

# Turbulente Rayleigh-Bénard-Konvektion

Diplomarbeit  
vorgelegt von

Michael Sinhuber

Januar 2011



Westfälische Wilhelms-Universität  
Münster



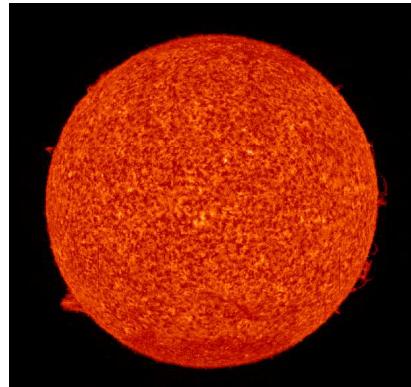
# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Rayleigh-Bénard-Konvektion . . . . .	2
1.2. Grundgleichungen . . . . .	3
1.2.1. Oberbeck-Boussinesq-Approximation . . . . .	5
1.2.2. Dimensionslose Kennzahlen . . . . .	7
1.3. Aufbau der Arbeit . . . . .	8
<b>2. Volumenpenalismierung</b>	<b>11</b>
2.1. Einführung . . . . .	11
2.2. Mathematische Grundlagen . . . . .	12
2.2.1. Räume und Normen . . . . .	12
2.2.2. Schnelle Fouriertransformation . . . . .	14
2.3. Die Penalismierungsmethode . . . . .	18
2.3.1. Penalismierung der Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	18
2.3.2. Penalismierung der Rayleigh-Bénard-Gleichungen . . . . .	21
2.3.3. Pseudospektralverfahren . . . . .	25
2.4. Zeitdiskretisierung . . . . .	27
2.4.1. Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	27
2.4.2. Aliasing . . . . .	31
2.4.3. Anforderungen an den Zeitschritt . . . . .	34
2.4.4. Anforderungen an die Auflösung . . . . .	37
2.5. Implementation von lagrangeschen Teilchen . . . . .	39
2.5.1. Interpolation der Felder . . . . .	40
2.5.2. Zeitintegration . . . . .	45
2.6. Isolierende Wände . . . . .	45
2.7. Validierung des Verfahrens . . . . .	50
2.7.1. Reproduktion der Bifurkation . . . . .	50
2.7.2. Seitenabhängigkeit der kritischen Rayleigh-Zahl . . . . .	51
2.7.3. Wandkollisionen . . . . .	52
2.7.4. Isolierende Seitenwände . . . . .	55
2.7.5. Validierung der Tracerimplementierung . . . . .	57
<b>3. Lagrangesche Darstellung</b>	<b>61</b>
3.1. Lagrangesche Geschwindigkeit . . . . .	61

3.2. Lagrangesche Abbildung . . . . .	62
3.3. Lagrangesche Rayleigh-Bénard-Gleichungen . . . . .	64
3.4. Verschiedene Anfangsbedingungen in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	65
3.4.1. Wandkollisionen . . . . .	65
3.4.2. Rayleigh-Taylor-Instabilität . . . . .	67
3.4.3. Entstehung von Plumes . . . . .	69
3.5. Rayleigh-Bénard-Konvektion in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	73
3.5.1. Periodische Ränder . . . . .	73
3.5.2. Isolierende Seitenwände . . . . .	75
<b>4. Wärmetransport</b>	<b>79</b>
4.1. Abhängigkeit der Nusseltzahl von der Rayleighzahl . . . . .	79
4.2. Abhängigkeit der Nusseltzahl vom Seitenverhältnis . . . . .	81
4.3. Einfluss von Objekten . . . . .	84
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>87</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>89</b>
A.1. Kritische Rayleighzahl . . . . .	89
A.2. Struktur der Interpolationsmatrix . . . . .	92
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>93</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>97</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>99</b>
<b>Danksagung</b>	<b>101</b>
<b>Erklärung zur Diplomarbeit</b>	<b>103</b>

# 1. Einleitung

Konvektion ist als Mechanismus für die Übertragung von Wärme durch den Transport von Teilchen Ursache einer Vielzahl natürlicher Effekte. Angefangen bei der Bildung des Erdmagnetfeldes durch den Dynamoeffekt über das Nictdurchfrieren von Seen im Winter und die Entstehung von Wolken bis hin zur Granulation an der Sonnenoberfläche zeigt sich die Konvektion als zugrundeliegender Prozess mit massivem Einfluss auf die Natur. Selbstverständlich ist auch in technischen Anwendungen der Einsatz konvektiver Prozesse nicht wegzudenken, so ist die Platzierung von Heizkörpern unter Fenstern zur Anregung der Luftzirkulation genau diesen Vorgängen geschuldet, auch der unerwünschte Transport von Wärme durch Konvektion muss in Anlagen und Geräten stets bedacht werden, was beispielsweise zur Entwicklung doppelt verglaster Fenster zur Unterdrückung konvektiver Wärmeverluste führte.



**Abbildung 1.1.:** Links ein Photo von tiefen konvektiven Sturmwolken, aufgenommen von der ISS [NASA 2003]. Rechts konvektionsbedingte Granulation an der Oberfläche der Sonne, aufgenommen von SUMER über He-Emissionslinien [SOHO 1996].

Trotz der Fülle der verschiedenen Erscheinungsformen konvektiver Prozesse und ihrer Bedeutung für Natur und Leben sind viele von ihnen noch nicht vollständig verstanden und Gegenstand aktueller wissenschaftlicher Untersuchungen. So wird allgemein angenommen, dass der Dynamoeffekt für das Erdmagnetfeld verantwortlich ist, es bleiben jedoch viele Fragen ungeklärt [Jones 2000]. Auch die Entstehung von Wolken, einem wesentlichen Faktor in allen gängigen Klimamodellen, fordert

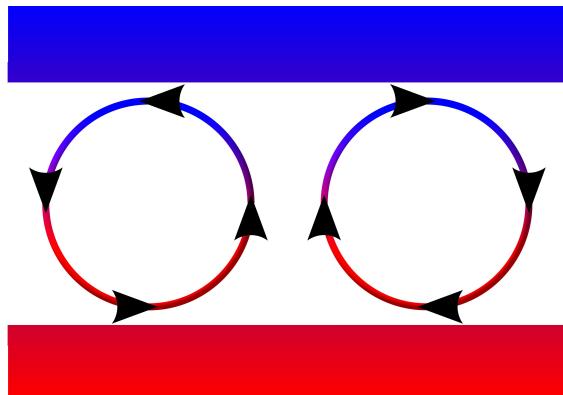
weitere intensive Forschung [Weidauer et al. 2010]. Diese Arbeit beschäftigt sich mit einem Spezialfall gravitationsgetriebener Konvektion, der Rayleigh-Bénard-Konvektion.

## 1.1. Rayleigh-Bénard-Konvektion

Bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion handelt es sich um einen Spezialfall allgemeiner Konvektionsprozesse, bei dem eine Flüssigkeit unter dem Einfluss der Gravitation zwischen zwei horizontalen Platten eingeschlossen, von unten geheizt und von oben gekühlt wird. Durch die Aufheizung verringert sich die Dichte der Flüssigkeit an der unteren Randschicht, während hingegen an der oberen Randschicht durch Kühlung eine Vergrößerung der Fluidichte verursacht wird. Durch den Einfluss der Gravitation wird nun, falls der Temperaturunterschied der beiden Platten einen kritischen Wert überschritten hat, schwerere Flüssigkeit aus den oberen Bereichen nach unten sinken, während leichtere Flüssigkeit von unten aufsteigt. Die schwere, kalte Flüssigkeit wird in den unteren Bereichen wiederum aufgewärmt und dementsprechend leichter. Wird die Temperaturdifferenz der beiden Platten aufrechterhalten, so bilden sich als erste Instabilität Konvektionsrollen, in denen Wärme durch das System transportiert wird.

Erste Beobachtungen dieses Phänomens datieren zurück auf die Wende zum 20. Jhd., zuerst beschrieben wurde eine vergleichbare Beobachtung von Thomson [Thomson 1882], der Strukturen in seifigen Flüssigkeiten beobachtete, die auf die Verdunstungsabkühlung an deren Oberflächen zurückzuführen waren. Eine erste systematische experimentelle Untersuchung leistete Henri Bénard in seiner Dissertation “Les Tourbillons cellulaires dans une nappe liquide” [Bénard 1900], in der er den Wärmetransport durch dünne Flüssigkeitsschichten an freien Oberflächen untersuchte. Eine ausführliche theoretische Beschreibung der Konvektion einer Flüssigkeit, die zwischen zwei horizontalen Platten eingeschlossen ist, wurde schließlich von Lord Rayleigh in der Veröffentlichung “On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side.” [Rayleigh 1916] geleistet. Beschrieben wird hier insbesondere, wie sich aus einem, unterhalb einer kritischen Temperaturdifferenz wärmeleitendem Zustand, ein konvektiver Zustand entwickelt, dessen grundlegende Strukturen Rollen sind. Nachzuvollziehen sind Rayleighs Überlegungen in Anhang A.1.

Das Rayleigh-Bénard-System weist, abhängig von den gewählten Parametern des Experimentes, eine große Anzahl grundsätzlich unterschiedlicher Verhaltensweisen auf, angefangen von der Strukturbildung in dünnen Schichten über die Entstehung von pilzartigen Plumes bei viskosen Fluiden bis hin zum stark turbulenten Verhalten bei sehr hohen Temperaturunterschieden. Diese Vielschichtigkeit hat das Experiment in den folgenden Jahrzehnten stets im Fokus intensiver wissenschaftlicher Untersuchungen gehalten. Erwähnenswert ist hier insbesondere die

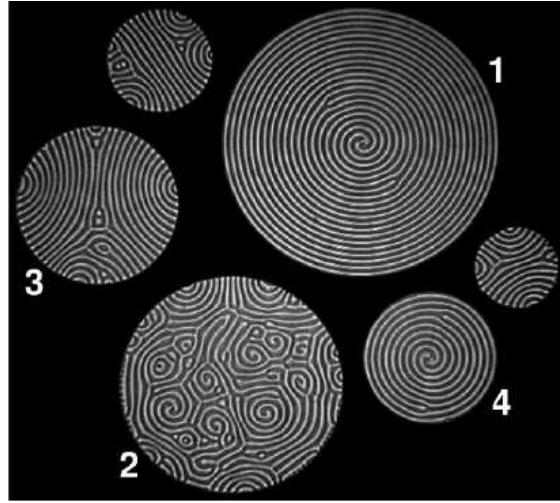


**Abbildung 1.2.:** Schematische Darstellung des Einsetzen der Konvektion. Bei Erhöhung der Rayleighzahl über eine kritische Rayleighzahl entstehen aus einem wärmeleitenden Zustand Konvektionsrollen. Die schwarzen Pfeile geben die Richtung der Geschwindigkeiten an.

Arbeit von Edward N. Lorenz zu einem einfachen Klimamodell, dass sich aus den Rayleigh-Bénard-Gleichungen herleiten lässt [Lorenz 1963]. Das chaotische Verhalten des Lorenzattraktors, der gemeinhin mit dem Schmetterlingseffekt assoziiert wird, war ein Hinweis auf die Existenz von Chaos in dissipativen Systemen. Neuere Experimente befassen sich beispielsweise mit Strukturbildung in Rayleigh-Bénard-Systemen geringer Höhe (siehe Abbildung 1.3), von großem Interesse ist auch die Formulierung einer statistischen Beschreibung turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion [Lülf et al. 2011]. Auf der beiliegenden DVD befinden sich Visualisierungen des in Kapitel 2 vorgestellten numerischen Verfahrens typischer Phänomene zweidimensionaler Rayleigh-Bénard-Konvektion im Verzeichnis "...\\Videos\\Kapitel 1\\...". Schwarze Balken entsprechen darin stets heizenden Wänden, während weiße Balken isolierende Wände symbolisieren.

## 1.2. Grundgleichungen

In diesem Abschnitt sollen die grundlegenden Gleichungen der Rayleigh-Bénard-Konvektion kurz eingeführt und auf eine Form gebracht werden, die über eine minimale Anzahl von Kontrollparametern verfügt. Für eine ausführliche Herleitung dieser Grundgleichungen sei dem Leser das Buch “Hydrodynamics and Hydromagnetic Stability” von Chandrasekhar empfohlen [Chandrasekhar 1961]. Vollständig beschrieben wird das Rayleigh-Bénard-System durch die Kenntnis des Geschwindigkeitsfeldes  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , des Druckes  $p(\mathbf{x}, t)$  und der Temperatur  $T(\mathbf{x}, t)$  sowie deren Rand- und Anfangsbedingungen. Geht man von einem inkompressiblen Newtonschen Fluid aus, so werden Druck und Geschwindigkeit durch die Navier-Stokes-Gleichungen und die Inkompressibilitätsbedingung bestimmt.



**Abbildung 1.3.:** Oberflächenaufnahme der Konvektion. Dunkle Bereiche entsprechen warmer, aufsteigender Flüssigkeit, helle Bereiche kalter, absteigender. Durchgeführt im Laboratory of Atomic and Solid State Physics, Cornell University, Ithaca, New York [Plapp et al. 1998].

Hierzu sei  $\Omega_f = [0, d_x] \times [0 : d_z]$  ein quadratisches Gebiet wie Abbildung 1.2 mit periodischen Randbedingungen für alle Felder in horizontaler Richtung. Die Geschwindigkeit soll no-slip Randbedingungen an den Wänden bei  $z = 0$  und  $z = d_z$  annehmen. Die Inkompressibilität fordert:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.1)$$

Die Navier-Stokes-Gleichungen für die Geschwindigkeit unter Berücksichtigung externer Kräfte  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$  lauten dann:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \rho (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \eta \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \rho \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \quad (1.2)$$

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega_f} = 0 \quad (1.3)$$

Weiterhin lässt sich die kinematische Viskosität  $\nu$  als Quotient aus der Viskosität  $\eta$  und der Dichte  $\rho$  der Flüssigkeit einführen, die Kraft  $\mathbf{f}$  ist eine Volumenkraft, die aufgrund der Gravitation und der Ausdehnung und damit abnehmenden Dichte der Flüssigkeit wirkt. Geht man von einer linearen Änderung der Dichte  $\rho$  des Fluids in Abhängigkeit von der Temperatur aus, so lässt sich der Kraftterm schreiben als

$$\rho \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = -\rho_0 [1 - \alpha(T - T_0)] g \mathbf{e}_z , \quad (1.4)$$

wenn  $T_0$  eine beliebige Referenztemperatur,  $\rho_0$  der Druck des Fluids bei dieser Temperatur,  $\alpha$  der Wärmeausdehnungskoeffizient und  $g$  die Erdbeschleunigung ist. Das Temperaturfeld  $T$  wird durch die Wärmetransportgleichung bestimmt, zum Transport tragen Konvektion und Diffusion bei:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{x}, t) + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) T(\mathbf{x}, t) = \kappa \Delta T(\mathbf{x}, T) \quad (1.5)$$

$$T(x, 0, t) = T_u \quad (1.6)$$

$$T(x, d_z, t) = T_o \quad (1.7)$$

Der Koeffizient  $\kappa$  ist die thermische Diffusivität des Fluids. Problematisch sind diese Gleichungen insofern, dass die Größen  $\nu$ ,  $\kappa$ ,  $\alpha$  und insbesondere der Druck von der Temperatur abhängen, was eine geschlossene Beschreibung des Rayleigh-Bénard-Systems stark erschwert. Handhabbar wird diese Problematik, wenn man zur Oberbeck-Boussinesq-Approximation übergeht, die im kommenden Abschnitt behandelt wird.

### 1.2.1. Oberbeck-Boussinesq-Approximation

Wie oben besprochen, handelt es sich bei den Parametern in den Rayleigh-Bénard-Gleichungen nicht um Konstanten, sondern um temperaturabhängige Variablen. Zunutze machen kann man sich jedoch, dass die Variationen Parameter  $\nu$ ,  $\kappa$  und  $\alpha$  bei nicht allzu großen Temperaturunterschieden sehr klein sind und vernachlässigt werden können (Bei einem Temperaturunterschied der Größenordnung  $10^0$ K liegen die Variationen von  $\alpha$  beispielsweise im Bereich  $10^{-3}$  bis  $10^{-4}$  [Chandrasekhar 1961].). Ausgenommen von dieser Vereinfachung wird lediglich der Kraftterm, der Beitrag der Variation des Druckes in diesem Term lässt sich gegenüber der Temperaturdifferenz nicht vernachlässigen. Vor allen anderen Termen kann der Druck als konstant angenommen werden, dort gilt  $\rho \approx \rho_0$ . Die Rayleigh-Bénard-Gleichung lauten demnach in Oberbeck-Boussinesq-Approximation:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.8)$$

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

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \rho_0 (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \\ -\nabla p(\mathbf{x}, t) + \eta \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \rho_0 [1 - \alpha(T - T_0)] g \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (1.10)$$

Weiter vereinfachen lassen sich diese Gleichungen, wenn man Schwankungsprofile um ein linear wärmeleitendes Profil einführt, das sich im stationären bewegungsfreien Fall entwickelt. Dieser tritt unterhalb der kritischen Rayleighzahl auf, die Geschwindigkeit verschwindet, die Temperatur lässt sich dann direkt über die

Wärmeleitungsgleichung, der Druck über die Navier-Stokes-Gleichungen bestimmen:

$$\mathbf{u} = 0 \quad (1.11)$$

$$\kappa \Delta T = 0 \quad (1.12)$$

$$-\partial_z p - \rho_0 (1 - \alpha (T - T_0)) g = 0 \quad (1.13)$$

Sowohl Druck als auch Temperatur sind nur noch von der Höhe  $z$  abhängig, die Lösung für die Temperatur ist ein lineares Profil

$$T(z) = T(0) + \frac{z}{d_z} [T(d_z) - T(0)] , \quad (1.14)$$

der Druck hängt somit quadratisch von der Höhe ab. Führt man nun die Abweichungen  $P$  und  $\theta$  der Felder von diesen Profilen ein

$$p(\mathbf{x}, t) = P(\mathbf{x}, t) + p_0(z) \quad (1.15)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = \theta(\mathbf{x}, t) + T(z) , \quad (1.16)$$

so lassen sich die Rayleigh-Bénard-Gleichungen mit  $\beta = (T(d_z) - T(0))/d_z$  weiter vereinfachen:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla P(\mathbf{x}, t) + \nu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \alpha \theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta(\mathbf{x}, t) + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \theta(\mathbf{x}, t) = \kappa \Delta \theta(\mathbf{x}, t) - \beta u_z(\mathbf{x}, t) \quad (1.19)$$

Die Randbedingungen für die Geschwindigkeit bleiben unbeeinflusst, die Temperaturschwankung  $\theta$  erfüllt Nullrandwerte in vertikaler Richtung. Durch die Einführung entdimensionalisierten Koordinaten

$$\mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{d_z} \quad (1.20)$$

$$t' = \frac{\kappa}{d_z^2} t \quad (1.21)$$

und zweier Kontrollparameter, der Prandtlzahl und der Rayleighzahl, lassen sich die Rayleigh-Bénard-Gleichungen in einer kompakten Form schreiben. Die Prandtlzahl gibt das Verhältnis von kinematischer Viskosität und thermischer Diffusivität an:

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa} \quad (1.22)$$

Für Wasser hat die Prandtlzahl den Wert 0,7, in geophysikalischen Anwendungen wird häufig mit  $\text{Pr} \rightarrow \infty$  gerechnet. Der zweite Kontrollparameter, die Rayleighzahl, stellt ein Maß für die Heizung und den Einfluss der Geometrie dar:

$$\text{Ra} = \frac{\alpha \beta g}{\nu \kappa} d_z^4 \quad (1.23)$$

Mithilfe dieser Kontrollparameter lauten die entdimensionalisierten Rayleigh-Bénard-Gleichungen:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.24)$$

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \right) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = -\nabla P(\mathbf{x}, t) + \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \text{Ra} \theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_z \quad (1.25)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla) \right) \theta(\mathbf{x}, t) = \Delta \theta(\mathbf{x}, t) + u_z(\mathbf{x}, t) \quad (1.26)$$

### 1.2.2. Dimensionslose Kennzahlen

Um das Verhalten des Rayleigh-Bénard-Systems möglichst einfach zu charakterisieren, bietet es sich an, dimensionslose Kennzahlen einzuführen, die die wesentlichen Effekte der Strömung quantifizieren. Von Interesse sind insbesondere der Grad der Turbulenz des Systems und die Wärme, die von der unteren Seite zur oberen transportiert wird. Ein Maß für den Grad der Turbulenz stellt die Reynoldszahl dar, die das Verhältnis von advektivem und diffusivem Beitrag zur Geschwindigkeit vergleicht. Führt man eine charakteristische Geschwindigkeit  $U$  und eine charakteristische Länge  $L$  ein, lässt sich die Reynoldszahl  $\text{Re}$  aus einer Dimensionsanalyse bestimmen [Pope 2001].

$$\text{Re} = \frac{\mathbf{u} \nabla \mathbf{u}}{\nu \Delta \mathbf{u}} = \frac{\frac{U^2}{L}}{\nu \frac{U}{L^2}} = \frac{UL}{\nu} \quad (1.27)$$

Die charakteristische Geschwindigkeit  $U$  wird üblicherweise über die Standardabweichung der Geschwindigkeit bestimmt, die Länge  $L$  lässt sich mit der Höhe des Systems identifizieren.

$$\sigma_u = \sqrt{\frac{1}{2} \langle \mathbf{u}^2 \rangle} \quad (1.28)$$

Von größerem Interesse als der Grad der Turbulenz ist jedoch die Wärme, die durch das System transportiert wird. Ein Maß hierfür ist die dimensionslose Nusseltzahl, die das Verhältnis von konvektivem zu kunduktivem Wärmetransport angibt. Aus der Wärmeleitungsgleichung ergibt sich für eine Schicht  $A$  konstanter Höhe  $z$  ein Ausdruck für die Nusseltzahl [Schumacher 2009]:

$$\text{Nu}(z) = \frac{\langle u_z T \rangle_{A,t} - \kappa \partial_z \langle T \rangle_{A,t}}{\kappa \frac{\Delta T}{d}} \quad (1.29)$$

Durch Integration über die Höhe des Systems lässt sich hieraus eine globaler Formulierung für den Wärmetransport ermitteln.

$$\text{Nu} = \frac{1}{d} \int_0^d \text{Nu}(z) dz = 1 + \frac{d}{\kappa \Delta T} \langle u_z T \rangle_{V,t} = 1 + \frac{1}{\kappa \beta} \langle u_z T \rangle_{V,t} \quad (1.30)$$

Diese beiden Größen bieten die Möglichkeit, wesentliche Aspekte des Verhaltens des Rayleigh-Bénard-Systems knapp zu quantifizieren. Auf das Skalierungsverhalten der Nusseltzahl bezüglich der Kontrollparameter wird in Kapitel 4 näher eingegangen.

### 1.3. Aufbau der Arbeit

Nachdem in diesem einleitenden Kapitel der Arbeit die grundlegenden physikalischen Aspekte und Gleichungen der Rayleigh-Bénard-Konvektion dargestellt wurden, werden in den folgenden Kapiteln die Ergebnisse präsentiert. Hierbei soll der Fokus auf zweidimensionaler Rayleigh-Bénard-Konvektion liegen.

Kapitel 2 präsentiert das im Rahmen dieser Arbeit verwendete numerische Verfahren. Ausgehend von bekannten Pseudospektralmethoden für die Navier-Stokes-Gleichungen soll hier dargestellt werden, wie sich Volumenpenalisierungsmethoden zur Implementation von Randbedingungen auf das Rayleigh-Bénard-System verallgemeinern lassen. Da die technische Implementierung und deren Validierung des Simulationsprogrammes einen großen Anteil der Bearbeitungszeit dieser Arbeit in Anspruch genommen hat, soll das Vorgehen in diesem Kapitel dementsprechend ausführlich beschrieben werden.

In Kapitel 3 wird eine alternative Beschreibung der Rayleigh-Bénard-Konvektion dargestellt, die auf der Einführung sogenannter “lagrangescher Koordinaten” beruht. Hierbei stehen nicht die üblichen eulerschen Feldgrößen im Mittelpunkt der Betrachtung, sondern das Verhalten physikalischer Größen entlang von Trajektorien von Tracern, die sich im Strömungsfeld bewegen.

### 1.3 Aufbau der Arbeit

---

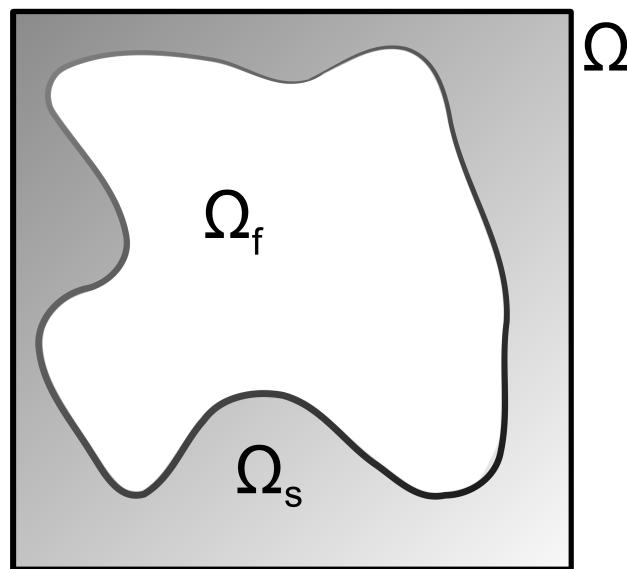
Im 4. Kapitel wird das Skalierungsverhalten des Wärmetransportes in Abhängigkeit der Kontrollparameter untersucht. Das Hauptaugenmerk liegt hierbei auf der Abhängigkeit des Wärmetransportes von dem Seitenverhältnis einer Box mit isolierenden Wänden. Abschließend wird kurz und nur phänomenologisch der Einfluss von Objekten in der Flüssigkeit besprochen.



## 2. Volumenpenalisierung

### 2.1. Einführung

Komplexe Randgeometrien und Hindernisse stellen eine große Herausforderung an numerische Verfahren für hydrodynamische Systeme dar. Herkömmliche Algorithmen zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen auf aufwendigeren Geometrien mit Randbedingungen basieren im Wesentlichen auf speziell angepassten Finite-Elemente- oder Finite-Volumen-Methoden. Die 1984 von Arquis und Caltagirone [Arquis und Caltagirone 1984] vorgeschlagene Volumenpenalisierung liefert eine alternative Herangehensweise für die Navier-Stokes-Gleichungen. Statt der direkten Implementation der Randbedingungen wird die zugrundeliegende Differentialgleichung modifiziert, um die Randbedingungen implizit zu behandeln. Hierzu wird das zu simulierende Gebiet  $\Omega_f$  in ein weiteres Gebiet  $\Omega_s$  eingebettet, sodass  $\Omega_f \cap \Omega_s = \emptyset$  und  $\Omega_f \cup \Omega_s = \Omega$ , wobei  $\Omega$  ein Gebiet mit einer einfach zu simulierender Geometrie darstellt. Hierzu siehe auch Abbildung 2.1.



**Abbildung 2.1.:** Schematische Darstellung der Gebietseinbettung. Das zu simulierende Gebiet  $\Omega_f$  mit komplexer Geometrie wird durch Einbettung in ein Gebiet  $\Omega_s$  in ein numerisch einfach handhabbares Gebiet  $\Omega$  rechteckiger Geometrie überführt.

In dem Gebiet  $\Omega_s$  wird nun ein poröses Medium durch Hinzufügen eines Rampentermes in der Differentialgleichung simuliert, sodass die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen in  $\Omega_s$  exponentiell gedämpft wird. Auf dem Rand  $\partial\Omega_s$  von  $\Omega_s$  nimmt die Lösung im Grenzfall verschwindender Porösität von  $\Omega_f$  no-slip Randbedingungen an. Der Beweis für diese Konvergenz wurde von Angot [Angot et al. 1999] geführt. Da die Ränder nun komplett durch die Differentialgleichung beschrieben werden, lässt sich hiervon ausgehend ein effizientes Pseudospektralverfahren anwenden, in dem die Geometrie über den Rampenterm realisiert wird. Dies wurde insbesondere von Kai Schneider, [Schneider 2005], Clercx [Clercx und Bruneau 2006] und anderen [Keetels et al. 2007, Keetels et al. 2008] untersucht.

In diesem Kapitel soll diese Methode nun von den Navier-Stokes-Gleichungen auf das Rayleigh-Bénard-System erweitert und auf Anwendbarkeit überprüft werden. Um eine bessere Nachvollziehbarkeit der Methode zu gewährleisten, wird eine ausführliche Herleitung ausgehend von bekannten Methoden vollzogen. Aus den Grundlagen der Abschnitte 2.2.1, 2.3.1, 2.4.1 und 2.5 wird gezeigt, wie sich die Volumenpenalisierungsmethode auf das Rayleigh-Bénard-System übertragen lässt. Abschnitt 2.6 befasst sich mit der Herleitung der Implementation isolierender Seitenwände, während in Abschnitt 2.7 das Verfahren überprüft wird. Der Quellcode des Simulationsprogrammes findet sich auf der beiliegenden DVD im Verzeichnis “...\\Quellcode\\RaBe\\...”.

## 2.2. Mathematische Grundlagen

### 2.2.1. Räume und Normen

Die korrekte Herleitung der Volumenpenalisierung bedarf der Erklärung einiger mathematischer Normen und Formalismen, was an dieser Stelle nach [Alt 2006] und [Ohlberger 2008b] geschehen soll. Hierzu sei im gesamten Abschnitt  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ein **Gebiet**, also eine offene, nichtleere und zusammenhängende Teilmenge eines topologischen Raumes und  $x \in \Omega$ .

Zur Fehlerabschätzung des Verfahrens müssen geeignete Normen verwendet werden, wobei die gängigsten, die  $L^p$ -Norm und die  $H^{m,p}$ -Norm, hier kurz eingeführt werden sollen.

**Definition 2.2.1 ( $L^p$ -Räume)** Sei  $f$  eine Lebesgue-messbare Funktion.  $L^p(\Omega)$  mit  $p \in [1, \infty)$  bezeichnet dann den Raum der Lebesgue-messbaren Funktionen  $f$ , für die  $f^p$  Lebesgue-integrierbar ist. Mit der dazugehörigen Norm

$$\|f\|_p := \left( \int_{\Omega} |f|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.1)$$

ist  $L^p(\Omega)$  ein Banachraum.

Insbesondere ist  $L^2$  ein Hilbertraum mit dem Skalarprodukt:

$$(f, g)_{L^2(\Omega)} := \int_{\Omega} f g \mathrm{d}x \quad (2.2)$$

Die  $L^\infty$ -Norm ist als wesentliches Supremum zu verstehen:

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} := \operatorname{ess\,sup}_{\Omega} |f| \quad (2.3)$$

Um Abschätzungen über die Ableitung einer Funktion zu erhalten, die unter Umständen nicht klassisch differenzierbar ist, eignet sich die  $H^{m,p}$ -Norm. Hierzu muss zunächst eine schwache Ableitung definiert werden, die den Begriff der klassischen Ableitung auf nichtstetige Funktionen erweitert. Hierzu seien  $C_0^\infty(\Omega)$  die unendlich oft auf  $\Omega$  differenzierbaren Funktionen  $C^\infty(\Omega)$  mit kompaktem Träger und  $L_{loc}^1(\Omega)$  die auf  $\Omega$  lokal integrierbaren Funktionen. Dann lässt sich eine schwache Ableitung wie folgt einführen:

**Definition 2.2.2 (Schwache Ableitung)** Sei  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$  ein Multiindex. Dann heißt  $v_\alpha \in L_{loc}^1(\Omega)$  schwache Ableitung  $D^\alpha f$  von  $f \in L_{loc}^1(\Omega)$ , wenn für alle  $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$  gilt:

$$\int_{\Omega} f D^\alpha \varphi = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v_\alpha \varphi \quad (2.4)$$

So behalten die üblichen Ableitungsregeln wie Ketten- und Produktregel auch für die schwache Ableitung ihre Gültigkeit und es lassen sich Sobolev-Räume wie folgt definieren:

**Definition 2.2.3 (Sobolev-Räume)** Seien  $m \in \mathbb{N}$  und  $p \in [1, \infty)$  sowie  $f \in L_{loc}^1(\Omega)$ . Zudem existieren alle schwachen Ableitungen  $D^\alpha f$  von  $f$  mit  $|\alpha| \leq m$ . Dann ist die Sobolevnorm von  $f$  für  $1 \leq p < \infty$  definiert durch

$$\|f\|_{H^{m,p}(\Omega)} := \left( \sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha f\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.5)$$

und für  $p = \infty$  durch

$$\|f\|_{H^{m,\infty}(\Omega)} = \max_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha f\|_{L^\infty(\Omega)} \quad (2.6)$$

Sobolevräume  $H^{m,p}(\Omega)$  ergeben sich dann über diese Norm zu:

$$H^{m,p}(\Omega) := \{f \in L_{loc}^1(\Omega) \mid \|f\|_{H^{m,p}(\Omega)} < \infty\} \quad (2.7)$$

Für gewöhnlich wird  $H^m(\Omega)$  statt  $H^{m,2}(\Omega)$  geschrieben, die Sobolev-Halbnorm berücksichtigt nur die Ableitungen höchster Ordnung:

$$|f|_{H^{m,p}(\Omega)} := \left( \sum_{|\alpha|=m} \|D^\alpha f\|_{L^p(\omega)}^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (2.8)$$

Die partielle Integration gilt weiterhin auf Sobolev-Räumen, mit  $f \in H^1(\Omega)$  und  $\mathbf{v} \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^d)$  ergibt sich:

$$\int_{\Omega} \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) \cdot f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} ds \quad (2.9)$$

Mit diesen Normen erhält man das wichtigste Handwerkzeug, um die Penalisationsmethode herzuleiten und deren Fehler abzuschätzen.

### 2.2.2. Schnelle Fouriertransformation

Eine gängige Methode zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen bieten Spektralverfahren, die durch Transformation der Gleichungen auf neue Basisfunktionen Ableitungsoperatoren in einfache Multiplikationen überführen. Ist diese Transformation vollzogen, lassen sich die Gleichungen mit bekannten Methoden für gewöhnliche Differentialgleichungen lösen, statt auf speziell auf partielle Differentialgleichungen angepasste und aufwendige Methoden zurückgreifen zu müssen. Hier soll lediglich die Fouriertransformation [Werner 2005] behandelt und auf die Diskussion der Verwendung alternativer Basisfunktionen wie den Chebyshev-Polynomen [Bronstein et al. 2001] verzichtet werden.

**Definition 2.2.4 (Fouriertransformation)** Die Fouriertransformation  $\tilde{f}(\mathbf{k}) := \mathcal{F}(f(\mathbf{x}))$  einer Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , mit  $f(\mathbf{x}) \in L^1(\mathbb{R}^n)$  ist definiert als:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) e^{-i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \quad (2.10)$$

Sofern  $\tilde{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$ , existiert die Umkehrtransformation und es gilt:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \quad (2.11)$$

Im Fourieraum lassen sich Ortsableitungen durch Multiplikationen darstellen:

$$\mathcal{F}(D^\alpha f(\mathbf{x})) = i^{|\alpha|} \mathbf{k}^\alpha \mathcal{F}(f(\mathbf{x})) \quad (2.12)$$

Insbesondere gilt also:

$$\mathcal{F} \left( \frac{\partial}{\partial x_j} f(\mathbf{x}) \right) = ik_j \mathcal{F}(f(\mathbf{x})) \quad (2.13)$$

$$\mathcal{F}(\Delta f(\mathbf{x})) = -k^2 \mathcal{F}(f(\mathbf{x})) \quad (2.14)$$

Diese Regeln gelten jedoch nur für lineare Operation, Multiplikationen im Ortsraum vereinfachen sich im Fourierraum nicht, sondern werden zu numerisch teuren Faltungen, was später die Einführung eines pseudospektralen Verfahrens erzwingt, bei dem die nichtlinearen Terme weiter im Ortstraum behandelt werden.

$$\mathcal{F}(f \cdot g) = \mathcal{F}(f) * \mathcal{F}(g) \quad (2.15)$$

Mit periodischen Randbedingungen zerfällt das Fourierintegral in eine Reihe, da lediglich diskrete Wellenzahlen ausgewählt werden. Ist die zu transformierende Funktion zudem nur an endlich vielen Stellen bekannt, muss man zur endlichen diskreten Fouriertransformation übergehen.

**Definition 2.2.5 (Diskrete Fouriertransformation)** Sei  $f_k := f(x_k) \in \mathbb{C}$  eine Folge komplexer Funktionswerte einer Funktion  $f$  auf einem Gitter  $x_N$  mit  $N$  Stützstellen. Dann lässt sich  $f_k$  als

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \tilde{f}_j e^{\frac{2\pi i}{N} kj} \quad (2.16)$$

darstellen, wenn für die Fourierkoeffizienten  $\tilde{f}_k$  gilt:

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{-\frac{2\pi i}{N} kj} \quad (2.17)$$

Durch die Verwendung von endlich vielen Fouriermoden lassen sich Funktionen approximieren, die Konvergenzrate der Fourierprojektion  $(S_N f)(x)$  einer Funktion  $f$  mit  $N$  Stützstellen ist abhängig von der Regularität der Funktion; ist  $f \in C^p$ , konvergiert die Projektion gleichmäßig, und es gilt [Stromberg 1981]:

$$|f(x) - (S_N f)(x)| \leq c N^{-p} \log N \quad (2.18)$$

Dies führt für nichtstetige Funktionen zu den bekannten Gibbs-Oszillationen. Alle wichtigen Eigenschaften der kontinuierlichen Fouriertransformation übertragen

sich auf die diskrete Variante, insbesondere vereinfachen sich Ableitungen wie in Gleichung (2.12). Diese Berechnungsformel für die Koeffizienten der diskreten Fouriertransformation ist numerisch jedoch unhandlich. Für jeden der  $N$  Koeffizienten sind  $O(N)$  Rechenoperationen notwendig, der numerische Aufwand einer Transformation wäre also selbst beim Ausnutzen von Symmetrieeigenschaften von Fouriertransformierten reeller Funktionen der Größenordnung  $O(N^2)$ . Abhilfe verschafft die schnelle Fouriertransformation, die 1965 von Cooley und Turkey entwickelt wurde und den numerischen Aufwand durch einen divide-and-conquer Algorithmus, bei dem das gesamte Problem in mehrere kleine Probleme zerlegt wird, auf  $O(N \log_2 N)$  Operationen reduziert [Cooley und Tukey 1965]. Um zu verdeutlichen, wie entscheidend für die Geschwindigkeit und somit Anwendbarkeit eines numerischen Verfahrens diese Verbesserung ist, soll hier eine kurze Abschätzung dargestellt werden. Geht man von einem zweidimensionalen Problem mit üblichen Größen zwischen  $256^2$  und  $2048^2$  Gitterpunkten aus, so lässt sich für die Größenordnung der benötigten Operationen nach Tabelle 2.1 leicht erkennen, dass der numerische Mehraufwand für ein  $O(N^2)$ -Verfahren so groß ist, dass diese in der Praxis nicht anwendbar sind.

$N$	$O(N^2)$	$O(N \log_2 N)$
$256^2$	$4,3 \cdot 10^9$	$1,0 \cdot 10^6$
$512^2$	$6,9 \cdot 10^{10}$	$4,7 \cdot 10^6$
$1024^2$	$1,1 \cdot 10^{12}$	$2,1 \cdot 10^7$
$2048^2$	$1,8 \cdot 10^{13}$	$9,2 \cdot 10^7$

**Tabelle 2.1.:** Vergleich des numerischen Aufwandes der Fouriertransformationen

Ist nun die Anzahl der Gitterpunkte  $N$  eine Potenz  $z^m$  einer kleinen ganzen Zahl  $z$ , lässt sich der Aufwand der Fouriertransformation mittels des Cooley-Tukey-Verfahrens auf  $O(N \log_2 N)$  Additionen und Multiplikationen reduzieren. Diese Voraussetzung stellt keine große Einschränkung dar, da die numerischen Gittergrößen in der Regel in gewissem Rahmen frei gewählt werden können. Theoretisch am effektivsten ist zwar die Wahl  $z = 3$  [Cooley und Tukey 1965], aufgrund der binären Natur von Computern bietet sich aber die Wahl  $z = 2$  an, für die hier das Verfahren erläutert werden soll. Sei hierzu  $\tilde{f}_k$  ein Fourierkoeffizient nach Gleichung (2.17). Zur Berechnung dieses Koeffizienten zerlegt man die Summe zunächst in gerade und ungerade Anteile:

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \left( \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} e^{-\frac{2\pi i}{N}(2j)k} + \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j+1} e^{-\frac{2\pi i}{N}(2j+1)k} \right) \quad (2.19)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \left( \underbrace{\sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}jk}}_{F_k^g} + e^{-\frac{2\pi i}{N}k} \underbrace{\sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j+1} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}jk}}_{F_k^u} \right) \quad (2.20)$$

Es sind folglich zwei Fouriertransformationen der Länge  $N/2$  zu berechnen, eine Transformation  $F_k^g$  für die geraden Indizes und eine Transformation  $F_k^u$  für die ungeraden. Für  $N/2 \leq k < N$  entsprechen die Koeffizienten aufgrund der Periodizität der Fouriertransformation denen für  $0 \leq k < N/2$ , die Einheitswurzel, der sogenannte Twiddlefaktor  $e^{-\frac{2\pi i}{N}k}$  vor der ungeraden Transformation ändert lediglich sein Vorzeichen [Gentleman und Sande 1966]:

$$\tilde{f}_k = \begin{cases} F_k^g + e^{-\frac{2\pi i}{N}k} F_k^u & \text{für } k < N/2 \\ F_{k-N/2}^g + e^{-\frac{2\pi i}{N}(k-N/2)} F_{k-N/2}^u & \text{für } N/2 \leq k < N \end{cases} \quad (2.21)$$

Nun werden die Transformationen der Länge  $N/2$  weiter zerlegt, die gerade Transformation  $F_k^g$  in eine gerade-gerade Transformation  $F_k^{gg}$  und eine gerade-ungerade  $F_k^{gu}$  der Längen  $N/4$ . Das Vorgehen für die ungerade Transformation erfolgt analog [Danielson und Lanczos 1942]. Setzt man diese Zerlegung nun sukzessive fort, benötigt man  $\log N$  Zerlegungen, um auf  $N$  Fouriertransformationen der Länge eins zu kommen. Diese stellen nach Gleichung (2.17) lediglich Identitätsoperationen dar. Für jedes  $n \in 0, \dots, N-1$  gibt es nun eine Kombination (...) von  $\log_2 N$  g's und u's, sodass

$$F_k^{(\dots)} = f_n \quad (2.22)$$

ein Element des Eingabevektors  $f$  ist. Sortiert man die Elemente von  $f$  geeignet in einer bit-reversed Ordnung an, so können benachbarte Paare von Fouriertransformationen der Länge eins zunächst mit dem Twiddlefaktor zu Transformationen der Länge zwei zusammengesetzt werden. Die resultierenden Nachbarn lassen sich wieder zu Transformationen doppelter Länger kombinieren, bis letztendlich die volle Transformation entsteht [Press et al. 2007]. Verwendet man die Ergebnisse der Subtransformationen weiter, müssen für eine volle Fouriertransformation  $\log_2 N$ -mal  $O(N)$  Operationen durchgeführt werden, es resultiert ein  $O(N \log_2 N)$ -Algorithmus.

In dem in dieser Arbeit entwickelten Code wird zur Berechnung der Fouriertransformationen die “Fastest Fourier Transformation of the West” (FFTW) verwendet, eine Open Source Bibliothek, die die Transformation auf die jeweilig verwendeten Prozessoren optimiert und Parallelrechnen ermöglicht. Nach eigenen Angaben gehört sie zu den schnellsten Transformationen der Welt und stellt sicher, dass für beliebige Gittergrößen der  $O(N \log_2 N)$ -Aufwand erhalten bleibt [Frigo und Johnson 1997].

## 2.3. Die Penalismethode

### 2.3.1. Penalismierung der Navier-Stokes-Gleichungen

Wie in Abschnitt 2.1 geschildert, werden im Volumenpenalisierungsverfahren no-slip Randbedingungen für die Navier-Stokes-Gleichungen durch Einbetten des Flüssigkeitsgebietes  $\Omega_f$  in ein Gebiet  $\Omega_s$  eines porösen Materials realisiert. In porösen Medien gilt Darcys Gesetz:

$$\nabla p = -\frac{K}{\mu} \mathbf{u} \quad (2.23)$$

Hier bezeichnet  $K$  die spezifische Permeabilität des Mediums und  $\mu$  die dynamische Viskosität. In einem porösen Medium ist die Geschwindigkeit also proportional zum Druckgradienten [Darcy 1856, Nield und Bejan 2006]. Sei nun  $\mathbf{u}$  die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u} \mathbf{f} \quad (2.24)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.25)$$

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega_f} = 0 \quad (2.26)$$

auf  $\Omega_f$  mit no-slip Randbedingungen auf  $\partial\Omega_f$ . Hierbei ist  $p(\mathbf{x}, t)$  der Druck und die Reynoldszahl  $\text{Re}$  gibt das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften an und ist ein Maß für den Grad der Turbulenz. Aufgrund der Inkompressibilität verschwindet die Normalenableitung der Geschwindigkeit auf dem Rand:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (2.27)$$

Um nun eine Einbettung wie in Abschnitt 2.1 zu konstruieren, definiert man sich zunächst eine Maskenfunktion  $\chi$  wie folgt:

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_s \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.28)$$

Sei nun  $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_s$  das Simulationsgebiet und unterscheidet man zwischen  $\Omega_f$  und  $\Omega_s$  über die Maskenfunktion  $\chi$ , dann ist die grundsätzliche Idee der Volumen-penalisierte Navier-Stokes-Gleichungen in dem porösen Gebiet  $\Omega_f$  durch ein Darcy-ähnlichen Zusatzterm so zu modifizieren, dass die Dynamik in  $\Omega_s$  weiterhin durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben wird und durch Gleichung (2.23) die korrekten Randbedingungen erzwungen werden [Schneider 2005].

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_\eta + \mathbf{u}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta + \nabla p - \frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u}_\eta + \frac{1}{\eta} \chi \mathbf{u}_\eta = \mathbf{f} \quad (2.29)$$

Der zusätzliche Term  $\frac{1}{\eta} \chi \mathbf{u}_\eta$  beschreibt das Gebiet  $\Omega_s$  porösen Materials (siehe Abbildung 2.1). Im Grenzfall vernachlässigbarer Porösität  $\eta \rightarrow 0$  ist zu zeigen, dass die Lösung nach Gleichung (2.23) in  $\Omega_s$  verschwindet und no-slip Randwerte auf  $\partial\Omega_f$  annimmt. Ist  $\mathbf{u}$  die Lösung der unmodifizierten Navier-Stokes-Gleichungen (2.24) auf  $\Omega_s$ ,  $\hat{\mathbf{u}}$  deren  $L^2$ -Fortsetzung auf  $\Omega_s$

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{u} & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_f \\ 0 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_s \end{cases} \quad (2.30)$$

und  $\mathbf{u}_\eta$  die Lösung der penalisierten Gleichung (2.29) auf  $\Omega$ , so muss für die Anwendbarkeit des Verfahrens für alle Zeiten gelten:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} |\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_\eta|_{L^2(0,t;\Omega)} = 0 \quad (2.31)$$

Insbesondere ist die Konvergenzrate der Methode von Interesse, also ein Ausdruck der Form

$$|\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_\eta|_{L^2(0,t;\Omega)} \leq g(t) \eta^\alpha \quad (2.32)$$

mit einer Funktion  $g \in C^0(\mathbb{R})$  und möglichst großem  $\alpha$ . Der Beweis hierfür wurde von Angot geführt und soll hier nur kurz skizziert werden [Angot et al. 1999]. Hierzu geht man von der schwachen Formulierung der penalisierten Navier-Stokes-Gleichungen aus. Dazu sei  $\varphi \in H_0^1(\Omega)$  mit  $\text{div} \varphi = 0$  eine sonst beliebige Testfunktion mit kompaktem Träger. Dann erhält man aus Gleichung (2.29) durch Multiplikation mit  $\varphi$  und partieller Integration die schwache Formulierung der

Navier-Stokes-Gleichungen. Diese Darstellungsweise stellt geringere Regularitätsanforderungen an die Funktionen ( $\mathbf{u} \in H^1$  statt  $\mathbf{u} \in C^2(\Omega)$ ) und bietet direkte Möglichkeiten, Randbedingungen durch spezielle Wahlen der Testfunktionen einzubinden. Zudem sollte erwähnt sein, dass jede Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen auch immer eine schwache Lösung der schwachen Navier-Stokes-Gleichungen ist.

$$\langle \partial_t \mathbf{u}_\eta, \varphi \rangle + \frac{1}{\text{Re}} \int_\Omega \nabla \mathbf{u}_\eta \cdot \nabla \varphi dx + \int_\Omega \mathbf{u}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta \varphi dx + \frac{1}{\eta} \int_\Omega \chi \mathbf{u}_\eta \varphi dx = \int_\Omega f \varphi dx \quad (2.33)$$

$$\mathbf{u}_\eta(0, \cdot) = 0 \quad (2.34)$$

Setzt man hier  $\varphi = \mathbf{u}_\eta$  und geht zu den Normen über ( $\|\cdot\|_{-1}$  bezeichnet die Norm im Dualraum zu  $H^1(\Omega)$ ), so erhält man zunächst:

$$\frac{d}{dt} |\mathbf{u}_\eta(t)|^2 + \frac{1}{\text{Re}} |\nabla \mathbf{u}_\eta(t)|^2 + \frac{2}{\eta} \int_\Omega \chi(\mathbf{x}) \mathbf{u}_\eta(t, \mathbf{x}) dx \leq \frac{1}{\text{Re}} \|f\|_{-1}^2 \quad (2.35)$$

Hieraus lässt sich mit einem technischen mathematischen Aufwand zeigen, dass die Folge  $(\mathbf{u}_\eta)_\eta$  für  $\eta \rightarrow 0$  gegen eine Funktion  $u$  konvergiert, für die gilt:

$$u|_{\Omega_s} = 0 \quad (2.36)$$

und  $u|_{\Omega_f}$  die eindeutige schwache Lösung der nicht penalisierten schwachen Navier-Stokes-Gleichungen

$$\langle \partial_t \mathbf{u}, \varphi \rangle + \frac{1}{\text{Re}} \int_{\Omega_f} \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi dx + \int_{\Omega_f} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \varphi dx = \int_{\Omega_f} f \varphi dx \quad (2.37)$$

$$\mathbf{u}_\eta(0, \cdot) = 0 \quad (2.38)$$

auf  $\Omega_f$  mit no-slip Randbedingungen auf  $\partial\Omega_f$  ist. Um den Fehler abschätzen zu können, nimmt man an, dass sich die Lösung  $\mathbf{u}_\eta$  von Gleichung (2.33) darstellen lässt als  $\mathbf{u}_\eta = \mathbf{u} + \eta \bar{\mathbf{u}}_\eta$ . Setzt man dies in Gleichung (2.33) ein und setzt zugleich  $\varphi = \bar{\mathbf{u}}_\eta$ , so ergibt sich nach wiederum einigen technischen Rechnungen:

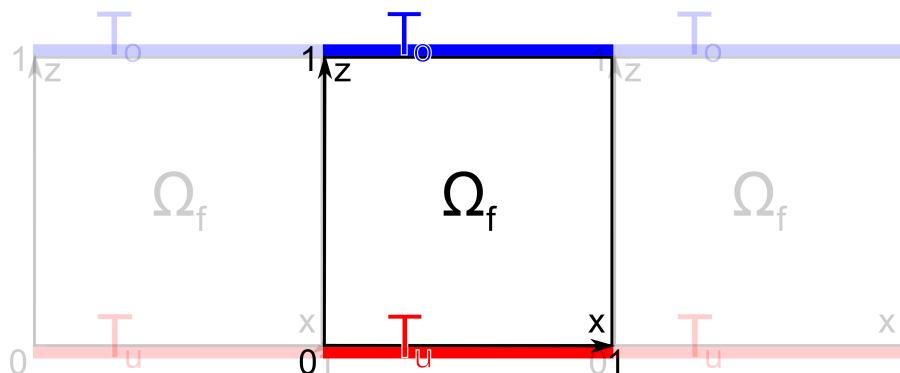
$$|\mathbf{u}_\eta - \mathbf{u}|_{L^2(0,t;\Omega)} \leq g(t) \eta^{\frac{3}{4}} \quad (2.39)$$

Die penalisierte Gleichung konvergiert also mit  $\eta^{0.75}$  gegen die Lösung des ursprünglichen Problems (2.24). Theoretisch ließe sich die Konvergenz verbessern, wenn man statt der hier vorgestellten  $L^2$ -Penalisierung eine  $H^1$ -Penalisierung einführen würde, die zusätzlich die linearen Ableitungsterme maskiert. Im besten

Fall ergibt sich hier eine Konvergenzrate von  $\eta^1$ , in der Praxis liefert diese Methode aber schlechtere Ergebnisse als die  $L^2$ -Penalismethode [Angot et al. 1999]. Durch diese Methode lassen sich aufwendigere Randgeometrien und Hindernisse durch die Wahl der Maskenfunktion  $\chi$  ohne Änderung des Verfahrens realisieren, die Geometrie wird intuitiv direkt in die Gleichungen modelliert. Dies stellt einen großen Vorteil gegenüber diversen üblichen Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen dar, bei denen die Implementation komplexer Geometrien durchaus problematisch sein kann.

### 2.3.2. Penalismethode der Rayleigh-Bénard-Gleichungen

Ausgehend von den Erkenntnissen aus Abschnitt 2.3.1 soll nun eine äquivalente Methode für das Rayleigh-Bénard-System entwickelt werden. Die Navier-Stokes-Gleichungen lassen sich analog zu Abschnitt 2.3.1 modifizieren, bei der Wärmetransportgleichung sind einige weitere Änderungen notwendig [Gurevich 2009]. Zunächst soll die einfachst mögliche Geometrie des zweidimensionalen Rayleigh-Bénard-Systems betrachtet werden: Auf dem Gebiet  $\Omega_f = [0, 1] \times [0, 1]$  sollen periodische Randbedingungen für Temperatur und Geschwindigkeit in horizontaler  $x$ -Richtung und no-slip Randbedingungen für die Geschwindigkeit an den horizontalen Wänden gelten. Zudem soll die Temperatur der unteren Wand  $T(\cdot, 0)$  den Wert  $T_u$  annehmen und die der oberen Wand  $T(\cdot, 1)$  den höheren Wert  $T_o$ .



**Abbildung 2.2.:** Klassische Rayleigh-Bénard-Geometrie. Eine Flüssigkeit in dem Gebiet  $\Omega_f$  wird von unten durch eine Platte der Temperatur  $T_u$  geheizt und oben von einer parallelen Platte der Temperatur  $T_o$  gekühlt. Die horizontale Ausdehnung des Systems ist unendlich groß und wird durch die Annahme periodischer Randbedingungen simuliert.

Wie schon in Kapitel 1 dargestellt, übertragen sich die Randbedingungen für die Temperatur in Nullrandwerte für die Abweichung vom linearen Profil  $\theta$ . Die Rayleigh-Bénard-Gleichungen für den Fall periodischer Ränder lauten also im entdimensionalisierten Fall:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.40)$$

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \right) \mathbf{u} = -\nabla P + \Delta \mathbf{u} + \text{Ra} \theta \mathbf{e}_z \quad (2.41)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \right) \theta = \Delta \theta + \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_z \quad (2.42)$$

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega_f} = 0 \quad (2.43)$$

$$\theta|_{\partial\Omega_f} = 0 \quad (2.44)$$

$$\mathbf{u}(t, x+1, z) = \mathbf{u}(t, x, z) \quad (2.45)$$

$$\theta(t, x+1, z) = \theta(t, x, z) \quad (2.46)$$

Die periodischen Randbedingungen in x-Richtung werden später durch das pseudospektrale Verfahren automatisch erfüllt, die horizontalen Wände müssen über die Penalismethode realisiert werden. Die Navier-Stokes-Gleichungen für die Geschwindigkeit lassen sich analog zu Abschnitt 2.3.1 behandeln, wenn man die Maskenfunktion  $\chi$  wie in Abbildung 2.3.2 wählt.



$$\Omega_s$$



$$\Omega_f$$



$$\Omega_s$$

**Abbildung 2.3.:** In  $\Omega_f$  wird  $\chi$  zu Null gewählt (Weiß), in  $\Omega_s$  zu eins (Schwarz). Aufgrund der periodischen Randbedingungen in horizontaler Richtung ergibt sich obige Wahl von  $\chi$ .

Der Kopplungsterm mit der Geschwindigkeit wurde in Abschnitt 2.3.1 indirekt über den Kraftterm  $f$  behandelt und bedarf deshalb keiner weiterer Modifikationen. Um die Randbedingungen für die Wärmetransportgleichung zu erfüllen, muss diese ebenfalls im Sinne der Volumenpenalisierung modifiziert werden. Die zentrale Idee ist nun, dass sich diese Modifikation erreichen lässt, wenn man in dem porösen Gebiet  $\Omega_s$  einen zusätzlichen Term zur Wärmetransportgleichung hinzufügt, der analog zu Gleichung (2.23) eine exponentielle Dämpfung verursacht. Da die Temperaturabweichung  $\theta$  gerade so gewählt wurde, dass diese auf den Wänden ver-

schwindet, lässt sich eine der Navier-Stokes-Penalisation gleichartige Modifikation der Wärmetransportgleichung etablieren, die im Grenzfall  $\eta \rightarrow 0$  Nullrandwerte für  $\theta$  auf den Wänden erzeugt. Dies bedeutet, dass nach Kapitel 1 genau die korrekten Randbedingungen für die Temperatur erfüllt werden:  $T(0) = T_u$  und  $T(1) = T_o$ . Schreibt man nun die Gleichungen für die Variablen  $\mathbf{u}_\eta$ ,  $\theta_\eta$  und  $P_\eta$  der penalisierten Gleichungen, ergibt sich folgendes System:

$$\frac{1}{Pr} \left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \right) \mathbf{u}_\eta = -\nabla P_\eta + \Delta \mathbf{u}_\eta + Ra \theta_\eta \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathbf{u}_\eta \quad (2.47)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \right) \theta_\eta = \Delta \theta_\eta + \mathbf{u}_\eta \cdot \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \theta_\eta \quad (2.48)$$

Problematisch ist insbesondere der Druckterm  $\nabla P$ , der zu einer Nichtlokalität der Gleichung führt. Bildet man die Rotation der Navier-Stokes-Gleichungen, erhält man unter Annahme der Divergenzfreiheit für den Kraftterm eine Poissons-Gleichung für den Druck [Argyris et al. 2010].

$$\Delta P(\mathbf{x}, t) = - \sum_{i,j} \frac{\partial u_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \frac{\partial u_j(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \quad (2.49)$$

Diese lässt sich mithilfe der Greensfunktion  $G$  für die Geometrie lösen, die geometrieabhängig bestimmt werden muss. Die dann resultierende Gleichung für den Druck lautet dann:

$$P(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{i,j} \frac{\partial u_i(\mathbf{x}', t)}{\partial x'_j} \frac{\partial u_j(\mathbf{x}', t)}{\partial x'_i} \quad (2.50)$$

Im zweidimensionalen, unendlich ausgedehnten Fall ohne Ränder lässt sich  $G$  direkt angeben

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \quad , \quad (2.51)$$

die Bestimmung im allgemeinen Fall widerspricht jedoch der Grundidee der Penalismethode, Geometrien ohne großen Aufwand direkt in die Gleichungen zu modellieren. Der Druckterm bedingt zudem die Nichtlokalität der Navier-Stokes-Gleichungen. Um diesen an einem Punkt zu kennen, bedarf es der Integration über den gesamten Raum. Es bietet sich nun an, zur Wirbeltransportgleichung überzugehen. Hierzu wird eine neue Größe, die Vortizität  $\omega$ , eingeführt, die sich aus der Rotation der Geschwindigkeit ergibt. Dies führt nicht zu einer lokalen

Gleichung, reduziert aber im zweidimensionalen Fall die Anzahl der zu lösenden Gleichungen auf zwei, da die Vortizität in diesem Fall nur über eine Komponente verfügt, wie man sich leicht anhand Gleichung (2.52) klar machen kann.

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.52)$$

Dies ist eine wohldefinierte Größe, da sich aus  $\boldsymbol{\omega}$  aufgrund der Inkompressibilität des Geschwindigkeitsfeldes,  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , analog dem Biot-Savartschen Gesetz aus der Magnetostatik [Nolting 2004], ebendieses unter Kenntnis von Rand- und Anfangsbedingungen berechnen lässt. Es gilt die Poissons-Gleichung:

$$\Delta \mathbf{u} = -\nabla \times \boldsymbol{\omega} \quad (2.53)$$

Der Übergang erfolgt, indem man von den Navier-Stokes-Gleichungen die Rotation bildet und einige fundamentale Vektorrechenregeln anwendet:

$$\frac{1}{Pr} \left( \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \right) \boldsymbol{\omega}_\eta = \boldsymbol{\omega}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta + \Delta \boldsymbol{\omega}_\eta + Ra \nabla \times \theta_\eta \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} \nabla \times (\chi \cdot \mathbf{u}_\eta) \quad (2.54)$$

Der Druckterm verschwindet als reines Gradientenfeld bei der Rotationsbildung, die Nichtlokalität geht aber nur scheinbar verloren, sondern bleibt im Geschwindigkeitsfeld  $\mathbf{u}$  erhalten. Die beiden Formulierungen sind völlig äquivalent, im Zweidimensionalen lässt sich die Gleichung noch weiter vereinfachen. Berücksichtigt man, dass  $\boldsymbol{\omega}$  bei einer Strömung in der  $(x, z)$ -Ebene aufgrund der Beziehung (2.52) lediglich eine Komponente in  $y$ -Richtung aufweist und diese im Wirbelstreckungsterm  $\boldsymbol{\omega}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta$  nur als Produkt mit der verschwindenden  $y$ -Ableitung der Geschwindigkeit auftaucht, wird der Wirbelstreckungsterm identisch Null. Insbesondere ist die Wirbeltransportgleichung in zwei Dimensionen im Gegensatz zur zweikomponentigen Gleichung für die Geschwindigkeit lediglich eine einkomponentige Gleichung und somit einfacher zu handhaben.

Berücksichtigt man dies und vereinfacht die Gleichung noch etwas, ergeben sich folgende penalisierte Gleichungen in entdimensionalisierte Form

$$\frac{1}{Pr} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\omega}_\eta = \nabla \times \left( \frac{1}{Pr} \mathbf{u}_\eta \times \boldsymbol{\omega}_\eta - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathbf{u}_\eta \right) + \Delta \boldsymbol{\omega}_\eta + Ra \frac{\partial}{\partial x} \theta_\eta \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta_\eta = -(\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \theta_\eta + \Delta \theta_\eta + \mathbf{u}_\eta \cdot \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \theta_\eta \quad (2.56)$$

beziehungsweise

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\omega}_\eta = \nabla \times \left( \mathbf{u}_\eta \times \boldsymbol{\omega}_\eta - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathbf{u}_\eta \right) + \nu \Delta \boldsymbol{\omega}_\eta + \alpha g \frac{\partial}{\partial x} \theta_\eta \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta_\eta = -(\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \theta_\eta + \kappa \Delta \theta_\eta + \beta \mathbf{u}_\eta \cdot \mathbf{e}_z - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \theta_\eta \quad (2.58)$$

in dimensionsbehafteter Form. Die Geschwindigkeit ist keine unabhängige Größe, sondern lässt sich im Fourierraum aus der Vortizität nach Gleichung (2.53) durch Bilden der Rotation auf beiden Seiten berechnen:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{i \mathbf{k} \times \tilde{\boldsymbol{\omega}}}{k^2} \quad (2.59)$$

### 2.3.3. Pseudospektralverfahren

Ausgehend von Gleichungen (2.57) lässt sich nun prinzipiell ein beliebiges geeignetes numerisches Verfahren entwickeln, das das Rayleigh-Bénard-System löst. Ein spektrales Verfahren basierend auf Fouriertransformationen bietet den Vorteil der Geschwindigkeit gegenüber finiten Elemente- und finiten Volumen-Methoden und der besseren Skalierungseigenschaften gegenüber den Chebyshev-Polynomen. In Kauf zu nehmen ist lediglich die Festlegung auf ein äquidistantes Gitter, was zu einer schlechteren Auflösung der Grenzschichten führt, im später diskutierten Fall von isolierenden Wänden aber nicht zu sehr ins Gewicht fällt. Die Äquidistanz kann sogar vorteilhaft sein, da diese in einer einfacheren Interpolation von Feldern und schnelleren Transformationen resultiert. In diesem Abschnitt sollen Größen mit Tilde stets Größen im Fourierraum darstellen,  $\mathcal{F}$  die Fourierhin- und  $\mathcal{F}^{-1}$  die Fourierrücktransformation. Die Grundidee des Verfahrens ist es, die partiellen Differentialgleichungen in den Fourierraum zu transformieren, damit nach Gleichung (2.13) die Ortsableitungen verschwinden und man eine gewöhnliche Differentialgleichung in der Zeit erhält, die sich über verhältnismäßig einfache Zeitschrittverfahren in der Zeit entwickeln lassen. Das Resultat im Ortsraum lässt sich dann durch eine Fourierücktransformation gewinnen. Der für die Geschwindigkeit des Verfahrens limitierende Faktor sind die Transformationen, die jedoch nach 2.2.2 mit  $O(N \log N)$  skalieren und deshalb keine große Anforderung an die Größe des Gitters stellen. Da durch eine Fourierprojektion einer reellen Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  auf einem Intervall der Länge  $T$  eine  $T$ -periodische Funktion auf  $\mathbb{R}$  reproduziert, werden periodische Randbedingungen in horizontaler Richtung automatisch erfüllt.

Zunächst müssen die Gleichungen also in den Fourierraum transformiert werden um die Ortsableitungen zu behandeln, die Diffusions- und Kopplungsterme lassen sich direkt vereinfachen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta = i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[ \mathbf{u}_\eta \times \boldsymbol{\omega}_\eta - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathbf{u}_\eta \right] - \nu k^2 \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta + ik_x \alpha g \tilde{\theta}_\eta \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\theta}_\eta = -\mathcal{F} [(\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \theta_\eta] + -k^2 \kappa \tilde{\theta}_\eta + \beta \tilde{u}_z - \mathcal{F} \left[ \frac{1}{\eta} \chi \cdot \theta_\eta \right] \quad (2.61)$$

Problematisch sind die noch nicht berechneten Fouriertransformation der nicht-linearen Terme, da die Multiplikationen im Ortsraum nach Abschnitt 2.2.2 zu Faltungen im Fourierraum werden. Allgemein ist eine Faltung zweier diskreter Funktionen  $f$  und  $g$  definiert als [Meyer und Mildenberger 2002]:

$$(f * g)[n] := \sum_{m=0}^{N-1} f[m]g[n-m] \quad n \in \{0, \dots, N-1\} \quad (2.62)$$

Für die Auswertung dieses Ausdrucks sind für jeden der  $N$  Stützpunkte einer Funktion  $N$  Operationen durchzuführen, die gesamte Faltung ist also eine  $O(N^2)$ -Operation. Würde man das **Spektralverfahren** wie in Gleichung (2.60) implementieren, ginge der Vorteil der schnellen Fouriertransformation, die  $O(N \log N)$ -Geschwindigkeit, verloren und die Faltungenstellten den Flaschenhals der Simulation dar. Die Behandlung dieses Problems führt zu den **Pseudospektralverfahren**, bei denen die nichtlinearen Terme nicht im Fourierraum gelöst werden, sondern vor der Berechnung in den Ortsraum zurücktransformiert werden. Die Multiplikation kann dort in  $O(N)$  Operationen gelöst werden, das Resultat wird wieder in den Fourierraum transformiert. Es wird also statt der Faltungen

$$\mathcal{F}[f \cdot g] = \tilde{f} * \tilde{g} \quad (2.63)$$

folgender, numerisch günstigerer Ausdruck berechnet.

$$\mathcal{F}[f \cdot g] = \mathcal{F} \left[ \mathcal{F}^{-1} [\tilde{f}] \cdot \mathcal{F}^{-1} [\tilde{g}] \right] \quad (2.64)$$

Wendet man dies auf die spektralen Gleichungen (2.60) an, so erhält man die Gleichungen in pseudospektraler Darstellung.

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta = i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[ \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \times \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta] - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \right] + i\alpha g \mathbf{k} \times (\tilde{\theta}_\eta \mathbf{e}_z) - \nu k^2 \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\theta}_\eta = i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[ \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \times \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\theta}_\eta \mathbf{e}_z] \right] - \mathcal{F} \left[ \frac{1}{\eta} \chi \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\theta}_\eta] \right] + \beta \tilde{u}_z \mathbf{e}_z - \kappa k^2 \tilde{\theta}_\eta \quad (2.66)$$

Dies sind die grundlegenden Gleichungen, um Rayleigh-Bénard-Konvektion auf einer Geometrie nach Abbildung 2.3.2 zu simulieren. Es lassen sich mit der Wahl von  $\chi$  auch komplexere Geometrien berechnen, jedoch muss hier bedacht werden, dass in den Gebieten  $\Omega_s$  die Fluktuationen  $\theta$  auf Null gedämpft werden, was keinesfalls gleichbedeutend mit einem verschwindenden Wärmefluss durch die Wände ist. Etwaige Hindernisse stellen also keine wärmeisolierenden Objekte dar, sondern heizende Wände, die auf einem linearen Temperaturprofil gehalten werden. Es ist durchaus denkbar, dass sich ein solches Experiment durchführen lässt, in der Realität werden Seitenwände aber in der Regel aus wärmeisolierenden Materialien wie MACOR [Bodenschatz et al. 1991] oder Plexiglas [Nikolaenko und Ahlers 2003, Yamamoto et al. 1998] gebaut. Diese Problematik soll in Abschnitt 2.6 behandelt werden.

## 2.4. Zeitdiskretisierung

### 2.4.1. Runge-Kutta-Verfahren

In Abschnitt 2.3.3 wurde das Rayleigh-Bénard-System in ein gewöhnliches Anfangswertproblem überführt, welches sich mit bekannten Methoden lösen lässt [Ohlberger 2008a]. Die allgemeine Struktur eines solchen Anfangswertproblems ist

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t), t) \quad (2.67)$$

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 , \quad (2.68)$$

mit dem Feld  $\mathbf{y}(t)$  und einem in der Regel nichtlinearen Operator  $\mathbf{f}(\mathbf{y}(t), t)$ . In dem hier vorliegenden Fall der nicht expliziten Zeitabhängigkeit der rechten Seite vereinfacht sich das Anfangswertproblem zu einem autonomen System:

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t)) \quad (2.69)$$

$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \quad (2.70)$$

Erfüllt  $\mathbf{f}$  gewisse Regularitätsbedingungen (Lipschitzstetigkeit), so existiert eine eindeutige Lösung des Anfangswertproblems, die mithilfe eines numerischen Verfahrens approximiert werden kann [Stoer und Bulirsch 2005]. Um das Anfangswertproblem (2.69) auf einem Zeitintervall  $I \subset [t_0, t]$  zu lösen, zerlegt man dieses Intervall zunächst in ein diskretes Gitter  $I_h = \{t_0, \dots, t_n\}$  mit den Schrittweiten  $h_j: t_{j+1} = t_j + h_j$ . Bei einer äquidistanten Unterteilung sind alle  $h_j$  identisch. Die einfachste Möglichkeit, ein solches Problem auf einem diskreten Gitter numerisch zu lösen, bieten die sogenannten Einschrittverfahren. Hierbei wird aus den Informationen aus dem aktuellen Zeitschritt  $t_j$  der nächste Funktionswert  $\mathbf{y}(t_{j+1})$  berechnet.

Alle vorherigen Zeitschritte spielen keine Rolle für diese Berechnung, sie müssen also auch insbesondere nicht zur weiteren Verwendung gespeichert werden. In einem Einschrittverfahren wird nun also eine Verfahrensfunktion  $\varphi(t, y, h)$  definiert, sodass:

$$\mathbf{y}(t_{j+1}) = \mathbf{y}(t_j) + h_j \varphi(t_j, y_j, h_j) \quad (2.71)$$

Im einfachsten Fall wählt man  $\varphi(t_j, y_j, h_j) = \mathbf{f}(\mathbf{y}_j(t_j))$  und erhält das Eulerverfahren. Im Bild nach Gleichung (2.69) entspricht dies dem Approximieren der Ableitung der Funktion durch eine Gerade auf dem Intervall  $[t_j, t_{j+1}]$ . Integriert man die Gleichung (2.69) auf dem Intervall  $[t_j, t_{j+1}]$  aus

$$\mathbf{y}(t_{j+1}) = \mathbf{y}(t_j) + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(t)) dt \quad , \quad (2.72)$$

so entspräche das Eulerverfahren der Approximation des Integrals durch ein Rechteck:

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(t)) dt \approx h_j \cdot \mathbf{f}(\mathbf{y}(t_j)) \quad (2.73)$$

Eine Verbesserung gegenüber dem Eulerverfahren, das erster Ordnung in der Zeit ist, bieten die Runge-Kutta-Verfahren m-ter Stufe, die hier für äquidistante Gitter vorgestellt werden sollen.

**Definition 2.4.1** Sei  $\varphi(t, y, h)$  die Verfahrensfunktion des Einschrittverfahrens. Dann heißt dieses Verfahren explizites Runge-Kutta-Verfahren m-ter Stufe, wenn für die Verfahrensfunktion gilt:

$$\mathbf{y}(t_{j+1}) = \mathbf{y}(t_j) + h \varphi(t_j, \mathbf{y}_j, h) \quad (2.74)$$

$$\varphi(t, \mathbf{y}, h) = \sum_{i=1}^m \gamma_i k_i(t, \mathbf{y}, h) \quad (2.75)$$

$$\sum_{i=1}^m \gamma_i = 1 \quad (2.76)$$

$$k_1(t, \mathbf{y}, h) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \quad (2.77)$$

$$k_2(t, \mathbf{y}, h) = \mathbf{f}(t + \alpha_2 h, \mathbf{y}(t) + \beta_{2,1} k_1(t, \mathbf{y}, h)) \quad (2.78)$$

$\vdots$

$$k_m(t, \mathbf{y}, h) = \mathbf{f} \left( t + \alpha_m h, \mathbf{y}(t) + \sum_{l=1}^{m-1} \beta_{m,l} k_l(t, \mathbf{y}, h) \right) \quad (2.79)$$

Die Rayleigh-Bénard-Gleichung in Formulierung nach Gleichung (2.65) sind autonom, hängen also nicht explizit von der Zeit ab. Von daher soll diese Abhängigkeit im Weiteren vernachlässigt werden. Die  $\alpha_i$  und  $\beta_{m_i}$  lassen sich mittels Taylorentwicklungen aus Konsistenzüberlegungen berechnen und werden üblicherweise in Butcher-Tableaus niedergeschrieben.

$\alpha_1$	0			
$\alpha_2$	$\beta_{2,1}$	$\ddots$		
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\ddots$	
$\alpha_m$	$\beta_{m,l}$	$\cdots$	$\beta_{m,m-1}$	0
	$\gamma_1$	$\cdots$	$\gamma_{m-1}$	$\gamma_m$

**Tabelle 2.2.:** Allgemeines Butcher-Tableau

Im Allgemeinen hängt die Konvergenzordnung des Verfahrens von der gewählten Stufe ab,  $m = 4$  ist jedoch die höchstmögliche Stufe, die gleichzeitig der Konvergenzordnung entspricht [Ohlberger 2008a]. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ein vierstufiges Runge-Kutta-Verfahren zur Zeitintegration des Anfangswertproblems gewählt, da dieses einen ausgewogenen Kompromiss aus Konvergenzrate und numerischem Aufwand bietet. Das Butcher-Tableau des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens vierter Ordnung, welches über eine Konvergenzrate von  $O(h^4)$  verfügt, ist in Tabelle 2.3 dargestellt.

0	0			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

**Tabelle 2.3.:** Klassisches Runge-Kutta-Verfahren

Die Berechnung für ein autonomes System ausgehend vom Zeitpunkt  $t_j$  ergibt sich aus Definition 2.4.1 und Tabelle 2.3 wie folgt:

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t_j)) \quad (2.80)$$

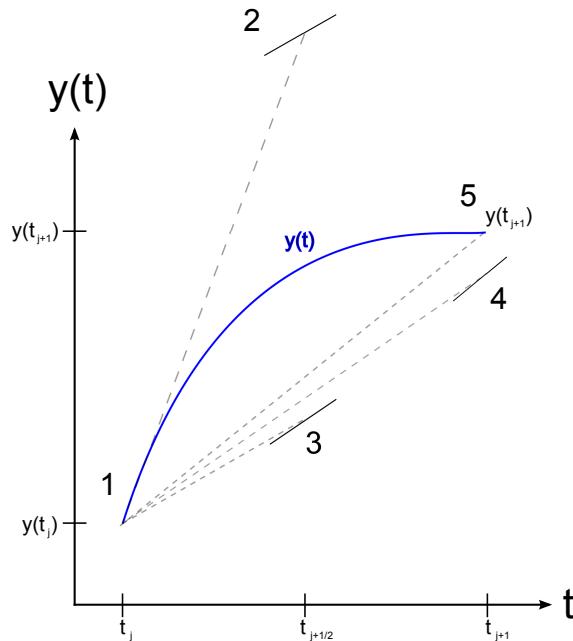
$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}\left(\mathbf{y}(t_j) + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right) \quad (2.81)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}\left(\mathbf{y}(t_j) + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2\right) \quad (2.82)$$

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t_j) + h\mathbf{k}_3) \quad (2.83)$$

$$\mathbf{y}(t_{j+1}) = \mathbf{y}(t_j) + h\left(\frac{1}{6}\mathbf{k}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{k}_4\right) \quad (2.84)$$

Dieses Verfahren approximiert das Integral in Gleichung (2.72) durch die Simpsons-Regel. Zunächst wird der Ausdruck an der Stelle  $t_j$  ausgewertet, zweimal mit den vorherigen Ergebnissen an die Stelle  $t_{j+\frac{1}{2}}$  extrapoliert und ein weiteres Mal auf  $t_{j+1}$ . Aus diesen Zwischenergebnissen wird dann der Funktionswert am neuen Zeitpunkt  $t_{j+1}$  berechnet (Siehe Abbildung 2.4).



**Abbildung 2.4.:** Klassisches Runge-Kutta Verfahren. Blau dargestellt ist das Zeitverhalten einer beliebigen Funktion  $y(t)$ . Zur numerischen Berechnung dieser zu einem Zeitpunkt  $t_j$  bekannten Funktion wird zunächst vom Punkt **1** auf die Zeit  $t_{j+1/2}$  mit der Ableitung  $f(y(t_j))$  extrapoliert. Mit dem jeweils vorhergehenden Ergebnis werden an den Punkten **2,3** und **4** Abschätzungen für die Ableitungen zu den Zeiten  $t_{j+1/2}$  und  $t_{j+1}$  berechnet und der numerische Zeitschritt  $y(t_{j+1})$  (**5**) aus allen vorherigen Ergebnissen ermittelt.

Für die penalisierten zweidimensionalen Rayleigh-Bénard-Gleichungen ist nach Gleichung (2.65):

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} \omega_\eta \\ \theta_\eta \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}(t)) = \begin{pmatrix} i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[ \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \times \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta] - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \right] + i\alpha g \mathbf{k} \times (\tilde{\theta}_\eta \mathbf{e}_z) - \nu k^2 \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta \\ -\mathcal{F}[(\mathbf{u}_\eta \cdot \nabla) \theta_\eta] + -k^2 \kappa \tilde{\theta}_\eta + \beta \tilde{u}_z - \mathcal{F}\left[\frac{1}{\eta} \chi \cdot \theta_\eta\right] \end{pmatrix} \quad (2.86)$$

Mit diesen Gleichungen lässt sich das Rayleigh-Bénard-System unter Berücksichtigung von Gleichung (2.59) in der Zeit integrieren.

### 2.4.2. Aliasing

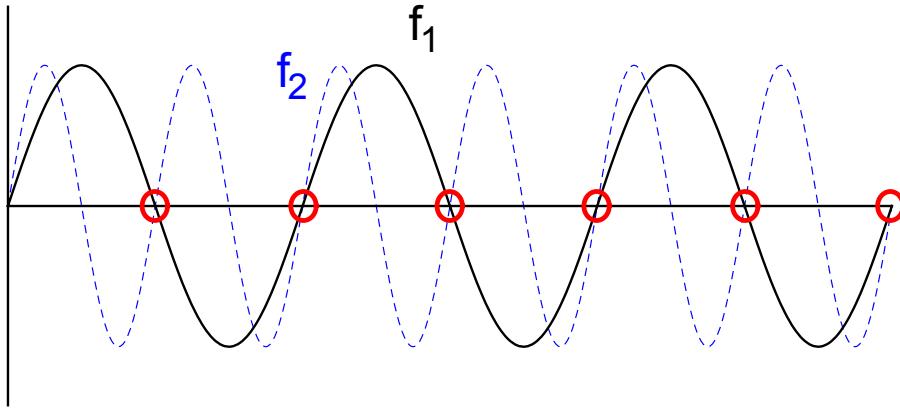
In numerischen Simulationen sind Funktionen im Ortsraum nur an diskreten Punkten bekannt, was in einem zu Instabilitäten führenden Effekt resultieren kann, der unter dem Namen Aliasing bekannt ist. Durch die nichtlinearen Terme können im Fourierraum Wellenzahlen erzeugt werden, deren Frequenzen über der numerischen Auflösung liegen (siehe Abbildung 2.5). Durch die aufgrund der Diskretisierung des Ortsraumes beschränkten maximal auflösbaren Wellenzahl werden Fourierkomponenten überhalb dieser maximalen Wellenzahl wieder auf Fourierkomponenten niedrigerer Wellenzahl additiv projiziert. Dadurch wird in der Regel Energie von numerisch nicht aufgelösten Bereich physikalisch unbegründet in niedrige Wellenzahlbereich transferiert, was zu einer Destabilisierung der Simulation führen kann. Unproblematisch sind die linearen Terme in Gleichung (2.65), da diese aufgrund der Linearität der Fouriertransformation keine nicht aufgelösten Wellenzahlen anregen können. Lediglich die quadratischen Nichtlinearitäten in Gleichung (2.65) führen zu Aliasing-Effekten.

Dies macht man sich anhand eines einfachen Beispiels klar. Seien dazu  $I \in [0, 2\pi]$  ein Intervall und  $f_1(x), f_2(x) : I \rightarrow \mathbb{R}$  an  $N$  Stellen auf  $I$  bekannte Funktionen. Dann ist nach Gleichung (2.16)

$$f_1(x) = \sum_{j_1=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \tilde{f}_1(j_1) e^{ij_1 x} \quad (2.87)$$

$$f_2(x) = \sum_{j_2=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \tilde{f}_2(j_2) e^{ij_2 x} \quad (2.88)$$

und es wird ersichtlich, dass lineare Operationen auf  $f_1$  und  $f_2$  den Wellenzahlbereich nicht vergrößern. Dies schließt Ableitungen ein, da nach Gleichung (2.13) gilt:



**Abbildung 2.5.:** Typisches Aliasing Problem. Wird eine Funktion an den rot markierten Stellen ausgewertet, so ist die höchste aufnehmbare Frequenz diejenige der Funktion  $f_1$ . Die in blau gezeichnete Funktion  $f_2$  doppelter Frequenz kann nicht aufgelöst werden, da sie über mehr Nulldurchgänge als vorhandene Gitterpunkte verfügt. In einer endlichen diskreten Fouriertransformation würde diese Funktion auf die Fouriertransformierte von  $f_1$  projiziert werden. Zeichnung analog zu [Wilczek 2007].

$$\frac{\partial}{\partial x} f_1(x) = \sum_{j_1=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} i j_1 \tilde{f}_1(j_1) e^{i j_1 x} \quad (2.89)$$

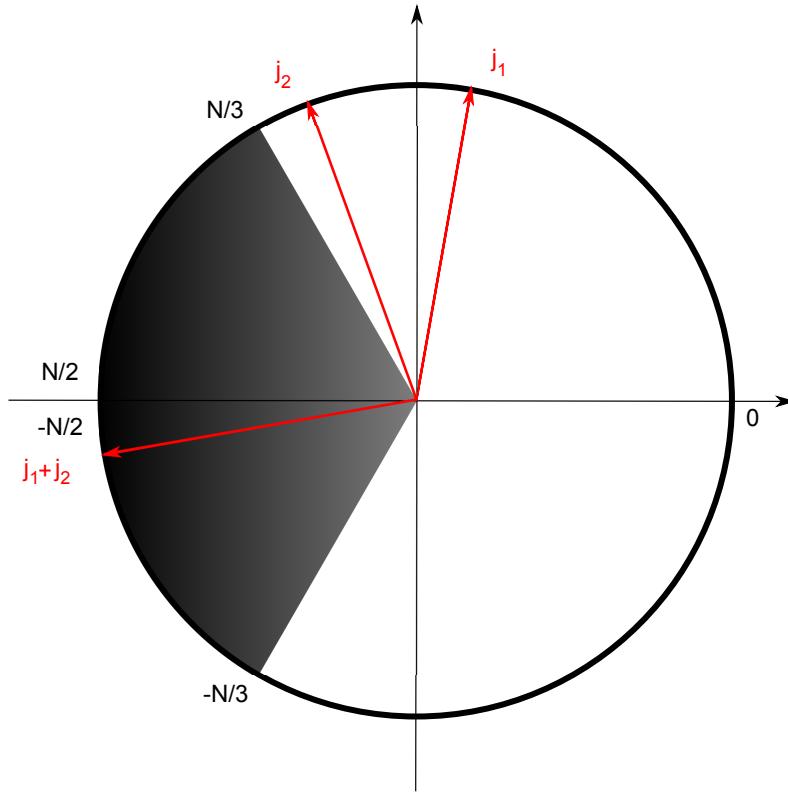
(2.90)

Multipliziert man nun jedoch die beiden Funktionen

$$f_1(x) \cdot f_2(x) = \sum_{j_1, j_2=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \tilde{f}_1(j_1) \tilde{f}_2(j_2) e^{i(j_1+j_2)x} , \quad (2.91)$$

so wird der resultierende Wellenzahlensbereich von  $[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$  auf  $[-N, N]$  vergrößert. Fourierkomponenten in dem Intervall  $[-N, N] \setminus [-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}]$  werden jedoch von der Numerik nicht aufgelöst und führen zu Aliasing-Effekten.

Verhindern lässt sich dieses, wenn sogenanntes Dealiasing eingesetzt wird. Hierbei wird ein Fourierfilter verwendet, der Fourierkomponenten, die durch Multiplikationen in nicht aufgelöste Bereiche verschoben werden, auf Null setzt. Die eingängigste und am einfachsten zu implementierende Variante eines solchen Filters ist Orszag's 2/3-Regel. Bei diesem scharfen Filter werden sämtliche Fourierkomponenten, bei deren Multiplikation es prinzipiell zu Aliasing-Effekten kommen könnte, auf Null gesetzt [Orszag 1971]. Nach Abbildung 2.6 sind dies gerade die Komponenten,



**Abbildung 2.6.:** Orszags 2/3 Regel. Durch die quadratische Nichtlinearität können Aliasing-Effekte entstehen. Die Multiplikation im Ortstraum führt zu einer Addition der Winkel im Fourierraum, die resultierende Wellenzahlen in möglicherweise nicht aufgelöste Bereiche verschiebt. Setzt man alle Fourierkomponenten mit  $|k| \geq \frac{2}{3} k_{max}$  auf Null, wird der Aliasing-Effekt verhindert. Zeichnung analog zu [Wilczek 2007].

deren  $k$ -Wert mindestens  $2/3$  des maximal aufgelösten Wertes  $k_{max}$  beträgt. Die Vorschrift, um eine Funktion  $\tilde{f}(\mathbf{k})$  auf einem zweidimensionalen Gitter nach Orszags 2/3-Regel zu dealiasen, lautet also:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \begin{cases} \tilde{f}(\mathbf{k}) & \text{für } \left(\frac{3k_x}{2N_x}\right)^2 + \left(\frac{3k_y}{2N_y}\right)^2 < 1 \\ 0 & \text{für } \left(\frac{3k_x}{2N_x}\right)^2 + \left(\frac{3k_y}{2N_y}\right)^2 \geq 1 \end{cases} \quad (2.92)$$

Orszags 2/3-Regel verhindert jedweden Aliasing-Effekt, reduziert jedoch die verfügbare numerische Auflösung beträchtlich. Schon in zwei Dimensionen werden nur noch  $\left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{4}{9}$  aller Komponenten nicht auf Null gesetzt. Effektiv wird also über die Hälfte aller Fourierkomponenten, die in der Simulation berechnet werden, ignoriert. In zwei Dimensionen ist dieser Kompromiss noch akzeptabel, bei höherer

Dimensionalität wird das Dealiasing hingegen ein nicht zu vernachlässigendes Problem für die effektive Auflösung. Beizukommen ist diesem, wenn man statt der scharfen 2/3-Regel glatte Fourierfilter einsetzt, die die verfügbare Auflösung im Austausch für nicht perfektes Filtern vergrößern. Hierzu wird in der Regel eine Exponentialfunktion  $e^{nx^n}$  mit hohem Exponenten  $n$  anstelle der  $\theta$ -Funktion der 2/3-Regel verwendet. Dieser Filter verhindert Aliasing-Effekte nicht vollständig, es kann aber zumindestens für die Burgers-Gleichung gezeigt werden, dass der Fehler der Lösung des numerischen Verfahrens kleiner als derjenige ist, der bei Verwendung der 2/3-Regel entsteht [Hou und Li 2007].

### 2.4.3. Anforderungen an den Zeitschritt

Aliasingeffekte stellen in einer numerischen Simulation nicht die einzige Quelle von Instabilität dar. Von großer Bedeutung sind hier die Wahl der Orts- und Zeitaufteilung, die hier diskutiert werden sollen. Dazu sei im ganzen Abschnitt ein quadratisches Grundgebiet  $\Omega$  der Abmessung  $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$  mit einer Auflösung von  $N^2$  Gitterpunkten angenommen. Der Zeitschritt sei  $h$ , die kürzeste aufgelöste Länge  $\Delta x$  ist dann  $\frac{2\pi}{N}$ . Der Zeitschritt wird durch das sogenannte Courant-Friedrichs-Lowy-Kriterium (CFL-Kriterium) [Courant et al. 1928] limitiert, das die maximale auftretende physikalische Informationsgeschwindigkeit mit der maximal möglichen numerischen Informationsgeschwindigkeit in Zusammenhang setzt. Die Beschränkung an den Zeitschritt entsteht aus der Tatsache, dass sich eine physikalische Information innerhalb eines Zeitschrittes nicht weiter als einen Gitterpunkt bewegen sollte. Die im Rayleigh-Bénard-System auftretenden physikalischen Geschwindigkeiten  $\mathbf{u}$  sollten also nicht größer sein als die größte "numerische Geschwindigkeit"  $\frac{\Delta x}{h}$ , um die Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten. Überschreitet die physikalische Geschwindigkeit die numerisch mögliche, werden Informationen "zu weit" in der Zeit transportiert und das resultierende numerische Ergebnis wird im Allgemeinen nicht mehr den physikalischen Resultat entsprechen [Wilczek 2007]. Im Rayleigh-Bénard-System tragen im Wesentlichen zwei Prozesse zum Transport von Informationen bei, zum einen der advektive Transport von Geschwindigkeit und Temperatur, zum anderen die Diffusion. Soll keine Information pro Zeitschritt weiter als einen Gitterpunkt advektiert werden, so muss für den Zeitschritt beschränkt durch die Advektion  $h_{adv}$  gelten:

$$h_{adv} < \Delta x u_{max} \quad (2.93)$$

Wobei

$$u_{max} := \max \{|u_x|_{L^\infty(\Omega)}, |u_y|_{L^\infty(\Omega)}\} \quad (2.94)$$

Das CFL-Kriterium für die Advektion lautet also

$$h_{\text{adv}} = \lambda \frac{2\pi u_{\max}}{N} , \quad (2.95)$$

wobei  $\lambda \in \mathbb{R}, \lambda < 1$ . Der benötigte advektive Zeitschritt verhält sich also umgekehrt proportional zur Anzahl der Gitterpunkte. Problematischer bezüglich der Ortsauflösung ist hingegen die Anforderung an den diffusiven Zeitschritt, die sowohl für Geschwindigkeit als auch Temperatur durch die Diffusionsterme  $+\nu\Delta u$  und  $+\kappa\Delta\theta$  der rechten Seite von Gleichung (2.65) hervorgerufen wird. Nimmt man gewöhnliche Diffusion an:

$$\langle x^2 \rangle = 4\nu t , \quad (2.96)$$

bei der das zweite Moment linear mit der Zeit ansteigt, lassen sich die Überlegung des advektiven CFL-Kriteriums direkt übertragen und man erhält (durch Analogie ebenfalls für die Temperatur):

$$h_{\text{diff},\mathbf{u}} = \lambda \frac{\pi^2}{\nu N^2} \quad (2.97)$$

$$h_{\text{diff},\theta} = \lambda \frac{\pi^2}{\kappa N^2} \quad (2.98)$$

Diese Bedingung ist stärker, was die Abhängigkeit von der Ortsauflösung angeht, jedoch unabhängig von den auftretenden Geschwindigkeiten. Dieses Kriterium ist also für geringe Rayleigh-Zahlen und hohe Auflösungen dominant, wenn die auftretenden Geschwindigkeiten klein sind.

Da die umgekehrt quadratische Abhängigkeit von der Auflösung dennoch problematisch sein kann, bietet es sich an, die diffusiven Terme mittels einer integrierender Faktor Methode explizit zu behandeln [Gurevich 2009]. Hierzu zerlegt man die Gleichungen (2.65) in diffusive und nicht-diffusiven Anteile:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta = \Omega_\eta (\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta, \tilde{\theta}_\eta) - \nu k^2 \tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\theta}_\eta = \Theta_\eta (\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta, \tilde{\theta}_\eta) - \kappa k^2 \tilde{\theta}_\eta \quad (2.100)$$

Hierbei gilt für die nicht-diffusiven Anteile  $\Omega$  und  $\Theta$ :

$$\Omega_\eta (\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta, \tilde{\theta}_\eta) = i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[ \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \times \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta] - \frac{1}{\eta} \chi \cdot \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \right] + i\alpha g \mathbf{k} \times (\tilde{\theta}_\eta \mathbf{e}_z) \quad (2.101)$$

$$\Theta_\eta (\tilde{\boldsymbol{\omega}}_\eta, \tilde{\theta}_\eta) = i\mathbf{k} \times \mathcal{F} \left[ \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\mathbf{u}}_\eta] \times \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\theta}_\eta \mathbf{e}_z] \right] - \mathcal{F} \left[ \frac{1}{\eta} \chi \mathcal{F}^{-1} [\tilde{\theta}_\eta] \right] + \beta \tilde{u}_\eta \mathbf{e}_z \quad (2.102)$$

Die diffusiven Terme lassen sich nun explizit behandeln, in dem man zu neuen Variablen übergeht:

$$\hat{\omega}_\eta = \tilde{\omega}_\eta e^{\nu k^2 t} \quad (2.103)$$

$$\hat{\theta}_\eta = \tilde{\theta}_\eta e^{\kappa k^2 t} \quad (2.104)$$

Setzt man dieses in die Zeitableitung in Gleichung (2.99) ein und nutzt die Kettenregel aus, so erhält man zunächst:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\omega}_\eta e^{-\nu k^2 t} - \nu k^2 e^{-\nu k^2 t} \hat{\omega}_\eta = \Omega_\eta (\tilde{\omega}_\eta, \tilde{\theta}_\eta) - \nu k^2 \tilde{\omega}_\eta \quad (2.105)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\theta}_\eta e^{-\kappa k^2 t} - \kappa k^2 e^{-\kappa k^2 t} \hat{\theta}_\eta = \Theta_\eta (\tilde{\omega}_\eta, \tilde{\theta}_\eta) - \kappa k^2 \tilde{\theta}_\eta \quad (2.106)$$

Die diffusiven Terme kürzen sich nach Rückeinsetzen weg und es verbleibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\omega}_\eta = \Omega_\eta (\hat{\omega}_\eta e^{-\nu k^2 t}, \hat{\theta}_\eta e^{-\kappa k^2 t}) e^{\nu k^2 t} \quad (2.107)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\theta}_\eta = \Theta_\eta (\hat{\omega}_\eta e^{-\nu k^2 t}, \hat{\theta}_\eta e^{-\kappa k^2 t}) e^{\kappa k^2 t} \quad (2.108)$$

Ausgehend von diesen Gleichungen lässt sich nun ein nicht mehr autonomes klassisches Runge-Kutta-Verfahren konstruieren, das keine Zeitschrittabhängigkeit gegenüber der Diffusion aufweist. Aufgrund der Äquivalenz der beiden Gleichungen soll dies hier nur für die Vortizität formuliert werden, die Vorschrift für die Temperaturabweichung ergibt sich durch Austauschen von  $\Omega$  durch  $\Theta$  und von  $\nu$  durch  $\kappa$ . Der Übersichtlichkeit halber werden  $\eta$ -Indizes und Tilden weggelassen.

Zunächst formuliert man das klassische Runge-Kutta Verfahren aus Gleichung (2.80) für die Gleichung

$$\boldsymbol{\omega} = \Omega(\boldsymbol{\omega}) \quad , \quad (2.109)$$

ausgehend vom Zeitpunkt  $t_n$  mit der Schrittweite  $h$ . Um Speicherplatz zu sparen, fasst man zudem die letzten beiden Schritte zusammen und erhält für die extrapolierten Vortizitäten an den Stellen  $t_{n+1/2}$  und  $t_n$ :

$$\boldsymbol{\omega}_A = \boldsymbol{\omega}(t_n) + \frac{h}{2} \Omega(\boldsymbol{\omega}(t_n)) \quad (2.110)$$

$$\boldsymbol{\omega}_B = \boldsymbol{\omega}(t_n) + \frac{h}{2} \Omega(\boldsymbol{\omega}_A) \quad (2.111)$$

$$\boldsymbol{\omega}_C = \boldsymbol{\omega}(t_n) + h \Omega(\boldsymbol{\omega}_B) \quad (2.112)$$

$$\boldsymbol{\omega}(t_{n+1}) = -\frac{1}{3} \boldsymbol{\omega}(t_n) + \frac{1}{3} \boldsymbol{\omega}_A + \frac{2}{3} \boldsymbol{\omega}_B + \frac{1}{3} \boldsymbol{\omega}_C + \frac{h}{6} \Omega(\boldsymbol{\omega}_C) \quad (2.113)$$

Zusammen mit Gleichung (2.107) ergibt sich das neue Zeitschrittverfahren nach Multiplikation mit  $e^{-\nu k^2 t}$ :

$$\omega_A = \left( \omega(t_n) + \frac{h}{2} \Omega(\omega(t_n)) \right) e^{-\nu k^2 \frac{h}{2}} \quad (2.114)$$

$$\omega_B = \omega(t_n) e^{-\nu k^2 \frac{h}{2}} + \frac{h}{2} \Omega(\omega_A) \quad (2.115)$$

$$\omega_C = \omega(t_n) e^{-\nu k^2 h} + h \Omega(\omega_B) e^{-\nu k^2 \frac{h}{2}} \quad (2.116)$$

$$\omega(t_{n+1}) = -\frac{1}{3} \omega(t_n) e^{-\nu k^2 h} + \frac{1}{3} \omega_A e^{-\nu k^2 \frac{h}{2}} + \frac{2}{3} \omega_B e^{-\nu k^2 \frac{h}{2}} + \frac{1}{3} \omega_C + \frac{h}{6} \Omega(\omega_C) \quad (2.117)$$

Dieses Zeitschrittverfahren weist nun keine Stabilitätsabhängigkeit gegenüber der Diffusion auf, ohne dabei einen nennenswerten numerischen Mehraufwand im Vergleich zum gewöhnlichen klassischen Runge-Kutta Verfahren zu erfordern. Neben der advektiven Bedienung an den Zeitschritt führt jedoch auch die Penalisation zu einer weiteren Anforderung. Aufgrund der Explizitität des Runge-Kutta-Verfahrens gilt ein CFL-Kriterium für die Rampenabhängigkeit. Durch den Rampenterm wird die resultierende Differentialgleich steif, die lineare Stabilität des Verfahrens fordert [Kolomenskiy und Schneider 2009]:

$$h_\eta = \lambda \eta \quad (2.118)$$

Wobei wiederum  $\lambda < 1$ . Diese Bedingungen lassen sich zu einem adaptiven Zeitschrittverfahren kombinieren, in jedem Zeitschritt muss gewährleistet werden, dass:

$$h < \lambda \min \left\{ \frac{2\pi u_{max}}{N}, \eta \right\} \quad (2.119)$$

#### 2.4.4. Anforderungen an die Auflösung

Neben der Stabilität ist es wünschenswert, dass in einer Simulation möglichst alle auftretenden physikalisch bedeutsamen Effekte erfasst werden. Insbesondere sollten in einer direkten numerischen Simulation auch die kleinsten physikalisch relevanten Skalen aufgelöst werden, die in klassischer Turbulenz im Wesentlichen durch die Energiedissipationsrate bestimmt werden. Ist das numerische Gitter deutlich größer als die kleinsten physikalischen Skalen, ist davon auszugehen, dass wesentliche Größen wie der Wärmetransport durch die Simulation nicht mehr korrekt dargestellt werden, da diese auch durch kleine Strukturen maßgeblich beeinflusst werden. Die in turbulenten Strömungen auftretenden kleinsten mittleren Längenskalen entsprechen der kolmogorovschen Dissipationslänge  $\eta_k$  [Pope 2001].

$$\eta_K = \frac{\nu^{3/4}}{\langle \epsilon \rangle^{1/4}} \quad (2.120)$$

Die mittlere Energiedissipationsrate  $\langle \epsilon \rangle$  lässt sich direkt aus der Numerik bestimmen, es gilt mit einsteinscher Summenkonvention:

$$\langle \epsilon(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{\nu}{2} \left\langle \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle = \frac{\nu}{2} \langle \boldsymbol{\omega}^2 \rangle \quad (2.121)$$

Diese Abschätzung basiert auf homogener, isotroper Turbulenz, lässt sich also nicht ohne weiteres direkt auf Rayleigh-Bénard-Konvektion anwenden, da aufgrund der Wände und Randschichten eine ausgeprägte z-Anisotropie vorliegt. In horizontaler Richtung verhält sich die Strömung jedoch isotrop, sodass es naheliegt, eine z-abhängige Energiedissipationsrate zu berechnen und aus dieser die kolmogorovschen Dissipationslänge  $\eta_K(z)$  zu bestimmen [Bailon-Cuba et al. 2010].

$$\eta_K(z) = \frac{\nu^{3/4}}{\langle \epsilon(z) \rangle^{1/4}} \quad (2.122)$$

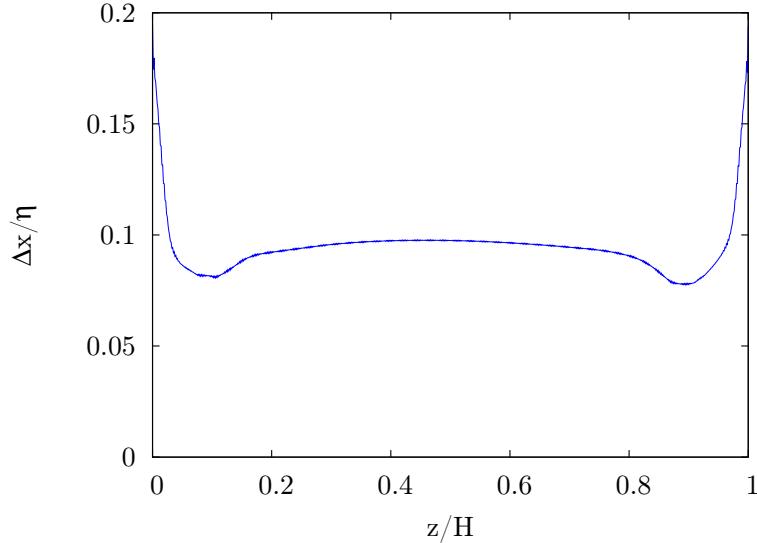
Entsprechend gilt für die Dissipationslänge bezüglich der Temperatur:

$$\eta_{K,T}(z) = \frac{\kappa^{3/4}}{\langle \epsilon_T(z) \rangle^{1/4}} \quad (2.123)$$

Auf einem äquidistanten Gitter mit dem Gitterabstand  $\Delta x$  muss dieser so gewählt werden, dass das Grötzbach-Kriterium [Grötzbach 1983] erfüllt ist, nach dem der größte aufzulösende Wellenvektor  $k_{max} = \frac{\pi}{\Delta x}$  größer als die inversen Kolmogorovschen Dissipationslängen  $\frac{1}{\eta_K}$  und  $\frac{1}{\eta_{K,T}}$  sein muss. Demnach gilt für die benötigte Auflösung, wenn  $\epsilon_{max}$  und  $\epsilon_{T,max}$  je das Maximum der z-Abhängigen Dissipationsraten darstellen:

$$\Delta x \leq \begin{cases} \pi \left( \frac{\nu^3}{\epsilon_{max}} \right)^{1/4} & \text{für } Pr \leq 1 \\ \pi \left( \frac{\kappa^3}{\epsilon_{T,max}} \right)^{1/4} & \text{für } Pr > 1 \end{cases} \quad (2.124)$$

Dieses Kriterium wird im Wesentlichen durch Prozesse in den Randschichten dominiert, wie leicht aus Abbildung 2.8 ersichtlich wird. Die Prozesse im Bulk stellen keine große Anforderung an die Auflösung, sie werden erst bei sehr hohen Rayleighzahlen beim Aufbrechen der Randschichten bedeutsam.



**Abbildung 2.7.:** Dargestellt ist das höhenabhängige Grötzsch-Kriterium für Simulation mit  $N_x=N_y=1024$ ,  $\text{Pr} = 1$  und  $\text{Ra} = 10^7$ . Sowohl der Bulk als auch die Randschichten sind hinreichend gut aufgelöst.

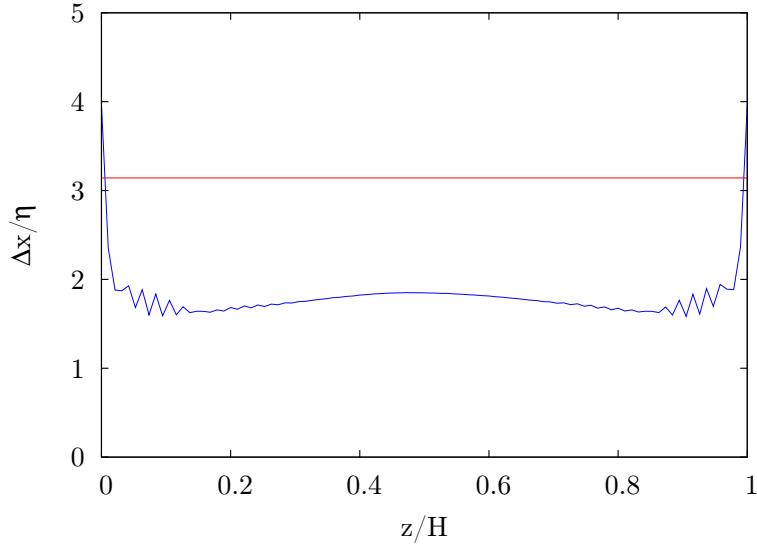
## 2.5. Implementation von lagrangeschen Teilchen

Die bisherige numerische Behandlung des Rayleigh-Bénard-Systems erfolgte ausschließlich im eulerschen Bild, in dem die Feldgrößen  $\boldsymbol{\omega}(x, y, t)$  und  $\theta(x, y, t)$  zu allen Zeiten an allen Gitterpunkten berechnet werden. Um auf die lagrangesche Darstellung in Kapitel 3 zu kommen, müssen passive Tracer berechnet werden, die sich in dem Geschwindigkeitsfeld des Rayleigh-Bénard-Systems in der Zeit fortbewegen. Jeder dieser Tracer folgt einem Weg  $\mathbf{X}(t)$ , der vollständig durch die Anfangsposition  $\mathbf{X}_0 := \mathbf{X}(0) := \mathbf{y}$  und das eulersche Geschwindigkeitsfeld  $\mathbf{u}(x, y, t)$  bestimmt ist. Die Trajektorie gehorcht dann dem Bewegungsgesetz:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(t) = \mathbf{u}[\mathbf{X}(t), t] \quad (2.125)$$

Die passiven Tracer bewegen sich also im eulerschen Feld und spüren zu jeder Zeit lediglich die Geschwindigkeit am Ort des Tracers. Das eulersche Geschwindigkeitsfeld wird wiederum durch die Rayleigh-Bénard-Gleichungen (2.57) bestimmt und erfährt keine Wechselwirkung durch die Tracer. Durch die Berechnung genügend vieler Tracer verschiedener Startpositionen lässt sich dann aus dem eulerschen Bild die lagrangesche Darstellung gewinnen, indem die lagrangesche Abbildung berechnet wird.

Die numerische Herausforderung ist es nun, aufbauend auf eine eulersche Beschreibung, die Tracerpfade  $\mathbf{X}(t)$  zu bestimmen. Wie in Abbildung 2.9 dargestellt, ist die

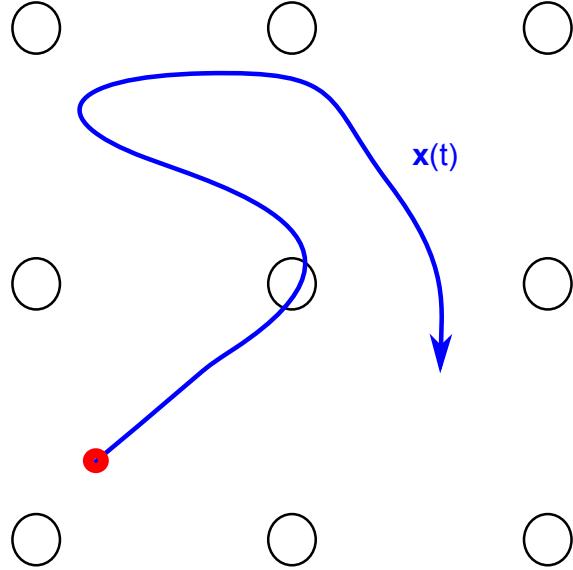


**Abbildung 2.8.:** Unteraufgelöste Simulation mit den Parametern  $N_x = N_y = 128$ ,  $\Pr = 1$  und  $\text{Ra} = 2 \cdot 10^8$ . Die Gitterweite ist hinreichend klein im Bulk, jedoch deutlich zu groß, um die Randschichten genügend fein aufzulösen. Ein mittleres Grötzbach-Kriterium nach Gleichung (2.120) würde fälschlicherweise eine hinreichende Auflösung für das gesamte Simulationsgebiet ergeben.

Problematik, dass das eulersche Geschwindigkeitsfeld  $\mathbf{u}(x, y, t)$  entlang des Weges  $\mathbf{X}(t)$  überhaupt nicht bekannt ist; die Auflösung des Gitters ist in der Regel aufgrund von Bedingung (2.124) nicht so hoch, dass erwartet werden kann, dass sich ein Teilchen lediglich auf Gitterpunkten bewegen kann. Es muss also anhand der vorhandenen Informationen des Geschwindigkeitsfeldes eine Geschwindigkeit für die Tracer interpoliert werden. Ist diese interpolierte Geschwindigkeit bekannt, so lassen sich Gleichung (2.125) in der Zeit integrieren und die Teilchenbahnen bestimmen. Dies soll nun in den beiden folgenden Abschnitten diskutiert werden.

### 2.5.1. Interpolation der Felder

In der Numerik sind im Allgemeinen Funktionen nicht mit beliebiger Genauigkeit bekannt, sondern nur an endlich vielen diskreten Punkten. Dennoch ist es für diverse Berechnungen, wie beispielsweise die Integration von Tracerbahnen in Abschnitt 2.5, unumgänglich, physikalisch sinnvolle quantitative Abschätzungen für physikalische Größen an nicht aufgelösten Punkten zu ermitteln. Dies ist die Grundaufgabe eines Interpolationsproblems: Ausgehend von einer an diskreten Stellen bekannten Funktion  $f(x_i)$  ist eine möglichst sinnvolle Approximation für in den durch die Diskretisierung nicht aufgelösten Bereichen zu berechnen. Insbesondere sollte diese Diskretisierung möglichst die physikalisch erwartete Regularität von  $f$  reproduzie-



**Abbildung 2.9.:** Bewegung eines lagrangeschen Teilchens im Geschwindigkeitsfeld. Bekannt sind die Geschwindigkeiten an diskreten Punkten (schwarze Kreise), der blaue Weg  $\mathbf{X}(t)$  des Teilchens liegt nicht notwendigerweise auf diesen Gitterpunkten.

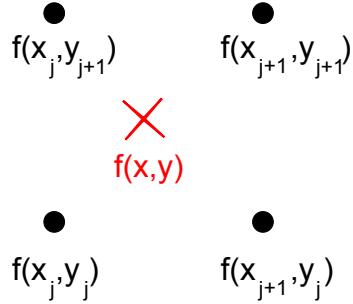
ren. Sei nun im Folgenden  $f(x_i, y_j)$  die auf einem Gitter bekannte zu interpolierende Funktion. In der Praxis haben sich für den zweidimensionalen Fall im Wesentlichen zwei Herangehensweisen bewährt. Eine nichtlokale Methode ist die Interpolation durch Splines, bei der sämtliche Gitterpunkte zur Berechnung eines Interpolationspunktes verwendet werden. Hieraus resultiert auf Kosten der Geschwindigkeit eine glatte interpolierende Funktion. Da der numerische Aufwand für solch ein Verfahren für ein Gitter der Größe  $N_x \cdot N_y$  Gitterpunkten für jeden interpolierten Wert von der Größenordnung  $O(N_x \log(N_x) + N_y)$  beträgt, eignet es sich nur bedingt für die Interpolation von Geschwindigkeiten von  $O(N_x \cdot N_y)$  Tracern [Press et al. 2007]. Effizienter sind hier lokale Methoden, bei denen auf Kosten der Regularität der Lösung der interpolierte Wert aus benachbarten Funktionswerten durch die Approximation mit Polynomen berechnet wird. Diese sollen hier nach [Press et al. 2007] vorgestellt werden.

Die einfachste Methode ist die bilineare Interpolation, bei der zur Interpolation des Funktionswertes  $f(x, y)$  lediglich die Werte der vier benachbarten Gitterpunkte herangezogen werden. Sei hierzu:

$$x_i \leq x \leq x_{i+1} \quad (2.126)$$

$$y_j \leq y \leq y_{j+1} \quad (2.127)$$

Zur Berechnung geht man zunächst (ausgehend von einem äquidistanten Gitter mit



**Abbildung 2.10.:** Zur Berechnung einer bilinearen Interpolation an der Stelle  $(x,y)$  werden die Funktionswerte an den benachbarten vier Gitterpunkten herangezogen.

dem Gitterabstand  $\Delta x$ ) zu neuen Koordinaten über:

$$t = \frac{x - x_i}{\Delta x} \quad (2.128)$$

$$u = \frac{y - y_j}{\Delta x} \quad (2.129)$$

Somit ist stets  $0 \leq t, u \leq 1$  und die bilineare Funktion zerfällt in die Auswertung an den vier benachbarten Punkten:

$$f(x, y) = (1 - t)(1 - u)f(x_i, y_j) + t(1 - u)f(x_{i+1}, y_j) \\ + tuf(x_{i+1}, y_{j+1}) + (1 - t)uf(x_i, y_{j+1}) \quad (2.130)$$

Der Vorteil der bilinearen Interpolation ist die außerordentlich schnelle Berechnung. Dies geht jedoch auf Kosten der Regularität, die resultierende Funktion  $f$  ist nur in  $C^0$ , die Gradienten sind nicht-stetig an den Zellenkanten. Bessere Regularitätseigenschaften hat die bikubische Interpolation, bei der der Funktionswert mithilfe Polynomen dritten Grades bestimmt wird.

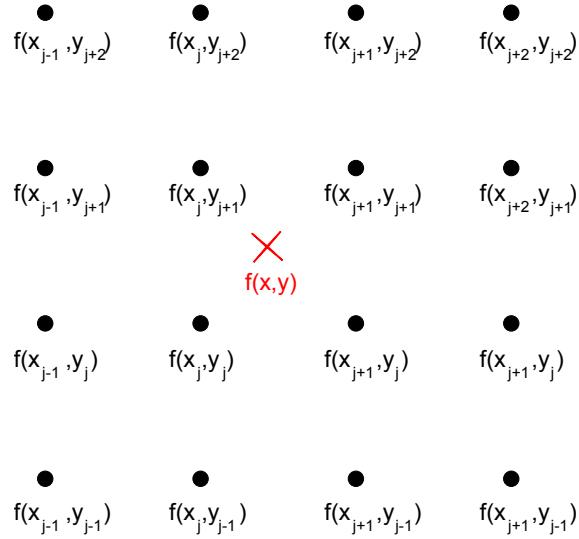
Hierzu geht man zu oben äquivalenten Koordinaten über:

$$t = \frac{x - x_i}{\Delta x} \quad (2.131)$$

$$u = \frac{y - y_j}{\Delta x} \quad (2.132)$$

Um nun ein bikubisches Polynom der Form

$$f(x, y) = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 c_{nm} t^n u^m \quad (2.133)$$



**Abbildung 2.11.:** Zur Berechnung einer bikubischen Interpolation an der Stelle  $(x,y)$  werden die Funktionswerte und Ableitungen an den benachbarten vier Gitterpunkten benötigt. Die Ableitungen werden wiederum durch benachbarte Punkte über finite Differenzen bestimmt, sodass letztendlich 16 Gitterpunkte zur Berechnung benötigt werden.

zu bestimmen, sind 16 linear unabhängige Bedingungen erforderlich. Das zugrundeliegende Gleichungssystem lautet mit  $k, l \in \{0, 1\}$ :

$$f(x_{i+k}, y_{j+l}) = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 c_{nm} t^n u^m \quad (2.134)$$

$$\partial_x f(x_{i+k}, y_{j+l}) = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 n c_{nm} t^{n-1} u^m / (\Delta x) \quad (2.135)$$

$$\partial_y f(x_{i+k}, y_{j+l}) = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 m c_{nm} t^n u^{m-1} / (\Delta y) \quad (2.136)$$

$$\partial_{xy} f(x_{i+k}, y_{j+l}) = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 n m c_{nm} t^{n-1} u^{m-1} / (\Delta x)^2 \quad (2.137)$$

Die ersten vier Bedingungen sind durch die Funktionswerte an den vier Nachbarpunkten gegeben, die verbleibenden 12 ergeben sich durch die über finite Differenzen bestimmten Ableitungen an ebendiesen Punkten. Die resultierende Interpolation ist aufgrund der Wahl von  $f$  hinreichend glatt, die Genauigkeit hängt aber von der Bestimmung der Ableitungen ab. Daher werden diese Ableitungen über zentrale Differenzen gebildet, die zweiter Ordnung im Ort sind.

$$\partial_x f(x_i, y_j) \approx \frac{f(x_{i+1}, y_j) - f(x_{i-1}, y_j)}{2\Delta x} \quad (2.138)$$

$$\partial_y f(x_i, y_j) \approx \frac{f(x_i, y_{j+1}) - f(x_i, y_{j-1})}{2\Delta x} \quad (2.139)$$

$$\partial_{xy} f(x_i, y_j) \approx \frac{f(x_{i+1}, y_{j+1}) - f(x_{i+1}, y_{j-1}) - f(x_{i-1}, y_{j+1}) + f(x_{i-1}, y_{j-1})}{4(\Delta x)^2} \quad (2.140)$$

Dieses lineare Gleichungssystem lässt sich in Matrixform schreiben, mit  $D^\alpha \in \{1, \partial_x, \partial_y, \partial_{x,y}\}$  und  $f_{kl} := f(x_{i+k}, y_{j+l})$  erhält man:

$$D^\alpha f_{kl} = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 W_{kl,nm}^\alpha c_{nm} \quad (2.141)$$

Die  $16 \times 16$  Matrix  $W_{k,l}^\alpha$  hängt nicht von  $D^\alpha f_{kl}$  ab und muss daher nur zu Beginn der Rechnung ein einziges Mal bestimmt werden. Invertiert man Gleichung, so ergibt sich für die Koeffizienten  $c_{nm}$ :

$$c_{nm} = \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 W_{nm,kl}^{\alpha^{-1}} D^\alpha f_{kl} \quad (2.142)$$

$W_{nm,kl}^{\alpha^{-1}}$  ergibt sich aus länglichen linearen Rechnungen, liegt aber für kartesische Gitter tabellarisch vor und lässt sich im Anhang A.2 finden. Für jeden Interpolationspunkt müssen also zur bikubischen Interpolation zunächst die 16 Funktionswerte an den benachbarten Punkten ermittelt werden. Aus diesen werden darauf die Ableitungen (2.138) berechnet und zu neuen Koordinaten  $t, u$  übergegangen. Daraufhin ist das Gleichungssystem (2.142) zu lösen und der gesuchte Funktionswert aus Gleichung (2.133) zu ermitteln. Im Gegensatz zu den bikubischen Splines erfordert dieses Vorgehen nur noch  $O(\log Nx + \log Ny)$  Operation, ist also deutlich zeiteffizienter als die Splines.

Problematisch für die penalisierten Rayleigh-Bénard-Gleichungen sind die Wände. Nach Abschnitt 2.3.1 konvergiert die Lösung zwar mit verschwindendem  $\eta$  gegen Null in den Wänden, es ist jedoch nicht zu erwarten, dass sie für endlich großen  $\eta$  exakt Null wird. Dies führt dazu, dass eine geringe Geschwindigkeitskomponente senkrecht zu den Wänden verbleibt, die zu einem langsam Drift von einem kleinen Anteil der Tracer in die Wände führen kann. Eingängig wird dies insbesondere, wenn man bedenkt, dass die Wände ja gerade als poröses Medium modelliert wurden, bei nicht verschwindender Porosität sollte auch ein Eindringen möglich sein. Um diesem Effekt entgegenzuwirken, werden die Funktionswerte an Gitterpunkten, die in der Rampe liegen, für die Interpolation auf Null gesetzt. Dies hat keinen Einfluss

auf die numerische Simulation selbst, die weiterhin mit den kleinen Abweichungen von Null fortgesetzt wird, lediglich das Eindringen von Tracern in die Wände wird unterbunden.

## 2.5.2. Zeitintegration

Ist die eulersche Geschwindigkeit  $\mathbf{u}[\mathbf{X}(t), t]$  an dem Ort eines Tracers an einem Zeitschritt durch Interpolation bekannt, lässt sich die Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(t) = \mathbf{u}[\mathbf{X}(t), t] \quad (2.143)$$

mit bekannten Methoden für gewöhnliche Differentialgleichungen lösen. Es bietet sich an, die Zeitintegration der Tracertrajektorien direkt an das Zeitschrittverfahren zur Lösung des Rayleigh-Bénard-Systems anzukoppeln um sicherzustellen, dass sowohl die eulersche als auch lagrangesche Darstellung gleiche Ordnungen in der Zeit aufweisen. In der Berechnung des Runge-Kutta Verfahrens für die Rayleigh-Bénard-Gleichungen in der Vortizitätsformulierung (2.114) fällt das Geschwindigkeitsfeld in den Zwischenschritten bei der Berechnung der rechte-Hand-Seite mit ab und lässt sich problemlos speichern, um es für die Zeitintegration der Tracer zu verwenden. Seien dazu  $\mathbf{u}_{A,B,C}$  die Geschwindigkeitsfelder an den Zwischenschritten. Dann lässt sich zu jedem Zeitpunkt die Geschwindigkeit des Tracer interpolieren und man erhält folgendes Zeitschrittverfahren:

$$\mathbf{X}_A = \mathbf{X}(t_n) + \frac{h}{2} \mathbf{u}[\mathbf{X}(t_n)] \quad (2.144)$$

$$\mathbf{X}_B = \mathbf{X}(t_n) + \frac{h}{2} \mathbf{u}_A[\mathbf{X}_A] \quad (2.145)$$

$$\mathbf{X}_C = \mathbf{X}(t_n) + h \mathbf{u}_B[\mathbf{X}_B] \quad (2.146)$$

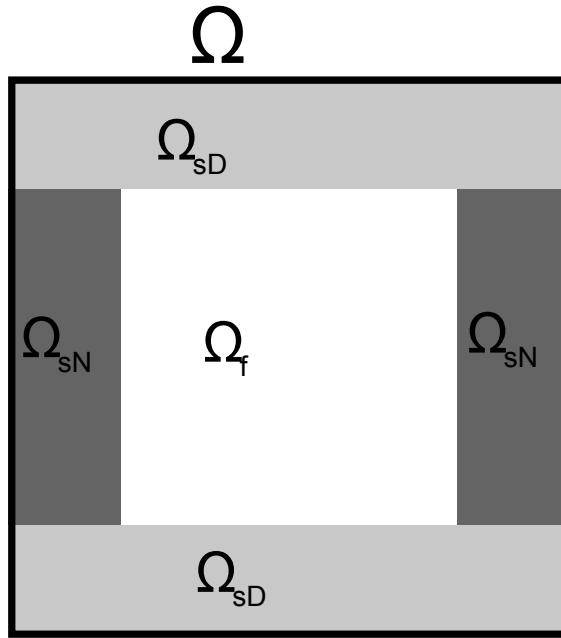
$$\mathbf{X}(t_{n+1}) = -\frac{1}{3} \mathbf{X}(t_n) + \frac{1}{3} \mathbf{X}_A + \frac{2}{3} \mathbf{X}_B + \frac{1}{3} \mathbf{X}_C + \frac{h}{6} \mathbf{u}[\mathbf{X}_C] \quad (2.147)$$

Es sind also pro Zeitschritt und Tracer insgesamt acht Interpolationen des Geschwindigkeitsfeldes notwendig.

## 2.6. Isolierende Wände

In Abschnitt 2.3.2 wurde die Realisierung von Dirichlet-Randbedingungen für Temperatur und Geschwindigkeit durch die Penalisationmethode entwickelt. Nun ist es aufgrund der dort erwähnten Tatsache, dass Nullrandwerte für die Temperaturabweichung der physikalischen Situation heizender Seitenwänden, die auf einem

linearen Profil gehalten werden, entsprechen, erforderlich, die bisher entwickelte Methode auf die Implementierung von Neumann-Randbedingungen für die Temperatur zu erweitern. Die Randbedingungen für die Geschwindigkeit sollen dabei unbeeinflusst no-slip-Bedingungen auf allen Wänden genügen und die Temperaturabweichung weiterhin Nullrandwerte auf den horizontalen heizenden Wänden annehmen. In diesem Abschnitt soll daher eine Modifikation der Volumenpenalisierungsmethode entwickelt werden, die in der Lage ist, sowohl Dirichlet- als auch von Neumann-Randbedingungen zu modellieren. Hierzu wird zunächst das einbettende Gebiet  $\Omega_s$  Gebiete mit Dirichlet-Rändern  $\Omega_{sD}$  und von Neumann-Rändern  $\Omega_{sN}$  unterteilt, wobei wieder  $\Omega_{sD} \cup \Omega_{sN} = \Omega_s$  gelten soll.



**Abbildung 2.12.:** Das einbettende Gebiet  $\Omega_s$  wird in zwei weitere Gebiete unterteilt, wobei weiterhin  $u|_{\partial\Omega_f} = 0$  gelten soll,  $\theta$  aber Nullrandwerte auf  $\partial\Omega_{sD}$  annehmen und der Fluss durch  $\partial\Omega_{sN}$  verschwinden soll.

Arbeiten zu von Neumann-Randbedingungen in Penalisierungsmethoden wurden zu Diffusionsproblemen [Ramière et al. 2007] und Transportgleichungen [Kadoch 2009] durchgeführt. Aufbauend auf diesen Arbeiten lässt sich eine Modifikation für das Rayleigh-Bénard-System entwickeln. Die Herangehensweise verläuft zunächst ähnlich wie in Abschnitt 2.3.2 über die schwache Formulierung der Rayleigh-Bénard-Gleichungen, es wird jedoch auf  $\partial\Omega_{sN}$  nicht der Wert der Temperaturabweichung durch die Modellierung eines porösen Mediums in  $\Omega_{sN}$  gedämpft, stattdessen wird der Fluss durch  $\partial\Omega_{sN}$  und die Diffusion in  $\Omega_{sN}$  unterdrückt. Die Gleichung für die Geschwindigkeit bedarf keiner großen Änderung. Führt man zwei Maskenfunktionen ein

$$\chi_D(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_{sD} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.148)$$

$$\chi_N(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega_{sN} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (2.149)$$

so erhält man die Gleichung für die Vortizität analog zu 2.3.2 durch:

$$\frac{1}{\Pr} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\omega}_\eta = \nabla \times \left( \frac{1}{\Pr} \mathbf{u}_\eta \times \boldsymbol{\omega}_\eta - \frac{1}{\eta} (\chi_D + \chi_N) \cdot \mathbf{u}_\eta \right) \Delta \boldsymbol{\omega}_\eta + \text{Ra} \frac{\partial}{\partial x} \theta_\eta \quad (2.150)$$

Zu Herleitung der Penalisierung der Wärmetransportgleichung bietet es sich an, zunächst davon auszugehen, dass auf dem gesamten Rand von  $\Omega_f$  von-Neumann Randbedingungen für  $\theta$  gelten und die Geschwindigkeit schon durch Gleichung (2.150) bestimmt wurde. Die zu lösende Gleichung lautet dann mit dem Normalenvektor  $\mathbf{n}$  auf den Rand  $\partial\Omega_F$ :

$$\partial_t \theta + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = \Delta \theta + u_z \quad \text{in } \Omega_f \quad (2.151)$$

$$\nabla \theta \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega_f \quad (2.152)$$

Die beiden Prozesse, die gegen die geforderte Randbedingung wirken, sind Diffusion und advektiver Fluss von  $\theta$ . Nutzt man die Inkompressibilität des Geschwindigkeitsfeldes aus, so lässt sich die Gleichung (2.151) umformulieren:

$$\partial_t \theta - \nabla \cdot (\nabla \theta) + \nabla \cdot (\mathbf{u} \theta) = u_z \quad (2.153)$$

Um diese Gleichung mit von-Neumann Randbedingungen mittels einer Penalismethode zu beschreiben,bettet man das Gebiet  $\Omega_f$  wiederum in ein Gebiet  $\Omega_{sN}$  ein, wobei auf  $\partial\Omega_f$  die entsprechenden Randbedingungen erfüllt sein sollen. Im Gegensatz zur Penalisierung in Abschnitt 2.3.2 wird nun jedoch zugelassen, dass die Diffusion und Advektion in  $\Omega_{sN}$  anderen physikalischen Bedingungen als in  $\Omega_f$  folgt. Dazu sei  $\mathbf{K}$  ein Diffusionstensor, der in  $\Omega_{sN}$  zunächst beliebige Gestalt haben kann, für den jedoch stets gilt  $\mathbf{K}|_{\Omega_f} = \text{Id}$ . Sei  $\hat{\mathbf{u}}$  eine ebenso zunächst beliebige  $L^\infty$  Fortsetzung von  $\mathbf{u}$  in  $\Omega_{sN}$ , die in  $\Omega_f$  den der Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$  entspricht:  $\hat{\mathbf{u}}|_{\Omega_f} = \mathbf{u}$ . Gesucht ist dann die Lösung  $\theta$  des Problems:

$$\partial_t \theta - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla \theta) + \nabla \cdot (\hat{\mathbf{u}} \theta) = \hat{u}_z \quad \text{in } \Omega \quad (2.154)$$

$$\nabla \theta \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega_f \quad (2.155)$$

Im Sinne von Abschnitt 2.3.1 geht man zur schwachen Formulierung über, jedoch wählt man die Testfunktionen  $\vartheta$  aufgrund der Nichtnullrandwerte nicht aus  $H_0^1(\Omega)$ , sondern aus  $H^1(\Omega)$ . Dies hat zur Folge, dass bei der partiellen Integration die Randintegrale nicht verschwinden. Multipliziert man also Gleichung (2.154) mit einer beliebigen Testfunktion  $\vartheta \in H^1(\Omega)$  ergeben sich folgende Gleichungen um die Lösung  $\hat{\theta}$  zu bestimmen:

$$\begin{aligned} & \left\langle \partial_t \hat{\theta}, \vartheta \right\rangle_{\Omega_f} + \int_{\Omega_f} \nabla \hat{\theta} \nabla \vartheta d\mathbf{x} - \int_{\partial \Omega_f} (\nabla \hat{\theta})^- \cdot \mathbf{n} \vartheta ds \\ & - \int_{\Omega_f} (\hat{\mathbf{u}} \hat{\theta}) \nabla \vartheta d\mathbf{x} + \int_{\partial \Omega_f} \vartheta \hat{\theta} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})^- ds = \int_{\Omega_f} \vartheta \hat{u}_z \\ & \left\langle \partial_t \hat{\theta}, \vartheta \right\rangle_{\Omega_{sN}} + \int_{\Omega_{sN}} \mathbf{K} \nabla \hat{\theta} \nabla \vartheta d\mathbf{x} - \int_{\partial \Omega_{sN}} (\mathbf{K} \nabla \hat{\theta})^+ \cdot \mathbf{n} \vartheta ds \\ & - \int_{\Omega_{sN}} (\hat{\mathbf{u}} \hat{\theta}) \nabla \vartheta d\mathbf{x} + \int_{\partial \Omega_{sN}} \vartheta \hat{\theta} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})^+ ds = \int_{\Omega_f} \vartheta \hat{u}_z \end{aligned} \quad \begin{matrix} (2.156) \\ \text{in } \Omega_f \\ (2.157) \\ \text{in } \Omega_{sN} \end{matrix}$$

Bisher wurden die Fortsetzung  $\hat{\mathbf{u}}$  und der Diffusionstensor in  $\Omega_{sN}$  noch nicht festgelegt, hierzu definiert man sich die Sprungterme:

$$[(\mathbf{K} \cdot \nabla \theta) \cdot \mathbf{n}]_{\Omega_f} = (\mathbf{K} \nabla \hat{\theta})^+ \mathbf{n}_{\Omega_f} - (\nabla \hat{\theta})^- \mathbf{n}_{\Omega_f} \quad (2.158)$$

$$[(\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})]_{\Omega_f} = (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})^-|_{\partial \Omega_f} - (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})^+|_{\partial \Omega_f} \quad (2.159)$$

Bildet man nun die Summe der beiden Gleichungen für  $\hat{\theta}$ , ergibt sich, wenn man die Richtung des Normalenvektors  $\mathbf{n}$  berücksichtigt:

$$\begin{aligned} & \left\langle \partial_t \hat{\theta}, \vartheta \right\rangle_{\Omega} + \int_{\Omega} \nabla \hat{\theta} \nabla \vartheta d\mathbf{x} - \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{u}} \hat{\theta}) \nabla \vartheta d\mathbf{x} = \\ & \int_{\partial \Omega_f} \vartheta \hat{\theta} [(\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})]_{\Omega_f} ds - \int_{\partial \Omega_f} [(\mathbf{K} \cdot \nabla \theta) \cdot \mathbf{n}]_{\Omega_f} \vartheta ds + \int_{\Omega} \vartheta \hat{u}_z \end{aligned} \quad (2.160)$$

Die Randintegrale über die Sprungterme lassen sich gerade als Sprünge im diffusiven und advektiven Fluss durch die Oberfläche von  $\Omega_f$  interpretieren. No-slip Randbedingungen für  $\hat{\theta}$  auf  $\partial \Omega_f$  erfordern verschwindende Flüsse aus  $\Omega_f$  und ergeben folgende Bedingungen für die Sprungterme:

$$-(\nabla \hat{\theta})^- \mathbf{n}|_{\Omega_f} = 0 \quad (2.161)$$

$$(\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n})^-|_{\partial \Omega_f} = 0 \quad (2.162)$$

Erzwingt man nun  $(\mathbf{K}\nabla\hat{\theta})^+\mathbf{n}_{\Omega_f} \approx 0$  durch die Wahl des Diffusionstensors  $\mathbf{K}|_{\Omega_{sN}} = \eta_N \text{Id}$  mit dem Penalisationsparameter  $0 < \eta_N \ll 1$  und setzt  $\hat{\mathbf{u}} = 0$  in  $\Omega_{sN}$  so verschwinden aufgrund der Nullrandwerte von  $\mathbf{u}$ , die durch die Dirichletpenalisierung in Gleichung (2.150) im Grenzfall  $\eta \rightarrow 0$  erzwungen werden, die Sprungterme und man erhält folgende schwache Formulierung der Wärmetransportgleichung mit isolierenden Wänden:

$$\left\langle \partial_t \hat{\theta}, \vartheta \right\rangle_\Omega = - \int_\Omega \mathbf{K} \nabla \hat{\theta} \nabla \vartheta \, d\mathbf{x} + \int_\Omega (\hat{\mathbf{u}} \hat{\theta}) \nabla \vartheta \, d\mathbf{x} + \int_\Omega \vartheta \hat{u}_z \quad (2.163)$$

$$\mathbf{K} = (1 - \chi_N + \eta_N \chi_N) \text{Id} \quad (2.164)$$

$$\hat{\mathbf{u}}|_{\Omega_{sN}} = 0 \quad (2.165)$$

Geht man zurück zur starken Formulierung des Problems, lautet diese Gleichung für  $\Omega$ :

$$\partial_t \theta - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla \theta) + \nabla \cdot ((1 - \chi_N) \mathbf{u} \theta) = u_z \quad (2.166)$$

Die gemischten Randbedingungen im Rayleigh-Bénard-System lassen sich problemlos in diese Gleichung einbinden. Behandelt man Dirichlet- und von Neumann-Ränder mit separaten Maskenfunktionen und Penalisationsparametern, so lässt sich die penalisierte Form der Rayleigh-Bénard-Gleichungen mit isolierenden Seitenwänden wie folgt formulieren:

$$\frac{1}{\Pr} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\omega} = \nabla \times \left( \frac{1}{\Pr} \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} - \frac{1}{\eta} (\chi_D + \chi_N) \cdot \mathbf{u} \right) + \Delta \boldsymbol{\omega} + \text{Ra} \frac{\partial}{\partial x} \theta \quad (2.167)$$

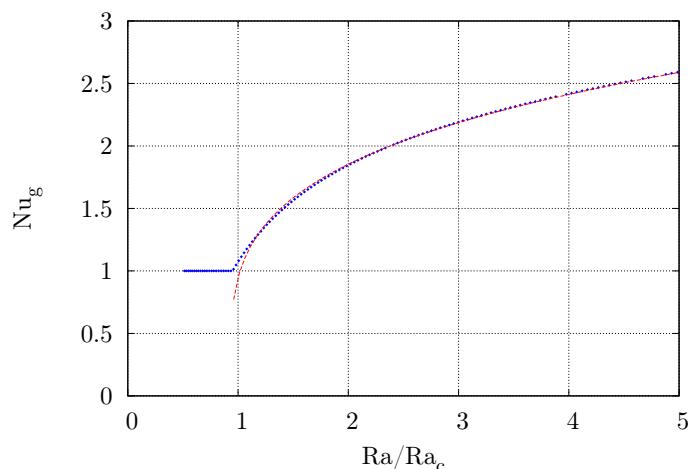
$$\frac{\partial}{\partial t} \theta + ((1 - \chi_N) \mathbf{u}) \cdot \nabla \theta = \nabla \cdot ((1 - \chi_N) \nabla \theta) - \frac{1}{\eta} \chi_D \theta + u_z \quad (2.168)$$

Im Gegensatz zur Dirichletpenalisierung wird hier auf einen strengen Beweis der Konvergenz der Methode verzichtet, die in Abbildung 2.19 dargestellten Fehler zeigen jedoch, dass die Randbedingungen für geeignete Wahl von  $\eta_N$  angenommen werden. Mit dieser modifizierten Penalisationsmethode ist es möglich, geometrische Strukturen wie in Abbildung 2.12 zu simulieren. Bei der Wahl von komplexeren Geometrien sollte jedoch immer bedacht werden, dass durch die Pseudospektralmethode mit Fouriermoden stets auf einem äquidistanten Gitter gerechnet wird und etwaige Strukturen mitunter auf diesem nicht adäquat dargestellt oder aufgelöst werden können. Zudem ist es für nichtkartesische Wände notwendig, die in diesem Abschnitt für die Temperaturabweichung  $\theta$  durchgeführten Überlegungen auf die tatsächliche Temperatur  $T$  zu übertragen, da sich durch das lineare additive Profil die Normalenableitung von  $T$  anders als diejenige von  $\theta$  verhält.

## 2.7. Validierung des Verfahrens

Bei der Entwicklung eines neuen numerischen Verfahren ist es stets notwendig, die produzierten Ergebnisse auf physikalische Korrektheit zu überprüfen. Auch wenn es theoretische Konvergenzaussagen für ein spezielles Verfahren gibt, existieren in der Regel diverse mögliche Fehlerquellen, die die Resultate verfälschen oder das gesamte Verfahren unzulässig werden lassen können. Es ist also unumgänglich, die Simulationsergebnisse mit bekannten Ergebnissen zu vergleichen und tatsächliche Abschätzungen für den Fehler des Verfahrens zu berechnen. Dies soll in diesem Abschnitt geschehen, die numerischen Ergebnisse der Penalisationsmethode sollen bei niedriger Rayleighzahl mit analytisch bekannten Ergebnissen verglichen werden und Abschätzungen für den Fehler des Verfahrens an den Wänden bei hohen Rayleighzahlen ermittelt werden.

### 2.7.1. Reproduktion der Bifurkation



**Abbildung 2.13.:** Aufgetragen ist die Nusseltzahl gegenüber der Rayleighzahl normiert auf die kritische Rayleighzahl. Die Simulationsparameter sind  $N_x = N_y = 128$ ,  $\text{Pr} = 1$  und  $\Gamma = 2$ . Ermittelte Daten werden durch blaue Punkte dargestellt, die gestrichelte rote Linie eine angefittete Potenzfunktion.

Die fundamentale Beobachtung bei der Betrachtung im Rayleigh-Bénard-System ist das Einsetzen von Konvektion oberhalb einer kritischen Rayleighzahl. Nach den Kapiteln 1 und 4 sollte sich das Verhalten der Nusseltzahl in einer Region um die kritische Rayleighzahl durch ein Potenzgesetz darstellen lassen, unterhalb sollte sich die Nusseltzahl stets zu 1 ergeben. Trägt man die in einer Simulation mit periodischen horizontalen Randbedingungen numerische ermittelte Nusseltzahl gegenüber der nach Gleichung (2.169) auf die kritische Rayleighzahl normierte Rayleighzahl

auf, so ergibt sich nach Abbildung 2.13 ebendieses Verhalten. Bei noch höheren Rayleighzahlen kommt es zu weiteren Bifurkationen, da höhere Moden angeregt werden können.

Die Bifurkation wird reproduziert, die gemessene kritische Rayleighzahl 1704 liegt 0,3% unterhalb der theoretisch erwarteten kritischen Rayleighzahl 1709,2. Dies ist hauptsächlich darauf zurückzuführen, dass die Relaxationszeit ins Gleichgewicht knapp überhalb der kritischen Rayleighzahl sehr groß wird und somit in der vorliegenden Simulation nicht vollständig durchlaufen wurde.

### 2.7.2. Seitenabhängigkeit der kritischen Rayleigh-Zahl

Ausgehend von einer Geometrie mit periodischen Rändern in horizontaler Richtung und no-slip Randbedingungen in vertikaler Richtung weist die kritische Rayleighzahl eine Abhängigkeit von dem Seitenverhältnis  $\Gamma$  auf. Der Grund hierfür ist, dass durch die Wahl der Höhe des Systems und damit dem Seitenverhältnis ein diskretes Spektrum von zulässigen Wellenvektoren ausgewählt wird. Berechnet man nun analytisch die kritische Rayleighzahl in Abhängigkeit von der Wellenzahl und vergleicht dieses Ergebnis mit Simulationsdaten, ergibt sich eine direkte Möglichkeit, die Penalisationsmethode bei niedrigen Rayleighzahlen zu validieren. Diese Berechnungen wurden von Pellew und Southwell durchgeführt [Pellew und Southwell 1940] und führen auf folgendes transzendentes Gleichungssystem für die Wellenzahl  $a$  und die kritische Rayleighzahl  $Ra_c$ :

$$-q_0 \tan \frac{1}{2} q_0 = \frac{(q_1 + q_2 \sqrt{3}) \sinh q_1 + (q_1 \sqrt{3} - q_2) \sin q_2}{\cosh q_1 + \cos q_2} \quad (2.169)$$

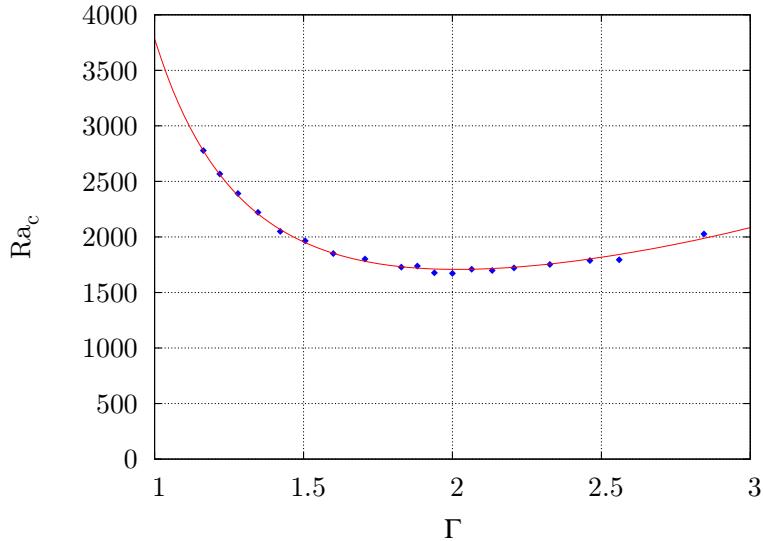
$$q_0 = a (\tau - 1)^{\frac{1}{2}} \quad (2.170)$$

$$q_1 = a \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{1 + \tau + \tau^2} + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{2} \tau \right) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.171)$$

$$q_2 = a \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{1 + \tau + \tau^2} - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{2} \tau \right) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.172)$$

$$Ra_c^2 = \tau^3 a^6 \quad (2.173)$$

Löst man diese Gleichung numerisch und rechnet noch die Wellenzahl  $a$  in das Seitenverhältnis  $\Gamma$  um, lassen sich Simulationsergebnisse und Theorie direkt vergleichen (Siehe Abbildung 2.14).

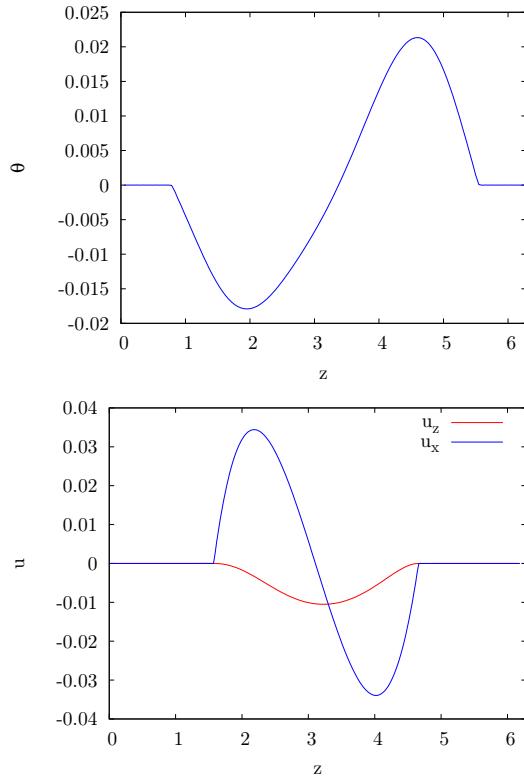


**Abbildung 2.14.:** Dargestellt ist die kritische Rayleighzahl in Abhangigkeit vom Seitenverhaltnis. Die blauen Punkten sind Messdaten, ermittelt aus Simulationen nach Abbildung 2.13, die rote gestrichelte Kurve ist die theoretische Abhangigkeit nach Chandrasekhar [Chandrasekhar 1961]. Simulationsergebnisse und theoretische Vorhersage liegen dicht beieinander, die Abweichungen ergeben sich im Wesentlichen aus der langen Relaxationszeit ins Gleichgewicht.

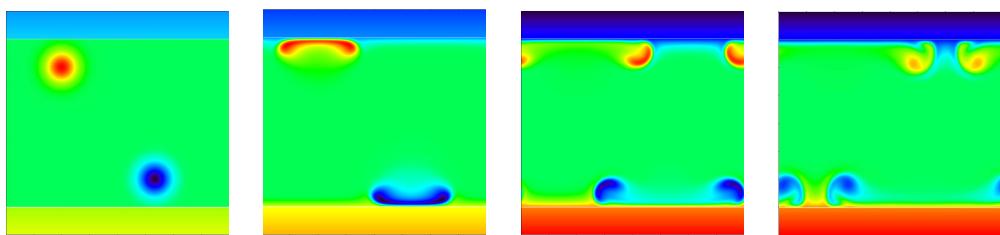
### 2.7.3. Wandkollisionen

Die Volumenpenalisierungsmethode soll nicht nur für Simulationen niedriger Rayleighzahlen eingesetzt werden, sondern sich auch für turbulente Regime eignen. Hierzu ist es erforderlich, das Annehmen der Randbedingungen bei großen Belastungen zu testen. Niedrige Rayleighzahlen resultieren in niedrigen Geschwindigkeiten und Vortizitaten und stellen keine groe Herausforderung an den Penalisationsparameter und die Ortsauflösung (Siehe Abbildung 2.15).

Fur eine Validierung der Randbedingungen bei hoheren Rayleighzahlen bietet sich eine Adaption eines Benchmarks an, der fur die Navier-Stokes-Gleichungen mit Randbedingung verwendet wird. Hier wird als Testsystem haufig eine Dipol-Wand-Kollision verwendet, bei der zwei Wirbel entgegengesetzter Vortizitat senkrecht auf eine Wand zulaufen [Clercx und Bruneau 2006]. Die bei der Kollision auftretenden Vortizitaten an der Wand stellen eine groe Herausforderung an das numerische Verfahren dar und eignen sich daher als Test fur die Annahme der Randwerte. Ubertragen lsst sich dieser Test auf das Rayleigh-Benard-System, wenn man anstelle des Dipoles durch das Setzen von lokalisierten gauformigen Strukturen im Temperaturfeld plumeartige Objekte erzeugt, die auf die Wande treffen.

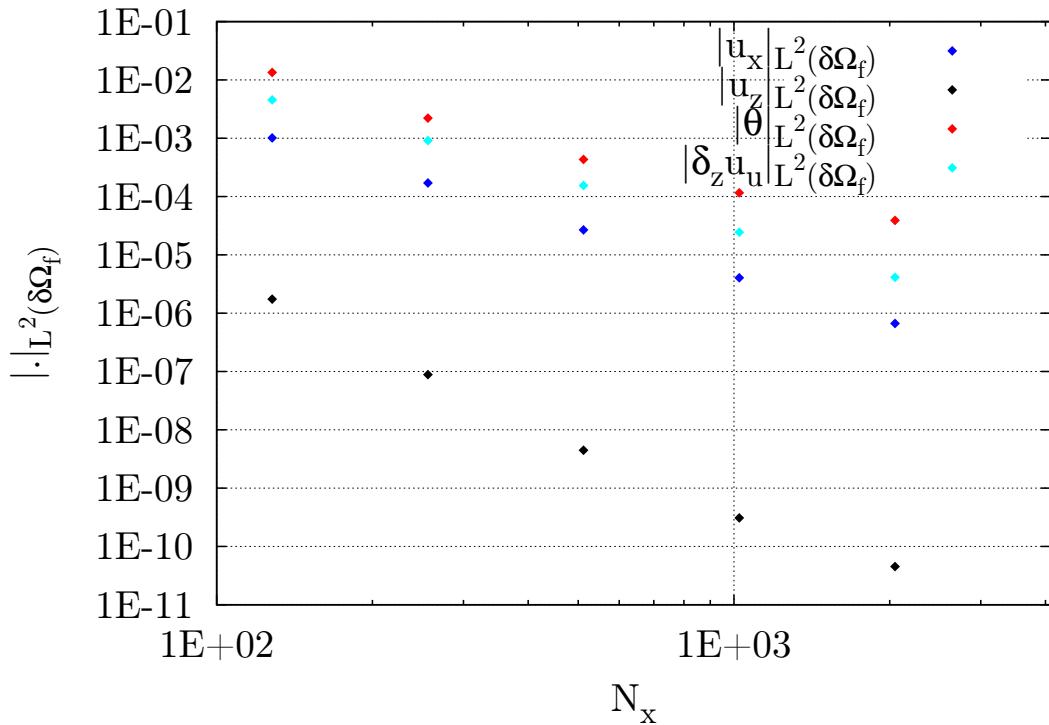


**Abbildung 2.15.:** Vertikale Profile zweier Simulationen bei Rayleighzahlen von  $10^5$ . Die Randbedingungen werden gut erfüllt, die Abweichungen von Null sind von der Größenordnung  $10^{-8}$ .



**Abbildung 2.16.:** Dargestellt ist die Zeitentwicklung der Temperaturverteilung der als Benchmark verwendeten Wandkollisionen. Die weißen horizontalen Linien entsprechen den Wänden in der durchgeführten Simulation.

Berechnet man die  $L^2$ -Fehler von Geschwindigkeit und Temperatur sowie die Normalableitung der senkrechten Geschwindigkeitskomponente an den Wänden wie in Abbildung 2.17, erhält man eine Möglichkeit, die tatsächliche Konvergenz des Verfahrens in Abhängigkeit von Ortsauflösung und Penalisationsparameter zu ermitteln und mit der Theorie in Abschnitt 2.3.2 zu vergleichen.



**Abbildung 2.17.:** Fehler an der Randschicht bei einer Dipol-Wand Kollision in Abhängigkeit von der Ortsauflösung. Der Fehler der senkrechten Geschwindigkeitskomponente konvergiert schneller gegen Null als die anderen Feldgrößen, da dieses Feld aufgrund der verschwindenden Ableitung über eine höhere Regularität verfügt.

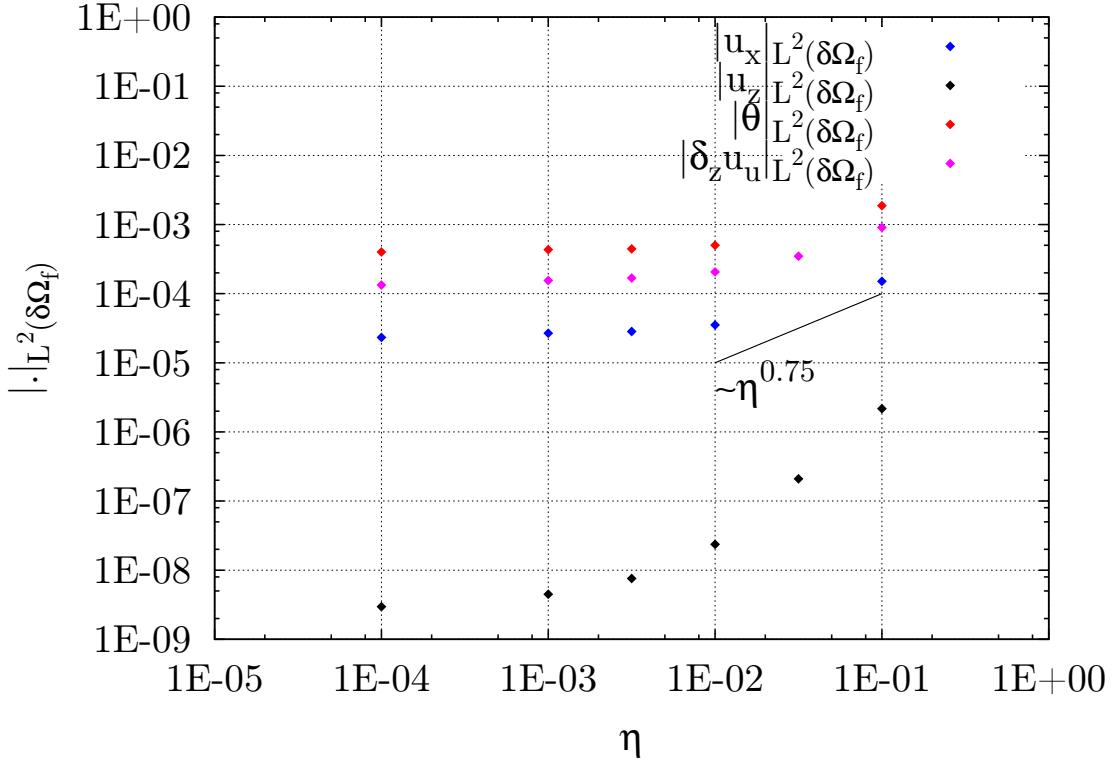
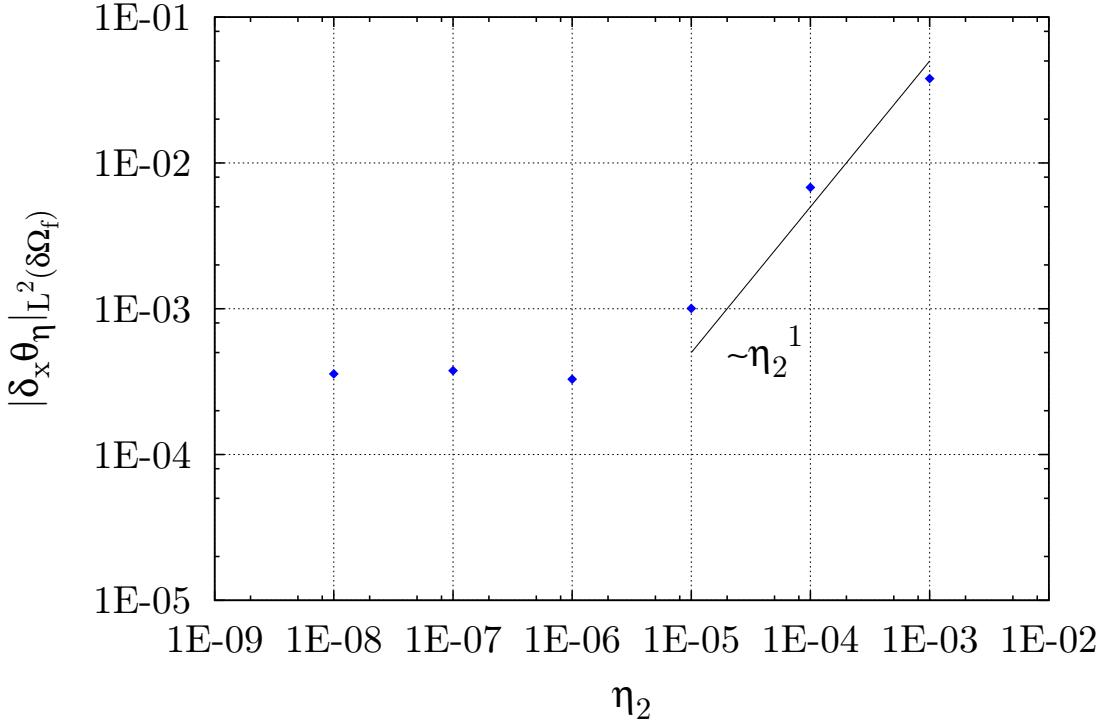


Abbildung 2.18.: Fehler an der Randschicht bei einer Dipol-Wand Kollision in Abhängigkeit vom Penalisationsparameter.

## 2.7.4. Isolierende Seitenwände

Da bisher keine theoretischen Aussagen über die Anwendbarkeit der Penalisation für isolierende Wände nach Abschnitt 2.6 hergeleitet wurden, soll hier anhand von Simulationsergebnissen die Korrektheit der Methode gezeigt werden. Hierzu wurde eine Simulation mit der Geometrie nach Abbildung 2.12 implementiert und das Langzeitverhalten des  $L^2$ -Fehlers der Normalenableitung der Temperaturabweichung an den Seitenwänden in Abhängigkeit vom Penalisationsparameter  $\eta_N$  untersucht. In der zeitgemittelten  $L^2$ -Norm ergibt sich in Bereichen größeren  $\eta_N$  eine quasi lineare Abhängigkeit des Fehlers vom Penalisationsparameter. Zu erkennen ist zudem eine Sättigung des Fehlers unterhalb eines Penalisationsparameters von  $10^{-6}$ ; es kommt bei einer weiteren Verringerung nicht zu einer Verbesserung des Fehlerverhaltens (Siehe Abbildung 2.19).

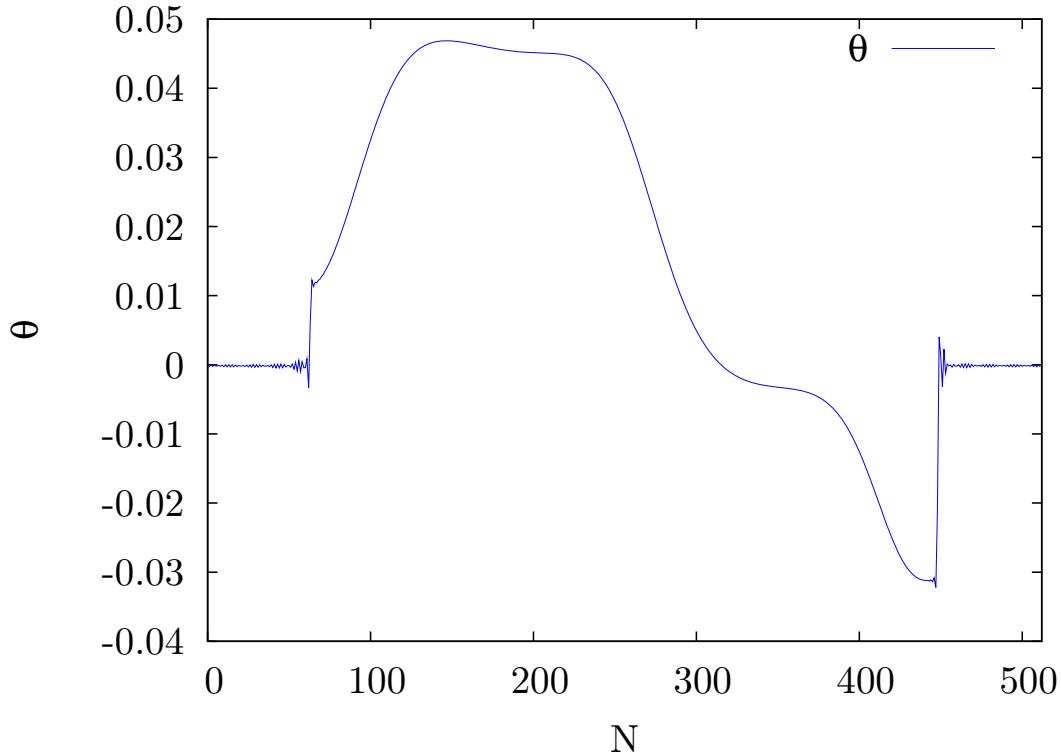
Ursächlich ist hier die Abhängigkeit des Fehlers von der Ortsdiskretisierung. Durch die Nichtstetigkeit des Temperaturabweichungsfeldes an den Wänden verringert sich die Konvergenzrate der Fourierprojektion und es kommt zu Gibb'schen Oszillationen. Betrachtet man einen horizontalen Schnitt obiger Simulation zu ei-



**Abbildung 2.19.:** Dargestellt ist der Fehler der Normalenableitung der Temperaturabweichung auf isolierenden Seitenwänden in Abhängigkeit von dem Penalisationsparameter  $\eta_N$  bei der Simulation einer Box nach Abbildung 2.12. Die Parameter der Simulation sind  $N_x = N_y = 512$ , wobei  $\Omega_f$  der Größe  $226 \times 384$  Gitterpunkte ist. Zudem ist  $\eta = 0.001$ ,  $Pr = 1$  und  $Ra = 10^7$ .

nem Zeitpunkt, so lassen sich die Oszillationen direkt erkennen. Innerhalb des Gebietes  $\Omega_f$  haben diese keinen Einfluss [Kadoch 2009], limitieren aber die mögliche Konvergenz des Fehlers bezüglich des Penalisationsparameters.

Bei der Betrachtung von isolierenden Seitenwänden sollte die Ortsauflösung nicht zu klein gewählt werden, da sonst die isolierende Eigenschaft verloren gehen kann. Mit der Wahl  $\eta_N \ll \nu, \kappa$  werden die Eigenschaften der Wände bei genügender Wahl der Auflösung jedoch hinreichend modelliert.



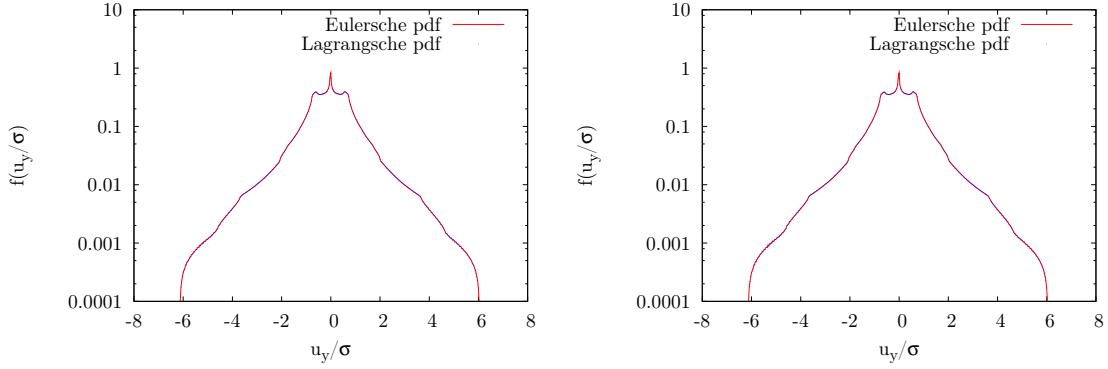
**Abbildung 2.20.:** Dargestellt ist ein horizontaler Schnitt aus einer Simulation wie in Abbildung 2.19. Die Oszillationen erstrecken sich in das Gebiet  $\Omega_{sD}$ , beeinflussen aber nicht das Verhalten in  $\Omega_f$ .

### 2.7.5. Validierung der Tracerimplementierung

Prinzipiell ist die Konvergenz der Interpolation hinreichend untersucht, dennoch stellen die Wände der Penalisationsmethode ein nicht unerhebliches Problem für die Simulation von Tracertrajektorien dar. Da nach Abschnitt 2.7.3 die resultierende senkrechte Komponente der Geschwindigkeit auf den Wänden nicht exakt verschwindet, besteht die Möglichkeit, dass randnahe Tracer durch diese Geschwindigkeitskomponente langsam in die Wände wandern. Dieses Verhalten ist durchaus nachvollziehbar, wenn man im Kontext der porösen Wände denkt, jedoch unerwünscht im Sinne einer lagrangeschen Darstellung. Für die Interpolation werden daher Feldwerte in den Wänden zu Null angenommen. Testen lässt sich das Verhalten der Tracer durch einen Vergleich der eulerschen und lagrangeschen ein-Punkt-Verteilungsfunktionen für Temperatur und Geschwindigkeit, die im Idealfall übereinstimmen sollten. Nutzt man als Belastungstest die gleiche Dipol-Wand-Kollision wie in Abschnitt 2.7.3, lassen sich verschiedene Interpolationsmethoden, bikubisch und bikubisch mit linearer Interpolation am Rand, vergleichen, es ergibt sich ein Verhalten nach Abbildung 2.21.

## 2 Volumenpenalisierung

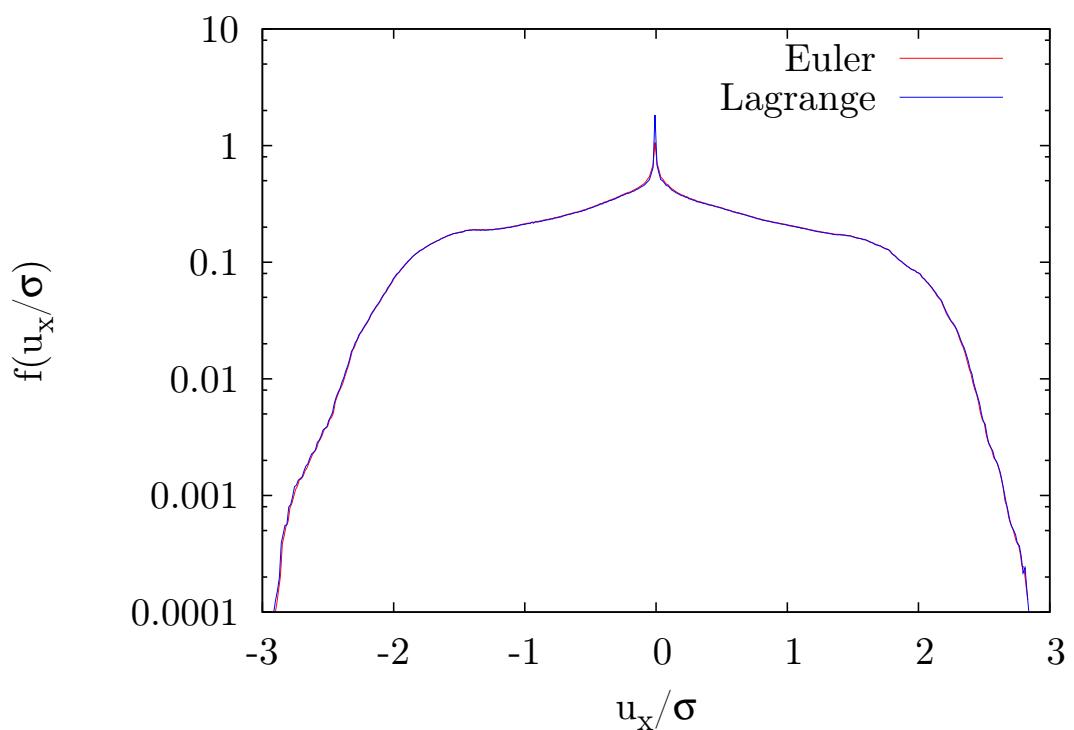
---



**Abbildung 2.21.:** Links dargestellt sind die eulerschen und Langrangschen normierten Verteilungsfunktionen der senkrechten Geschwindigkeitskomponente bei bikubischer Interpolation der Tracergeschwindigkeiten im gesamten Simulationsgebiet, rechts die Verteilungsfunktionen bei linearer Interpolation am Rand. Die Abweichungen der unterschiedlichen Interpolationsarten sind zu vernachlässigen.

Beide Interpolationsarten ergeben eine annähernd gleichwertige Identität der eulerschen und langrangschen Verteilungsfunktionen, die Differenz der beiden Darstellungen ist bei bikubischer Interpolation im gesamten Simulationsgebiet aufgrund der höheren Ordnung der bikubischen Interpolation etwas geringer als die der linearen Randinterpolation. Um das Ansammeln von Tracern an Wandschichten statistisch vollständig zu kontrollieren, bietet es sich zudem an, Tracer, die sich einem bestimmten Abstand zum ersten Wandgitterpunkt befinden (Praktikabel ist ein Abstand von 0.5% der Gitterweite), aus der Berechnung der langrangschen Verteilungsfunktion herauszunehmen. Der Anteil der Tracer, den diese Korrektur betrifft, ist abhängig vom gewählten Penalisationssparameter und der Dauer der Simulation. Bei den üblichen Penalisationssparametern ist dieser Anteil jedoch so gering, dass die langrangsche Darstellung hiervon nicht wesentlich beeinflusst wird. Das Zusammenfallen der eulerschen und langrangschen Verteilungsfunktionen ist folglich ein Beleg für die Praktikabilität der Implementation von Tracern in den penalisierten Rayleigh-Bénard-Gleichungen.

Das Zusammenfallen der beiden Verteilungsfunktionen ist auch für große Zeiten gegeben. Betrachtet man die Verteilungsfunktionen der horizontalen Geschwindigkeitskomponente einer Simulation einer Box mit isolierenden Wänden bei  $N_x = N_y = 512$ ,  $\text{Ra} = 10^7$  und  $\text{Pr} = 1$  nach  $5 \cdot 10^6$  Zeitschritten bei einem Penalisationssparameter  $\eta = 0,001$ , so ergeben sich nach Abbildung 2.22 ebenfalls keine nennenswerten Abweichungen.



**Abbildung 2.22.:** Eulersche und lagrangesche normierte Verteilungsfunktionen der horizontalen Geschwindigkeitskomponente in einer Simulation einer Box mit isolierenden Seitenwänden.



# 3. Lagrangesche Darstellung

Üblicherweise wird die Fluidodynamik von einem eulerschen Standpunkt aus betrachtet. Zu jedem Zeitpunkt kennt ein eulerscher Beobachter physikalisch relevante Größen als Feldgrößen überall im Raum. In den meisten Fällen ist diese Ansicht mathematisch zweckmäßig, oftmals gibt es jedoch eine intuitivere Beschreibung. Denkt man beispielsweise an Staub, der durch die Luft gewirbelt wird, oder an Blätter, die von einem Fluss mitgetragen werden, drängt sich eine Beschreibung der zugrundeliegenden Prozesse auf, die nicht auf die Bestimmung von Feldgrößen fixiert ist, sondern die Frage nach physikalischen Größen entlang der Bahnen von Teilchen stellt. Die hieraus resultierende Beschreibung ist die lagrangesche Darstellung der Fluidmechanik, entlang der Trajektorien von (passiven) Tracern werden die physikalisch relevanten Größen bestimmt. Einsichtig ist es, dass durch diese lagrangesche Darstellung keine neuen physikalischen Situationen geschaffen werden, sowohl eulersche als auch lagrangesche Beschreibung folgen denselben physikalischen Gesetzen und sollten äquivalente Resultate liefern. In diesem Kapitel soll nun die lagrangesche Darstellung für das Rayleigh-Bénard-System entwickelt werden, um anschließend anhand numerischer Ergebnisse lagrangesche und eulersche Beschreibung verschiedener Effekte der Rayleigh-Bénard-Konvektion miteinander zu vergleichen. In diesem Kapitel soll stets die einsteinsche Summenkonvention impliziert sein, über doppelte Indizes wird summiert.

$$x_i y_i := \sum_i x_i y_i \quad (3.1)$$

## 3.1. Lagrangesche Geschwindigkeit

Eine sehr ausführliche Beschreibung der lagrangeschen Fluidodynamik findet sich in dem Buch “Lagrangian Fluid Dynamics” von Andrew Bennett [Bennett 2006] und in der Diplomarbeit von Anton Daitche [Daitche 2009]. In diesem Abschnitt sollen die dort gewonnenen Erkenntnisse auf das Rayleigh-Bénard-Systems erweitert werden. Die zentrale Größe der lagrangeschen Beschreibung der Fluidodynamik ist die Trajektorie eines Teilchens, dass sich im Strömungsfeld bewegt. Das Teilchen starte zur Zeit  $t = 0$  an der Position  $\mathbf{y}$  und folge dann, getrieben durch die lokale Geschwindigkeit, der Strömung entlang der Trajektorie  $\mathbf{X}(\mathbf{y}, t)$ . Dies lässt sich durch folgende Gleichung ausdrücken:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(\mathbf{y}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{y}, t), t) \quad (3.2)$$

Die Langrangesche Geschwindigkeit  $\mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{y}, t), t)$  ist direkt verknüpft mit der eulerschen Geschwindigkeit  $\mathbf{u}[\mathbf{x}, t]$ , geht man vom Startpunkt  $(\mathbf{y}, t_0)$  des Teilchens aus, so ist offensichtlich, dass dort die eulersche Geschwindigkeit identisch mit der lagrangeschen Geschwindigkeit sein muss:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{y}, t_0), t_0) = \mathbf{u}[\mathbf{X}, t_0] \quad (3.3)$$

Es lässt sich also folgende, insbesondere für die Numerik hilfreiche Bewegungsgleichung aufstellen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{X}(\mathbf{y}, t) = \mathbf{u}[\mathbf{X}(\mathbf{y}, t_0), t_0] \quad (3.4)$$

Dies ist insofern von Vorteil, da zur numerischen Implementation von Tracertrajektorien lediglich die eulerschen Feldgrößen bekannt sein müssen. Hierzu siehe auch Abschnitt 2.5.2. Gleichsam gilt für die Temperatur der Tracer entlang der Trajektorien:

$$T(\mathbf{X}(\mathbf{y}, t), t) = T[\mathbf{X}, t] \quad (3.5)$$

## 3.2. Lagrangesche Abbildung

Kennt man die Trajektorien zu sämtlichen möglichen Startpunkten  $\mathbf{y}$ , sind eulersche und lagrangesche Darstellung vollständig äquivalent und beinhalten denselben Informationsgehalt. Es wird dann durch die lagrangesche Bewegungsgleichung eine Abbildung  $\mathbf{X}$  definiert, die die Startpositionen auf den aktuellen Punkt der Trajektorie abbildet:

$$\mathbf{X} : \mathbf{y} \rightarrow (\mathbf{X}(\mathbf{y}, t), t) \quad (3.6)$$

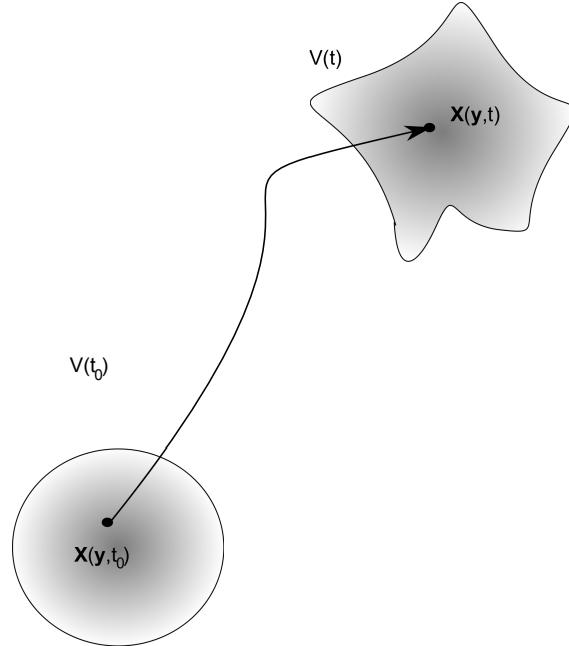
Deren Jacobimatrix  $\bar{\mathbf{L}}$  ergibt sich direkt durch:

$$\bar{L}_i^j = \frac{\partial X_i}{\partial y_j} \quad (3.7)$$

Des Weiteren ist diese Abbildung für inkompressible Fluide volumenerhaltend, da gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \det(\bar{L}) = \frac{\partial}{\partial t} \det \left( \frac{\partial X_i}{\partial y_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_m} \frac{\partial x_m}{\partial t} \det(\bar{L}) = \det(\bar{L}) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.8)$$

Ein Gebiet, das von einer Menge von Teilchen gebildet wird, wird im Laufe der Zeit im Allgemeinen seine Form ändern, nicht jedoch sein Volumen. Ein Volumenelement der Größe  $d\mathbf{x}$  zur Startzeit der Tracer  $t_0$  wird durch die Abbildung wiederum auf ein gleich großes Volumenelement abgebildet:



**Abbildung 3.1.:** Ein Volumen, das zur Zeit  $t_0$  die Größe  $V$  hat, wird durch die lagrangesche Abbildung in der Form verändert. Bei inkompressiblen Strömungen verschwindet die Zeitableitung der Determinante der Jacobimatrix, die Größe des Volumens bleibt erhalten, Zeichnung analog zu Bennett [Bennett 2006].

Die lagrangesche Abbildung ist insbesondere bijektiv [Daitche 2009] und somit invertierbar. Es lässt sich demnach ebenfalls die Umkehrabbildung  $\mathbf{Y}$  definieren, die die aktuelle Position des Teilchens zurück auf den Startpunkt  $\mathbf{y}$  abbildet:

$$\mathbf{Y} : \mathbf{X} \rightarrow (\mathbf{y}) \quad (3.9)$$

Deren Jacobimatrix lautet dementsprechend:

$$L_i^j = \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \quad (3.10)$$

Wählt man die Startkoordinaten  $\mathbf{y}$  als neue Koordinaten, so erhält man die lagrangesche Darstellung. Der Fokus der Betrachtung liegt nun nicht mehr auf dem eulerschen Feldern, die zu jedem Punkt die physikalischen Größen an beliebigen Orten darstellen, sondern auf der Betrachtung der Entwicklung physikalischer Größen entlang der Trajektorien einzelner Teilchen. Invertiert man also die Transformation aus Abbildung 3.1, so ergibt sich eine neue Betrachtungsweise der Fliddynamik.

### 3.3. Lagrangesche Rayleigh-Bénard-Gleichungen

Zur Umformulierung der Rayleigh-Bénard-Gleichungen in die lagrangesche Darstellung ist es zunächst erforderlich, sich Gedanken über das Verhalten der Zeitableitung zu machen. Hierzu sei  $\mathbf{q}$  eine beliebige lagrangesche Feldgröße, die sich im Laufe der Zeit ändern soll. In den lagrangeschen Koordinaten  $\mathbf{y}$  erhält man die Zeitableitung direkt aus Abschnitt 3.1 nach Anwendung der Kettenregel als:

$$\frac{\partial \mathbf{q}(\mathbf{X}(\mathbf{y}, t), t)}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{q}[\mathbf{x}, t]}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{q}[\mathbf{x}, t] \quad (3.11)$$

Hiernach ist leicht einzusehen, dass durch die lagrangesche Abbildung die konvektiven Terme der Rayleigh-Bénard-Gleichung wegfallen. Berechnet man weiter über die Kettenregel die Ortsoperatoren in lagrangeschen Koordinaten, lassen sich die Rayleigh-Bénard-Gleichungen transformieren. Im weiteren bezeichnen Operatoren mit einem  $L$  im Index Operatoren im Lagrangebild.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial Y_n}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial y_n} = L_i^n \frac{\partial}{\partial y_n} \quad (3.12)$$

$$\nabla_L = \left( \frac{\partial Y_n}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_n}, \frac{\partial Y_n}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial y_n}, \frac{\partial Y_n}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial y_n} \right) = \left( L_1^n \frac{\partial}{\partial y_n}, L_2^n \frac{\partial}{\partial y_n}, L_3^n \frac{\partial}{\partial y_n} \right) \quad (3.13)$$

$$\Delta_L = \frac{\partial Y_n}{\partial x_m} \frac{\partial Y_l}{\partial x_m} \frac{\partial^2}{\partial y_n \partial y_l} + \frac{\partial^2 Y_l}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial}{\partial y_l} = L_m^n L_m^l \frac{\partial^2}{\partial y_n \partial y_l} + \frac{\partial^2 Y_l}{\partial x_m \partial x_m} \frac{\partial}{\partial y_l} \quad (3.14)$$

Mit diesen Operatoren lassen sich die Rayleigh-Bénard-Gleichungen in lagrangesche Koordinaten transformieren und man erhält eine scheinbar einfachere Form dieser Gleichungen:

$$\frac{\partial \theta(\mathbf{y}, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} X_3(\mathbf{y}, t) = \Delta_L \theta(\mathbf{y}, t) \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} u_i[x_i, t] = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial^2 \mathbf{X}(\mathbf{y}, t)}{\partial t^2} = -\nabla_L P(\mathbf{y}, t) + \Delta_L \mathbf{u}(\mathbf{y}, t) + \text{Ra} \theta(\mathbf{y}, t) \mathbf{e}_z \quad (3.17)$$

Diese Gleichungen sind jedoch keinesfalls linear, wie es zunächst durch den Wegfall des Konvektionstermes erscheint, sondern ebenso nichtlinear wie die eulerschen Rayleigh-Bénard-Gleichungen. Der Grund hierfür ist die Zeitabhängigkeit und Nichtlinearität der lagrangeschen Abbildungen  $\mathbf{Y}(\mathbf{x}, t)$  und  $\mathbf{X}(\mathbf{y}, t)$ . Da diese Abbildung nur bei Kenntnis der Lösung der eulerschen Gleichungen analytisch berechenbar ist, werden die Rayleigh-Bénard-Gleichungen im Folgenden numerisch in Abhängigkeit von  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  bestimmt. Dies umgeht das Problem der analytischen Bestimmung der Jacobideterminante, was nur in wenigen Spezialfällen überhaupt machbar ist [Wilczek 2007].

## 3.4. Verschiedene Anfangsbedingungen in lagrangeschen Koordinaten

Im Folgenden sollen nun anhand numerischer Ergebnisse des Algorithmus aus Kapitel 2 verschiedene Effekte der Rayleigh-Bénard-Konvektion in eulerschen und lagrangeschen Koordinaten miteinander verglichen werden. Durch den, durch die Transformation bedingten, Wegfall des konvektiven Termes in beiden Gleichungen ergibt sich eine interessante alternative Sichtweise auf die dynamischen Vorgänge im Rayleigh-Bénard-System, die durch diffusive Effekte und die Kopplung der Gleichungen bestimmt sind. Zunächst soll das Augenmerk auf verschiedenen Anfangsbedingungen liegen und in Abschnitt 3.5 dann die voll entwickelte Konvektion betrachtet werden.

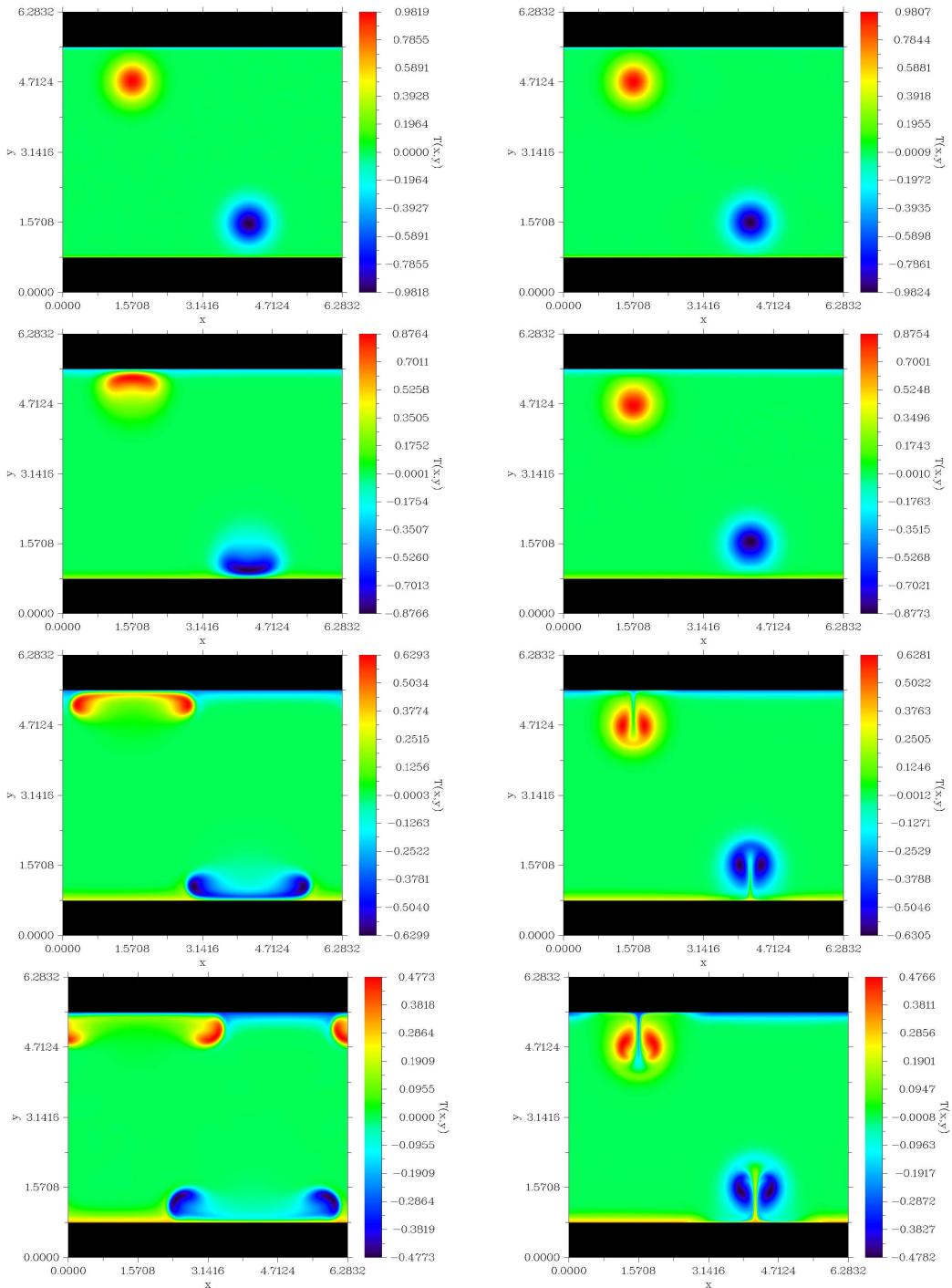
Visualisierungen der Vorgänge in beiden Koordinaten finden sich auf der beiliegenden DVD im Verzeichnis "...\\Videos\\Kapitel 3\\...", es wird empfohlen, diese zum besseren Verständnis zu betrachten. Zur Entstehung von Plumes und der Rayleigh-Taylor-Instabilität befinden sich zudem Visualisierungen der Bewegung von Teilchen in jeweiligen Ordnern.

### 3.4.1. Wandkollisionen

Zunächst wird ein künstlich konstruiertes, nichtsdestoweniger untersuchenswertes Beispiel betrachtet, das einen guten Einblick in die Unterschiede der beiden Darstellungsweisen liefert und die Wechselwirkungen mit den Randschichten in den Mittelpunkt stellt. Die zum Testen des numerischen Verfahrens verwendeten Wandkollisionen aus Abschnitt 2.7.3 eignen sich besonders, um den Einfluss der Wände in lagrangeschen Koordinaten zu untersuchen. Hierzu wird ausgehend von zwei gaußförmigen Strukturen in der Temperatur die lagragesche Abbildung berechnet.

### 3 Lagrangesche Darstellung

---



**Abbildung 3.2.:** Zeitlicher Verlauf einer Wandkollision nach Abschnitt 2.7.3 in eulerschen (links) und lagrangeschen (rechts) Koordinaten. Dargestellt zu den Zeiten  $t = 0$ ,  $t = 5,4$ ,  $t = 9,9$  und  $t = 14,4$ . Parameter der Simulation in Tabelle 3.1.

$N_x, N_y$	$\Gamma$	$Ra$	$Pr$
1024	$\frac{4}{3}$	$10^7$	1

**Tabelle 3.1.:** Parameter der Wandkollision zur Bestimmung der lagrangeschen Abbildung.  
Das Seitenverhältnis  $\Gamma$  ist definiert als Quotient aus Länge und Höhe des Systems.

Der zeitliche Verlauf dieser Kollision ist dargestellt in Abbildung 3.2. In der eulerschen Darstellung bewegen sich die lokalisierten Strukturen auf die Wände zu und verformen sich dabei direkt aufgrund des gaußförmigen Profils: Fluid extremerer Temperaturen werden schneller Richtung Wand transportiert als solches mittlerer Temperatur. Es kommt schon zu einer Zeit von  $t = 5,4$  zu einer deutlichen Abflachung der gaußschen Profile in vertikaler Richtung. Bemerkenswert ist nun, dass es in lagrangeschen Koordinaten zu diesem Zeitpunkt zu keiner nennenswerten Veränderung der Form gekommen ist. Die absoluten Werte der Temperatur werden ebenso wie in eulerschen Koordinaten durch Diffusion gedämpft, die Bewegung der Strukturen wird jedoch völlig ausgeblendet.

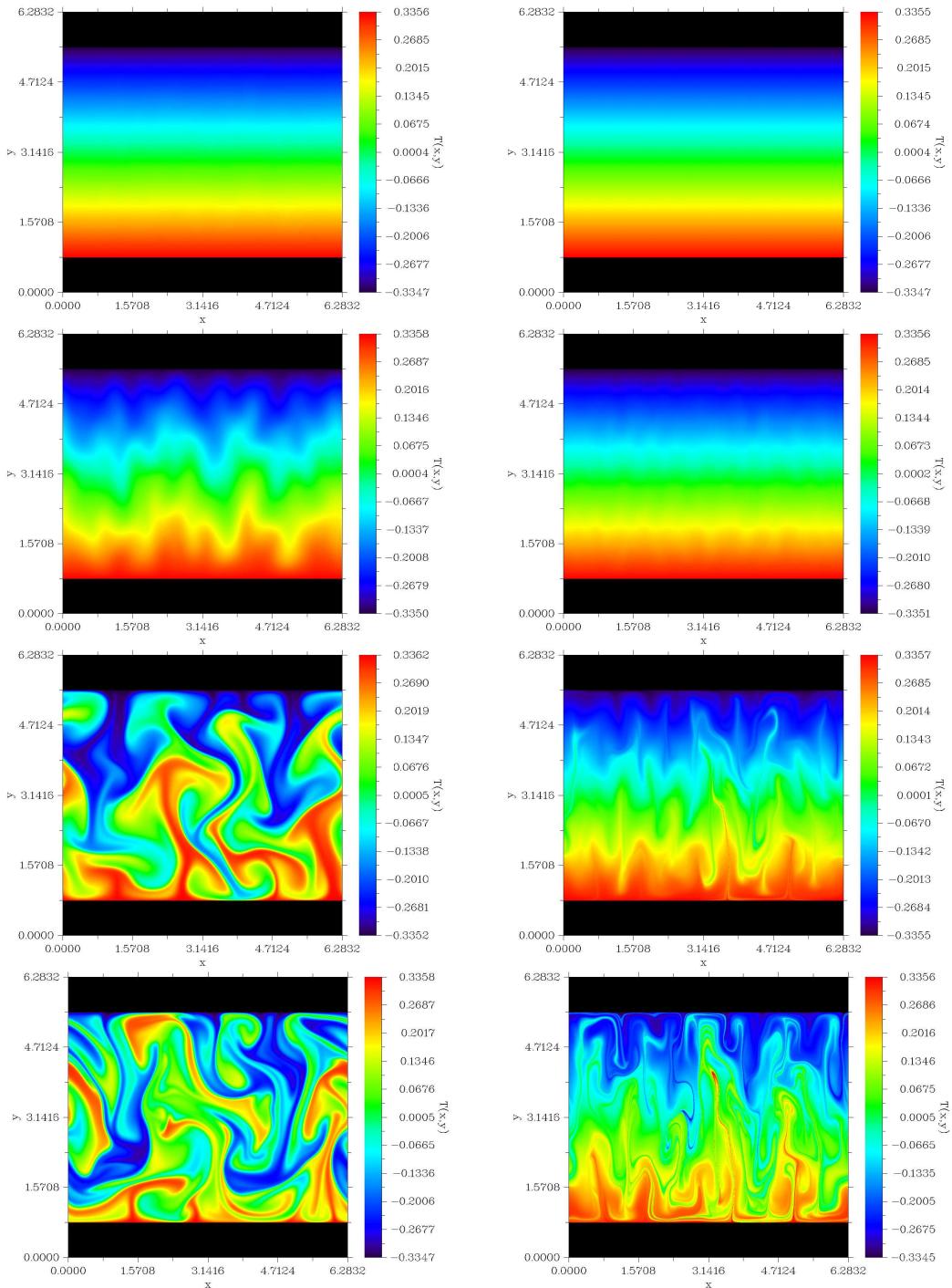
Zu einer Zeit von  $t = 9,9$  sind die Strukturen in eulerschen Koordinaten auf die Wände aufgetroffen und spalten sich in jeweils zwei kleinere Strukturen auf, die sich entlang der Wände in horizontaler Richtung bewegen. Dabei kommt es zu einer Verformung der “eulerschen Randschicht”, das Auftreffen der gaußschen Strukturen verdrängt randnahe Fluid, welches die sich dann in horizontaler Richtung bewegenden Strukturen vor sich herschieben. Die Kollision mit den Wänden wird nun auch im Gegensatz zu der Bewegung der Strukturen in lagrangeschen Koordinaten sichtbar, auch wenn sich hier ein völlig anderes Bild als in eulerschen Koordinaten darbietet. Teilchen im horizontalen Zentrum der Strukturen erfahren eine deutliche Abkühlung bzw. Erwärmung, beginnend mit randnäheren Bereichen, sodass eine keilförmige Aufspaltung der ursprünglichen Struktur einsetzt. Diese wird zu größeren Zeiten verstärkt; im Gegensatz zu eulerschen Koordinaten, in denen sich zur Zeit  $t = 14,4$  die abgespaltenen Strukturen von den Wänden ablösen, bleiben diese in lagrangeschen Koordinaten nahezu ortsfest. Die Entwicklung dieser Kollision verläuft in lagrangeschen Koordinaten bedeutend langsamer ab als in eulerschen Koordinaten und ist stark lokalisiert. Die Bewegung der Strukturen wird in lagrangeschen Strukturen beinahe völlig ausgeblendet.

### 3.4.2. Rayleigh-Taylor-Instabilität

Geht man von einer Rayleigh-Taylor-Instabilität aus, einer Anfangsbedingung, bei der sich zunächst kalte, schwere Flüssigkeit über warmer, leichter Flüssigkeit befindet, so kommt es zu einer turbulenten Vermischung. Realisieren lässt sich dies, wenn man mit den Parametern aus 3.1 als Anfangsbedingung  $\theta = 0$  wählt.

### 3 Lagrangesche Darstellung

---



**Abbildung 3.3.:** Zeitlicher Verlauf einer Rayleigh-Taylor Instabilität in eulerschen (links) und lagrangeschen (rechts) Koordinaten. Dargestellt zu den Zeiten  $t = 9,9$ ,  $t = 18,9$ ,  $t = 24,5$  und  $t = 26,8$ . Die Simulationsparameter entsprechen denen in 3.1.

In eulerschen Koordinaten kommt es zunächst bei  $t = 18,9$  zu einer langwelligen Störung des Anfangsprofils, die sich, deutlich weniger stark ausgeprägt, in lagrangeschen Koordinaten kaum widerspiegelt. Zu  $t = 24,5$  kommt es zu in eulerschen Koordinaten zur Bildung bis zu etwa einem Viertel der horizontalen Länge des Systems messenden, plumeartigen Strukturen, die zu einer turbulenten Durchmischung der Flüssigkeit führen. In der lagrangeschen Darstellung hingegen bilden sich statt dieser großen, sich bewegenden Strukturen feine, vertikal ausgerichtete Filamente aus, die das Anfangsprofil durchsetzen.

Geht man zu noch größeren Zeiten ( $t = 26,8$ ) über, so verkleinern sich auch die Strukturen in der eulerschen Darstellung, in lagrangeschen Koordinaten ist dieser Effekt jedoch deutlich ausgeprägter. Bemerkenswert ist insbesondere die Tatsache, dass die ursprünglichen vertikalen Störung auch zu größeren Zeiten vertikal ausgeprägt bleiben. Während in eulerschen Koordinaten keine eindeutige Vorzugsrichtung zu erkennen ist, weist die lagrangesche Darstellung trotz der deutlich feineren Strukturen und deren hoher Komplexität eine größere räumliche Ordnung auf.

### 3.4.3. Entstehung von Plumes

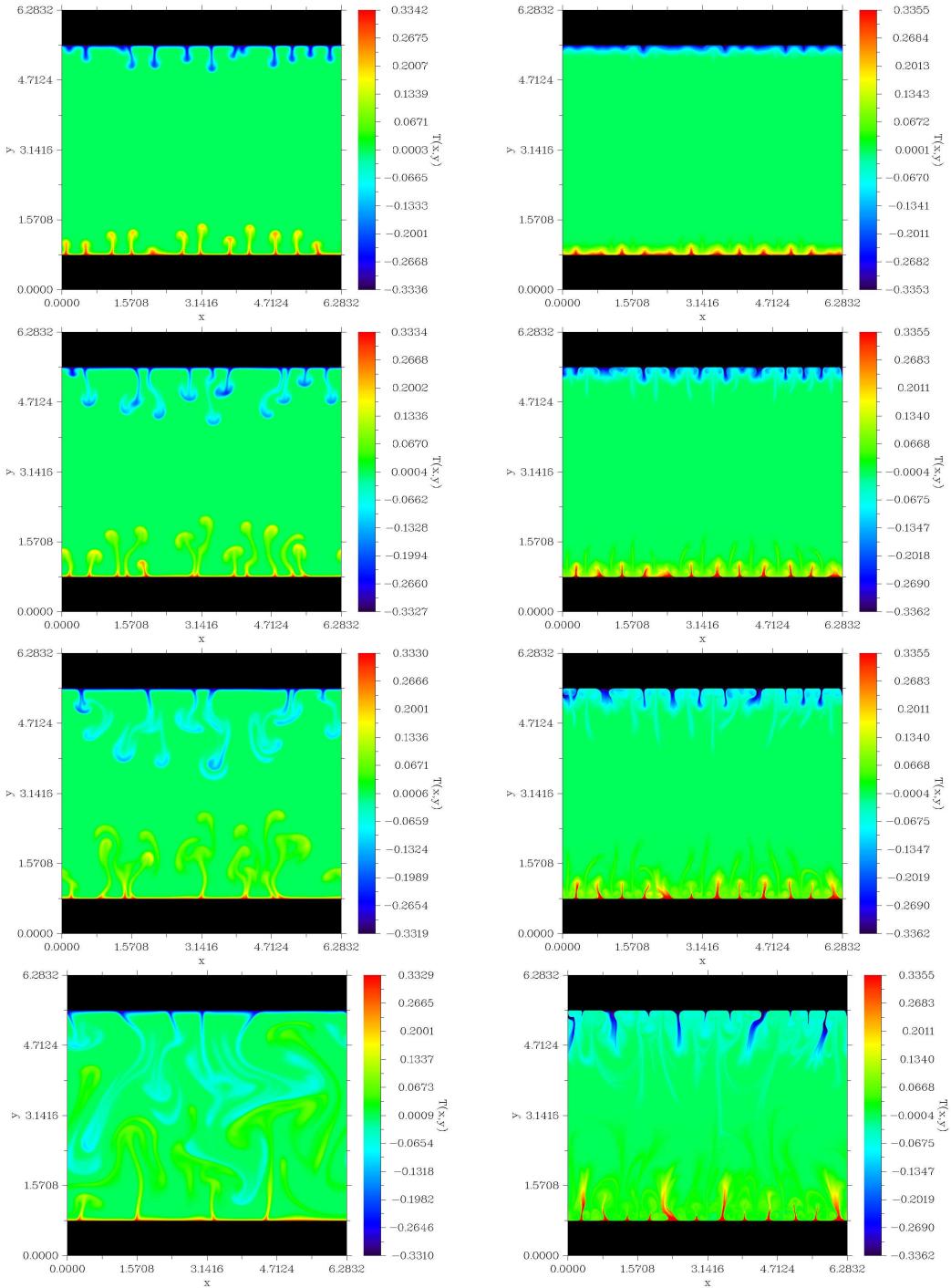
$N_x, N_y$	$\Gamma$	$Ra$	$Pr$
1024	$\frac{4}{3}$	$10^7$	100

**Tabelle 3.2.:** Parametersatz zur Entstehung von Plumes.

Eine charakteristische Eigenschaft des Rayleigh-Bénard-Systems bei hohen Prandtlzahlen ist die Ausbildung von Plumes. Hierbei handelt es sich um pilzartige Strukturen, die sich in den Randschichten bilden und durch Auf- beziehungsweise Absteigen diese Randschichten tiefer in den Bulk erweitern. Diese Plumes werden sich nach einiger Zeit von der ursprünglichen Randschicht trennen und auf die entgegengesetzte Wand treffen und dabei eine signifikante Menge an Wärme transportiert haben. Gerade in Parameterbereichen sehr großer Prandtlzahlen, wie sie beispielsweise in geophysikalischen Anwendungen auftreten, tragen Plumes wesentlich zur Dynamik des Systems bei und bedürfen daher einer intensiven Untersuchung. Hier soll die Entstehung von Plumes und ihre Bedeutung für die zeitliche Entwicklung der Rayleigh-Bénard-Konvektion in lagrangeschen Koordinaten untersucht werden. Hierzu wird ein Parametersatz nach Tabelle 3.2 gewählt, der gewährleistet, dass sich nach kurzer Zeit aus mit geringem Rauschen versetzten Nullstartwerten für die Felder Plumes entwickeln.

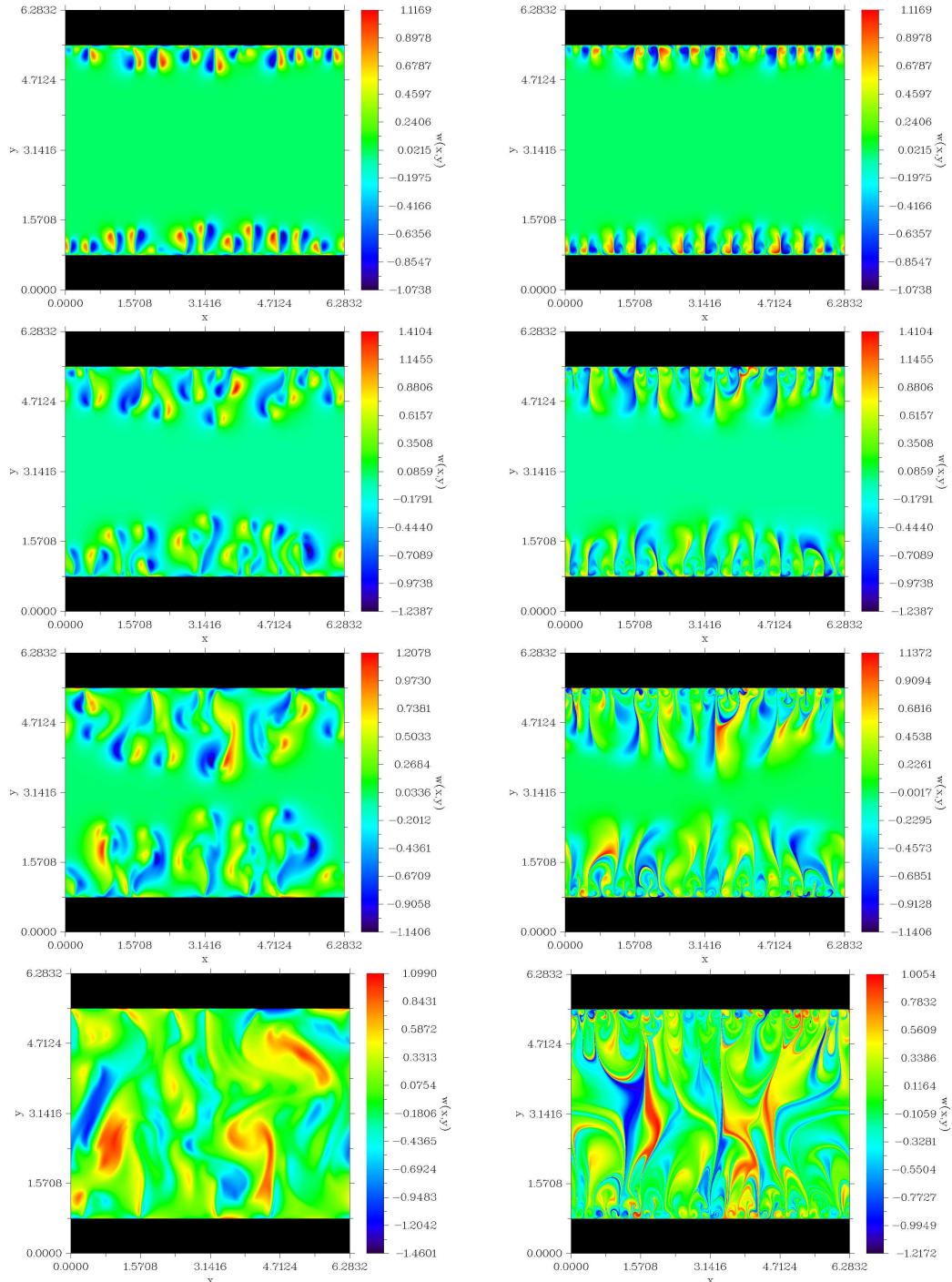
### 3 Lagrangesche Darstellung

---



**Abbildung 3.4.:** Entstehung von Plumes bei einer Prandtlzahl von  $\text{Pr} = 100$  in eulerschen (links) und lagrangeschen (rechts) Koordinaten. Dargestellt zu den Zeiten  $t = 54, t = 63, t = 72$  und  $t = 90$ .

### 3.4 Verschiedene Anfangsbedingungen in lagrangeschen Koordinaten



**Abbildung 3.5.:** Entstehung von Plumes bei einer Prandtlzahl von  $\text{Pr} = 100$  in eulerschen (links) und lagrangeschen (rechts) Koordinaten. Dargestellt ist die Vortizität zu den Zeiten  $t = 54$ ,  $t = 63$ ,  $t = 72$  und  $t = 90$ .

### 3 Lagrangesche Darstellung

---

Betrachtet man zunächst die Temperatur in Abbildung 3.4, so haben sich in der eulerschen Darstellung zur Zeit  $t = 54$  an beiden Randschichten Plumes mit runden Köpfen gebildet, die sich in vertikale Richtung bewegen. In lagrangeschen Koordinaten ist die Bildung noch nicht zu erkennen, lediglich die Randschicht scheint eine fast regelmäßige aufgerautete Form anzunehmen. Zur Zeit  $t = 63$  weisen die Plumes in eulerschen Koordinaten die charakteristische pilzartige Struktur auf, aus der ursprünglichen rein vertikalen Bewegung haben sich horizontale Anteile durch die steigende Vortizität entwickelt. Man beachte, dass die zur Zeit  $t = 54$  in regelmäßigen Abständen entstandenen Plumes in kleineren Gruppen zusammengetrieben werden. Dem gegenüber ist zur Zeit  $t = 63$  in lagrangeschen Koordinaten eine regelmäßige Struktur entstanden, die sich aus zwei Teilen zusammensetzt: Eine fingerförmige Struktur wechselnder extremer und mittlerer Temperaturen, die an den Wänden lokalisiert ist, und eine feinere, vertikal ausgerichtete Struktur geringer Temperaturabweichung vom Mittel.

Bemerkenswert ist hier insbesondere, dass die Extrema der feinen Struktur gerade mit der horizontalen Koordinate der Entstehungsorte der Plumes in eulerschen Koordinaten zusammenfallen, während hingegen die fingerförmige Struktur an deren Zwischenbereichen lokalisiert ist. Der Grund hierfür liegt in der vertikalen Bewegung der Plumes in eulerschen Koordinaten. Beim Auf- oder Absteigen eines Plumes trägt dieser Teilchen, die er passiert, mit. Diese werden dann erwärmt bzw. abgekühlt und erscheinen in lagrangeschen Koordinaten als feine Struktur. Hier lässt sich in lagrangeschen Koordinaten in gewissem Rahmen die Bewegung der Plumes zurückverfolgen, ohne die gesamte zeitliche Dynamik kennen zu müssen. In eulerschen Koordinaten kommt es über die Zeit  $t = 72$  bis hin zu einer Zeit von  $t = 100$  zu einer Durchmischung der Plumes, bei der die ursprüngliche Identifizierbarkeit der Plumes verloren geht. Es lassen sich noch großflächige Plumes identifizieren, die bei  $t = 100$  beinahe bis zu der Hälfte der horizontalen Ausdehnung der grundlegenden Geometrie messen. Es erscheint aber aussichtslos, allein aus dieser Feldverteilung die Anzahl der ursprünglichen Plumes zu rekonstruieren. Ganz anders stellt sich dies in lagrangeschen Koordinaten dar. Die wandnahe, fingerförmige Struktur büßt zwar einige Regelmäßigkeit ein, einige Ausläufer werden zu kleinen Peaks direkt an den Wänden, dem gegenüber andere sich vertikal ausdehnen und an den Enden ausfasern. Jedoch lässt sich auch zu großen Zeiten stets die Anzahl der ursprünglichen Plumes in eulerschen Koordinaten rekonstruieren. Dies ist ein starker Hinweis darauf, dass die Entstehung von Plumes einen wesentlichen, langzeitkorrelierten Einfluss auf die Dynamik des Systems hat.

Experimentelle Untersuchungen von Zhou und Xia haben ergeben, dass der Skalierungsexponent der Nusseltzahl-Rayleighzahl-Beziehung im Wesentlichen durch Plumeanzahl im System bestimmt wird [Zhou und K.-Q. 2010]. Die Darstellung der Plumeentstehung in lagrangeschen Koordinaten könnte aufgrund der besseren Detektierbarkeit der Plumeanzahl und zeitlich länger korrelierten Effekte ein

komplementäres Hilfsmittel zur genauen Bestimmung der Abhängigkeit der Plumeanzahl von der Rayleighzahl und deren Einfluss auf den Wärmetransport bieten.

Interessant ist zudem die Darstellung in der Vortizität von der Entstehung von Plumes. Betrachtet man Abbildung 3.5, die der Situation aus Abbildung 3.4 entspricht und zu gleichen Zeit abgebildet ist, so ist zu erkennen, dass die entstehenden Strukturen in lagrangeschen Koordinaten in etwa die gleiche räumliche Ausdehnung wie diejenigen in eulerschen Koordinaten aufweisen, jedoch deutlich feiner strukturiert sind. Für große Zeiten ( $t = 100$ ) ergeben sich in der lagrangeschen Darstellung hochkomplexe Muster, die keine Äquivalente in der eulerschen Darstellung haben und besser verstanden werden müssen.

Auffallend ist, dass sich Änderungen der Strukturen in der lagrangeschen Darstellung dann ergeben, wenn es zu topologischen Veränderungen in der eulerschen Darstellung kommt. So kommt es beispielsweise bei den Wandkollisionen genau dann zu einem Aufspalten der Struktur in lagrangeschen Koordinaten, wenn es in eulerschen Koordinaten zur Kollision mit der Wand gekommen ist und sich eine qualitativ neue Strömungssituation entwickelt hat.

## 3.5. Rayleigh-Bénard-Konvektion in lagrangeschen Koordinaten

Nachdem im letzten Abschnitt verschiedene Anfangsbedingungen in lagrangeschen Koordinaten diskutiert wurden, soll nun der Fokus auf relaxierter Konvektion liegen. Hierzu wurden numerische Simulationen über große Zeitspannen berechnet, sodass Effekte der Anfangsbedingungen zu vernachlässigen sind. Nach dem Abklingen des Einflusses der Anfangsbedingungen wurde auf jedem Gitterpunkt ein Tracer platziert und von dort aus die lagrangesche Abbildung berechnet.

### 3.5.1. Periodische Ränder

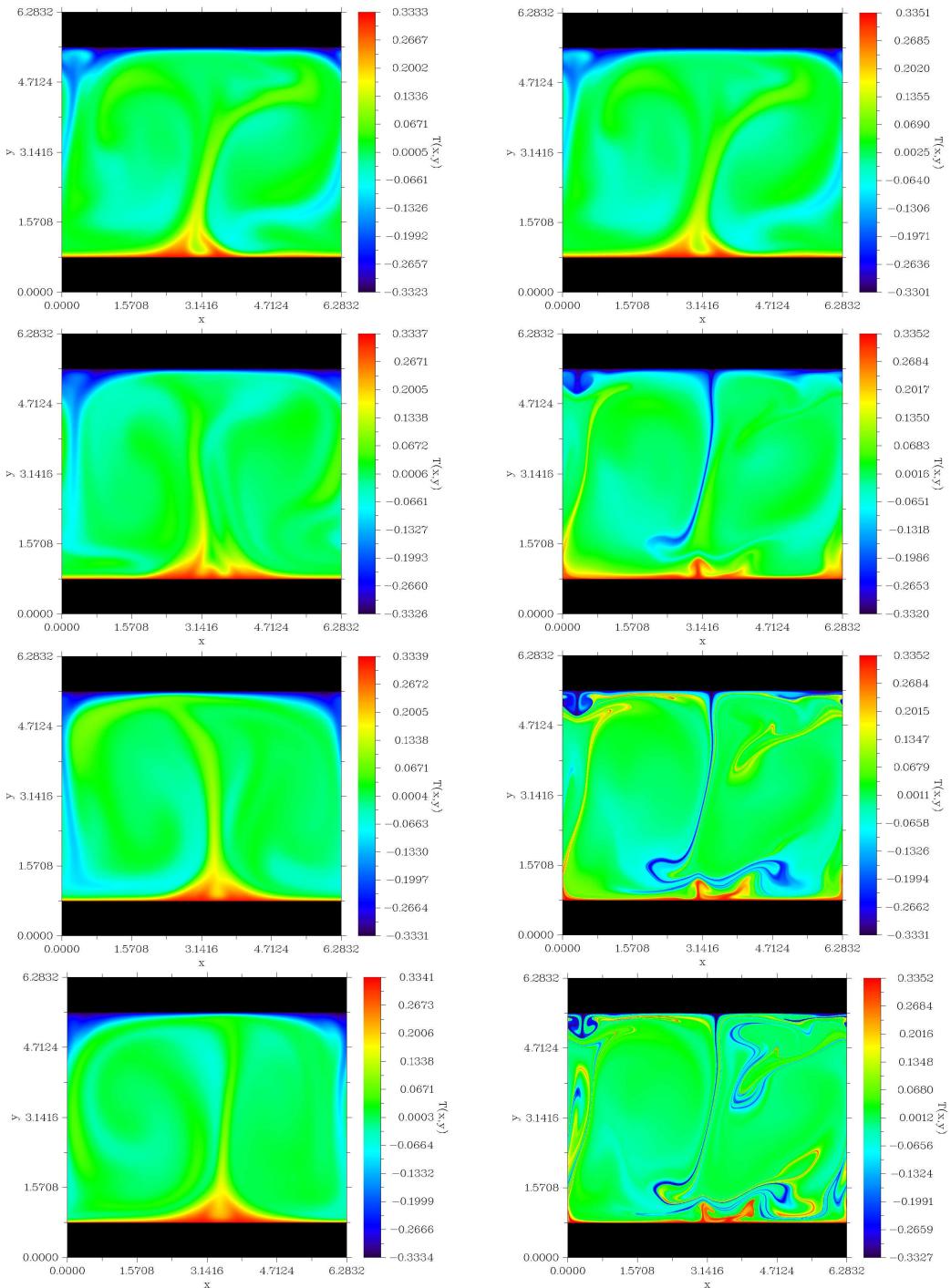
$N_x, N_y$	Ra	Pr
1024	$10^7$	1

**Tabelle 3.3.:** Parameter der Simulation zur Berechnung der lagrangeschen Abbildung bei periodischen Randbedingungen.

Führt man eine Simulation mit den Parametern aus Tabelle 3.3 durch, so kommt es in eulerschen Koordinaten zur Bildung zweier Konvektionsrollen, die jedoch aufgrund der hohen Rayleighzahl von  $\text{Ra} = 10^7$  nicht stationär bleiben, sondern Verformungen und horizontalen Fluktuationen in der Bewegung unterworfen sind.

### 3 Lagrangesche Darstellung

---



**Abbildung 3.6.:** Konvektion mit periodischen Randbedingungen in eulerschen (links) und lagrangeschen (rechts) Koordinaten. Dargestellt ist die Temperatur zu den Zeiten  $t = 0$ ,  $t = 17,7$ ,  $t = 34,6$  und  $t = 51,7$ .

Eine Visualisierung des Vorganges ist auf der beiliegenden DVD im Verzeichnis “...\\Kapitel 3\\Periodisch\\euler.avi” zu finden. Trotz dieser dynamischen Vorgänge bleibt die grundsätzliche Struktur der zwei Konvektionsrollen erhalten, die Schnappschüsse zu den Zeiten  $t = 0$  und  $t = 51,7$  unterscheiden sich qualitativ nicht. Ein besseres Verständnis für die Vorgänge innerhalb der Konvektionsrollen bietet die Darstellung in lagrangeschen Koordinaten. Ausgehend von der gleichen Anfangsbedingung zur Zeit  $t = 0$  bilden sich zunächst in den Bereichen auf- und absteigender Flüssigkeit feine, horizontal ausgerichtete Strukturen, die mit dem Transport von Teilchen aus diesen Bereichen in die Randschichten und deren damit verbundener Abkühlung bzw. Erwärmung verknüpft sind. Bemerkenswert ist zudem, dass ein nicht unerheblicher Anteil von Teilchen, die sich direkt an den Ursprungs-orten der abwärts und aufwärts gerichteten Strömungen befinden, auf konstanter Temperatur verbleibt. Dies ist beispielsweise an der ausgedehnten, pilzförmigen, blauen Struktur im oberen linken Bereich von der Zeit  $t = 17,7$  und aufwärts zu erkennen. Teilchen in diesen Bereichen tragen nicht zum Transport von Wärme durch das System bei, sondern verbleiben in der Nähe der Randschichten.

Geht man nun zu größeren Zeiten über, so wachsen die Strukturen in der lagrangeschen Darstellung entlang der Konvektionsrollen und beginnen, fein aufgelöste Muster zu bilden. Dies ist direkt verknüpft mit der Separation benachbarter Trajektorien; sich ursprüngliche nahe beieinander befindliche Teilchen werden durch die Strömung auseinander getrieben und werden mitunter in gegenüberliegende Randschichten transportiert. Dass die Strukturbildung in lagrangeschen Koordinaten im Wesentlichen um die Konvektionsrollen in eulerschen Koordinaten zentriert ist, weist auf eine geringe Durchmischung zwischen Teilchen im Bulk und in den Randschichten hin. Die Geschwindigkeiten innerhalb der Konvektionsrollen sind so gering, dass ein Großteil dieser Teilchen innerhalb dieser gefangen ist. Be-trachtet man die Darstellung in lagrangeschen Koordinaten zur Zeit  $t = 51,7$ , so ist auffällig, dass die grünen Bereiche, die mit Teilchen mittlerer Temperaturen zu identifizieren sind, eine deutlich größere Fläche einnehmen als die feinen Strukturen hoher und niedriger Temperatur entlang der Konvektionsrollen. Zum Transport von Wärme trägt also nur ein sehr geringer Anteil der Teilchen bei. Eine Visualisierung der Strukturbildung findet sich auf der DVD im Verzeichnis “...\\Videos\\Kapitel 3\\Periodisch\\lagrange.avi”.

#### 3.5.2. Isolierende Seitenwände

Eine vergleichbare Situation entsteht, wenn man eine Box mit isolierenden Seitenwänden mit den Parametern aus Tabelle 3.4 auf äquivalente Weise berechnet. Anstelle der zwei nebeneinander liegenden Rollen entstehen zwei Konvektionsrollen, die sich übereinander befinden. Die grundsätzlichen Beobachtungen sind mit denen aus Abschnitt 3.5.1 identisch; entlang der Ränder der Konvektionsrollen, die

### 3 Lagrangesche Darstellung

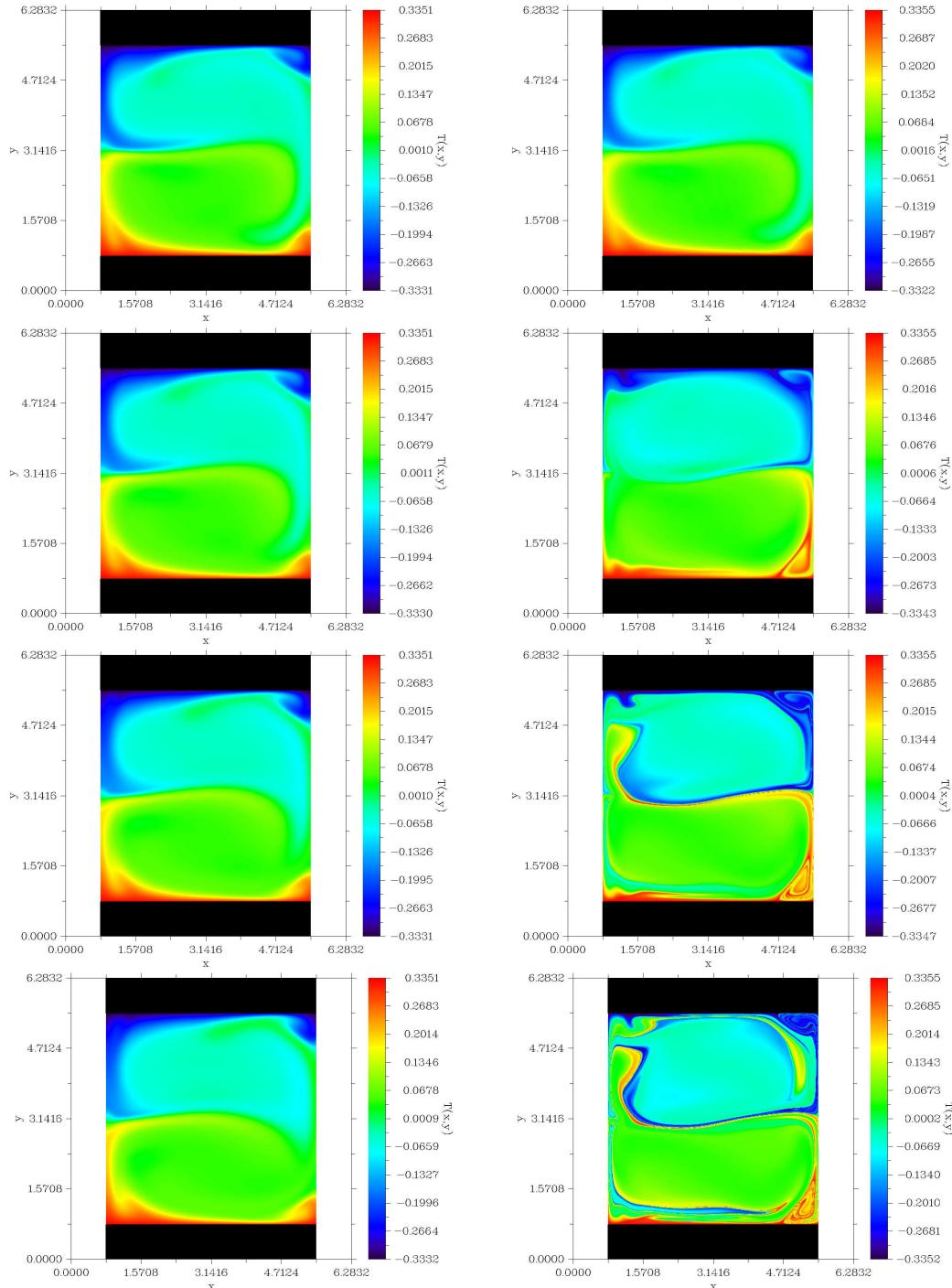
---

in eulerschen Koordinaten Fluktuationen unterworfen sind, bildet sich in lagrangeschen Koordinaten eine fein aufgelöste Struktur aus. Bedingt durch gegenrotierende Rollen in den Ecken der Box trägt jedoch ein im Vergleich zu periodischen Randbedingungen deutlich größerer Anteil an Teilchen zum Wärmetransport bei, was zu einem anderen Skalierungsverhalten der Nusseltzahl bezüglich der Rayleighzahl führt (siehe Kapitel 4).

$N_x, N_y$	$\Gamma$	$Ra$	$Pr$
512	1	$10^7$	1

**Tabelle 3.4.:** Parameter der Simulation zur Berechnung der lagrangeschen Abbildung bei isolierenden Seitenwänden.

### 3.5 Rayleigh-Bénard-Konvektion in lagrangeschen Koordinaten



**Abbildung 3.7.:** Konvektion bei isolierenden Seitenwänden in eulerschen (links) und lagrangeschen (rechts) Koordinaten. Dargestellt ist die Temperatur zu den Zeiten  $t = 0$ ,  $t = 27,9$ ,  $t = 54,9$  und  $t = 81,9$ .



# 4. Wärmetransport

Der Transport von Wärme durch das Rayleigh-Bénard-System ist einer der meist untersuchtesten Aspekte, jedoch bis heute nicht vollständig verstanden. In eingeschränkten Parameterbereichen lässt sich die Abhängigkeit der Nusseltzahl von den Kontrollparametern durch ein Potenzgesetz approximieren:

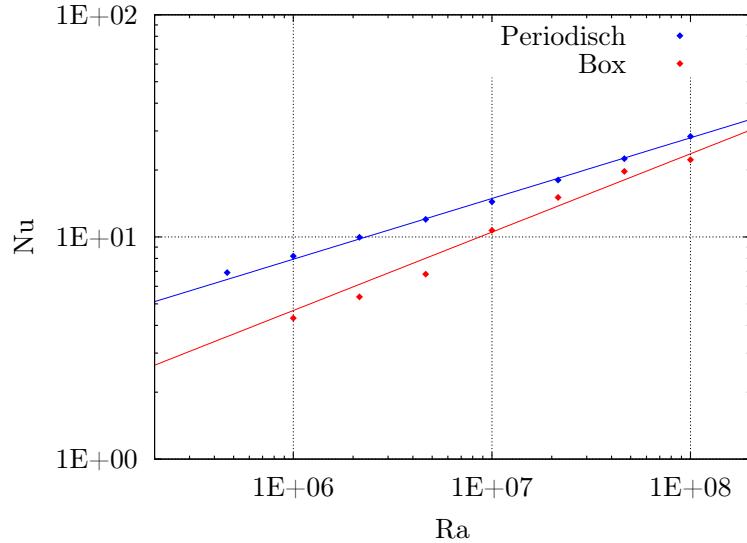
$$\text{Nu} \approx \text{Ra}^\gamma \text{Pr}^\alpha \quad (4.1)$$

Dieses Verhalten wurde in vielen Experimenten und Simulationen bestätigt, jedoch variieren die Exponenten bei größeren Veränderungen der Kontrollparameter. Neuere Theorien aus Dimensionsanalysen postulieren kompliziertere Abhängigkeiten der Nusseltzahl von den Kontrollparametern. Bisher existiert jedoch keine einheitliche Theorie, die sämtliche Aspekte des Wärmetransportes berücksichtigt. Eine Übersicht über diese Entwicklung lässt sich in einem Review-Paper von Ahlers nachlesen [Ahlers et al. 2009]. In den letzten Jahren wurden große Fortschritte in der Arbeitsgruppe Hansen am Institut für Geophysik zur Erklärung des Wärmetransportes vollzogen, es bleiben jedoch einige Fragen offen [Breuer und Hansen 2009, Breuer et al. 2004, Hansen et al. 1992]. Der Schwerpunkt dieses Kapitels soll der Einfluss von Seitenwänden auf den Wärmetransport durch das Rayleigh-Bénard-System sein. Hierzu wird anhand numerischer Simulationen das Skalierungsverhalten der Nusseltzahl bezüglich der Rayleighzahl und dem Seitenverhältnis bestimmt.

## 4.1. Abhängigkeit der Nusseltzahl von der Rayleighzahl

In diesem Abschnitt soll der Einfluss von Seitenwänden auf den Wärmetransport demonstriert werden. Hierzu wurde die Nusseltzahl in Abhängigkeit der Rayleighzahl auf zwei verschiedenen Geometrien numerisch bestimmt. Verglichen wurde eine Simulation nach Abbildung 2.3.2 periodischer Randbedingungen in horizontaler Richtung und eine Simulation einer Box mit isolierenden Wänden nach Abbildung 2.12. In beiden Fällen wurde die Prandtlzahl zu 1 gewählt. Es ergibt sich ein Verhalten nach Abbildung 4.1.

Nimmt man eine einfache Potenzabhängigkeit der Nusseltzahl von der Rayleighzahl an:



**Abbildung 4.1.:** Aufgetragen ist die Nusseltzahl gegenüber der Rayleighzahl für zwei Simulationen mit  $\text{Pr} = 1$ . In blau sind dargestellt die Ergebnisse unter periodischen Randbedingungen, in rot die einer Box mit isolierenden Seitenwänden und  $\Gamma = 1$ . Die Punkte entsprechen den numerischen Resultaten, die durchgezogenen Linien angefittete Potenzfunktionen.

$$\text{Nu} = \lambda \cdot \text{Ra}^\gamma , \quad (4.2)$$

so lassen sich die Koeffizienten für die jeweiligen Randbedingungen bestimmen (siehe Tabelle 4.1). Augenscheinlich wird das Potenzgesetz unter periodischen Rändern besser erfüllt als bei Konvektion in einer Box. Die Effekte an den Rändern, insbesondere gegenrotierende kleine Konvektionsrollen (siehe Abbildung 4.2), führen zu einer komplexeren Strömung, deren Wärmetransport weniger gut durch ein Potenzgesetz approximiert werden kann.

Seitenwände	$\lambda$	$\gamma$
Periodisch	$0,18 \pm 0,02$	$0.273 \pm 0.006$
Isolierend	$0.04 \pm 0.02$	$0.35 \pm 0.03$

**Tabelle 4.1.:** Koeffizienten der angefitteten Potenzfunktionen

Bemerkenswert ist, dass das Skalierungsverhalten der Nusseltzahl signifikant von den Seitenwänden abhängt, der Exponent der Rayleighzahlabhängigkeit der Nusseltzahl bei isolierenden Wänden ist um fast 30% größer als derjenige bei periodischen Randbedingungen. Durch die Seitenwände kommt es in den Ecken zu gegenrotierenden, kleinen Konvektionsrollen, die zu einer Aufweitung der Randschichten

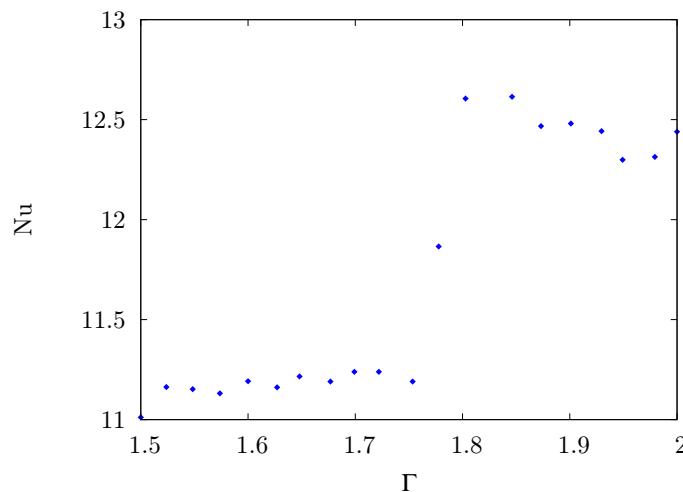
fuhren. Dies hat zur Folge, dass der Warmetransport sensitiver von der Rayleighzahl abhangt, es kommt zum oben dargestellten Verhalten. Bei einer Simulation mit periodischen Randern zum Vergleich mit dem Experiment muss folglich stets uberpruft werden, ob der Einfluss der Wande tatsachlich vernachlassigt werden kann.

## 4.2. Abhangigkeit der Nusseltzahl vom Seitenverhaltnis

Neben der vielmals postulierten Abhangigkeit der Nusseltzahl von Rayleigh- und Prandtlzahl ist in den letzten Jahren die Frage nach der Abhangigkeit der Nusseltzahl von dem Seitenverhaltnis  $\Gamma$  eines einschlieenden Containers mit isolierenden Wanden aufgekommen. Beachtenswert ist besonders, dass die experimentellen Ergebnisse zum Teil stark widerspruchliche Aussagen uber diese Abhangigkeit treffen. So fanden Sun und Mitarbeiter [Sun et al. 2005] eine Potenzgesetzabhangigkeit der Form

$$\text{Nu}(\text{Ra}, \Gamma) = A_1(\Gamma) \text{Ra}^{\beta_1} + A_2(\Gamma) \text{Ra}^{\beta_2} , \quad (4.3)$$

wahrend hingegen Funfschilling keine signifikante Abhangigkeit der Nusseltzahl vom Seitenverhaltnis feststellen konnte [Funfschilling et al. 2005]. Auch numerische Ergebnisse haben bisher kein einheitliches Bild abgegeben [Bailon-Cuba et al. 2010].

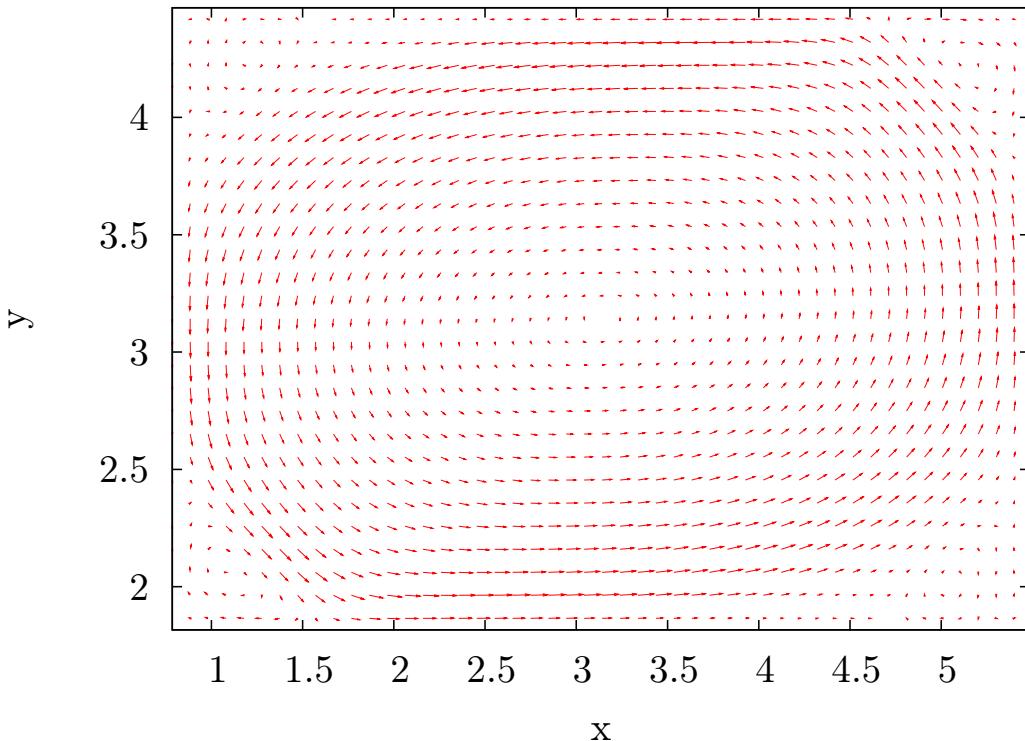


**Abbildung 4.2.:** Dargestellt ist die Abhangigkeit der Nusseltzahl vom Seitenverhaltnis. Die Simulationsparameter sind  $\text{Ra} = 10^7$ ,  $\text{Pr} = 1$  und  $N_x = N_y = 512$ .

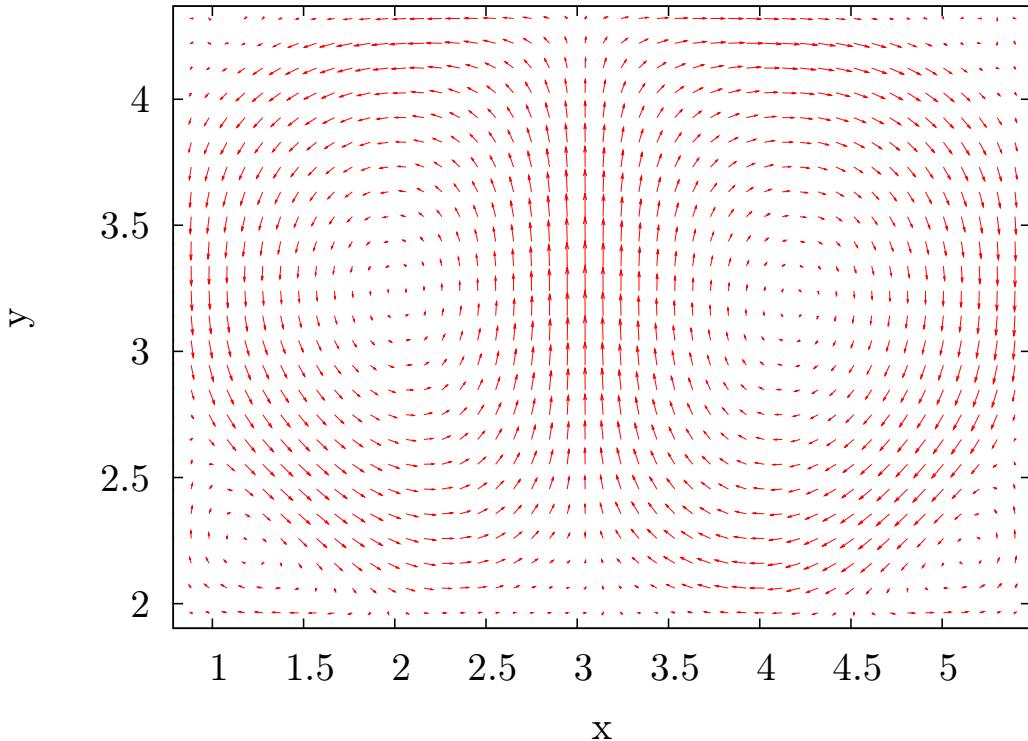
## 4 Wärmetransport

---

Betrachtet man den zweidimensionalen Fall einer Box mit isolierenden Seitenwänden (siehe auch Abbildung 2.12) und variiert das Seitenverhältnis dieser Box bei konstanter Rayleigh- und Prandtlzahl in Bereichen unter  $\Gamma = 2$ , so ergibt sich ein Verhalten nach Abbildung 4.2. Anstelle einer Potenzabhängigkeit des Wärmetransportes ergibt sich ein Sprung im Wärmetransport zwischen  $\Gamma = 1,75$  und  $\Gamma = 1,8$ , wobei die Nusseltzahl bei geringen Seitenverhältnissen im Wesentlichen konstant bleibt und bei größeren Seitenverhältnissen leicht abnimmt. Dieses Verhalten lässt sich erklären, wenn man die zeitgemittelten Geschwindigkeitsfelder oberhalb und unterhalb des Sprunges betrachtet.



**Abbildung 4.3.:** Zeitgemitteltes Geschwindigkeitsfeld der Simulation aus Abbildung 4.2 für  $\Gamma = 1,78$

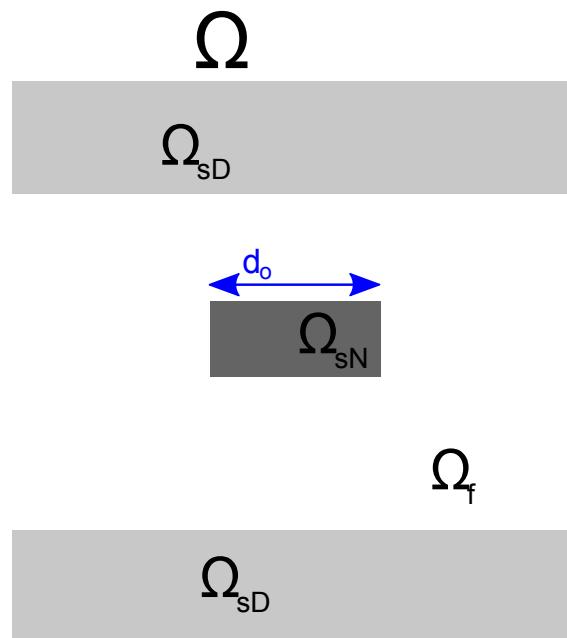


**Abbildung 4.4.:** Zeitgemitteltes Geschwindigkeitsfeld der Simulation aus Abbildung 4.2 fur  $\Gamma = 1,9$

Es kommt genau an der Stelle des Sprunges zu einer Bifurkation in der Rollenstruktur, bei kleineren Seitenverhaltnissen ist eine Ein-Rollenstruktur die Wahrscheinlichste, wahrend hingegen bei groeren Seitenverhaltnissen zwei Rollen als stabilste Struktur hervortreten. Die Asymmetrie der Zweirollenstruktur, die aufgrund der isolierenden Wande auftritt, begunstigt den Transport von Warme durch den mittleren Up- bzw. Downstream und fuhrt zum beobachteten Verhalten der Nusseltzahl. In diesen Bereichen kleiner Seitenverhaltnisse wird der Warmetransport also durch Bifurkationen dominiert, es ist davon auszugehen, dass dies auch fur hohere Seitenverhaltnisse und dreidimensionale Stromungen gilt. Eine vollstandige Theorie der Abhangigkeit der Nusseltzahl vom Seitenverhaltnis sollte dies also berucksichtigen, einfache Potenzgesetze scheinen dazu nicht in der Lage zu sein.

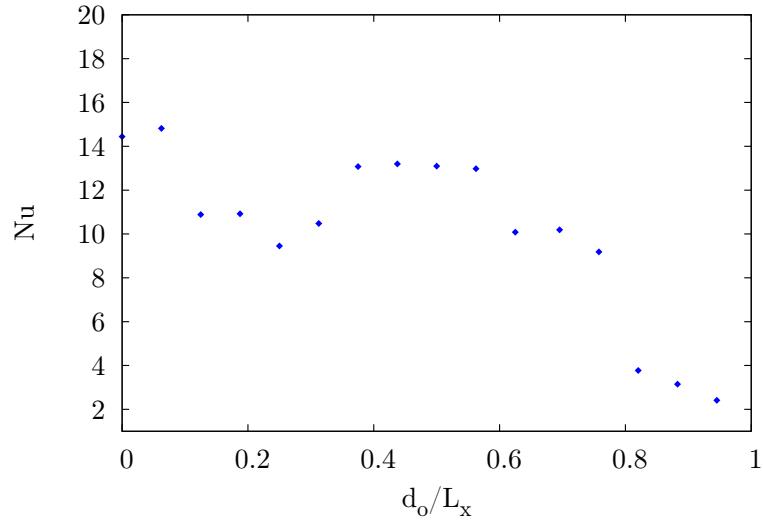
### 4.3. Einfluss von Objekten

Wie in Kapitel 2 geschildert, lassen sich mittels der Penalisationsmethode auch komplexere Geometrien simulieren. Dies soll hier anhand eines einfachen Beispieles kurz phänomenologisch demonstriert werden. Von grundsätzlichem Interesse ist die Frage nach der Möglichkeit der Beeinflussung konvektiven Verhaltens durch Einbringen von Hindernissen in das Strömungsfeld. Gerade bei der Konstruktion industrieller Anlagen ist der Informationsbedarf hiernach groß, die Penalisationsmethode könnte hilfreich bei der Klärung ebensolcher Fragen sein. Die Komplexität des Einflusses von Objekten ist jedoch nicht zu unterschätzen, wie man sich anhand eines verhältnismäßig simplen Beispiels klar machen kann. Hierzu betrachte man ein quadratisches ortsfestes Objekt variabler Breite  $d_o$  mit von Neumann-Randbedingungen, das in das Strömungsfeld eingebracht wird (siehe Abbildung 4.5). Eine Visualisierung des Vorganges befindet sich auf der beiliegenden DVD im Verzeichnis "...\\Videos\\Kapitel 4\\..." .



**Abbildung 4.5.:** Schematische Darstellung der Geometrie eines Objektes im Strömungsfeld.

Variiert man die Breite  $d_o$  des Hindernisses und bestimmt anhand einer Simulation bei  $Ra = 10^7$  und  $Pr = 1$  die resultierende Nusseltzahl, ergibt sich keineswegs eine lineare Abhängigkeit. Vielmehr kommt es zu einer Bildung verschiedener Plateaus, auf denen der Wärmetransport annähernd konstant bleibt, bis dieser für  $d_o \rightarrow L_x$  verschwindet.



**Abbildung 4.6.:** Dargestellt ist die Nusseltzahl in Abhängigkeit von der Breite des Objektes, normiert auf die Breite der Box. Ein Wert von 0 entspricht der Abwesenheit eines Hindernisses, ein Wert von 1 einem komplett durchsetzendem Hindernis.

Mit einem weiteren technischen Aufwand ließen sich auch bewegende Objekte simulieren [Kadoch 2009], um beispielsweise den Einfluss von dynamischen Mixern oder Propellern auf den Fluss zu untersuchen. Die Penalisationsmethode böte die Grundlage einer systematischen Untersuchung, allerdings müssten zunächst Fragen nach dynamischer Gitterauflösung und der Kantenglättung an runden Objekten geklärt werden.



## 5. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde mit der lagrangeschen Darstellung ein alternatives Bild für die Untersuchung turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion vorgestellt. Hierzu wurde ein pseudospektrales numerisches Verfahren mit einer Volumenpenalisationstechnik entwickelt, das in der Lage ist, Rayleigh-Bénard-Konvektion mit üblichen Randbedingungen zu simulieren und die lagrangesche Abbildung anhand der Rückrechnung von Trajektorien von Tracern zu bestimmen.

Die Entwicklung des numerischen Verfahrens wurde in Kapitel 2 ausführlich vollzogen. Ausgehend von bekannten Verfahren für die Navier-Stokes-Gleichungen wurde hier erläutert, wie sich die dort gewonnenen Erkenntnisse auf das Rayleigh-Bénard-System übertragen lassen. Neben der Herleitung der Implementation isolierender Seitenwände wurde anhand numerischer Ergebnisse eine Validation des Verfahrens durchgeführt und gezeigt, dass die Volumenpenalisierungsmethode eine anwendbare Alternative zu herkömmlichen Simulationsverfahren für das Rayleigh-Bénard-System darstellt. Neben der Überprüfung theoretischer Konvergenzraten ergaben sich gerade durch die Einfachheit der Implementierung durch pseudospektrale Methoden und die Anpassbarkeit an verschiedene Geometrien Vorteile in der Verwendung von Volumenpenalisierungsmethoden.

Der nächste Schritt in der Weiterentwicklung der Penalisationsmethoden wäre das Einführen eines impliziten Zeitschrittverfahrens, das die Anforderung des Zeitschrittes an den Penalisationsparameter umgeht, ohne jedoch die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes zu beeinträchtigen. Ist dieses erfolgt, so liegt es nahe, komplexere Geometrien und den Einfluss beweglicher Objekte innerhalb des Fluidgebietes zu untersuchen.

Im 3. Kapitel wurde durch die lagrangesche Darstellungsweise eine Sichtweise auf die Rayleigh-Bénard-Konvektion entwickelt, die den Fokus auf das Verhalten von Tracern legt, die sich in der Strömung bewegen. Hierzu wurden im numerischen Verfahren aus Kapitel 2 Tracer implementiert, anhand deren Trajektorien sich die lagrangesche Abbildung berechnen ließ. Untersucht wurde in diesem Kapitel zunächst das Verhalten verschiedener Anfangsbedingungen im Vergleich der eulerschen und lagrangeschen Koordinaten. Besonders bemerkenswert waren hier die Unterschiede in der Entwicklung von Plumes, in lagrangeschen Koordinaten ergab sich eine bedeutend höhere zeitliche Korrelation in der Entstehung gegenüber der Entstehung in eulerschen Koordinaten, was zu einer besseren Detektierbarkeit führte. In

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

---

der anschließenden Diskussion voll entwickelter Konvektion in beiden Darstellungen wurde der Einfluss randschichtennaher Teilchen im Vergleich zu sich im Bulk befindlichen Teilchen auf den Wärmetransport verdeutlicht.

Die lagrangesche Abbildung bietet einen neuen Zugang zur Beschreibung turbulenter Rayleigh-Bénard-Konvektion, der weiter untersucht werden sollte. Gerade der Vergleich von Korrelationen und statistischen Größen in beiden Bildern könnte zu einem besseren Verständnis des Systems führen und die Grundlage einer verbesserten Theorie zum Wärmetransport bieten.

Das 4. Kapitel behandelte kurz den Einfluss isolierender Seitenwände und Objekte auf den Wärmetransport. Hierzu wurde beispielhaft der Unterschied im Skalierungsverhalten der Nusseltzahl zwischen der An- und Abwesenheit von Wänden untersucht und der Einfluss des Seitenverhältnisses diskutiert. Zur Demonstration der Möglichkeiten des numerischen Verfahrens wurde zudem kurz gezeigt, welche Bedeutung das Einführen von Objekten in das Strömungsfeld haben kann.

Dieses Kapitel sollte aufzeigen, dass die Theorie des Wärmetransportes im Rayleigh-Bénard-System eine Anzahl nicht vollständig verstandener Aspekte besitzt, die in Zukunft weiter untersucht werden müssen. Eine lagrangesche Theorie scheint hier erfolgversprechend und sollte im Fokus weiterer Forschung stehen.

Das Rayleigh-Bénard-System ist ein komplexes System mit großer Bedeutung für natürliche Prozesse. Dennoch sind viele Aspekte bis heute nicht vollständig verstanden und bedürfen tiefergehender Untersuchungen. Die hier vorgestellte Darstellung in lagrangeschen Koordinaten könnte neben der statistischen Beschreibung [Lülf et al. 2011] ein vielversprechendes Hilfsmittel sein, um diese offene Fragen unter anderen Blickwinkeln zu betrachten und somit möglicherweise zu einer Klärung beitragen.

# A. Anhang

## A.1. Kritische Rayleighzahl

Die grundlegende Beobachtung eines Rayleigh-Bénard-Experimentes ist das Einsetzen der Konvektion oberhalb einer kritischen Rayleighzahl. Ist der Temperaturunterschied zwischen den beiden Wärmeleitenden Platten zu gering, ist der Wärmevertrag rein konduktiv, es entstehen keine Konvektionsrollen. Dieser kritische Bifurkationspunkt lässt sich über eine lineare Stabilitätsanalyse bestimmen. Hierzu sei das zugrundeliegende Gebiet wieder zweidimensional, es gelte also:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_x \\ 0 \\ u_z \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Nun führt man neben der Vortizität

$$\omega = \nabla \times \mathbf{u} \quad (\text{A.2})$$

noch die Stromfunktion  $\Psi$  ein, die in zwei Dimensionen ebenfalls lediglich über eine Komponente verfügt, über die sich die Geschwindigkeit berechnen lässt.

$$\mathbf{u} = \nabla \times \Psi \mathbf{e}_y \quad (\text{A.3})$$

Die Geschwindigkeit lässt sich darüber leicht bestimmen:

$$u_x = -\frac{\partial}{\partial z} \Psi \quad (\text{A.4})$$

$$u_z = \frac{\partial}{\partial x} \Psi \quad (\text{A.5})$$

Vortizität und Stromfunktion lassen sich in Zusammenhang bringen:

$$\Delta \Psi = -\omega \quad (\text{A.6})$$

Mit diesen Größen lassen sich die Rayleigh-Bénard-Gleichungen ausdrücken, man erhält:

$$\frac{1}{\text{Pr}} \frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \omega = \Delta \omega - \text{Ra} \frac{\partial}{\partial x} \theta \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta = \Delta \theta + \frac{\partial}{\partial x} \Psi \quad (\text{A.8})$$

Im rein konduktiven Fall sind die auftretenden Geschwindigkeiten klein, die advektiven quadratischen Terme  $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \omega$  und  $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \theta$  lassen sich gegenüber den übrigen Termen vernachlässigen. Diese Vereinfachung ermöglicht eine lineare Stabilitätsanalyse. Hierzu löst man zunächst die linearisierte Gleichung A.8 formal nach  $\Psi$  auf.

$$\Psi = \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \left( \frac{\partial}{\partial t} - \Delta \right) \theta \quad (\text{A.9})$$

Dieses Ergebnis setzt man wiederum in Gleichung A.7 unter Zuhilfenahme von Gleichung A.6 ein und erhält eine Bestimmungsgleichung für das Temperaturschwankungsfeld:

$$-\frac{1}{\text{Pr}} \partial_t \Delta \left( \partial_x^{-1} (\partial_t - \Delta) \theta \right) = -\Delta^2 \left( \partial_x^{-1} (\partial_t - \Delta) \theta \right) - \text{Ra} \partial_x \theta \quad (\text{A.10})$$

Ein angemessener Ansatz für  $\theta$  ist eine ebene Welle in horizontaler Richtung, die in vertikaler Richtung die Randbedingungen erfüllt:

$$\theta(\mathbf{x}, t) = \sum_k \sum_n \tilde{\theta}_{nk}(t) \sin(n\pi z) e^{ikx} \quad (\text{A.11})$$

Eingesetzt in Gleichung A.10 ergibt sich nach einigen elementaren Umformungen eine Gleichung für die Koeffizienten  $\tilde{\theta}_{nk}(t)$ :

$$\frac{k^2 + n^2 \pi^2}{\text{Pr}} \ddot{\tilde{\theta}}_{nk}(t) + \left( (\text{Pr} + 1) (k^2 + n^2 \pi^2)^2 \right) \dot{\tilde{\theta}}_{nk}(t) + \left( (k^2 + n^2 \pi^2)^3 - \text{Ra} k^2 \right) \tilde{\theta}_{nk}(t) = 0 \quad (\text{A.12})$$

Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten, die sich mit den dafür bekannten Methoden lösen lässt. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\tilde{\theta}_{nk}(t) = c_{nk} e^{\lambda_+ t} + d_{nk} e^{\lambda_- t} , \quad (\text{A.13})$$

wobei die Koeffizienten  $c_{nk}$  durch die Anfangsbedingungen festgelegt werden und für  $\lambda_{\pm}$  gilt:

$$\lambda_{\pm} = -\frac{(\Pr + 1)(k^2 + n^2\pi^2)}{2} \pm \sqrt{\frac{(\Pr + 1)^2(k^2 + n^2\pi^2)^2}{4} + \Pr \left[ \frac{\Rak^2}{k^2 + n^2\pi^2} - (k^2 + n^2\pi^2) \right]} \quad (\text{A.14})$$

Die kritische Rayleighzahl  $\Ra_c$  ist gerade diejenige zu  $\lambda_{\pm} = 0$ :

$$\Ra_c = \frac{(k^2 + n^2\pi^2)^3}{k^2} \quad (\text{A.15})$$

Man sieht leicht ein, dass die entscheidende Mode diejenige mit  $n = 1$  ist, zudem verschwindet die Wachstumsrate der kritischen Mode:

$$\frac{\partial \Ra_c}{\partial k} = 0 \quad (\text{A.16})$$

Dies liefert nach kurzer Rechnung:

$$k = \pm \frac{\pi}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.17})$$

Und zurückeingesetzt die kritische Rayleighzahl:

$$\Ra_c = \frac{27}{4}\pi^4 \approx 657,51 \quad (\text{A.18})$$

Oberhalb dieser kritischen Rayleighzahl wird die erste Mode linear instabil und es bilden sich Konvektionsrollen aus. Dieses Ergebnis ist identisch zum Fall unendlicher Prandtlzahl, für no-slip Randbedingungen für die Geschwindigkeit sei hier auf Abschnitt 2.7.2 und das Buch von Chandrasekhar [Chandrasekhar 1961] verwiesen.

## A.2. Struktur der Interpolationsmatrix

Die Matrix  $W_{nm,kl}^{\alpha^{-1}}$  lautet [Press et al. 2007]:

$$W_{nm,kl}^{\alpha^{-1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -3 & 3 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 3 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & 0 \\ 9 & -9 & 9 & -9 & 6 & 3 & -3 & -6 & 6 & -6 & -3 & 3 & 4 & 2 & 1 & 2 \\ -6 & 6 & -6 & 6 & -4 & -2 & 2 & 4 & -3 & 3 & 3 & -3 & -2 & -1 & -1 & -2 \\ 2 & -2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ -6 & 6 & -6 & 6 & -3 & -3 & 3 & 3 & -4 & 4 & 2 & -2 & -2 & -2 & -1 & -1 \\ 4 & -4 & 4 & -4 & 2 & 2 & -2 & -2 & 2 & -2 & -2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

# Literaturverzeichnis

- Ahlers, G., Grossmann, S. und Lohse, D. (2009), ‘Heat transfer and large scale dynamics in turbulent rayleigh-bénard convection’, *Rev. Mod. Phys.* **81**(2), 503–537.
- Alt, H. W. (2006), *Lineare Funktionalanalysis*, Springer.
- Angot, P., Bruneau, C.-H. und Fabrie, P. (1999), ‘A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows’, *Numerische Mathematik* **81**(4), 497–520.
- Argyris, J., Faust, G., Haase, M. und Friedrich, R. (2010), *Die Erforschung des Chaos*, Springer.
- Arquis, E. und Caltagirone, J. (1984), ‘Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d’une interface milieu fluide - milieu poreux: application à la convection naturelle’, *C. R. Acad. Sci. Paris* **299**(1), 1–4.
- Bailon-Cuba, J., Emran, M. S. und Schumacher, J. (2010), ‘Aspect ratio dependence of heat transfer and large-scale flow in turbulent convection’, *Journal of Fluid Mechanics* **655**, 152–173.
- Bennett, A. (2006), *Lagrangian Fluid Dynamics*, Cambridge University Press.
- Bodenschatz, E., de Bruyn, J. R., Ahlers, G. und Cannell, D. S. (1991), ‘Transitions between patterns in thermal convection’, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3078–3081.
- Breuer, M. und Hansen, U. (2009), ‘Turbulent convection in the zero reynolds number limit’, *Europhysics Letters* **86**, 24004.
- Breuer, M., Wessling, S., Schmalzl, J. und Hansen, U. (2004), ‘Effect of inertia in rayleigh-bénard convection’, *Phys. Rev. E* **69**, 026302.
- Bronstein, I., Semendjaev, K., Musiol, G. und Mühlig, H. (2001), *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch.
- Bénard, H. (1900), ‘Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide’, *Revue générale des Sciences pures et appliquées* **11**, 1261–1271, 1309–1328.
- Chandrasekhar, S. (1961), *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Oxford University Press.
- Clercx, H. und Bruneau, C.-H. (2006), ‘The normal and oblique collision of a dipole with a no-slip boundary’, *Computers & Fluids* **35**(3), 245 – 279.

- Cooley, J. W. und Tukey, J. W. (1965), ‘An algorithm for the machine calculation of complex fourier series’, *Mathematics of Computation* **19**, 297–301.
- Courant, R., Friedrichs, K. und Lewy, H. (1928), ‘Über die partiellen differenzialgleichungen der mathematischen physik’, *Mathematische Annalen* **100**(1), 32–74.
- Daitche, A. (2009), Statistische und geometrische eigenschaften turbulenter strömungen, Master’s thesis, Institut für theoretische Physik, WWU Münster.
- Danielson, G. C. und Lanczos, C. (1942), ‘Some improvements in practical fourier analysis and their application to x-ray scattering from liquids’, *Journal of the Franklin Institute* **233**(4), 365 – 380.
- Darcy, H. (1856), *Les Fontaines Publiques De La Ville De Dijon*, Victor Dalmont, Paris.
- Frigo, M. und Johnson, S. (1997), ‘Fastest fourier transformation of the west’, <http://www.fftw.org/>.
- Funfschilling, D., Brown, E., Nikolaenko, A. und Ahlers, G. (2005), ‘Heat transport by turbulent rayleigh–bénard convection in cylindrical samples with aspect ratio one and larger’, *Journal of Fluid Mechanics* **536**, 145–154.
- Gentleman, W. M. und Sande, G. (1966), Fast fourier transforms: for fun and profit, in ‘Proceedings of the November 7-10, 1966, fall joint computer conference’, AFIPS ’66 (Fall), pp. 563–578.
- Grötzbach, G. (1983), ‘Spatial resolution requirements for direct numerical simulation of the rayleigh-bénard convection’, *Journal of Computational Physics* **49**(2), 241 – 264.
- Gurevich, S. (2009), ‘Numerische methoden für komplexe systeme’, <http://pauli.uni-muenster.de/tp/fileadmin/lehre/NumMethoden/SoSe2009/Skript/script.pdf>.
- Hansen, U., Yuen, D. und S.E., K. (1992), ‘Mass and heat transport in strongly time-dependent thermal convection at infinite prandtl number’, *Geophys. Astrophys. Fluid Dynamics* **63**, 67–89.
- Harrington, B., MenTaLguY, Hurst, N. und T., G. (2003), ‘Inkscape’, <http://inkscape.org/>.
- Hou, Y. T. und Li, R. (2007), ‘Computing nearly singular solutions using pseudo-spectral methods’, *Jounral of Computational Physics* **226**, 379–397.
- Jones, C. (2000), ‘Convection driven geodynamo models’, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **358**, 873–897.
- Kadoch, B. (2009), Transport and mixing in homogeneous and confined trubulent flows, PhD thesis, Université de Provence.

- Keetels, G., D'Ortona, U., Kramer, W., Clercx, H., Schneider, K. und van Heijst, G. (2007), '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.
- Keetels, G. H., Clercx, H. und van Heijst, G. (2008), 'A fourier spectral solver for confined navier-stokes flow', *International Journal for Multiscale Computational Engineering* **6**(1), 114.
- Kolomenskiy, D. und Schneider, K. (2009), 'A fourier spectral method for the navier-stokes equations with volume penalization for moving solid obstacles', *Journal of Computational Physics* **228**, 5687 – 5709.
- Lorenz, E. N. (1963), 'Deterministic nonperiodic flow', *Journal of the Atmospheric Sciences* **20**, 130–141.
- Lülf, J., Wilczek, M. und Friedrich, R. (2011), 'Temperature statistics in turbulent rayleigh–bénard convection', *New Journal of Computational Physics* **13**, 015002.
- Meyer, M. und Mildenberger, O. (2002), *Grundlagen der Informationstechnik: Signale, Systeme und Filter ; mit 33 Tabellen*, Vieweg.
- Michels, H. (1986), 'dislin', <http://www.dislin.de/>.
- NASA (2003), <http://www.nasa.gov/topics/earth/features/icing-forecast.html>.
- Nield, A. und Bejan, A. (2006), *Convection in Porous Media*, Springer.
- Nikolaenko, A. und Ahlers, G. (2003), 'Nusselt number measurements for turbulent rayleigh–bénard convection', *Phys. Rev. Lett.* **91**, 084501.
- Nolting, W. (2004), *Grundkurs theoretische Physik 3*, Springer.
- Ohlberger, M. (2008a), 'Höhere numerische mathematik'.
- Ohlberger, M. (2008b), 'Numerik partieller differentialgleichungen 1', [http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/PDEI\\_WS08/Skript/skriptum\\_beta.pdf](http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/PDEI_WS08/Skript/skriptum_beta.pdf).
- Orszag, S. A. (1971), 'Numerical simulation of incompressible flows within simple boundaries: accuracy', *Journal of Fluid Mechanics* **49**, 75–112.
- Pellew, A. und Southwell, R. V. (1940), 'On maintained convective motion in a fluid heated from below', *Proc. Roy. Soc. (London)* **176**, 312–343.
- Plapp, B. B., Egolf, D. A., Bodenschatz, E. und Pesch, W. (1998), 'Dynamics and selection of giant spirals in rayleigh–bénard convection', *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5334–5337.
- Pope, S. (2001), *Turbulent Flows*, Cambridge University Press.

- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. und Flannery, B. P. (2007), *Numerical Recipes*, Cambridge University Press.
- Ramière, I., Angot, P. und Belliard, M. (2007), ‘A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **196**(4-6), 766 – 781.
- Rayleigh, J. W. S. (1916), ‘On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side.’, *Philosophical Magazine* **32**, 529–546.
- Schneider, K. (2005), ‘Numerical simulation of the transient flow behaviour in chemical reactors using a penalisation method’, *Computers & Fluids* **34**(10), 1223 – 1238.
- Schumacher, J. (2009), ‘Lagrangian studies in convective turbulence’, *Phys. Rev. E* **79**(5), 056301.
- SOHO (1996), <http://sohowww.nascom.nasa.gov/gallery/SolarCorona/sum005.html>.
- Stoer, J. und Bulirsch, R. (2005), *Numerische Mathematik 2*, Springer.
- Stromberg, K. (1981), *Introduction to classical real analysis*, Wadsworth International Group.
- Sun, C., Ren, L.-Y., Song, H. und Xia, K.-Q. (2005), ‘Heat transport by turbulent rayleigh–bénard convection in 1 m diameter cylindrical cells of widely varying aspect ratio’, *Journal of Fluid Mechanics* **542**, 165–174.
- Thomson, J. (1882), ‘On a changing tessellated structure in certain liquids’, *Philosophical Society of Glasgow, Proceedings* **13**, 464–468.
- Weidauer, T., Pauluis, O. und Schumacher, J. (2010), ‘Cloud patterns and mixing properties in shallow moist rayleigh–bénard convection’, *New Journal of Physics* **12**, 105002.
- Werner, D. (2005), *Funktionalanalysis*, Springer.
- Wilczek, M. (2007), Kohärente strukturen in turbulenten strömungen, Master’s thesis, Institut für theoretische Physik.
- Williams, T., Kelley, C., Lang, R., Kotz, D., Campbell, J., Elber, G. und Woo, A. e. a. (1986), ‘gnuplot’, <http://www.gnuplot.info/>.
- Yamanaka, Y., Kakimoto, K., Ozoe, H. und Churchill, S. W. (1998), ‘Rayleigh–benard oscillatory natural convection of liquid gallium heated from below’, *Chemical Engineering Journal* **71**(3), 201 – 205.
- Zhou, Q. und K.-Q., X. (2010), ‘Physical and geometrical properties of thermal plumes in turbulent rayleigh–bénard convection’, *New Journal of Physics* **12**, 075006.

# Abbildungsverzeichnis

1.1.	Beispiele natürlicher Konvektion . . . . .	1
1.2.	Schematische Darstellung der Konvektionsrollen . . . . .	3
1.3.	Experimente zu Rayleigh-Bénard-Konvektion . . . . .	4
2.1.	Schematische Darstellung der Realisierung der Gebietseinbettung .	11
2.2.	Schematische Darstellung der Geometrie . . . . .	21
2.3.	$\chi$ im periodischen Fall . . . . .	22
2.4.	Klassisches Runge-Kutta Verfahren . . . . .	30
2.5.	Aliasing . . . . .	32
2.6.	Orszags 2/3-Regel . . . . .	33
2.7.	Hinreichend aufgelöste Simulation . . . . .	39
2.8.	Unteraufgelöste Simulation . . . . .	40
2.9.	Lagrangesches Teilchen . . . . .	41
2.10.	Bilineare Interpolation . . . . .	42
2.11.	Bikubische Interpolation . . . . .	43
2.12.	Isolierende Seitenwände . . . . .	46
2.13.	Einsetzen der Konvektion . . . . .	50
2.14.	Seitenabhängigkeit der kritischen Rayleighzahl . . . . .	52
2.15.	Profile bei niedrigen Rayleighzahlen . . . . .	53
2.16.	Wandkollisionen . . . . .	53
2.17.	Abhängigkeit des Fehlers von der Ortsauflösung . . . . .	54
2.18.	Abhängigkeit des Fehlers vom Penalisationsparameter . . . . .	55
2.19.	Fehler der Normalenableitung von $\theta$ auf isolierenden Wänden . . . . .	56
2.20.	Gibb'sche Oszillationen . . . . .	57
2.21.	Verteilungsfunktionen der Wandkollisionen . . . . .	58
2.22.	Verteilungsfunktionen bei isolierenden Wänden . . . . .	59
3.1.	Zeitentwicklung eines Volumens unter der lagrangeschen Abbildung	63
3.2.	Wandkollision in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	66
3.3.	Rayleigh-Taylor Instabilität in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	68
3.4.	Entstehung von Plumes in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	70
3.5.	Entstehung von Plumes in lagrangeschen Koordinaten, Vortizität .	71
3.6.	Konvektion mit periodischen Randbedingungen in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	74

## Abbildungsverzeichnis

---

3.7. Konvektion bei isolierenden Seitenwänden in lagrangeschen Koordinaten . . . . .	77
4.1. Abhängigkeit der Nusseltzahl von der Rayleighzahl . . . . .	80
4.2. Abhängigkeit der Nusseltzahl vom Seitenverhältnis . . . . .	81
4.3. Mittleres Geschwindigkeitsfeld für $\Gamma = 1,78$ . . . . .	82
4.4. Mittleres Geschwindigkeitsfeld für $\Gamma = 1,78$ . . . . .	83
4.5. Einfluss von Objekten, Geometrie . . . . .	84
4.6. Wärmetransport unter dem Einfluss von Objekten . . . . .	85

Sofern nicht anders angegeben, wurden alle Zeichnungen in dieser Arbeit dem Open-Source-Vektorgrafikeditor Inkscape [Harrington et al. 2003] erstellt, Plots mit dem Plottingprogramm gnuplot [Williams et al. 1986] und Visualisierungen aus dem Simulationscode mittels der Plotbibliothek dislin angefertigt [Michels 1986].

# Tabellenverzeichnis

2.1.	Vergleich des numerischen Aufwandes der Fouriertransformationen . . . . .	16
2.2.	Allgemeines Butcher-Tableau . . . . .	29
2.3.	Klassisches Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	29
3.1.	Parameter der Wandkollision . . . . .	67
3.2.	Parameter der Entstehung von Plumes . . . . .	69
3.3.	Parameter der Simulation zur Berechnung der lagrangeschen Abbil- dung bei periodischen Randbedingungen . . . . .	73
3.4.	Parameter der Simulation zur Berechnung der lagrangeschen Abbil- dung bei isolierenden Seitenwänden . . . . .	76
4.1.	Koeffizienten der angefitteten Potenzfunktionen . . . . .	80



# Danksagung

Ich danke Prof. Dr. Rudolf Friedrich für die Betreuung meiner Arbeit, die gegebene Möglichkeit, eigenen Ideen nachzugehen und für das Ermöglichen der Teilnahme an internationalen Konferenzen.

Besonderer Dank gilt Michael Wilczek für die aufopferungsvolle Unterstützung bei zahllosen technischen und inhaltlichen Problemen sowie für das Korrekturlesen im Angesicht seiner bevorstehenden Promotionsprüfung. Bedanken möchte ich mich zudem bei Johannes Lülfß für gewinnbringende Diskussionen zur Rayleigh-Bénard-Konvektion und Penalisationsmethoden, bei Holger Angenent für die Lösung sämtlicher auftretender Computerprobleme, bei Ingmar Schnell und Eva Baresel für eine großartige Zeit im Büro 409, bei Oliver Kamps, Johannes Greber, Christoph Honisch, Michael Köpf, Cornelia Petrovic, Svetlana Gurevich, Max Kuchel und Christoph Blum sowie der gesamten übrigen Arbeitsgruppe Friedrich für die Unterstützung während der Bearbeitungszeit.

Besonders herzlich bedanken möchte ich mich für eine unvergessliche Studienzeit bei Sune Wissing, Frederik Behrends und Markus Tegeder. Ihre Freundschaft hat Münster während meiner Studienzeit tatsächlich zur lebenswertesten Stadt der Welt gemacht. Zudem möchte mich bei Matthias Lischper, Gregor Müller, Sönke Schmid, Sonja Gauselmann, Sandra Freudenstein und Anna Lusiewicz dafür bedanken, dass sie meinen Blick stets auf das Wesentliche gerichtet haben.

Mein größter Dank gilt jedoch meinen Eltern Ute und Achim sowie meiner Schwester Marlene. Ohne ihre Unterstützung, Vertrauen und Fürsorge hätte ich dieses Studium niemals abgeschlossen.

Danke!



# **Erklärung zur Diplomarbeit**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur mit Hilfe der im Literaturverzeichnis angegebenen Quellen verfasst habe.

Münster, Januar 2011