeltechnik und $\Gamma = 2\sqrt{2}$
│ ├── noflux	Simulationen mit <i>no flux</i> -Seitenwänden
│ ├── nu_vs_ra	Parameter-scan über einen großen Ra-Bereich
│ ├── rale5	
│ ├── ...	
│ └── ra7e7	
│ ├── ra2e7_gamma4	die in Kapitel 4 benutzte Hauptsimulation
│ ├── bin	einige binäre Felder der Simulation
│ └── log	Log-Dateien der Simulation inkl. z-Profilen
├── videos	Videos von Simulationen, siehe Abschnitt A.2.2
│ ├── misc	verschiedene Videos
│ ├── noflux	Videos der <i>no flux</i> -Simulationen
│ └── ra2e7_gamma4	Videos der Simulation <code>ra2e7_gamma4</code>

¹Wegen der großen Datenmenge können nicht die mit dem Simulationscode generierten Daten selbst auf der DVD gespeichert werden. Damit man jedoch die Programme zum Berechnen bedingter Mittelwerte und zum Konvertieren direkt testen kann, enthält der Ordner `simulations/ra2e7_gamma4/bin` einige binär gespeicherte Felder.

A.2.2 Videos

Der Ordner `videos/misc` zeigt eine lose Zusammenstellung von Videos, die im Rahmen dieser Diplomarbeit entstanden sind. Soweit vorhanden, wurden die benutzten dimensionslosen Parameter Ra , Pr und Γ angegeben; bei einigen Videos konnten die verwendeten Parameter leider nicht mehr rekonstruiert werden. Im Ordner `videos/noflux` sind Videos von Simulationen mit isolierenden Seitenwänden gezeigt, die in Abschnitt 3.7 besprochen werden. Der Ordner `videos/ra2e7_gamma4` enthält mehrere Videos der in der gesamten Diplomarbeit benutzten Hauptsimulation. Diese letztgenannten Videos werden detailliert in Abschnitt 3.1 besprochen, wobei unter anderem auf die typischen Merkmale von Rayleigh-Bénard-Konvektion eingegangen wird, die in diesen Videos zu sehen sind. Zum Abspielen der Videos wird eventuell der DivX- oder Xvid-Videocodec benötigt [Div11, Xvi11]. Viele der Videos sind ebenfalls auf dem YouTube-Kanal der Münsteraner Turbulenzforscher zu finden [LWD11]. Es folgt eine kurze Beschreibung der einzelnen Videos.

`misc/2d_rale10_T.avi`

Zweidimensionale Simulation bei $Ra = 10^{10}$, $Pr = 1$ und $\Gamma = 2$. Gezeigt ist die Temperatur.

`misc/2d_T.avi`

Zweidimensionale Simulation mit $Ra > 10^9$, $Pr = 1$ und $\Gamma \approx 1.07$. Gezeigt ist die Temperatur.

`misc/2d_T_vort.avi`

Zweidimensionale Simulation wie `misc/2d_T.avi`. Gezeigt sind nebeneinander Temperatur und Vortizität.

`misc/2d_vort.avi`

Zweidimensionale Simulation wie `misc/2d_T.avi`. Gezeigt ist die Vortizität.

`misc/livingroom.avi`

Simulation, bei der mittels der *penalization*-Methode und einer speziell erstellten Maskierungsfunktion die Konvektion in einem Wohnzimmer simuliert wurde; gezeigt ist die Temperatur.

`misc/livingroom_crosseye.avi`

Stereoskopische Variante von `misc/livingroom.avi`, die sich mit dem sog. „Kreuzblick“ dreidimensional betrachten lässt, siehe z. B. <http://de.wikipedia.org/wiki/Stereoskopie#Stereobildpaar>

`misc/livingroom_stereo.avi`

Stereoskopische Variante von `misc/livingroom.avi`, die sich mit einer rot-

cyan-Brille dreidimensional betrachten lässt, siehe z. B. <http://de.wikipedia.org/wiki/Stereoskopie#Anaglyphenverfahren>

misc/oscillating_rolls.avi

Oszillierende Konvektionsrollen bei spannungsfreien Randbedingungen. Die Parameter sind $Ra = 3500$, $Pr = 1$ und $\Gamma = 2\sqrt{2}$. Gezeigt sind die Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes, die gemäß der Temperatur eingefärbt wurden.

misc/ra1e9_T_flight.avi

Kameraflug durch ein „eingefrorenes“ Temperaturfeld bei $Ra = 10^9$ und $Pr = 1$. Es handelt sich um dasselbe Temperaturfeld wie in Abbildung 1.2b auf Seite 7.

misc/ra8e7_streamlines.avi

Variante von `misc/ra8e7_T.avi`, bei der zusätzlich zum Temperaturfeld die sich tangential an das Geschwindigkeitsfeld anschmiegenden Stromlinien gezeigt sind.

misc/ra8e7_T_angle.avi

Variante von `misc/ra8e7_T.avi`, bei der das Volumen zusätzlich unter einem gekippten Winkel gezeigt ist, sodass man die an der Oberfläche entstehenden Strukturen erkennen kann.

misc/ra8e7_T.avi

Dreidimensionale Simulation bei $Ra = 8 \cdot 10^7$, $Pr = 1$ und $\Gamma = 4/3$. Gezeigt ist die Temperatur.

misc/ra8e7_T_crosseye.avi

Stereoskopische Variante von `misc/ra8e7_T.avi` für den „Kreuzblick“, vgl. `misc/livingroom_crosseye.avi`

misc/ra8e7_T_hot.avi

Variante von `misc/ra8e7_T.avi`, bei der nur die warmen Teile des Fluids gezeigt werden.

misc/rayleigh_taylor_blob_T.avi

Simulation einer Rayleigh-Taylor-Instabilität; gezeigt ist die Temperatur (bzw. nur die warmen Teile des Fluids). Als Anfangsbedingung wurde warmes Fluid mit einer Auswölbung im unteren Bereich des Simulationsvolumens platziert. Die Temperaturdifferenz zwischen oberer und unterer Platte ist null, d. h. $Ra = 0$. Diese Situation wurde zur Visualisierung eines einzelnen *plumes* benutzt.

misc/rayleigh_taylor_blob_T_ens.avi

Wie in `misc/rayleigh_taylor_blob_T.avi`, nur ist zusätzlich noch die Enstrophie ω^2 gezeigt.

misc/rayleigh_taylor_T.avi

Simulation einer Rayleigh-Taylor-Instabilität, bei der als Anfangsbedingung kaltes Fluid oberhalb von heißem Fluid plazierte wurde. Im Gegensatz zu misc/rayleigh_taylor_blob_T.avi ist in der Anfangsbedingung keine Auswölbung vorhanden.

misc/rayleigh_taylor_T_stereo.avi

Stereoskopische Variante von misc/rayleigh_taylor_T.avi zum Betrachten mit einer rot-cyan-Brille, vgl. misc/livingroom_stereo.avi

noflux/box_rale4_streamlines.avi

Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes mit *no flux*-Seitenwänden bei $Ra = 10^4$. Das Fluidvolumen ist quaderförmig mit Seitenverhältnis Breite : Tiefe : Höhe = 7 : 3 : 1.

noflux/box_rale4_streamlines_color.avi

Wie noflux/box_rale4_streamlines.avi, zusätzlich ist die Temperatur farblich dargestellt.

noflux/cylbox_rale4_streamlines.avi

Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes mit *no flux*-Seitenwänden bei $Ra = 10^4$. Das Fluidvolumen ist ein elliptischer Zylinder (Seitenverhältnis 15 : 7 : 1), aus dem ein quaderförmiges „Loch“ (Seitenverhältnis 4 : 2 : 1) herausgeschnitten wurde. Die Artefakte oder Punkte außerhalb des Zylinders entstehen durch Stromlinien, die innerhalb des Wandbereichs starten.

noflux/cylbox_rale4_streamlines_color.avi

Wie noflux/cylbox_rale4_streamlines.avi, zusätzlich ist die Temperatur farblich dargestellt.

noflux/cyl_rale4_streamlines.avi

Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes mit *no flux*-Seitenwänden bei $Ra = 10^4$. Das Fluidvolumen ist ein elliptischer Zylinder mit Seitenverhältnis Hauptachse : Nebenachse : Höhe = 7 : 3 : 1.

noflux/cyl_rale4_streamlines_color.avi

Wie noflux/cyl_rale4_streamlines.avi, zusätzlich ist die Temperatur farblich dargestellt.

noflux/cyl_ra2e7_T.avi

Simulation eines zylinderförmigen Volumens mit Seitenverhältnis Durchmesser : Höhe = 3.5 : 1 und *no flux*-Wänden bei $Ra = 2.44 \cdot 10^7$.

ra2e7_gamma4/4panels.avi

Temperatur T , Geschwindigkeitsbetrag $|u|$, vertikale Geschwindigkeit u_z und Vortizitätsbetrag $|\omega|$ der Simulaion ra2e7_gamma4 in vier Tafeln nebeneinander gezeigt (zeilenweise von oben/links nach unten/rechts).

ra2e7_gamma4/4panels_small.avi

Wie ra2e7_gamma4/4panels.avi, nur in geringerer Auflösung.

ra2e7_gamma4/T_angle.avi

Wie ra2e7_gamma4/T.avi, nur unter einem gekippten Blickwinkel gezeigt.

ra2e7_gamma4/T.avi

Temperatur T der Simulation ra2e7_gamma4.

ra2e7_gamma4/T_uz.avi

In diesem Video wurde das Fluidvolumen in der Mitte unterteilt; in der linken Hälfte ist die Temperatur T , in der rechten die vertikale Geschwindigkeit u_z gezeigt.

ra2e7_gamma4/T_vel.avi

In diesem Video wurde das Fluidvolumen in der Mitte unterteilt; in der linken Hälfte ist die Temperatur T , in der rechten die absolute Geschwindigkeit $|u|$ gezeigt.

ra2e7_gamma4/T_vort.avi

In diesem Video wurde das Fluidvolumen in der Mitte unterteilt; in der linken Hälfte ist die Temperatur T , in der rechten die absolute Vortizität $|\omega|$ gezeigt.

ra2e7_gamma4/uz.avi

Vertikale Geschwindigkeit u_z der Simulation ra2e7_gamma4.

ra2e7_gamma4/vel.avi

Absolute Geschwindigkeit $|u|$ der Simulation ra2e7_gamma4.

ra2e7_gamma4/vort.avi

Absolute Vortizität $|\omega|$ der Simulation ra2e7_gamma4.

ra2e7_gamma4/vort_vel.avi

In diesem Video wurde das Fluidvolumen in der Mitte unterteilt; in der linken Hälfte ist die absolute Vortizität $|\omega|$, in der rechten die absolute Geschwindigkeit $|u|$ gezeigt.

A.3 Zusatzmaterialien zum Simulationsprogramm

Das Simulationsprogramm ist auf der beiliegenden DVD im Ordner `code/rnb` enthalten, um die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse sicherzustellen. Da das Programm recht umfangreich ist, sollen hier nur einige Punkte kurz erwähnt werden.

A.3.1 Schematischer Ablauf des Simulationsprogramms

Der grobe Ablauf des Simulationsprogramms gestaltet sich folgendermaßen, wobei teilweise Referenzen auf die relevanten Formeln gegeben werden:

1. Initialisierung von...
 - a) k -Vektor (2.51)
 - b) *Dealiasing*-Filter (2.55)
 - c) Maskierungsfunktion (2.45)
 - d) Felder $\omega(x)$, $\theta(x)$
2. Zeitschrittsschleife
 - a) Zeitschritt $t \rightarrow t + \Delta t$ durchführen (2.39)
 - i. $\tilde{\xi}_1$ aus $\tilde{\xi}(t)$ berechnen
 - A. $\mathcal{R}[\tilde{\xi}(t)]$ berechnen (2.36)
 - B. *dealiasing*
 - C. $\tilde{\xi}_1$ berechnen (2.39a)
 - ii. $\tilde{\xi}_2$ berechnen, siehe i.
 - iii. $\tilde{\xi}(t + \Delta t)$ berechnen, siehe i.
 - b) Δt über CFL-Kriterium anpassen (2.60)
 - c) Felder herausschreiben
 - d) Statistische Analysen durchführen, Log-Datei schreiben
 - e) Bei 2 fortsetzen
3. *Checkpointing*
4. Aufräumen, Programm beenden

A.3.2 Strukturierung des Codes

Der Quelltext des Simulationsprogramms ist auf mehrere Dateien aufgeteilt. Jede Datei enthält dabei mehrere Routinen, die sich grob zusammen gruppieren lassen. Diese Gruppierungen werden hier kurz aufgelistet:

checkpoint.c

Routinen, die das *checkpointing* übernehmen

ifp.c

Routinen zum Einlesen der Parameterdatei (`ifp` $\hat{=}$ input file parser)

mers_twist.c

Generator für hochqualitative Zufallszahlen, siehe [MN98]

rnb_array_arithm.c

Enthält Routinen zum Umgang mit den diskretisierten Feldern wie z. B. Addition, FFT, Minimum- und Maximumberechnung, Mittelwertberechnung etc.

rnb_globals.c

Deklarationen der globalen Variablen

rnb_init.c

Initialisierung der verschiedenen Felder

rnb_IO.c

Routinen zur (parallelen) Ein- und Ausgabe und zum Berechnen verschiedener Größen aus ω und θ

rnb_log.c

Routinen, die die verschiedenen Log-Dateien schreiben

rnb_main.c

Enthält die Routinen, die den eigentlichen Algorithmus beinhalten, wie z. B. `main()`, verschiedene Zeitschrittverfahren, Berechnung der Rechten-Hand-Seite, Berechnung der Nichtlinearität, CFL-Kriterium etc.

rnb_params.c

Kümmert sich um die Parameter aus der Eingabedatei, mit denen man das Verhalten des Programms steuert

A.3.3 Parameter der Eingabedatei

Das Simulationsprogramm wird über eine Eingabedatei gesteuert. Eine solche Eingabedatei ist auf der DVD unter `code/rnb/input_files/rnb.ifp` zu finden; die

Werte der Parameter in dieser Datei entsprechen den Standardwerten der Parameter. Manche der Parameter beeinflussen sich gegenseitig; z. B. kann man eine *no flux*-Wand nur dann einschalten, wenn auch das normale *volume penalization* eingeschaltet ist. Für Details ist der Quelltext oder der Autor der vorliegenden Diplomarbeit zu konsultieren. Die Parameter werden im Folgenden kurz erklärt, wobei sie so wie in der Eingabedatei gruppiert sind:

length, resolution

lx Abmessung L_x des Simulationsgebiets Ω
ly Abmessung L_y des Simulationsgebiets Ω
lz Abmessung L_z des Simulationsgebiets Ω
nx Anzahl Gitterpunkte N_x in x -Richtung
ny Anzahl Gitterpunkte N_y in y -Richtung
nz Anzahl Gitterpunkte N_z in z -Richtung

physical parameters

param_alpha Thermaler Expansionskoeffizient α
param_beta Vertikaler Temperaturgradient $\beta = \frac{\delta T}{h}$
param_nu Kinematische Viskosität ν
param_kappa Wärmediffusivität κ

timestepping

n_iter Gesamtzahl an durchzuführenden Zeitschritten
dt Zeitschritt Δt ; dieser kann sich durch das CFL-Kriterium ändern
adaptive_timestep Entscheidet, ob der Zeitschritt über CFL-Kriterium angepasst werden soll; 1 bedeutet Anpassung, 0 keine Anpassung
timestepping_scheme Wahl des Zeitschrittverfahrens. Zu Testzwecken wurden im Code mehrere Zeitschrittverfahren implementiert; ein Wert von 2 entspricht dem benutzten RK3-Verfahren.
cfl „Sicherheitsfaktor“ $0 < \lambda < 1$ des CFL-Kriteriums

wampe² and boundaries

use_wampe *Volume penalization* an- bzw. ausschalten
wampe_eps *Penalization*-Parameter η
wampe_input_binary Optionaler Dateiname einer als Datei gespeicherten Maskierungsfunktion $H(x)$
d_wampe_x Dicke einer Wand links und rechts, angegeben in Prozent der Gesamtlänge L_x
d_wampe_y Dicke einer Wand vorne und hinten, angegeben in Prozent der Gesamtlänge L_y
d_wampe_z Dicke einer Wand oben und unten, angegeben in Prozent der Gesamtlänge L_z

²Die Bezeichnung „Wampe“ resultiert ursprünglich aus einem Schreibfehler des Autors, der sich im Laufe der Zeit selbstständig hat; in der Literatur wird die Maskierungsfunktion $H(x)$ auch als „Rampe“ bezeichnet.

d_wampe_gridpoints	Dicke einer Wand oben und unten, jeweils angegeben in Anzahl an Gitterpunkten
use_mirror	Spiegeltechnik an- bzw. ausschalten
use_wampe_noflux	<i>No flux</i> -Wände an- bzw. ausschalten
wampe_noflux_eps	<i>Penalization</i> -Parameter η_{nf} der <i>no flux</i> -Wand
d_wampe_noflux_gridpoints	Dicke einer <i>no flux</i> -Wand links/rechts und vorne/hinten, jeweils in Gitterpunkten
wampe_noflux_init_cylinder	<i>No flux</i> -Wände in Form eines (elliptischen) Zylinders statt eines Quaders

IO

every_out	Nach jeweils wievielen Zeitschritten sollen Felder herausgeschrieben werden?
first_out	Ab welchem Zeitschritt soll das erste Mal herausgeschrieben werden?
binary_basename	Dateiname der Felder; wird um Zusätze erweitert, um die verschiedenen Größen unterscheiden zu können
output_vel	Sollen Geschwindigkeitskomponenten u_x , u_y , u_z herausgeschrieben werden?
output_vel_x	u_x herausschreiben?
output_vel_y	u_y herausschreiben?
output_vel_z	u_z herausschreiben?
output_abs_vel	$ u $ herausschreiben?
output_vort	Vortizitätskomponenten ω_x , ω_y , ω_z herausschreiben?
output_vort_x	ω_x herausschreiben?
output_vort_y	ω_y herausschreiben?
output_vort_z	ω_z herausschreiben?
output_ens	Enstrophie ω^2 herausschreiben?
output_temp	Temperatur T herausschreiben?
output_theta	Temperaturabweichung θ herausschreiben?
output_pressure	Druck herausschreiben?
compensate_wampe_output	Kontrolliert, ob in den durch $H(x)$ maskierten Regionen die „echten“ Werte der Felder herausgeschrieben werden sollen oder ob die Felder in diesen Regionen auf einen festen Wert gesetzt werden

logging

every_log	Nach jeweils wievielen Zeitschritten soll in die Log-Datei geschrieben werden?
every_log_detail	Nach jeweils wievielen Zeitschritten soll eine detailliertere Log-Datei angelegt werden?
logfile_basename	Dateiname der Log-Datei; wird um verschiedene Zusätze erweitert

technical settings

use_workspace	Soll für die FFTW ein sog. <i>workspace</i> angelegt werden, der die Berechnungen beschleunigt? Details in [FJ10]
use_dealias_field	Soll die <i>dealiasing</i> -Funktion tabelliert werden?

A Anhang

<code>dealias_type</code>	Welches <i>dealiasing</i> soll benutzt werden? 0 entspricht glattem, 1 entspricht $2/3$ -Filter
<code>fftw_wisdom_level</code>	Stellt das sog. <i>wisdom</i> -Level der FFTW ein. Details in [FJ10]
<code>fftw_use_wisdom</code>	Soll die FFTW <i>wisdom</i> benutzen? Details in [FJ10]

field initialization

<code>omega_rand_amp</code>	Amplitude des gaußschen Rauschens, mit dem ω initialisiert wird
<code>theta_rand_amp</code>	Amplitude des gaußschen Rauschens, mit dem θ initialisiert wird
<code>init_raylor_tayleigh</code>	Veraltet, wird nicht mehr benutzt
<code>init_blob</code>	Veraltet, wird nicht mehr benutzt
<code>compensate_temperature_gradient_init</code>	Entscheidet, ob T oder θ auf eine Rauschanfangsbedingung initialisiert wird
<code>seed</code>	Anfangswert für den Zufallszahlengenerator
<code>input_vort_x</code>	Optional Name einer Eingabedatei für ω_x
<code>input_vort_y</code>	Optional Name einer Eingabedatei für ω_y
<code>input_vort_z</code>	Optional Name einer Eingabedatei für ω_z
<code>input_theta</code>	Optional Name einer Eingabedatei für θ

auto shutdown

<code>abort_if_nan</code>	Kontrolliert, ob das Programm abgebrochen werden soll, wenn die Felder divergieren (<code>nan</code> $\hat{=}$ „not a number“)
<code>abort_now_filename</code>	Existiert diese Datei im Pfad, in dem das Programm läuft, beendet sich das Programm (da man sonst wegen der Parallelisierung leicht die Kontrolle über das Programm verliert)
<code>tll_in_minutes</code>	Nach soviel Minuten beendet sich das Programm automatisch (<code>tll</code> $\hat{=}$ „time to live“)

checkpointing

<code>start_iteration</code>	Setzt explizit den Startindex der Zeitschritt-Iteration auf den angegebenen Wert
<code>start_time</code>	Setzt explizit die Startzeit t auf den angegebenen Wert
<code>checkpoint_every</code>	Nach jeweils wievielen Zeitschritten soll ein <i>checkpoint</i> gesetzt werden?
<code>checkpoint_end</code>	Soll am Ende der Simulation ein <i>checkpoint</i> gesetzt werden?
<code>checkpoint_basename</code>	Name der <i>checkpoint</i> -Datei, wird um den Iterationsindex erweitert
<code>resume_from_checkpoint</code>	Hier gibt man eine <i>checkpoint</i> -Datei an, von der aus die Simulation weiter gerechnet werden soll

Abbildungsverzeichnis

1	Aschewolke des Eyjafjallajökull	2
2	Aufsteigender Dampf	3
1.1	Das Original-Experiment von H. Bénard	6
1.2	Beispiele des Rayleigh-Bénard-Systems	7
1.3	Das „Göttinger U-Boot“	8
2.1	Beispiele für verschiedene Maskierungsfunktionen $H(x)$	34
2.2	Das <i>aliasing</i> -Phänomen beispielhaft dargestellt	42
2.3	Vergleich von $2/3$ - und glattem <i>dealiasing</i> -Filter	43
2.4	Schematische Darstellung der <i>slab decomposition</i> des Simulationsgebietes	47
2.5	Skalierung des parallelen Simulationscodes	48
2.6	Maskierungsfunktion mit Seitenwänden	53
3.1	Visualisierung des Temperaturfeldes	58
3.2	Visualisierung der vertikalen Geschwindigkeit	58
3.3	Visualisierung des Betrags der Vortizität	59
3.4	Visualisierung des Betrags der Geschwindigkeit	59
3.5	Visualisierungen des Temperaturfeldes zu verschiedenen Zeiten	62
3.6	Visualisierungen von Temperatur, absoluter Vortizität, vertikaler Geschwindigkeit und absoluter Geschwindigkeit	63
3.7	Zeitlicher Verlauf der Temperatur T_{rms}	66
3.8	Zeitlicher Verlauf der Nusselt-Zahl	66
3.9	Zeitlicher Verlauf der Geschwindigkeit u_{rms}	67
3.10	Zeitlicher Verlauf der Vortizität ω_{rms}	67
3.11	Vertikal aufgelöster Mittelwert der Temperatur	69
3.12	Vertikal aufgelöste rms-Werte von Geschwindigkeit und Vortizität	69
3.13	Vertikal aufgelöste Standardabweichung, Schiefe und Kurtosis der Temperaturverteilung	70
3.14	Visualisierungen des Temperaturfeldes bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen	72
3.15	Verteilungsfunktionen der Temperaturfluktuationen bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen	73
3.16	Kurtosis und Standardabweichung der Temperaturfluktuationen	74
3.17	Zeitreihen der quadratisch gemittelten Temperatur für verschiedene Rayleigh-Zahlen	76

3.18	Quadratisch gemittelte Temperatur aufgetragen gegen die Rayleigh-Zahl .	76
3.19	Skalierung der Nusselt- mit der Rayleigh-Zahl	78
3.20	Skalierung der Reynolds- mit der Rayleigh-Zahl	78
3.21	Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes bei $Ra = 4931$, $\Gamma = 4/3$	79
3.22	Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion bei $\Gamma = 4/3$	80
3.23	Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion bei $\Gamma = 2$	80
3.24	Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion bei spannungsfreien Randbedingungen und $\Gamma = 2\sqrt{2}$	81
3.25	Bifurkation von Wärmeleitung zu Konvektion bei spannungsfreien Randbedingungen und $\Gamma = 2$	81
3.26	Horizontal gemittelte Temperaturabweichung vom linearen Profil	83
3.27	Horizontal gemittelte rms-Geschwindigkeit	83
3.28	Horizontal gemittelte rms-Vortizität	84
3.29	Zeitlicher Verlauf des Auflösungskriteriums	86
3.30	Vertikal aufgelöstes Auflösungskriterium	86
3.31	Horizontale und vertikale Geschwindigkeit und Temperaturabweichung im laminaren Regime	87
3.32	Horizontale und vertikale Geschwindigkeit und Temperaturabweichung im laminaren Regime bei spannungsfreien Rändern	87
3.33	Visualisierungen der Temperatur mit <i>no flux</i> -Wänden zu unterschiedlichen Zeiten	89
3.34	Visualisierung der Temperatur mit zylindrischen <i>no flux</i> -Wänden	89
3.35	Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes bei quaderförmigem Behälter . .	91
3.36	Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes in einem elliptischen Zylinder . .	91
3.37	Stromlinien des Geschwindigkeitsfeldes in einem elliptischen Zylinder mit quaderförmigem Loch	92
4.1	Farblich kodierte, logarithmisch dargestellte Temperatur-PDF $h(\tau; z)$. .	106
4.2	Temperatur-PDF $h(\tau; z)$ in logarithmischer Darstellung für verschiedene, feste z -Werte	106
4.3	Farbliche Darstellung der bedingten vertikalen Geschwindigkeit	107
4.4	Die bedingt gemittelte vertikale Geschwindigkeit für verschiedene Werte von z	107
4.5	Farbliche Darstellung des bedingten Wärmediffusionsterms	108
4.6	Der bedingt gemittelte Wärmediffusionsterm für verschiedene z -Werte .	108
4.7	Darstellung einiger Charakteristiken	111
4.8	Lösungen $g(x, t)$ für die Anfangsbedingung $g_0(x) = e^{-\frac{(x-4)^2}{2}}$	111
4.9	Das Vektorfeld $(\frac{d\tau}{ds}, \frac{dz}{ds})$ der Charakteristiken, hinterlegt mit der Temperatur-PDF	114
4.10	Die mit der Temperatur-PDF multiplizierten Charakteristiken	115

4.11	Farbliche Darstellung des bedingten Wärmedissipationsterms	120
4.12	Der bedingt gemittelte Wärmedissipationsterm für verschiedene Werte von z	120
4.13	Der z -aufgelöste „wärmedissipationsartige“ Mittelwert $\langle (\nabla T')^2 \tau', z \rangle$. .	121
4.14	Über das gesamte Fluidvolumen bestimmter bedingter Mittelwert und PDF von $(\nabla T')^2$	121
4.15	Darstellung der Temperatur-PDF und Schnitte durch diese in z -Richtung	123

Literaturverzeichnis

- [ABF99] Philippe Angot, Charles-Henri Bruneau, and Pierre Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81(4):497–520, Feb 1999.
- [AFB09] Günter Ahlers, Denis Funfschilling, and Eberhard Bodenschatz. Transitions in heat transport by turbulent convection at Rayleigh numbers up to 10^{15} . *New Journal of Physics*, 11(12):123001, Dec 2009.
- [AFHF10] John Argyris, Gunter Faust, Maria Haase, and Rudolf Friedrich. *Die Erforschung des Chaos*. Springer, Berlin / Heidelberg, 2nd revised edition, 2010.
- [AGL09] Günter Ahlers, Siegfried Grossmann, and Detlef Lohse. Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh-Bénard convection. *Rev. Mod. Phys.*, 81(2):503–537, Apr 2009.
- [Ars11] Ars Electronica. Flickr Home Page. <http://www.flickr.com/photos/arselectronica/4659422133>, Jan 2011.
- [AS72] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, New York, Dec 1972.
- [Bat87] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1987.
- [Bat93] G. K. Batchelor. *The theory of homogeneous turbulence*. Cambridge Science Classics, 1993.
- [BCES10] J. Bailon-Cuba, M. S. Emran, and J. Schumacher. Aspect ratio dependence of heat transfer and large-scale flow in turbulent convection. *Journal of Fluid Mechanics*, 655:152–173, 2010.
- [Bén00] Henri Bénard. *Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide propageant de la chaleur par convection, en régime permanent*. PhD thesis, Université de Paris, 1900.

- [Bén01] Henri Bénard. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide. — Méthodes optiques d'observation et d'enregistrement. *J. Phys. Theor. Appl.*, 10(1):254–266, 1901.
- [Bou03] J. Boussinesq. *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Gauthier-Villars, Paris, 1903.
- [Boy01] J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods: Second Revised Edition*. Dover Publications, Dec 2001.
- [BPA00] Eberhard Bodenschatz, Werner Pesch, and Günter Ahlers. Recent developments in Rayleigh-Bénard convection. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1):709–778, 2000.
- [Bus78] F. H. Busse. Non-linear properties of thermal convection. *Reports on Progress in Physics*, 41(12):1929–1967, 1978.
- [But03] J. Butcher. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. J. Wiley, London, 2003.
- [CF03] Gilles Carbou and Pierre Fabrie. Boundary layer for a penalization method for viscous incompressible flow. *Advances in Differential Equations*, 8(12):1453–1480, 2003.
- [CFL28] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische Annalen*, 100(1):32–74, Dec 1928.
- [CGH⁺89] Bernard Castaing, Gemunu Gunaratne, François Heslot, Leo Kadanoff, Albert Libchaber, Stefan Thomae, Xiao-Zhong Wu, Stéphane Zaleski, and Gianluigi Zanetti. Scaling of hard thermal turbulence in Rayleigh-Bénard convection. *Journal of Fluid Mechanics*, 204:1–30, 1989.
- [CH62] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics Volume II*. Wiley-Interscience, 1962.
- [CH93] M. C. Cross and P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 65(3):851–1112, Jul 1993.
- [Cha81] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Dover Publications, New York, 1981.
- [Chi93] Emily S. C. Ching. Probability densities of turbulent temperature fluctuations. *Phys. Rev. Lett.*, 70(3):283–286, Jan 1993.

- [CHQZ87] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- [Cly11] John Clyne. Vapor Home Page. <http://www.vapor.ucar.edu>, Jan 2011.
- [CMNR07] John Clyne, Pablo Mininni, Alan Norton, and Mark Rast. Interactive desktop analysis of high resolution simulations: Application to turbulent plume dynamics and current sheet formation. *New J. Phys.*, 9(301), 2007.
- [CR05] John Clyne and Mark Rast. A prototype discovery environment for analyzing and visualizing terascale turbulent fluid flow simulations. In *Proceedings of Visualization and Data Analysis 2005*, January 2005.
- [CT65] James W. Cooley and John W. Tukey. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Mathematics of Computation*, 19(90):297–301, Apr 1965.
- [Dai09] Anton Daitche. *Statistische und geometrische Eigenschaften turbulenter Strömungen*. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Dec 2009.
- [Dav04] P. A. Davidson. *Turbulence: An introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press, 2004.
- [Div11] DivX Home Page. <http://www.divx.com>, Jan 2011.
- [DS00] Jack Dongarra and Francis Sullivan. Guest editors' introduction: The top 10 algorithms. *Computing in Science & Engineering*, 2(1):22–23, Jan 2000.
- [ES08] M. S. Emran and J. Schumacher. Fine-scale statistics of temperature and its derivatives in convective turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 611:13–34, 2008.
- [FJ10] Matteo Frigo and Steven G. Johnson. FFTW Home Page. <http://www.fftw.org>, Oct 2010.
- [Fri99] Matteo Frigo. A Fast Fourier Transform compiler. In *Proceedings of the 1999 ACM SIGPLAN Conference on Programming Language Design and Implementation*, Atlanta, Georgia, May 1999.
- [GC84] H. S. Greenside and W. M. Coughran. Nonlinear pattern formation near the onset of Rayleigh-Bénard convection. *Phys. Rev. A*, 30(1):398–428, Jul 1984.
- [Gib98] J. W. Gibbs. Fourier's series. *Nature*, 59:200, Dec 1898.

- [Gib99] J. W. Gibbs. Fourier's series. *Nature*, 59:606, Apr 1899.
- [GL92] Siegfried Grossmann and Detlef Lohse. Scaling in hard turbulent Rayleigh-Bénard flow. *Phys. Rev. A*, 46(2):903–917, Jul 1992.
- [GL00] Siegfried Grossmann and Detlef Lohse. Scaling in thermal convection: a unifying theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 407:27–56, 2000.
- [GL01] Siegfried Grossmann and Detlef Lohse. Thermal convection for large Prandtl numbers. *Phys. Rev. Lett.*, 86(15):3316–3319, Apr 2001.
- [Hak83] Hermann Haken. *Synergetics: Introduction and advanced topics*. Springer, Berlin / Heidelberg, 1983.
- [Har04] Thomas Hartlep. *Strukturbildung und Turbulenz. Eine numerische Studie zur turbulenten Rayleigh-Bénard-Konvektion*. PhD thesis, Georg-August-Universität Göttingen, 2004.
- [HCL87] F. Heslot, B. Castaing, and A. Libchaber. Transitions to turbulence in helium gas. *Phys. Rev. A*, 36(12):5870–5873, Dec 1987.
- [HL07] Thomas Y. Hou and Ruo Li. Computing nearly singular solutions using pseudo-spectral methods. *Journal of Computational Physics*, 226:379–397, Apr 2007.
- [Hom06] Holger Homann. *Lagrangian Statistics of Turbulent Flows in Fluids and Plasmas*. PhD thesis, Ruhr-Universität Bochum, 2006.
- [JD01] F. Jenko and W. Dorland. Nonlinear electromagnetic gyrokinetic simulations of Tokamak plasmas. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 43(12A):A141–A150, 2001.
- [JWSR93] Javier Jiménez, Alan A. Wray, Philip G. Saffman, and Robert S. Rogallo. The structure of intense vorticity in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Dynamics*, 255:65–90, 1993.
- [Kad09] Benjamin Kadoch. *Transport and mixing in homogeneous and confined turbulent flows*. PhD thesis, Université de Provence, 2009.
- [Kam09] Oliver Kamps. *Lagrangesche Statistik in turbulenten Strömungen*. PhD thesis, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2009.
- [KDK⁺07] G. H. Keetels, U. D'Ortona, W. Kramer, H. J. H. Clercx, K. Schneider, and G. J. F. van Heijst. Fourier spectral and wavelet solvers for the incompressible Navier-Stokes equations with volume-penalization: Convergence

- of a dipole-wall collision. *Journal of Computational Physics*, 227(2):919–945, 2007.
- [Ker96] Robert M. Kerr. Rayleigh number scaling in numerical convection. *Journal of Fluid Mechanics*, 310:139–179, 1996.
- [Kos74] E. L. Koschmieder. Bénard convection. *Advances in Chemical Physics*, 26:177–212, 1974.
- [Kra62] Robert H. Kraichnan. Turbulent thermal convection at arbitrary Prandtl number. *Physics of Fluids*, 5(11):1374–1389, 1962.
- [KS09] Dmitry Kolomenskiy and Kai Schneider. A Fourier spectral method for the Navier-Stokes equations with volume penalization for moving solid obstacles. *Journal of Computational Physics*, 228(16):5687–5709, 2009.
- [KvW97] Yoshiyuki Kagei and Wolf von Wahl. The Eckhaus criterion for convection roll solutions of the Oberbeck-Boussinesq equations. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 32(3):563–620, 1997.
- [LP98] Christian B. Lang and Norbert Pucker. *Mathematische Methoden in der Physik*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg / Berlin, 1998.
- [Lun67] T. S. Lundgren. Distribution functions in the statistical theory of turbulence. *Physics of Fluids*, 10(5):969–975, 1967.
- [LWD11] Johannes Lülff, Michael Wilczek, and Anton Daitche. 'Turbulence Team Münster' YouTube channel. <http://www.youtube.com/user/turbulenceteamms>, Jan 2011.
- [LWF11] Johannes Lülff, Michael Wilczek, and Rudolf Friedrich. Temperature statistics in turbulent Rayleigh–Bénard convection. *New Journal of Physics*, 13(1):015002, 2011.
- [Men10] Jörg Mensmann. *Exploiting Spatial and Temporal Coherence in GPU-Based Volume Rendering*. PhD thesis, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2010.
- [MN98] Makoto Matsumoto and Takuji Nishimura. Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8:3–30, Jan 1998.
- [Mon67] A. S. Monin. Equations of turbulent motion. *Prikl. Mat. Mekh.*, 31(6):1057–1068, 1967.

- [MSRMH09] Jennis Meyer-Spradow, Timo Ropinski, Jörg Mensmann, and Klaus H. Hinrichs. Voreen: A rapid-prototyping environment for ray-casting-based volume visualizations. *IEEE Computer Graphics and Applications (Applications Department)*, 29(6):6–13, Dec 2009.
- [Nov68] E. A. Novikov. Kinetic equations for a vortex field. *Soviet Physics-Doklady*, 12(11):1006–1008, 1968.
- [NS10] J. J. Niemela and K. R. Sreenivasan. Does confined turbulent convection ever attain the 'asymptotic scaling' with $1/2$ power? *New Journal of Physics*, 12(11):115002, 2010.
- [NSSD00] J. J. Niemela, L. Skrbek, K. R. Sreenivasan, and R. J. Donnelly. Turbulent convection at very high Rayleigh numbers. *Nature*, 404:837–840, Apr 2000.
- [Obe79] A. Oberbeck. Über die Wärmeleitung der Flüssigkeiten bei Berücksichtigung der Strömungen infolge von Temperaturdifferenzen. *Ann. Phys. Chem.*, 7:271–292, 1879.
- [Ors71] Steven A. Orszag. On the elimination of aliasing in finite-difference schemes by filtering high-wavenumber components. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 28:1074, Apr 1971.
- [PAL10] PALMA Home Page. http://www.uni-muenster.de/ZIV/Technik/Server/HPC_PALMA.html, Nov 2010.
- [Pek10] Dmitry Pekurovsky. P3DFFT Home Page. <http://www.sdsc.edu/us/resources/p3dfft/index.php>, Aug 2010.
- [PLLW10] Yan Peng, Wei Liao, Li-Shi Luo, and Lian-Ping Wang. Comparison of the lattice Boltzmann and pseudo-spectral methods for decaying turbulence: Low-order statistics. *Computers & Fluids*, 39:568–591, 2010.
- [Pop84] S. B. Pope. Calculations of a plane turbulent jet. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, 22(7):896–904, 1984.
- [Pop00] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [RAB07] Isabelle Ramière, Philippe Angot, and Michel Belliard. A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:766–781, Jan 2007.

- [Ray16] Lord Rayleigh. On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side. *Philosophical Magazine*, 32(192):529–546, Dec 1916.
- [RGKS10] P.-E. Roche, F. Gauthier, R. Kaiser, and J. Salort. On the triggering of the ultimate regime of convection. *New Journal of Physics*, 12(8):085014, 2010.
- [Roc00] Daniel N. Rockmore. The FFT: An algorithm the whole family can use. *Computing in Science & Engineering*, 2(1):60–64, Jan 2000.
- [Rop10] Timo Ropinski. Voreen Home Page. <http://www.voreen.org>, Dec 2010.
- [Sar03] Scott A. Sarra. The method of characteristics with applications to conservation laws. *Journal of Online Mathematics and its Applications*, 3:1–6, 2003.
- [Sch05] Kai Schneider. Numerical simulation of the transient flow behaviour in chemical reactors using a penalisation method. *Computers & Fluids*, 34(10):1223–1238, 2005.
- [Sch09] Jörg Schumacher. Lagrangian studies in convective turbulence. *Phys. Rev. E*, 79(5):056301, May 2009.
- [SD01] Katepalli R. Sreenivasan and Russell J. Donnelly. Role of cryogenic helium in classical fluid dynamics: Basic research and model testing. *Advances in Applied Mechanics*, 37:239–276, 2001.
- [SH77] J. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15(1):319–328, Jan 1977.
- [Sha49] Claude Elwood Shannon. Communication in the presence of noise. *Proceedings of the IRE*, 37(1):10–21, 1949.
- [Sig94] E. D. Siggia. High Rayleigh number convection. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 26(1):137–168, 1994.
- [SJO90] Zhen-Su She, Eric Jackson, and Steven A. Orszag. Intermittent vortex structures in homogeneous isotropic turbulence. *Nature*, 344:226–228, Mar 1990.
- [SO88] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2):439–471, 1988.

- [SO89] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. *Journal of Computational Physics*, 83(1):32–78, 1989.
- [SQTX03] X.-D. Shang, X.-L. Qiu, P. Tong, and K.-Q. Xia. Measured local heat transport in turbulent Rayleigh-Bénard convection. *Phys. Rev. Lett.*, 90(7):074501, Feb 2003.
- [SS90] Boris I. Shraiman and Eric D. Siggia. Heat transport in high-Rayleigh-number convection. *Phys. Rev. A*, 42(6):3650–3653, Sep 1990.
- [SWJ⁺05] Volker Springel, Simon D. M. White, Adrian Jenkins, Carlos S. Frenk, Naoki Yoshida, Liang Gao, Julio Navarro, Robert Thacker, Darren Croton, John Helly, John A. Peacock, Shaun Cole, Peter Thomas, Hugh Couchman, August Evrard, Jörg Colberg, and Frazer Pearce. Simulations of the formation, evolution and clustering of galaxies and quasars. *Nature*, 435:629–636, Jun 2005.
- [VC03] Roberto Verzicco and Roberto Camussi. Numerical experiments on strongly turbulent thermal convection in a slender cylindrical cell. *Journal of Fluid Mechanics*, 477:19–49, 2003.
- [Vos09] Michel Vosskuhle. *Statistische Analysen zweidimensionaler Turbulenz*. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Aug 2009.
- [vRJH08] Maarten van Reeuwijk, Harm J. J. Jonker, and Kemo Hanjalić. Wind and boundary layers in Rayleigh-Bénard convection. I. Analysis and modeling. *Phys. Rev. E*, 77(3):036311, Mar 2008.
- [WDF10] Michael Wilczek, Anton Daitche, and Rudolf Friedrich. On the velocity distribution in homogeneous isotropic turbulence: Correlations and deviations from Gaussianity. *Journal of Fluid Mechanics*, 2010. Accepted.
- [WF09] Michael Wilczek and Rudolf Friedrich. Dynamical origins for non-Gaussian vorticity distributions in turbulent flows. *Phys. Rev. E*, 80(1):016316, Jul 2009.
- [Wil07] Michael Wilczek. *Kohärente Strukturen in turbulenten Strömungen*. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Feb 2007.
- [Wil10] Michael Wilczek. *Statistical and Numerical Investigations of Fluid Turbulence*. PhD thesis, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Nov 2010.
- [WL91] Xiao-Zhong Wu and Albert Libchaber. Non-Boussinesq effects in free thermal convection. *Phys. Rev. A*, 43(6):2833–2839, Mar 1991.

- [WL92] Xiao-Zhong Wu and Albert Libchaber. Scaling relations in thermal turbulence: The aspect-ratio dependence. *Phys. Rev. A*, 45(2):842–845, Jan 1992.
- [Xvi11] Xvid Home Page. <http://www.xvid.org>, Jan 2011.
- [Yak89] Victor Yakhot. Probability distributions in high-Rayleigh number Bénard convection. *Phys. Rev. Lett.*, 63(18):1965–1967, Oct 1989.
- [ZCL97] Jun Zhang, Stephen Childress, and Albert Libchaber. Non-Boussinesq effect: Thermal convection with broken symmetry. *Physics of Fluids*, 9(4):1034–1042, 1997.

Danksagung

Und Alle so: „Yeaahh!“

(Unbekannt, 2009)

An vorderster Stelle möchte ich meinen Eltern, meinen Schwestern und meiner Familie danken. Durch sie wurde ich während des gesamten Studiums vorbehaltlos durch Wort und Tat unterstützt, was es mir ermöglichte, mich auf mein Studium konzentrieren zu können.

Dank gebührt der Unterstützung durch Prof. Friedrich. Er hat mir während meiner Zeit in der Arbeitsgruppe den Freiraum und die Zeit gelassen, das für mich passende Thema zu finden, und war mir stets dabei behilflich, die mich interessierenden Fragestellungen auszuarbeiten und zu erörtern.

Ich möchte mich ebenfalls bei Michael Wilczek bedanken, der meine Arbeit über die gesamte Zeit mit betreut hat. Durch seine detaillierte Anleitung und die fachlichen Diskussionen mit ihm (von denen einige mehr oder weniger hart geführt wurden) konnte ich mir die für diese Arbeit nötigen Fähigkeiten aneignen. Wenn wir uns auch nie auf eine adäquate Verwendung von Satzzeichen einigen konnten, habe ich doch sehr viel von ihm über Numerik, mathematisch-analytische Herangehensweisen und physikalische Intuition gelernt. Ich möchte ebenfalls Oliver Kamps und Michel Voßkuhle erwähnen, die ebenfalls immer für mich und meine Fragen Zeit hatten.

An dieser Stelle sei auch nochmal allen Korrekturleserinnen und -lesern gedankt, die mir dabei geholfen haben, meine Arbeit ein bisschen weniger fehlerträchtig werden zu lassen. Der Wert konstruktiver Kritik ist nicht hoch genug einzuschätzen.

Die gesamte Arbeitsgruppe hat über die letzten Jahre stets eine freundliche, kollegiale Atmosphäre ausgestrahlt und mir von Anfang an das Gefühl vermittelt, „dazu zu gehören“. Deswegen möchte ich allen derzeitigen und ehemaligen Mitgliedern der Arbeitsgruppe danken, die mich in meiner Zeit in der Arbeitsgruppe begleitet haben. Die sowohl fachlichen als auch politisch-sozialwissenschaftlich-philosophisch-musikalisch-popkulturellen Diskussionen in den Stunden zwischen der Arbeit werde ich in freudiger Erinnerung behalten.

Ähnliches gilt auch für alle Kommilitonen, mit denen zusammen ich so manche trockene Vorlesung, Stunden des gemeinsamen Lernens, die bangen Minuten vor Prüfungen und die umso erleichternden Stunden danach, und schließlich das gesamte Studium durchgestanden habe. Auch wenn man sich teilweise etwas aus den Augen verloren hat (oder womöglich noch verlieren wird), möchte ich die Zeit und die Erfahrungen, die ich mit ihnen geteilt habe, nicht missen.

Erklärung zur Diplomarbeit

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbstständig angefertigt und außer den angegebenen keine weiteren Hilfsmittel verwendet zu haben.

Johannes Lülff
Münster, im Januar 2011