

Über den Zusammenhang von Large Eddy Simulation und Smoothed Particle Hydrodynamics

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

angenommene
Dissertation
von

M.Sc. Max Okrashevski,
aus Spaichingen

Tag der mündlichen Prüfung:
Hauptreferent:
Korreferent:

30.01.2024
Prof. Dr.-Ing. Hans-Jörg Bauer
PD Dr.-Ing. habil. Stefan Adami

Vorwort des Herausgebers

Der schnelle technische Fortschritt im Turbomaschinenbau, der durch extreme technische Forderungen und starken internationalen Wettbewerb geprägt ist, verlangt einen effizienten Austausch und die Diskussion von Fachwissen und Erfahrung zwischen Universitäten und industriellen Partnern. Mit der vorliegenden Reihe haben wir versucht, ein Forum zu schaffen, das neben unseren Publikationen in Fachzeitschriften die aktuellen Forschungsergebnisse des Instituts für Thermische Strömungsmaschinen des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) einem möglichst großen Kreis von Fachkollegen aus der Wissenschaft und vor allem auch der Praxis zugänglich macht und den Wissenstransfer intensiviert und beschleunigt.

Flugtriebwerke, stationäre Gasturbinen, Turbolader und Verdichter sind im Verbund mit den zugehörigen Anlagen faszinierende Anwendungsbereiche. Es ist nur natürlich, dass die methodischen Lösungsansätze, die neuen Meßtechniken, die Laboranlagen auch zur Lösung von Problemstellungen in anderen Gebieten - hier denke ich an Otto- und Dieselmotoren, elektrische Antriebe und zahlreiche weitere Anwendungen - genutzt werden. Die effiziente, umweltfreundliche und zuverlässige Umsetzung von Energie führt zu Fragen der ein- und mehrphasigen Strömung, der Verbrennung und der Schadstoffbildung, des Wärmeübergangs sowie des Verhaltens metallischer und keramischer Materialien und Verbundwerkstoffe. Sie stehen im Mittelpunkt ausgedehnter theoretischer und experimenteller Arbeiten, die im Rahmen nationaler und internationaler Forschungsprogramme in Kooperation mit Partnern aus Industrie, Universitäten und anderen Forschungseinrichtungen durchgeführt werden.

Es sollte nicht unerwähnt bleiben, dass alle Arbeiten durch enge Kooperation innerhalb des Instituts geprägt sind. Nicht ohne Grund ist der Beitrag der Werkstätten, der Technik-, der Rechner- und Verwaltungsabteilungen besonders hervorzuheben. Diplomanden und Hilfsassistenten tragen mit ihren Ideen Wesentliches bei, und natürlich ist es der stets freundschaftlich fordernde wissenschaftliche Austausch zwischen den Forschergruppen des Instituts, der zur gleichbleibend hohen Qualität der Arbeiten entscheidend beiträgt. Dabei sind wir für die Unterstützung unserer Förderer außerordentlich dankbar.

Die Gemischaufbereitung erfolgt in modernen Triebwerksbrennkammern mit Hilfe von luftgestützten Einspritzdüsen, sogenannten „Airblast-Zerstäubern“. Während die reaktionsbehaftete Strömung in der Brennkammer einschließlich der Ausbreitung und Verdunstung des Kraftstoffsprays zwischenzeitlich mit für ingenieurmäßige Belange ausreichender Genauigkeit numerisch berechnet werden kann, war der Vorgang der Primärzerstäubung des Brennstoffes bis vor kurzem einer vollständigen numerischen Beschreibung nicht zugänglich. Die Definition exakter Tropfenstartbedingungen für die Berechnung der reagierenden Brennkammerströmung ist deshalb für den für Flugtriebwerksbrennkammern typischen sehr weiten Betriebsbereich a priori nur schwer möglich. Andererseits zeichnen sich zwischenzeitlich ermutigende Fortschritte bei der numerischen Simulation von Zweiphasenströmungen ab, die die schrittweise Annäherung an die Berechnung des Primärzerfallsprozesses als möglich erscheinen lassen. Gerade die relativ junge numerische Methode der Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) scheint für diese Anwendung ein hohes Potential zu besitzen. Im vorliegenden Band der Schriftenreihe befasst sich der Autor mit der Fragestellung, in wieweit SPH in der Lage ist, turbulente Strukturen der

Luftströmung aufzulösen, die für den Gemischbildungsprozess bedeutsam sind. Der Vergleich mit der Grobstruktursimulation gitterbasierter Verfahren (LES) bietet sich dabei an, die lediglich große bis mittelfeine turbulente Strukturen auflöst und die kleineren Strukturen bis hin zur Größenordnung der dissipativen Vorgänge über einen Modellierungsansatz erfasst.

Der Autor weist nach, dass die SPH-Methode entgegen der häufig publizierten Meinung in der Lage ist, das Turbulenzspektrum einer Grobstruktur bis zum zweifachen der Kernelauflösung im Inertialbereich der Turbulenz korrekt wiederzugeben – vorausgesetzt es wird eine geeignete Kernelfunktion ausgewählt und die Partikeldichte wird hinreichend hoch gewählt. Darüber hinaus wird gezeigt, dass SPH die Voraussetzungen für ein inhärentes Quadraturverfahren für die Grobstrukturgleichungen turbulenter Strömungen erfüllt. Andererseits wird anhand von Rechnungen generischer Strömungsbeispiele aufgezeigt, dass klassische Modelle der gitterbasierten Welt nicht geeignet sind, die Subfilterspannungen unterhalb der Kernelauflösung richtig wiederzugeben und worin die Problematik der Rückwirkung von inkorrekten Subfilterspannungen auf turbulente Strukturen oberhalb der Kernelauflösung begründet ist. Diese Ergebnisse stellen wesentliche Erweiterungen des derzeitigen wissenschaftlichen Kenntnisstands dar und sind für die Berechnung von ein- und mehrphasigen Strömungen mit der SPH-Methode von grundlegender Bedeutung. Die gewonnenen Erkenntnisse stellen darüber hinaus wichtige Grundlagen für weiterführende wissenschaftliche Arbeiten dar, beispielsweise für die Herleitung von auf die SPH-Methode angepasste Subfilterspannungsmodelle.

Kurzfassung

Die Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) ist eine vergleichsweise junge Methode der numerischen Strömungsmechanik, die der Astrophysik der 70er Jahre entspringt und in den letzten Jahrzehnten auch in den Ingenieurwissenschaften an Prominenz gewinnt. Dies ist ihrem Lagrangischen Charakter geschuldet, der es ermöglicht, insbesondere komplexe, mehrphasige Strömungsprobleme zu behandeln, die bis dato für konventionelle Methoden eine ernsthafte Herausforderung darstellen. Ein gesellschaftlich relevantes Beispiel ist die luftgestützte Kerosineinspritzung in modernen Turbofan-Triebwerken. Dank der SPH-Methode konnte in den letzten Jahren ein verbessertes Verständnis der Kerosineinspritzung erarbeitet werden, welches für die Reduktion der Schadstoffbildung durch optimierte Kraftstoffinjektoren unabdingbar ist.

Allerdings steht die SPH-Methode neuerdings in Kritik, turbulente Strömungen, die mitunter auch den Prozess der Kerosineinspritzung initiieren, nicht abbilden zu können. Dies zieht aus Simulationen abgeleitete Optimierungsvorschläge in starke Zweifel. An dieser Stelle greift die vorliegende Arbeit an, deren Ziel es ist, die Fähigkeiten der SPH-Methode zur Berechnung turbulenter Strömungen systematisch zu evaluieren. Hierfür wird mit einer Technik aus der statistischen Physik eine Grobstrukturtheorie entwickelt, die es ermöglicht, die SPH-Methode als eine Art Large Eddy Simulation (LES) zu interpretieren. Letztere Verfahren gelten in der numerischen Strömungsmechanik als zuverlässige skalenauflösende Methoden zur Berechnung turbulenter Strömungen, bei denen rechnerisch vernachlässigte Feinstrukturbeiträge durch geeignete Modelle substituiert werden. Anhand hochauflösender SPH-Simulationen turbulenter Strömungen wird der theoretische Zusammenhang zwischen LES und SPH verifiziert. Ferner wird aufgezeigt, dass die numerischen Methodenfehler implizite Feinstrukturbeiträge bedingen und erstmals erläutert, weshalb von der Verwendung existierender expliziter Feinstrukturmodelle im SPH-Kontext abzuraten ist.

Abstract

The Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method is a comparatively young method in the area of computational fluid dynamics (CFD) and has its origin in the astrophysics community of the 1970s. In the last decades, it is also gaining prominence in engineering sciences. This is due to its Lagrangian character, which makes it possible to treat complex multiphase flow problems that are a serious challenge for conventional methods to date. A socially relevant example is the air-assisted kerosene injection in modern turbofan engines. Thanks to the SPH method, an improved understanding of kerosene injection has been developed in recent years, which is essential for reducing pollutant formation through optimized fuel injectors.

However, the SPH method has recently been criticized for not being able to reproduce turbulent flows, which also initiate the kerosene injection process. This casts strong doubt on optimization guidelines derived from such simulations. This is where the present work comes in, the aim of which is to systematically evaluate the capabilities of the SPH method for computing turbulent flows. For this purpose, a coarse-grained theory is developed using a technique from statistical physics, which allows to interpret the SPH method as a kind of Large Eddy Simulation (LES). The latter are considered as reliable scale-resolving methods for the simulation of turbulent flows in CFD, where computationally neglected subfilter-scale effects are substituted by suitable models. Using highly resolved SPH simulations of turbulent flows, the theoretical relationship between LES and SPH is verified. Furthermore, it is shown that the numerical errors cause implicit subfilter-scale contributions and it is explained for the first time why the use of existing explicit subfilter-scale models is not recommended in the SPH context.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|------------|
| Symbole | iii |
| Abbildungen | vii |
| Tabellen | xi |
| 1 Einleitung | 1 |
| 2 Stand der Wissenschaft | 3 |
| 2.1 Kernelkonzept der SPH-Methode | 3 |
| 2.2 Wirkung von numerischen Fehlern | 5 |
| 2.2.1 Numerische Diffusion | 5 |
| 2.2.2 Numerische Dispersion | 8 |
| 2.3 SPH-Analysen subsonischer turbulenter Strömungen | 10 |
| 2.4 Numerische Konvergenz in SPH | 13 |
| 2.5 SPH-LES-Verfahren | 16 |
| 2.6 Zielsetzung der Arbeit | 20 |
| 3 Theorie der Grobstruktur | 23 |
| 3.1 Transportgleichungen der Grobstruktur | 23 |
| 3.1.1 Mathematische Notation | 24 |
| 3.1.2 Herleitung der Massentransportgleichung | 25 |
| 3.1.3 Herleitung der Impulstransportgleichung | 27 |
| 3.1.4 Herleitung des Subfilterspannungstensors | 28 |
| 3.1.5 Interpretation und Einordnung in den LES-Kontext | 30 |
| 3.2 SPH als Quadratur der Grobstruktur | 31 |
| 4 Implizite Subfilterspannungen | 35 |
| 4.1 Referenzexperiment & Vorgehen | 35 |
| 4.2 Analyse der Strömung | 38 |
| 4.3 Interpretation diffusiver Fehler als Subfilterspannungen | 42 |
| 4.4 Räumliche Organisation der Subfilterspannungen | 44 |
| 4.5 Zwischenfazit | 47 |
| 4.6 Reduktion von Subfilterspannungen durch explizite Modellierung | 48 |
| 5 SPH-LES subsonischer dreidimensionaler Turbulenz | 51 |
| 5.1 Referenzproblem & Vorgehen | 51 |
| 5.2 SPH-LES mit impliziten Subfilterspannungen | 56 |
| 5.2.1 Numerische Konvergenz | 56 |
| 5.2.2 Implizite Subfilterspannungen | 62 |
| 5.3 SPH-LES mit explizitem Subfilterspannungsmodell | 65 |
| 5.3.1 Einfluss des Smagorinsky-Modells | 65 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5.3.2 | Einfluss von alternativen Subfilterspannungsmodellen | 70 |
| 5.3.3 | Sensitivität hinsichtlich Modellkonstante und Filterweite | 72 |
| 5.3.4 | Phänomenologie der Partikeldualität | 72 |
| 5.4 | Ausblick - Numerische Dispersion und Galilei-Invarianz | 74 |
| 6 | Zusammenfassung | 77 |
| | Literatur | 79 |
| | Mitbetreute studentische Arbeiten | 85 |
| | Publikationsliste | 87 |
| | Anhang | 91 |
| A.1 | Lagrangesche Quadratur des Grobstrukturmodells | 91 |
| A.1.1 | Dichte der Grobstruktur | 91 |
| A.1.2 | Druckgradient der Grobstruktur | 91 |
| A.1.3 | Viskose Reibung der Grobstruktur | 93 |
| A.1.4 | Subfilterspannungen der Grobstruktur | 94 |

Symbole

| Formelzeichen | Einheit | Beschreibung |
|-----------------------------|----------------------------------|---|
| <i>Lateinische Symbole</i> | | |
| a | m/s^2 | Beschleunigungsfeld |
| a_μ | m/s^2 | Linearer Verzögerungsterm |
| a_χ | m/s^2 | Sinusförmiger Beschleunigungsterm |
| C_S | – | Modellkonstante Smagorinsky Modell |
| C_σ | – | Modellkonstante σ-Modell |
| c_{ph} | m/s | Phasengeschwindigkeit |
| c_s | m/s | Schallgeschwindigkeit |
| D_K | m | Kerneldurchmesser |
| d | m | Dicke |
| E | m^3/s^2 | Spektrale Energiedichte |
| e_v | m^2/s^2 | Volumengemittelte kinetische Energie |
| e_x | – | Richtungsvektor entlang der x-Koordinate |
| f | – | Funktion bzw. Skalarfeld |
| h | m | Charakteristisches Längenmaß für Kerneldurchmesser |
| k | $1/\text{m}$ | Wellenzahlvektor |
| k | $1/\text{m}$ | Norm des Wellenzahlvektors |
| k_{kern} | $1/\text{m}$ | Kernelwellenzahl |
| L | m | Geometrisches Längenmaß |
| l_c | m | Charakteristisches Längenmaß |
| l_η | m | Dissipatives Längenmaß |
| Δl | m | Mittlerer Partikelabstand, Zellweite |
| M | kg | Masse |
| dM | kg | Differentielles Massenelement |
| N | – | Partikelanzahl |
| N_{ens} | – | Gesamtanzahl im Ensemble |
| N_{ngb} | – | Anzahl Nachbarpartikel |
| ΔN | – | Anzahl im Intervall |
| p | Pa | Druckfeld |
| \bar{p} | Pa | Druckfeld der Grobstruktur bzw. kernelgemitteltes Druckfeld |
| T_ρ | $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ | Subfilterbeitrag in der Kontinuitätsgleichung |
| T_v | N/m^3 | Subfilterbeitrag in der Impulstransportgleichung |
| t | s | Zeit |

| | | |
|----------------------|-------------------------------------|---|
| Δt | s | Zeitspanne |
| $\mathbf{t}_{I,II}$ | – | Hauptspannungsrichtungen |
| u | J/kg | Massenbezogene innere Energie |
| u_c | m/s | Charakteristische Geschwindigkeit |
| u_{rms} | m/s | Quadratisch gemittelte Geschwindigkeit (engl. <i>root mean square</i>) |
| V | m ³ | Volumen |
| V_x | – | Kugelförmiger, in \mathbf{x} zentrierter Träger des Kernels W_h |
| \mathbf{v} | m/s | Geschwindigkeitsfeld |
| $\bar{\mathbf{v}}$ | m/s | Kernelgemitteltes Geschwindigkeitsfeld |
| $\tilde{\mathbf{v}}$ | m/s | Geschwindigkeitsfeld der Grobstruktur, Favre gemitteltes Geschwindigkeitsfeld |
| \mathbf{v}' | m/s | Geschwindigkeitsfeld der Schwankungen |
| W_h | 1/m ² , 1/m ³ | Kernel |
| \mathbf{w} | m/s | Pekuliargeschwindigkeitsfeld |
| \mathbf{x} | m | Ortsvektor in Eulerschen Koordinaten |
| $d\mathbf{x}$ | m ³ | Differentielles Volumenelement in Eulerschen Koordinaten |
| \mathbf{y} | m | Ortsvektor in Lagrangeschen Koordinaten |
| $d\mathbf{y}$ | m ³ | Differentielles Volumenelement in Lagrangeschen Koordinaten |

Griechische Symbole

| | | |
|-------------------|--------------------------------|---|
| γ | – | Kleinster einschließender Winkel |
| $\dot{\gamma}$ | 1/s | Scherrate |
| Δ | m | Filterweite |
| ϵ_{film} | m ² /s ³ | Dissipationsrate aufgrund der Filmreibung |
| ϵ_{inj} | m ² /s ³ | Energieinjektionsrate |
| ϵ_v | m ² /s ³ | Mittlere, viskose Dissipationsrate |
| η | Pas | Dynamische Viskosität |
| η_t | Pas | Dynamische turbulente Wirbelviskosität |
| λ | m | Wellenlänge |
| μ | 1/s | Reibungskonstante |
| ν | m ² /s | Kinematische Viskosität |
| ν_t | m ² /s | Kinematische turbulente Wirbelviskosität |
| ρ | kg/m ³ | Dichtefeld |
| $\bar{\rho}$ | kg/m ³ | Dichtefeld der Grobstruktur bzw. kernelgemitteltes Dichtefeld |

| | | |
|---------------------------|------------------|--|
| $\tau_{I,II}$ | Pa | Hauptspannungen |
| τ_{xy} | Pa | Schubspannung, die aus Transport von x-Impuls in y-Richtung resultiert |
| τ_{SFS} | Pa | Frobeniusnorm des Subfilterspannungstensors |
| $\boldsymbol{\tau}_{SFS}$ | Pa | Subfilterspannungstensor |
| χ | m/s ² | Beschleunigungsamplitude |
| Ω | – | Strömungsgebiet |
| ω | 1/s | Wirbelstärkefeld |
| ω_{ph} | 1/s | Kreisfrequenz der Phase |

Ähnlichkeitskennzahlen

| | | |
|----------------------------|---|---------------|
| $Ma = \frac{u_c}{c_s}$ | – | Machzahl |
| $Re = \frac{u_c l_c}{\nu}$ | – | Reynoldszahl |
| $Tu = \frac{u_{rms}}{u_c}$ | – | Turbulenzgrad |

Indizes

| | |
|--------------|---|
| <i>eff</i> | Effektiv |
| <i>film</i> | Film |
| <i>i, j</i> | Partikelindizes |
| <i>inj</i> | Injektion |
| <i>kern</i> | Kernel |
| <i>kin</i> | Kinetisch |
| <i>mikro</i> | Mikroskopisch |
| <i>ngb</i> | Nachbarn (engl. <i>neighbors</i>) |
| <i>ph</i> | Phase |
| <i>pot</i> | Potentiell |
| <i>ref</i> | Referenz |
| <i>res</i> | Auflösung (engl. <i>resolution</i>) |
| <i>rms</i> | Quadratisches Mittel (engl. <i>root mean square</i>) |
| <i>V</i> | Volumen |
| <i>visk</i> | Viskos |

Akronyme

| | |
|-----|-------------------------------|
| DNS | Direkte Numerische Simulation |
| FDM | Finite-Differenzen-Methode |
| LES | Large Eddy Simulation |

SPH

Smoothed Particle Hydrodynamics

Abbildungen

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Simulierte Momentaufnahme eines Kraftstoffzerfallereignisses im Rahmen des EU-Projektes PROTEUS. Abbildung reproduziert aus Okrashevski et al. (2023). | 1 |
| 2.1 | Kernelkonzept der SPH-Methode. Der Kernel W_h spannt eine Kugel mit Durchmesser D_K auf, die die Interaktion von Partikeln mit dem mittleren Partikelabstand Δl bewerkstelligt. | 4 |
| 2.2 | Illustration zum phänomenologischen Instabilitätsmechanismus nach Basa et al. (2009). | 6 |
| 2.3 | Illustration zur Studie von Ellero et al. (2010). (a) Schematische Skizze der untersuchten Couette Strömung. (b) Effektives dynamisches Viskositätsverhältnis in Abhängigkeit von Re . Die Daten sind der Originalstudie entnommen. | 7 |
| 2.4 | Veranschaulichung des Dispersionsverhaltens des Konvektions-operators von ebenen Wellen für ein zentrales FDM Schema zweiter Ordnung. | 9 |
| 2.5 | Methodenvergleich für zwei Momentaufnahmen der quadrierten Wirbelstärke ω^2 im Fall stationärer, angeregter Turbulenz. Die Abbildung wurde mit freundlicher Genehmigung der <i>Oxford University Press</i> aus der Arbeit von Bauer et al. (2012) reproduziert. | 11 |
| 2.6 | Schematischer Verlauf der spektralen Energiedichte $E(k)$ im physikalischen Idealfall gegenüber den resultierenden Verläufen einer gitterbasierten DNS-Lösung und einer SPH-Berechnung mit identischer Auflösung. | 12 |
| 2.7 | Veranschaulichung von SPH-Partikelkonfigurationen im Gleichgewicht für große N_{ngb} Werte und unterschiedliche Kernelklassen. (a) Spline-Kernel. (b) Wendland Kernel. Die Farbe repräsentiert die Dichte ρ der Partikel. | 14 |
| 2.8 | Schematischer Verlauf der normierten SPH-Dichte für Spline- und Wendland Kernel gemäß Dehnen et al. (2012). | 15 |
| 2.9 | Resultierende Verteilungen der spektralen Energiedichte $E(k)$ aus den SPH-LES-Simulationen von (a) Di Mascio et al. (2017) und (b) Antuono et al. (2021a). In (a) sind die Verteilungen für die unterschiedlichen Auflösungen vertikal verschoben. Die Daten wurden den Originalveröffentlichungen entnommen. | 19 |
| 3.1 | Schematische Darstellung der Theorie von Hardy (1982) und deren Verallgemeinerung zur Beschreibung der Grobstruktur einer Strömung. Abbildung adaptiert aus Okrashevski et al. (2022). | 24 |
| 3.2 | Skizze eines mit Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}$ konvektierten Superfluidelementes an der Position \mathbf{x} . Zur Veranschaulichung ist ein zugehöriges Fluidelement mit Geschwindigkeit \mathbf{v} an der Position $\mathbf{y}(t)$ eingezeichnet. | 24 |
| 3.3 | Veranschaulichung der Pekuliargeschwindigkeit anhand eines skizzierten Superfluidelementes mit zugehörigem Fluidelement. | 28 |
| 3.4 | Abgrenzung der kernelbasierten Grobstrukturtheorie von der Lagrangeschen Quadratur der SPH-Methode. Abbildung adaptiert von Okrashevski et al. (2022). | 32 |

| | | |
|-----|--|----|
| 4.1 | Schematische Darstellung des Experiments von Rivera et al. (2000). Der dünne, elektrisch leitende Flüssigkeitsfilm ist blau dargestellt. | 36 |
| 4.2 | Vergleich der numerischen und experimentellen zeitlichen Evolution für die (a) quadratisch gemittelte Geschwindigkeit u_{rms} und (b) Energiezufuhrtrate ϵ_{inj} . . . | 39 |
| 4.3 | Momentaufnahmen des Axialgeschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt (a) $t = 0.15$ s und (b) $t = 15.9$ s, sowie des Wirbelstärkefeldes (c) und seiner Quadrierten (d) zum Zeitpunkt $t = 15.9$ s. | 40 |
| 4.4 | Abweichung der spektralen Energiedichte $E(k)$ von der experimentellen Charakteristik nach Rivera et al. (2016). | 41 |
| 4.5 | Vergleich der Momentaufnahmen für die (a) quadrierte Wirbelstärke ω^2 und (b) Frobeniusnorm des Subfilterspannungstensors τ_{SFS} zum Zeitpunkt $t = 15.9$ s. . | 43 |
| 4.6 | Bivariate Häufigkeitsverteilung für das Tupel $(\tau_{SFS,i}^*, \omega^{2*})$ | 44 |
| 4.7 | Visualisierung der Eigenspannungen $\tau_{I,II}$ in (a) und (b) sowie der skalierten Eigenspannungsrichtungen $\mathbf{t}_{I,II}$ in (c) und (d) für die Momentaufnahme $t = 15.9$ s. In (e) ist die schwarz eingerahmte Zone der Eigenspannungsrichtung \mathbf{t}_I aus (c) im Detail dargestellt und vergleichend dem lokalen Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} in (f) gegenübergestellt. | 45 |
| 4.8 | Prozentuale univariate Häufigkeitsverteilung $\Delta N/N_{ens}$ als Polardiagramm für den kleinsten einschließenden Winkel γ zwischen \mathbf{t}_I und \mathbf{v} unter der Kondition $\tau_{SFS,i}^* > 0.1$ | 46 |
| 4.9 | Schematischer Verlauf der spektralen Energiedichte $E(k)$ zur Erörterung der Anforderungen und Zielsetzung an explizite Subfilterspannungsmodelle im SPH-Kontext. | 49 |
| 5.1 | Initiale Verteilung der (a) Norm des Geschwindigkeitsfeldes $\ \mathbf{v}\ _2$, (b) konsistenten Massenverteilung M_0 , (c) Partikelidentitäten (ID) sowie der zeitlichen Evolution der letzteren für Fall 11 (höchste Auflösung). Die Momentaufnahmen entsprechen: (d) $t = 5$ s, (e) $t = 9$ s, (f) $t = 14$ s. | 54 |
| 5.2 | Vergleich quantitativer Metriken zur Analyse der numerischen Konvergenz des SPH-LES-Modells. In der ersten Spalte (a,c,e) wird die Abhängigkeit der Partikelzahl N für den quintischen Spline-Kernel mit $D_K = 6\Delta l$ aufgezeigt und in der zweiten Spalte (b,d,f) die Abhängigkeit des Kerneldurchmessers D_K für den Wendland C4 Kernel bei $N = 256^3$ | 57 |
| 5.3 | Gegenüberstellung quantitativer Metriken für das analysierte SPH-LES-Modell. In der ersten Spalte (a,c,e) wird die Abhängigkeit der Partikelzahl N für den quintischen Spline-Kernel mit $D_K = 6\Delta l$ aufgezeigt und in der zweiten Spalte (b,d,f) für den Wendland C4 Kernel bei $D_K = 8\Delta l$ | 60 |
| 5.4 | Vergleich der spektralen Energiedichte $E(k)$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s zwischen DNS nach Dairay et al. (2017) und der genauesten SPH-Lösung (Tabelle 5.1 - Fall 11). | 61 |

| | | |
|------|---|----|
| 5.5 | Gegenüberstellung der quadrierten Wirbelstärke ω^2 und Frobeniusnorm der impliziten Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s für verschiedene N . Die Kernelkonfiguration entspricht einem Wendland C4 Kernel und $D_K = 8\Delta l$ | 63 |
| 5.6 | Vergleich quantitativer Metriken zur Analyse des Einflusses des klassischen Smagorinsky-Modells. In der ersten Spalte (a,c,e) wird die Abhängigkeit der Partikelzahl N für die Referenzfälle aufgezeigt und in der zweiten Spalte (b,d,f) entsprechend mit ergänztem Subfiltermodell. Abbildung adaptiert von Okrashevski et al. (2022). | 66 |
| 5.7 | Gegenüberstellung der (a) Frobeniusnorm von $\tau_{SFS,i}$ und der (b) turbulenten Wirbelviskosität η_t in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s für $N = 256^3$ (Fall 14). | 68 |
| 5.8 | Gegenüberstellung der Frobeniusnorm von $\tau_{SFS,i}$ in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s für verschiedene N . In der ersten Spalte (a,c,e) sind die Varianten ohne explizites Modell und in der zweiten Spalte (b,d,f) diejenigen mit SMAG Modell dargestellt. | 69 |
| 5.9 | Vergleich quantitativer Metriken zur Analyse des Einflusses von unterschiedlichen expliziten Subfilterspannungsmodellen (erste Spalte - (a,c,e)) und der Modellkonstanten C_S (zweite Spalte - (b,d,f)). Die Untersuchungen wurden für eine Partikelanzahl $N = 256^3$ und die Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ durchgeführt. Abbildung adaptiert von Okrashevski et al. (2022). | 71 |
| 5.10 | Veranschaulichung der Partikeldualität und deren Wirkung. | 73 |
| 5.11 | Verhalten quantitativer Metriken bei Untersuchung der Galilei-Invarianz für die mittlere Partikelzahl $N = 256^3$ und der Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$. (a) Mittlere kinetische Energie und (b) Spektrale Energiedichte zum Zeitpunkt $t = 14$ s. | 74 |

Tabellen

| | | |
|-----|--|----|
| 4.1 | Experimentelle Parameter nach Rivera et al. (2000). | 37 |
| 4.2 | Numerische Parameter des SPH-Modells zur Reproduktion der Strömung von Rivera et al. (2000). | 38 |
| 5.1 | SPH-LES-Simulationen der Taylor-Green Strömung. | 53 |

1 Einleitung

Aus Klimaschutzperspektive ist die Kraftstoffaufbereitung der Schlüsselprozess für die Schadstoffbildung in Flugtriebwerken. Es ist mittlerweile bekannt, dass eine ungünstige Kraftstoffeinspritzung zu fetten Kraftstoffzonen in der Brennkammer führt, die die Ausbildung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen sowie Ruß bedingen. Aber auch die Formation von Stickoxiden (NO_x) wird infolge der Luftführung durch den Kraftstoffinjektor und dessen Abstimmung mit den heißen Reaktionszonen der Brennkammer wesentlich beeinflusst. Insofern ist es verwunderlich, dass statistische Spraymodelle in gängigen Brennkammerauslegungswerkzeugen überwiegend auf lange zurückliegenden Arbeiten von Professor Lefebvre basieren (Lefebvre et al., 2017). Obwohl diese in den 1980-Jahren einen wesentlichen Fortschritt darstellten, muss heute konstatiert werden, dass diese Ansätze wichtige schadstofftreibende Korrelationen zwischen sprayrelevanten Größen, wie z.B. Fragmentmasse und Geschwindigkeit, vernachlässigen.

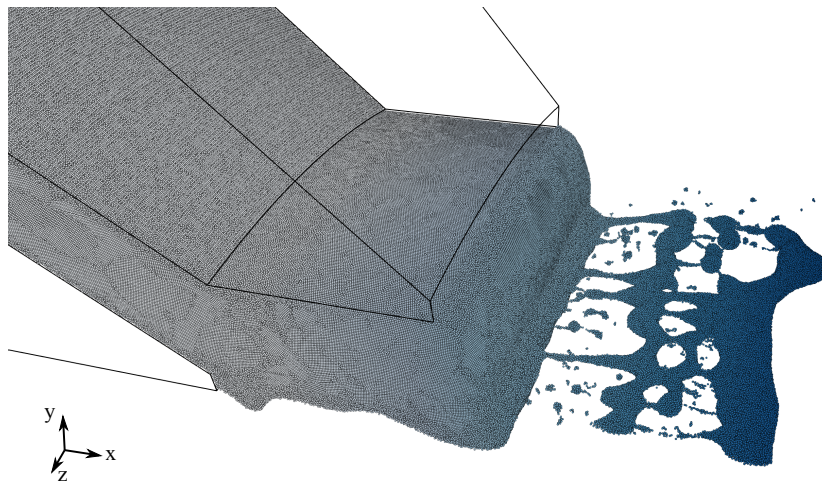


Abbildung 1.1: Simulierte Momentaufnahme eines Kraftstoffzerfallereignisses im Rahmen des EU-Projektes PROTEUS. Abbildung reproduziert aus Okrashevski et al. (2023).

In Hinblick auf die Schadstoffemissionen hat dieses wissenschaftliche Defizit in der statistischen Spraymodellierung viele vergangene Arbeiten am Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) motiviert. Insbesondere die Entwicklung eines massiv parallelisierten, hauseigenen Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Codes - *turboSPH* - ist hier hervorzuheben, mit dem selbst der herausfordernde Primärzerfall detailliert nachvollzogen werden kann (Braun et al., 2019; Dauch et al., 2021). Somit wird ein vollständiger Einblick in den inhärent dreidimensionalen Spraybildungsprozess ermöglicht, der die experimentelle Limitierung überschreitet und Aufschluss über die gesuchten schadstofftreibenden Korrelationen geben kann. Exemplarisch sei hierfür die Momentaufnahme einer zerfallenden Kraftstofflamelle aus einer hochaufgelösten Simulation in Abbildung 1.1 dargestellt, die im Rahmen des EU-Projektes PROTEUS entstanden ist (Okashevski et al., 2023). Offensichtlich ist ein einzelnes Zerfallereignis mit einem komplexen Strukturbildungsprozess verknüpft, der durch turbulente Schwankungen der Luft-

strömungen und damit einhergehenden primären Instabilitäten an der Phasengrenze initiiert wird.

Die Beobachtung, dass turbulente Schwankungen über die Entwicklung eines einzelnen Zerfallsereignisses entscheiden, ist vor allem aus SPH-methodischer Sicht interessant. Seit der Arbeit von Bauer et al. (2012) steht die SPH-Methode nämlich in starker Kritik, Turbulenz nicht abbilden zu können. Dies zieht das Vertrauen solcher Simulationen grundsätzlich in Zweifel und wirft schließlich folgende Leitfrage auf: *Welche turbulente Strömungsschwankungen, die über die Entwicklung von einzelnen Zerfallsereignissen entscheiden, können mittels der SPH-Methode tatsächlich abgebildet werden?* Die Beantwortung dieser Frage ist zentraler Gegenstand dieser Arbeit. Ein vielversprechender Ansatz könnte es sein, die SPH-Methode aus Sicht der Large Eddy Simulation (LES) zu interpretieren, in der bekanntlich der räumliche Filter die Auflösung von turbulenten Schwankungen limitiert. Eine solche Perspektive wurde neuerdings von Di Mascio et al. (2017) sowie Antuono et al. (2021a) vorgeschlagen, allerdings ohne die Kritik von Bauer et al. (2012) zu adressieren oder zu klären, welche räumliche Skalen der Turbulenz effektiv aufgelöst werden können. Deshalb soll das primäre Ziel dieser Arbeit sein, einen holistischen Zusammenhang zwischen LES und SPH zu erarbeiten, der diese wissenschaftlichen Lücken schließt. Hierfür wird sich das generelle Prinzip der Grobstrukturierung (engl. *coarse-graining*) als zweckmäßig erweisen, um einerseits die Grenzen der SPH-Methode zu identifizieren und andererseits Verbesserungsperspektiven zu eröffnen, die methodische Defizite reduzieren.

Zur Erarbeitung des holistischen Zusammenhanges zwischen der LES und SPH-Methode wird folgende Strategie verfolgt: In Kapitel 2 wird zunächst der wissenschaftliche Kenntnisstand der SPH-Methode im Hinblick auf turbulente Strömungen rekapituliert. Das wissenschaftliche Spannungsfeld, das durch die Arbeiten von Bauer et al. (2012) sowie Di Mascio et al. (2017) und Antuono et al. (2021a) resultiert, wird näher erläutert. Durch Letzteres wird ersichtlich, dass das physikalische Prinzip der Grobstrukturierung sich als vielversprechender Ansatz erweist, um eine konsistente SPH-LES-Theorie zu entwickeln. Deshalb wird in Kapitel 3 eine generelle Kontinuumstheorie für die Grobstrukturdynamik erarbeitet und in Zusammenhang zur LES-Methode gesetzt. Diese Theorie schließt von Anfang an die fundamentalen Konzepte der SPH-Methode ein. Letztere Beobachtung lässt sich verwenden, um zu argumentieren, dass die SPH-Methode intrinsisch ein Diskretisierungsverfahren für die Grobstruktur darstellt. Die daraus resultierenden Implikationen werden erläutert und bedürfen einer gründlichen Prüfung, die in den nachfolgenden Kapiteln erfolgt. In Kapitel 4 wird anhand einer experimentell abgesicherten, zweidimensionalen turbulenten Strömung aufgezeigt, dass implizite Subfilterspannungen in der SPH-Methodik existieren, mit denen sich die wesentlichen Probleme, insbesondere im Hinblick auf Turbulenz, erklären lassen. Mit diesem Wissen werden in Kapitel 5 systematisch dreidimensionale turbulente Strömungen analysiert. Das Ziel ist es einerseits aufzuzeigen, dass die SPH-Methode in der Tat von Beginn an die Grobstrukturdynamik erfasst, und andererseits, dass gängige explizite Subfiltermodelle nicht in der Lage sind, die impliziten Subfilterspannungen der Methode zielführend zu reduzieren. Abschließend werden in Kapitel 6 die wesentlichen Ergebnisse der Arbeit zusammengefasst.

2 Stand der Wissenschaft

Das Ziel dieser Arbeit ist, zu demonstrieren, welche turbulente Schwankungen mittels der SPH-Methode erfasst werden können, indem ein holistischer Zusammenhang zwischen der LES und der SPH-Methode entwickelt wird. Dazu ist zunächst der Stand der Wissenschaft der SPH-Methode hinsichtlich turbulenter Strömungen zu rekapitulieren. Dies ist Gegenstand des vorliegenden Kapitels. Zentral ist dabei insbesondere die Thematik, welche künstlichen physikalische Effekte durch numerische Fehler bedingt werden, wo und weshalb letztere in der Strömung entstehen und ob diese Fehler konvergentes Verhalten aufweisen. Praktisch impliziert Konvergenz, dass Fehler gezielt durch geeignete Parameterwahl reduziert werden können. Für LES-Verfahren, die per definitionem unteraufgelöst sind, und die damit verknüpfte Modellierung von Subfiltereffekten ist dieses Wissen unabdingbar. Neuere Studien von Dairay et al. (2017) und Yalla et al. (2021b) belegen dies beispielhaft. Durch numerische Diffusions- und Dispersionseffekte kann die Statistik vermeintlich aufgelöster turbulenter Skalen stark verfälscht werden (Fröhlich, 2006). Um dies zu verhindern, können explizite Subfiltermodelle eingesetzt werden, die sich des Wissens der methodenspezifischen Fehlercharakteristik bedienen und aktiv versuchen, die Wirkungen dieser Fehler zu unterbinden (Sagaut, 2006). Diese Strategie wird auch an späterer Stelle in dieser Arbeit verfolgt, wobei Details in Kapitel 4 diskutiert werden.

Zur Heranführung an den aktuellen Kenntnisstand ist dieses Kapitel wie folgt gegliedert: In Abschnitt 2.1 wird das Kernelkonzept der SPH-Methode erläutert, da es das fundamentale Konzept der Methode darstellt. Davon ausgehend kann ein anschaulicher Bogen zur physikalischen Wirkung numerischer Fehler in Abschnitt 2.2 gespannt werden, die sich in numerischer Diffusion und numerischer Dispersion manifestieren (Fröhlich, 2006; Kawai et al., 2021). Mit diesen Mitteln lassen sich die SPH-Untersuchungen von Bauer et al. (2012) zur subsonischen Turbulenz in Abschnitt 2.3, auf der auch der Fokus dieser Arbeit liegt, interpretieren. Der nachfolgende Abschnitt 2.4 zur Konvergenz der SPH-Methode wird diese harschen Ergebnisse unter dem Gesichtspunkt numerischer Kosten relativieren. Anschließend werden kombinierte, schon existierende SPH-LES-Ansätze in Abschnitt 2.5 kritisch diskutiert, um Lücken zu identifizieren, die in dieser Arbeit geschlossen werden sollen (Abschnitt 2.6). Hierdurch lässt sich motivieren, warum das generelle physikalische Prinzip der Grobstrukturierung ein geeignetes Mittel der Wahl ist, um einen holistischen SPH-LES-Ansatz zu entwickeln.

2.1 Kernelkonzept der SPH-Methode

Seit der ursprünglichen Einführung der SPH-Methode zur Simulation astrophysikalischer Strömungen (Gingold et al., 1977; Lucy, 1977), ist der Erfolg der Lagrangeschen Diskretisierungsmethode in der numerischen Strömungsmechanik unbestreitbar. In den vergangenen Jahrzehnten wurden wesentliche Anstrengungen unternommen, um das Fundament der Methode zu stärken. Zeitgleich wurde aber auch das Anwendungsspektrum auf immer komplexere technische Strömungen übertragen. Diese Fortschritte inklusive detaillierter Ausführungen zu den Grundlagen sind von verschiedenen Autoren dokumentiert (Chaussonnet et al., 2020; Lind et al., 2020;

Monaghan, 2005; Price, 2012; Shadloo et al., 2016; Sigalotti et al., 2021; Springel, 2010; Ye et al., 2019).

In diesem Abschnitt soll eine phänomenologische Einführung in das zentrale Kernelkonzept der SPH-Methode erfolgen. Einerseits, weil das Kernelkonzept generell im Fokus dieser Arbeit steht und andererseits, weil es die Abgrenzung zu konventionellen Diskretisierungsmethoden in der numerischen Strömungsmechanik ermöglicht. In Abbildung 2.1 ist der sogenannte Kernel W_h , der ein Partikelkollektiv von N_{ngb} Nachbarn umfasst, illustriert. Beim Kernel handelt es sich um eine in Radialrichtung monoton abfallende, symmetrische Funktion, deren kompakter Träger eine Kugel mit Durchmesser D_K aufspannt. Die mittels des Kernels interagierenden Partikel werden als Diskretisierungspunkte der SPH-Methode aufgefasst und stellen finite Massenelemente mit dem Partikelabstand Δl dar, die in Lagrangescher Art mit der Strömung konvektieren.

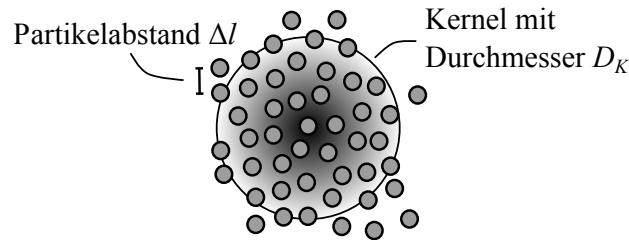


Abbildung 2.1: Kernelkonzept der SPH-Methode. Der Kernel W_h spannt eine Kugel mit Durchmesser D_K auf, die die Interaktion von Partikeln mit dem mittleren Partikelabstand Δl bewerkstelligt.

Die Kräfte, die auf die einzelnen Partikel wirken, werden durch die Impulsgleichung der Strömungsmechanik aufgeprägt, die sich aus der Lösung eines geschlossenen Transportgleichungssatzes ergeben. Im Falle dieser Arbeit erfolgt eine Einschränkung auf stark subsonische, barotrope Strömungen mit konstanter dynamischer Viskosität $\eta = konst.$ Folglich lautet der geschlossene Transportgleichungssatz in Lagrangescher Form (Eyink et al., 2018; Landau et al., 1991)

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \\ \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} \\ p &= p_{ref} + c_s^2 (\rho - \rho_{ref}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

mit der Lagrangeschen Ableitung $\frac{d}{dt}$ und den Parametern ρ_{ref} , p_{ref} , c_s . Diese beschreiben die Referenzdichte, den Referenzdruck und die Schallgeschwindigkeit. Mathematisch stellt Gl. (2.1) ein partielles Differentialgleichungssystem für das vektorielle Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} , das Dichtefeld ρ und das Druckfeld p dar. Die Besonderheit der SPH-Methode besteht nun darin, die Differentialoperatoren durch Integrale bezüglich des Kernels, präziser Faltungsintegrale, zu approximieren. Obwohl dies intuitiv zunächst widersprüchlich erscheint, da Differentiation und

Integration mathematisch inverse Operationen darstellen, lässt sich mittels Taylor-Polynom Entwicklung zeigen, dass derartige Approximationen möglich sind. Eine hervorragende Einführung hierzu wird in der Arbeit von Price (2012) gegeben. Im Kontrast zu konventionellen Methoden resultieren durch das Kernelkonzept zwei Auflösungsskalen, nämlich der Kerneldurchmesser D_K und der mittlere Partikelabstand Δl , und die resultierenden Fehler hängen stark von der sich stetig ändernden Anordnung der Lagrangeschen Partikel ab. Im Allgemeinen sind die Fehler nullter Ordnung, was anschaulich bedeutet, dass sich in jeder SPH-Lösung auf der Kernelskala künstliche Schwankungen in den approximierten Feldgrößen manifestieren, die wiederum künstliche Partikelbewegung induzieren (Price, 2012; Read et al., 2010). Es ist naheliegend, dass dadurch das eigentliche Strömungsverhalten beeinflusst wird, und zwar, wie nachfolgend dargelegt, durch numerische Diffusion und Dispersion.

2.2 Wirkung von numerischen Fehlern

Wie zuvor geschildert, sind Lösungen der Transportgleichungen der Strömungsmechanik mittels der SPH-Methode durch künstliche Schwankungen auf der Kernelskala charakterisiert. Diese Schwankungen resultieren aus numerischen Fehlern und induzieren wiederum Partikelbewegungen, die sich negativ auf die Entwicklung des Strömungsfeldes auswirken. Wie auch in konventionellen Verfahren können die physikalischen Auswirkungen der numerischen Fehler in numerische Diffusion und numerische Dispersion kategorisiert werden (Fröhlich, 2006; Kawai et al., 2021). Die wichtigen Zusammenhänge der substantiellen Studien, die hierzu im SPH-Kontext durchgeführt wurden, werden nachfolgend zusammengefasst. Ziel ist, ein Verständnis davon aufzubauen, welche Strömungsgebiete besonders von diesen Fehlern betroffen sind und unter welchen Konditionen deren Auswirkung zum Tragen kommt.

Es wird dabei bewusst auf die Entwicklung von Taylor-Polynomen verzichtet, wie sie bei konventionellen Diskretisierungsmethoden erfolgreich angewandt wird. Dort ermöglicht ein solches Vorgehen die Identifikation der dominanten Fehlerterme und eine Diskriminierung zwischen numerischer Diffusion und Dispersion. In der SPH-Methode ist dies nicht möglich, da die Rückwirkung der Partikelanordnung auf die einzelnen Fehlerterme a priori die Identifikation der dominanten Fehlerterme verhindert.

2.2.1 Numerische Diffusion

Es existieren zahlreiche Studien, die belegen, dass sich die SPH-Methode durch exzessive numerische Diffusion auszeichnet (Basa et al., 2009; Bauer et al., 2012; Colagrossi et al., 2013; Ellero et al., 2010; Hopkins, 2015; Rossi et al., 2015). Die diffusiven Fehler sind insbesondere in Scherschichten und Wirbeln stark ausgeprägt und werden mit zunehmender Reynoldszahl Re relevanter.

In der Arbeit von Basa et al. (2009) wird ein phänomenologischer Instabilitätsmechanismus beschrieben, der das numerische Diffusionsverhalten in der SPH-Methode in Analogie zum molekülbedingten, viskosen Impulstransport gemäß Durst (2006) beschreibt. Basierend auf zwei-

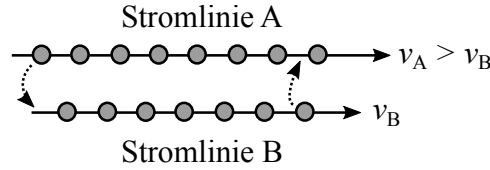


Abbildung 2.2: Illustration zum phänomenologischen Instabilitätsmechanismus nach Basa et al. (2009).

dimensionalen SPH-Simulationen einer Poiseuille Strömung konnten die Autoren beobachten, dass SPH-Partikel benachbarter Stromlinien mit den Geschwindigkeiten $v_A > v_B$ und v_B ausgetauscht werden (Abb. 2.2). Dies wird durch fehlerbedingte Schwankungen auf der Kernelskala verursacht, die einen Partikel- und somit Impulstransport vertikal zur Hauptströmungsrichtung bewirken. Partikel der Stromlinie A, die auf Stromlinie B übergehen, beschleunigen die Strömung lokal, aber auch umgekehrt. Effektiv wird hierdurch ein Angleichen des Geschwindigkeitsfeldes verursacht, das sich als numerische Diffusion äußert. Der Mechanismus wird mit steigender Reynoldszahl schneller angefacht.

Die Idee, das numerische Diffusionsverhalten der SPH-Methode basierend auf Konzepten der statistischen Physik zu verstehen und zu quantifizieren, wurde von Posch et al. (1995) vorgeschlagen und nochmals später elegant von Ellero et al. (2010) aufgegriffen. In letzterer Studie wird mittels einer Couette Strömung bei der Machzahl $Ma = 0.1$ und einer konstanten räumlichen Auflösung ein numerisches Scherrheometer realisiert (Abb. 2.3 (a)). Aus den resultierenden Spannungen τ_{xy} kann dann bei gegebener Scherrate $\dot{\gamma} = konst$ die effektive Viskosität η_{eff} bestimmt werden. Diese lässt sich aufgrund des Partikelcharakters der Methode in drei Anteile zerlegen und ist wie folgt definiert

$$\eta_{eff} := \left| \frac{\langle \tau_{xy} \rangle}{\dot{\gamma}} \right| = \eta_{visk} + \eta_{kin} + \eta_{pot} , \quad (2.2)$$

wobei $\langle \cdot \rangle$ ein statistisches Mittel im numerischen Gebiet bedeutet. Der erste Anteil in Gl. (2.2) spiegelt den Beitrag der im numerischen Experiment vorgegebenen physikalischen Viskosität wider (gemäß Gl. (2.1)). Diese wird hier als η_0 bezeichnet. Im Idealfall sollte folglich das Verhältnis $\eta_{visk}/\eta_0 \approx 1$ vorliegen. Die beiden anderen Beiträge, die sogenannte kinetische Viskosität η_{kin} und potentielle Viskosität η_{pot} , folgen aus Konzepten der statistischen Physik. In dieser existieren Theorien für die mikroskopische Definition des fluidodynamischen Spannungstensors, der sich aus Masse und Impuls von Molekülkollektiven erschließt (Hardy, 1982; Irving et al., 1950). Diese Definitionen werden in der Studie von Ellero et al. (2010) auf SPH-Partikel übertragen, um η_{kin} und η_{pot} zu berechnen. Hierbei beschreibt der kinetische Beitrag Spannungen resultierend aus Geschwindigkeitsschwankungen gegenüber dem analytischen linearen Geschwindigkeitsprofil, wohingegen der potentielle Beitrag resultierende Spannungen aufgrund von Druckkräften wiedergibt. Werden die individuellen Beiträge und deren Summe relativ zur vorgegebenen Viskosität η_0 in Abhängigkeit von Re aufgetragen, ergibt sich das Diagramm in Abb. 2.3 (b). Wie schon zuvor antizipiert, ist das Verhältnis $\eta_{visk}/\eta_0 \approx 1$ über den gesamten untersuchten Re Bereich. Allerdings ist interessant zu beobachten, dass die Beiträge η_{kin} und

η_{pot} für $Re < 500$ zunächst unerheblich sind, dann aber stark ansteigen und ab $Re > 1000$ dominant werden. Für $Re = 50000$ ist bei der untersuchten Auflösung $\eta_{eff}/\eta_0 \approx 1000$, also die numerische Diffusion um etwa drei Größenordnungen intensiver als erwartet. Dies verdeutlicht quantitativ die außerordentlich wichtige Rolle, die numerische Diffusion für die SPH-Methode im Falle von unteraufgelösten Simulationen in Scherschichten spielt. Bedauerlicherweise muss angemerkt werden, dass der Ansatz mathematisch nicht auf beliebig komplexe Strömungssituationen übertragbar ist. Wie schon zuvor geschildert, erfordert die Bestimmung der kinetischen Viskosität η_{kin} eine analytische Lösung, die die Quantifizierung von numerischen Geschwindigkeitsfluktuationen ermöglicht. Diese ist aber nur in Ausnahmefällen zugänglich.

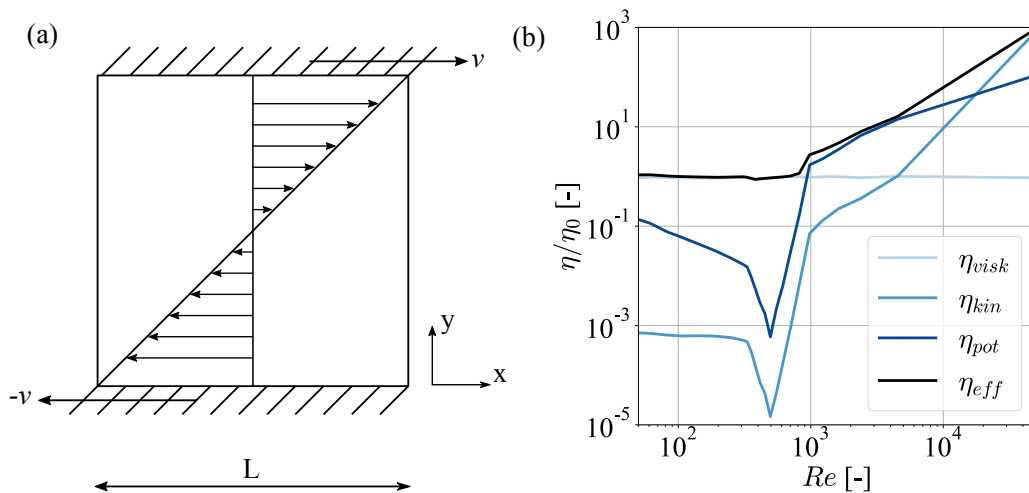


Abbildung 2.3: Illustration zur Studie von Ellero et al. (2010). (a) Schematische Skizze der untersuchten Couette Strömung. (b) Effektives dynamisches Viskositätsverhältnis in Abhängigkeit von Re . Die Daten sind der Originalstudie entnommen.

Die Arbeit von Colagrossi et al. (2013), in der das Abklingverhalten von zweidimensionalen Schwerewellen mittels SPH analysiert wird, präsentiert einen alternativen empirischen Ansatz zum Verständnis numerischer Diffusion in SPH. Dieser Ansatz ist losgelöst von Konzepten der statistischen Physik und lokalisiert diffusive Zonen durch die Erkennung von künstlichen Wirbelstärkeschwankungen im Strömungsfeld. Es lässt sich analytisch argumentieren, dass diese Wirbelstärkeschwankungen zu numerischer Dissipation von kinetischer Energie führen, da für periodische Strömungsgebiete folgender Zusammenhang zwischen Dissipationsrate ϵ_v und Wirbelstärke ω gilt

$$\rho \epsilon_v = \eta \langle \omega^2 \rangle_V = \frac{\eta}{|\Omega|} \int_{\Omega} \omega^2 \, d\mathbf{x} . \quad (2.3)$$

In Gl. (2.3) bezeichnet $\langle \cdot \rangle_V$ ein Volumenmittel im Gebiet Ω mit Volumen $|\Omega|$ und Volumenelement $d\mathbf{x}$. Anhand von Gl. (2.3) ist erkennbar, dass die Dissipation quadratisch von der Wirbelstärke abhängt, weshalb zusätzliche Schwankungen stets einen positiven Beitrag zur Gesamtdissipation leisten.

Die Studien von Hopkins (2015) und Rossi et al. (2015) bestätigen die beschriebenen Beobachtungen im Kontext der SPH-Analyse von generischen Einzelwirbelsystemen, nämlich dem Gresho Wirbel und dem Lamb-Oseen Wirbel. Diese ähneln dem Modell des Rankine-Wirbels mit dem wesentlichen Unterschied, dass im Falle des Gresho Wirbels der Potentialwirbelanteil in der Umfangsgeschwindigkeit linearisiert wird und im Falle des Lamb-Oseen Wirbels viskose Effekte berücksichtigt werden. Beide Studien zeigen auf, dass die SPH-Methode dazu neigt, den Umfangsimpuls zu schnell radial nach außen zu diffundieren, wobei der Effekt mit steigender Re Zahl bei gleicher räumlicher Auflösung intensiviert wird. Rossi et al. (2015) demonstrieren darüber hinaus, dass dieses Verhalten mit numerisch induzierten Wirbelstärkeschwankungen gemäß Gl. (2.3) verknüpft ist.

Anhand der Resultate für generische Einzelwirbelsysteme lässt sich vermuten, dass sich die Situation für Turbulenz, also für stark nichtlinear interagierende Wirbelsysteme, die über einen Kaskadenprozess zusammenhängen, nicht verbessert. Dies wird in der Arbeit von Bauer et al. (2012) für ein stationäres, turbulentes Strömungsfeld diskutiert. Da subsonische Turbulenz im Fokus der vorliegenden Arbeit steht, wird dieses Thema detaillierter in Abschnitt 2.3 aufgegriffen.

2.2.2 Numerische Dispersion

Während numerische Diffusion eine Umverteilung und Dissipation von kinetischer Energie im Strömungsfeld verursacht, werden durch dispersive Fehler einzelne ebene Wellen in ihrer Phase ω_{ph} verändert. Dies ist insbesondere für turbulente Strömungen moderater Turbulenzintensität interessant, in der die kinetische Energie der turbulenten Schwankungen \mathbf{v}' gegenüber der statistischen mittleren Strömung $\langle \mathbf{v} \rangle$ klein ist. Werden diese Schwankungen mit Wellenzahlvektor \mathbf{k} und Betrag $k := \sqrt{\mathbf{k}^2}$ als Fourier-Moden und somit ebene Wellen interpretiert, wie es für homogen isotrope Turbulenz üblich ist (Bailly et al., 2015), werden die Schwankungen gemäß der Taylor-Hypothese lediglich mit der mittleren Strömung konvektiert (Yalla et al., 2021a). Folglich ist es wichtig, dass dispersive Fehler bei der Diskretisierung des nichtlinearen konvektiven Terms möglichst klein sind, um den Energietransfer von Schwankungen zu den kleineren Skalen hin nicht zu inhibieren (Yalla et al., 2021b).

Obwohl der konvektive Term aufgrund des Lagrangeschen Charakters der SPH-Methode nicht explizit diskretisiert wird, wäre es dennoch falsch daraus zu schließen, dass numerische Dispersion in dem Verfahren keine Rolle spielt (Tartakovsky et al., 2015). Es ist wichtig einzusehen, dass in der SPH-Methode Konvektion eine Folge der Kräfte auf der rechten Seite der Impulsgleichung (2.1) ist. Demnach ist das Dispersionverhalten der gesamten diskretisierten Impulsgleichung von Interesse anstelle des Dispersionsverhaltens des Konvektionsoperators. Die Anzahl der Studien in der SPH-Literatur, die dieses Thema behandeln, ist stark begrenzt (Cha et al., 2003; Dehnen et al., 2012; Monaghan, 2005; Morris, 1996; Rasio, 2000; Read et al., 2010). Allerdings wird aus diesen Arbeiten deutlich, dass sich Dispersionbeziehungen gegenüber konventionellen Methoden stark verkomplizieren. Dies soll exemplarisch anhand einer ebenen Welle erläutert werden.

Für eine ebene Welle der Wellenzahl k , die mit der Phasengeschwindigkeit c_{ph} transportiert wird, lautet die ideale Dispersionsrelation $\omega_{ph}(k) = c_{ph}k$. Sie spiegelt einen linearen Zusammenhang zwischen der Kreisfrequenz ω_{ph} und der Wellenzahl k wider. Wird dieses Problem beispielsweise mittels der Finiten-Differenzen-Methode (FDM) behandelt und der Konvektionsoperator mit einem konventionellen zentralen Schema zweiter Ordnung approximiert, ergibt sich eine effektive Dispersionsrelation, die sich von der idealen unterscheidet. Sie ist abhängig von der Auflösung Δl und induziert Dispersionsfehler durch Phasenveränderung. Nach Fröhlich (2006) und Yalla et al. (2021a) gilt

$$\omega_{ph,eff}(k, \Delta l) = c_{ph} k_{eff}(k, \Delta l) = c_{ph} \frac{\sin(k\Delta l)}{\Delta l}, \quad (2.4)$$

wobei k_{eff} die effektive resultierende Wellenzahl beschreibt. In Abb. 2.4 ist der Zusammenhang zwischen effektiver Wellenzahl k_{eff} und vorgegebener Wellenzahl k gemäß Gl. (2.4) dargestellt. Die Achsen sind mit der Wellenzahl $k_{res} = 2\pi/(2\Delta l) = \pi/\Delta l$ nach dem Nyquistkriterium normiert. Es ist ersichtlich, dass ein hinreichend genauer Transport ebener Wellen für dieses FDM Verfahren nur für kleine $k\Delta l/\pi < 0.25$ möglich ist. Mit der Definition der Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ entspricht dies ebenen Wellen der Wellenlänge $\lambda > 8\Delta l$. Für kleinere Wellen werden die Fehler schnell unverträglich groß, sodass Wellen mit $\lambda < 8\Delta l$ nicht mehr vertrauenswürdig aufgelöst werden können.

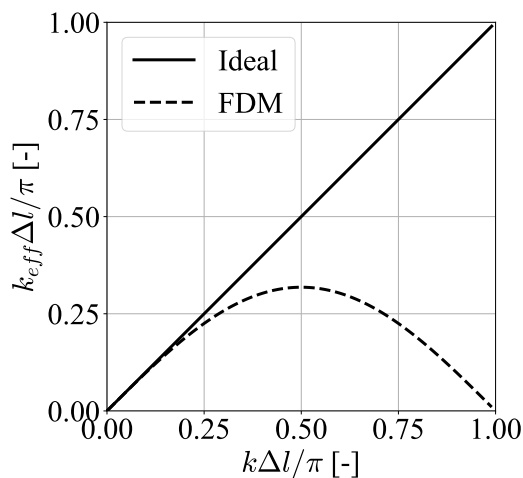


Abbildung 2.4: Veranschaulichung des Dispersionsverhaltens des Konvektionsoperators von ebenen Wellen für ein zentrales FDM Schema zweiter Ordnung.

Eine simple Dispersionsrelation gemäß Gl. (2.4) ist im SPH-Kontext nicht existent. Die wohl ausführlichste Dispersionsstudie von Dehnen et al. (2012) zeigt eindeutig auf, dass Dispersionsfehler in der SPH-Methode nicht nur von dem Partikelabstand Δl und dem exakten Schema abhängen. Es existierten im Kontrast zu konventionellen Verfahren zusätzliche Abhängigkeiten, nämlich von der vorgegebenen Referenzdichte ρ_{ref} , die die Trägheit der Partikel beeinflusst, dem Referenzdruck p_{ref} , der lokal eine Regularisierung der Partikelanordnung bewirkt (Colagrossi

et al., 2012; Price, 2012), der Nachbaranzahl N_{ngb} , sowie der konkreten Gestalt des Kernels W_h . Dies impliziert folgenden funktionalen Zusammenhang

$$\omega_{ph,eff}(k, \Delta l, N_{ngb}, \rho_{ref}, p_{ref}, W_h) = c_{ph} k_{eff}(k, \Delta l, N_{ngb}, \rho_{ref}, p_{ref}, W_h) . \quad (2.5)$$

Anhand von Gl. (2.5) wird deutlich, dass aufgrund der vielen Abhängigkeiten eine Bewertung von Dispersionfehlern in konkreten Strömungssituationen in SPH erschwert wird. Generell ist aber anzunehmen, dass die Fehler in unteraufgelösten Strömungen eine signifikante Rolle einnehmen. Sie bedürfen in Zukunft deutlich stärkerer Aufmerksamkeit für spezielle Strömungssituationen, wie im Rahmen dieser Arbeit noch aufgezeigt werden wird.

2.3 SPH-Analysen subsonischer turbulenter Strömungen

Mit den vorherigen Ausführungen zu numerischen Fehlern und deren Auswirkungen auf Strömungen lässt sich die bislang systematischste Studie zur subsonischen Turbulenz im SPH-Kontext von Bauer et al. (2012) einordnen. Zwar existieren auch andere SPH-Analysen zur subsonischen Turbulenz (Adami et al., 2012; Dalrymple et al., 2006; Hu et al., 2015; Monaghan, 2011; Robinson et al., 2012; Violeau et al., 2007), allerdings sind diese in ihrem Umfang nicht so weitreichend.

In den Arbeiten von Dalrymple et al. (2006), Hu et al. (2015), Monaghan (2011), Robinson et al. (2012) und Violeau et al. (2007) ist der Fokus vorwiegend auf zweidimensionale turbulente Strömungen gerichtet, die sich qualitativ gänzlich von natürlich vorkommenden dreidimensionalen turbulenten Strömungen unterscheiden (Boffetta et al., 2012; Sagaut, 2006). Darüber hinaus berücksichtigen die Arbeiten von Dalrymple et al. (2006) und Violeau et al. (2007) Turbulenzmodelle, die lediglich für dreidimensionale Turbulenz gültig sind. Diese Inkonsistenz mindert deren Aussagekraft zusätzlich. Die vorherigen Kritikpunkte betreffen zwar nicht die Arbeit von Adami et al. (2012), dort wird allerdings die globale Dynamik dreidimensionaler zerfallender Turbulenz untersucht, ohne auf das resultierende spektrale Verhalten einzugehen. Letzteres wäre hinsichtlich eines Nachweises des Multiskalencharakters der Turbulenz aufschlussreich.

Da genau diese Defizite in der Studie von Bauer et al. (2012) eliminiert werden, ist sie als Pionierarbeit anzusehen. Darin werden stationäre, turbulente Felder innerhalb eines periodischen Einheitswürfels bei $Ma \approx 0.3$ mittels einer spektralen Anregung durch einen Volumenquellterm erzeugt. Diese Anregung führt im Idealfall zu einer statistischen Verteilung der kinetischen Energie, die mit den klassischen Theorien von Kolmogorov (1941), Obukhov (1941), Onsager (1945) und Heisenberg (1948) konsistent ist. Es werden keine expliziten Turbulenzmodelle eingesetzt und Vergleichsrechnungen mit konventionellen Gitterverfahren bei unterschiedlicher Zell-/Partikelzahl (Auflösung) durchgeführt. Demnach untersuchen die Autoren unteraufgelöste Direkte Numerische Simulationen (uDNS).

Die wesentliche qualitative Beobachtung, die die Autoren machen, ist in Abb. 2.5 dargestellt. Es werden zwei Schnittbilder von Momentaufnahmen der quadrierten Wirbelstärke ω^2 (Rotationsenergie) bei gleicher numerischer Auflösung und turbulenter Anregung verglichen. Das

linke Feld repräsentiert dabei ein konventionelles Gitterverfahren und das rechte Feld eine numerisch gut kalibrierte SPH-Lösung. Es fällt auf, dass die gitterbasierte Lösung gegenüber der SPH-Lösung deutlich feinere kohärente Wirbelstrukturen und generell weniger numerisches Rauschen aufweist. Die Autoren führen dies argumentativ auf SPH-Fehler nullter Ordnung zurück, die durch die sich stetig ändernde Lagrangesche Partikelanordnung verursacht werden. Wie in Abschnitt 2.2.1 dargelegt wurde, resultiert dies in Scherschichten und Wirbeln bei hoher Re in starken numerischen Diffusionseffekten, die letztendlich auch eine Dissipation der kinetischen Energie bewirken. Dies wird anschaulich in Abb. 2.5 illustriert.

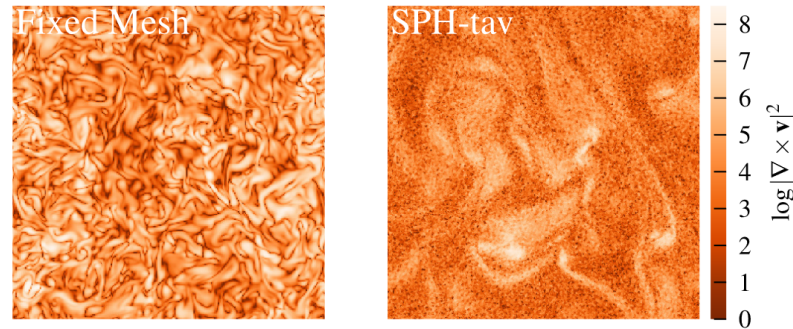


Abbildung 2.5: Methodenvergleich für zwei Momentaufnahmen der quadrierten Wirbelstärke ω^2 im Fall stationärer, angeregter Turbulenz. Die Abbildung wurde mit freundlicher Genehmigung der *Oxford University Press* aus der Arbeit von Bauer et al. (2012) reproduziert.

Um die quantitativen Auswirkungen auf die Statistik der turbulenten Schwankungen zu umreißen, ist es zunächst erforderlich, zu erläutern, wie diese gemessen wird und welche physikalische Idealform diese annehmen sollte. Die wohl wichtigste Metrik in diesem Zusammenhang ist die spektrale Energiedichte $E(k)$, die die Verteilung der volumengemittelten kinetischen Energie e_v der Schwankungen \mathbf{v}' über die verschiedenen Wellenzahlen k beschreibt. Die beiden Größen sind miteinander gemäß Bailly et al. (2015) über die Beziehung

$$e_v := \frac{1}{2} \langle \mathbf{v}'^2 \rangle_V = \int_0^\infty E(k) dk \quad (2.6)$$

verknüpft. Die physikalische Idealgestalt der spektralen Energiedichte für homogen isotrope Turbulenz ist in Abb. 2.6 dargestellt und quantifiziert den turbulenten Kaskadenprozess, der metaphorisch erstmals von Richardson (1922) beschrieben wurde. Sie ist mit e_v normiert und lässt sich in drei wesentliche Bereiche untergliedern. Diejenigen Schwankungen, die dem sogenannten Inertialbereich angehören und mit $E(k) \sim k^{-5/3}$ skalieren, transportieren im statistischen Mittel kinetische Energie von den großen zu den kleinen Strukturen, demnach von kleinen zu großen Wellenzahlen k . Die Entschlüsselung dieses Bereiches, der als eine zentrale Referenz zur Validierung von numerischen Methoden in der Strömungsmechanik gilt, wurde von den Arbeiten von Kolmogorov (1941), Obukhov (1941), Onsager (1945) und Heisenberg (1948) geprägt. Neue theoretische und numerische Arbeiten von McMullen et al. (2022), Bell et al. (2022) und Bandak et al. (2022) zeigen auf, dass für große k nahe der Wellenzahl der mittleren freien Weglänge k_{mikro} , thermische Fluktuationen dominant werden und zu einem Skalierungsgesetz

von $E(k) \sim k^2$ führen. Dieser mesoskopische Bereich, der den Übergang von der makroskopischen zur mikroskopischen Physik beschreibt, wird als thermischer Bereich bezeichnet. Er wird modellbedingt nicht von der Navier-Stokes Gleichung erfasst (McMullen et al., 2022). Obwohl letzterer Fakt die Irrelevanz dieses Bereiches für die numerische Strömungsmechanik implizieren könnte, muss betont werden, dass es letztendlich molekulare Geschwindigkeitsfluktuationen sind, die über makroskopische Skalen gemittelt, den verbleibenden exponentiell abfallenden Übergangsbereich begründen. In diesem sogenannten Dissipationsbereich werden viskose Effekte dominant und die kinetische Energie der Schwankungen wird in thermische Energie überführt (Bailly et al., 2015). Letztere repräsentiert makroskopisch die molekularen Geschwindigkeitsfluktuationen (Hardy, 1982; Irving et al., 1950).

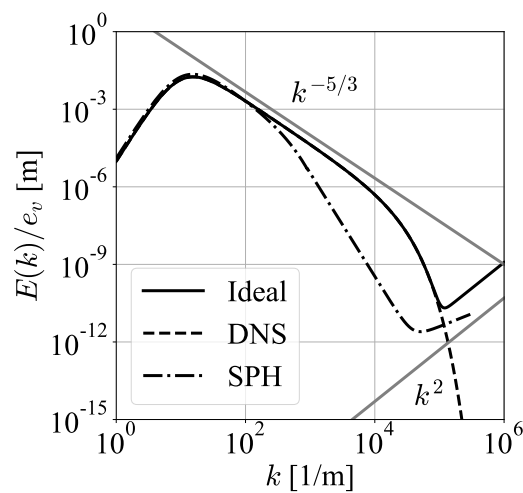


Abbildung 2.6: Schematischer Verlauf der spektralen Energiedichte $E(k)$ im physikalischen Idealfall gegenüber den resultierenden Verläufen einer gitterbasierten DNS-Lösung und einer SPH-Berechnung mit identischer Auflösung.

Basierend auf dieser spektralen Idealverteilung können die quantitativen Resultate der Studie von Bauer et al. (2012) nun nachvollzogen werden. Sie sind ebenfalls schematisch in Abb. 2.6 dargestellt. Wie die Autoren herausarbeiten, sind die gitterbasierten Simulationen in der Lage, mit steigender Auflösung den Inertialbereich zunehmend aufzulösen und gegen eine ideale DNS mit überschüssigem Dissipationsbereich zu konvergieren. Im Kontrast dazu weisen die resultierenden SPH-Spektren bei gleicher Auflösung ein starkes Energiedefizit im Inertialbereich auf. Dieses äußert sich durch eine Abweichung vom $E(k) \sim k^{-5/3}$ Gesetz. Es ist darüber hinaus interessant zu beobachten, dass für große Wellenzahlen sogar ein erneuter Anstieg der spektralen Energiedichte erfolgt, der qualitativ an den thermischen Bereich idealer Spektren erinnert. Dieser Anstieg repräsentiert fehlerbedingte Schwankungen auf der Kernelskala und ist gemäß Abschnitt 2.2.1 die quantitative Manifestation des exzessiven numerisch diffusiven Verhaltens, dessen Wirkung anschaulich in Abb. 2.5 dargestellt ist. Die Autoren stellen des Weiteren fest, dass eine steigende Auflösung in der SPH-Methode nicht zur Ausdehnung des abgebildeten Inertialbereichs führt und auch die Schwankungen auf der Kernelskala nicht verschwinden. Die

qualitative Form des Spektrums bleibt somit durch die Auflösung unberührt, woraus die Autoren schließen, dass die Methodik im Falle subsonischer Turbulenz ungeeignet ist. Augenscheinlich konvergiert das Verfahren nicht, selbst mit Berücksichtigung höherer Nachbarzahlen innerhalb des Kerns N_{ngb} .

Mittlerweile ist bekannt, dass die Aussage der Autoren zur Konvergenz nach heutigem Kenntnisstand nur bedingt richtig ist. Die Wahl des Kerns ist für numerische Konvergenz entscheidend. Ein Indiz dafür, dass der gewählte Spline-Kernel in der Studie unangemessen war, folgt aus der Beobachtung von entstehenden Partikelpaaren für eine steigende Nachbarzahl N_{ngb} . Dieses Phänomen wird im folgenden Abschnitt erläutert, der sich mit der numerischen Konvergenz der SPH-Methode befasst.

2.4 Numerische Konvergenz in SPH

Die Konvergenz der SPH-Methode wurde in verschiedenen Arbeiten detailliert untersucht (Amicarelli et al., 2011; Dehnen et al., 2012; Quinlan et al., 2006; Sigalotti et al., 2021; Vila, 1999; Zhu et al., 2015). All diese Arbeiten sind sich dahingehend einig, dass formale Konvergenz an das tatsächliche Strömungsfeld in der kernelbasierten SPH-Methode nur stattfinden kann, wenn $D_K \& \Delta l \rightarrow 0$ und $N_{ngb} \rightarrow \infty$. Anschaulich impliziert dies, dass die beiden Auflösungsskalen der Methode zur Verbesserung der numerischen Lösung beide kleiner werden müssen. Es muss allerdings gewährleistet werden, dass der Partikelabstand Δl schneller als der Kerneldurchmesser D_K abnimmt, um zunehmend mehr Nachbarn N_{ngb} bei der Approximation zu berücksichtigen. Im Gegensatz zu konventionellen Gittermethoden ist es somit zur Verbesserung der numerischen Approximation nicht ausreichend, lediglich Δl kleiner zu wählen. In Anlehnung an die Arbeit von Zhu et al. (2015), soll das Konvergenzverhalten exemplarisch anhand der Approximation des Dichtefeldes ρ einer Strömung erläutert werden.

Nach gegenwärtiger Auffassung besteht die SPH-Approximation des Dichtefeldes aus zwei Teilapproximationen. Die erste dieser Approximationen besteht in der Annäherung des Dichtefeldes mit dem eigenen Faltungsintegral des Kerns W_h . Hierbei bezeichnen \mathbf{x} und \mathbf{y} zwei unterschiedliche Positionen im Raum, $d\mathbf{y}$ ein differentielles Volumenelement, die Größe V_x das Kerngebiet und t die Zeit. Die Näherung lautet dann

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} \rho(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} + \mathcal{O}(D_K^2), \quad (2.7)$$

wobei die Fehler 2. Ordnung im Kerneldurchmesser D_K sind. Die zweite Approximation ergibt sich aus der Quadratur des Faltungsintegrals durch eine diskrete Summe über N_{ngb} Partikel mit konstanter Masse M . Befindet sich Partikel i an der Stelle \mathbf{x}_i und die Nachbarn j an der Stelle \mathbf{y}_j ergibt sich nach Zhu et al. (2015)

$$\rho(\mathbf{x}_i, t) = M \sum_{j=1}^{N_{ngb}} W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j) + \mathcal{O}(D_K^2) + \mathcal{O}(N_{ngb}^{-\gamma}), \quad \gamma \in \left[\frac{1}{2}, 1\right] \quad (2.8)$$

mit den Extremwert $\gamma = \frac{1}{2}$ und $\gamma = 1$, die die Quadraturfehler bei einer rein zufälligen und geordneten Partikelverteilung repräsentieren.

Anhand von Gl. (2.8) lässt sich erkennen, dass die SPH-Approximation zwei Fehlerterme enthält, die explizit von der Kernelgröße D_K und der Nachbarzahl N_{ngb} abhängen. Dieses Verhalten ist qualitativ auch auf SPH-Approximationen von räumlichen Differentialoperatoren übertragbar und ein zentrales Unterscheidungsmerkmal zu konventionellen Gittermethoden. Die Qualität der Lösung hängt nicht direkt von dem mittleren Partikelabstand Δl ab, wie auch in Kapitel 5 herausgearbeitet wird. Dennoch ist es gängige Praxis, wie in konventionellen Verfahren, von einer besseren Auflösung bei kleinerem Δl , unter der Bedingung $D_K/\Delta l = konst \Rightarrow N_{ngb} = konst$ zu sprechen. Hierdurch wird implizit der erste Fehlerterm für die Kernelapproximation in Gl. (2.8) reduziert, der zweite Fehlerterm für die Quadratur allerdings vernachlässigt. Nachweislich können dadurch numerische Fehler mit kleinerem Δl sättigen (Hopkins, 2015) oder im Extremfall sogar erneut ansteigen, da Kernelschwankungen intensiviert werden können (Quinlan et al., 2006). Um die Fehler der Kernelapproximation und der Quadratur in gleichem Maß zu senken, haben Zhu et al. (2015) ein Skalierungsgesetz entwickelt, das besagt, dass numerische Konvergenz nur möglich ist, wenn die Gesamtanzahl N und die Nachbarzahl N_{ngb} das Verhältnis

$$\frac{N_{ngb}}{\sqrt{N}} \sim 1 \quad (2.9)$$

einhalten. Wird der Kerneldurchmesser D_K in Relation zu wichtigen Strömungsskalen gewählt, kann die Anpassung der Nachbarzahl N_{ngb} ausschließlich über den mittlere Partikelabstand Δl erfolgen, der durch Gl. (2.9) eingeschränkt ist. Insofern ist es entscheidend festzuhalten, dass der mittlere Partikelabstand Δl in der SPH-Methode zur Kalibrierung der Nachbarzahl N_{ngb} dient, jedoch kein direktes räumliches Auflösungsmaß wie in konventionellen Gitterverfahren darstellt.

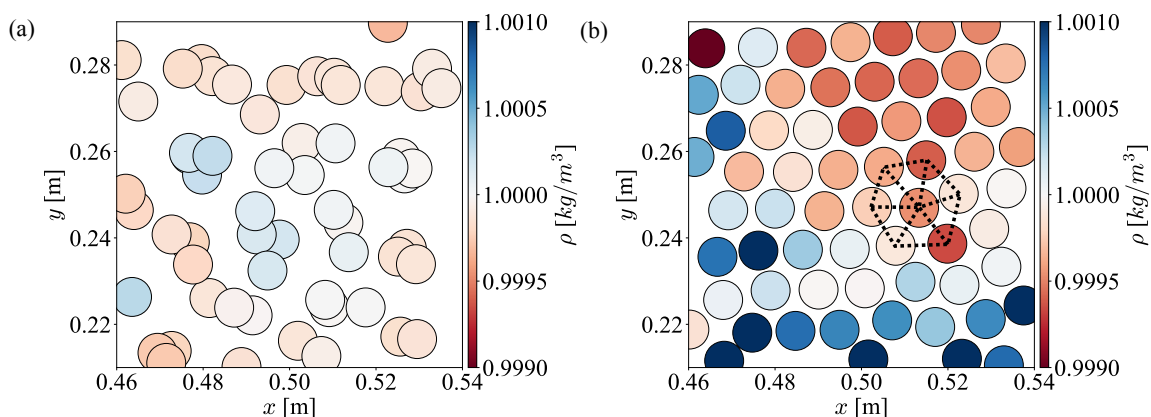


Abbildung 2.7: Veranschaulichung von SPH-Partikelkonfigurationen im Gleichgewicht für große N_{ngb} Werte und unterschiedliche Kernelklassen. (a) Spline-Kernel. (b) Wendland Kernel. Die Farbe repräsentiert die Dichte ρ der Partikel.

Diese Skalierungsgesetz in Gl. (2.9) war zur Zeit der Arbeit zur subsonischen Turbulenz von Bauer et al. (2012) noch nicht bekannt. Dennoch muss positiv angemerkt werden, dass die Autoren sowohl die Sensitivität der Lösungen bezüglich N als auch N_{ngb} untersucht haben. Wie schon zuvor geschildert, wurde jedoch bei $N = konst$ und steigendem N_{ngb} eine Instabilität initiiert, die eine Partikelpaarung verursacht und effektiv numerische Konvergenz verhindert (Abb. 2.7 (a)). Die Ursache hierfür wurde erst kurz darauf durch die Arbeit von Dehnen et al. (2012) geklärt. Dies lässt sich thermodynamisch anhand der Gibbsschen Fundamentalgleichung für die massenspezifische innere Energie u und der Evaluation der SPH-approximierten Dichte gemäß Gl. (2.8) verstehen. Die Autoren platzieren hierfür zunächst SPH-Partikel statisch in einer hexagonal dichtesten Packung. Diese Konfiguration entspricht einer stabilen Gleichgewichtslage der Partikelanordnung (Netz in Abb. 2.7 (b)) und wird auch in SPH-Simulationen von dem diskretisierten Druckterm angestrebt (Colagrossi et al., 2012; Price, 2012). Anschließend wird ρ in Abhängigkeit von N_{ngb} für zwei gängige Kernelklassen evaluiert, nämlich den Spline- und den Wendland Kerneln. Die qualitativen normierten Dichteverläufe sind in Abb. 2.8 visualisiert.

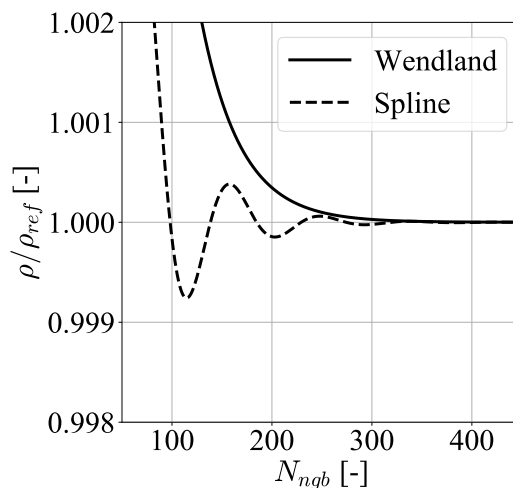


Abbildung 2.8: Schematischer Verlauf der normierten SPH-Dichte für Spline- und Wendland Kernel gemäß Dehnen et al. (2012).

Während die mit dem Wendland Kernel berechnete Dichte monoton mit steigendem N_{ngb} abfällt, ist auffällig, dass die Klasse der Spline-Kernel ein schwingendes Verhalten mit lokalen Minima aufzeigt. Diese Minima definieren gemäß der Gibbsschen Fundamentalgleichung für die innere Energie thermodynamische Gleichgewichtslagen. Für die isentropen Strömungen, die im Rahmen dieser Arbeit gemäß Gl. (2.1) betrachtet werden, lautet die Beziehung in Abhängigkeit von N_{ngb}

$$\frac{du}{dN_{ngb}} = \frac{p}{\rho^2} \frac{d\rho}{dN_{ngb}}. \quad (2.10)$$

Da im thermodynamischen Gleichgewicht bekanntlich u minimal wird, muss auch gemäß Gl. (2.10) die Dichte ρ minimal werden. Infolgedessen lässt sich nachvollziehen, weshalb eine weitere Erhöhung von N_{ngb} aus einem lokalen Minimum heraus bei Spline-Kerneln die Paarung von

SPH-Partikeln initiiert. Es wird eine thermodynamische Triebkraft verursacht, die in Richtung lokales Minimum strebt und dadurch eine größere Partikelunordnung verursacht (vgl. Abb. 2.7 (a) und (b)). Schlussendlich resultiert dies in größeren Approximationsfehlern und der Tatsache, dass Spline-Kernel praktisch die Konvergenz des SPH-Verfahrens verhindern. Generell ist deshalb von deren Nutzung abzuraten. Diese Beobachtungen relativieren folglich die Konvergenzaussage von Bauer et al. (2012) für subsonische Turbulenz in Anbetracht des gewählten Spline-Kernels.

In der Studie von Zhu et al. (2015) wird dieses Wissen zur Konvergenz und Paarungsinstabilität aufgegriffen, um die numerischen Experimente von Bauer et al. (2012) mit dem Wendland C4 Kernel (Dehnen et al., 2012) und dem Skalierungsgesetz in Gl. (2.9) zu wiederholen. Tatsächlich können die Autoren nun eine schwache Konvergenz im Inertialbereich für steigende Auflösung beobachten. Dennoch bleibt der qualitative Verlauf der SPH-Spektren erhalten (Abb. 2.6). Eine zentrale Schwäche der Studie ist, dass die Gesamtpartikelanzahl lediglich zwischen $N = 64^3$ und $N = 128^3$ variiert wird, was die quantitative Aussagekraft einschränkt. Es wäre im Sinne der Vergleichbarkeit zur Studie von Bauer et al. (2012) erstrebenswert gewesen, äquivalente Gesamtpartikelzahlen von bis zu $N = 512^3$ zu untersuchen.

2.5 SPH-LES-Verfahren

Bei der numerischen Berechnung von turbulenten Strömungen mit konventionellen Gittermethoden ist es inzwischen gängige Praxis, das Verfahren der sogenannten Large Eddy Simulation (LES) einzusetzen. Dabei werden ausschließlich die großen Turbulenzstrukturen berechnet und der Effekt der kleinen, unaufgelösten Strukturen modelliert (Fröhlich, 2006; Moser et al., 2021; Sagaut, 2006). Die Separation der aufgelösten von den vernachlässigten Skalen erfolgt über einen Tiefpassfilter, der meist implizit über die Gitterzellen realisiert wird (Fröhlich, 2006). Schon vor drei Jahrzehnten wurde von Bicknell (1991) erkannt, dass die SPH-Methode und LES-Verfahren sich dahingehend ähneln, dass der SPH-Kernel ebenfalls als Tiefpassfilter interpretiert werden kann. Obwohl die Eignung der SPH-Methode zur Berechnung turbulenter Strömungen anzuzweifeln ist (Abschnitt 2.3), hat dies dennoch einige Forscher in der SPH-Gemeinschaft veranlasst die Grundgleichungen der LES-Verfahren mittels der SPH-Methode zu lösen (Dalrymple et al., 2006; Lo et al., 2002; Mayrhofer et al., 2015; Violeau et al., 2007). Nachfolgend werden die Kernpunkte dieser Studien diskutiert und die Kombination als SPH-LES-Methode bezeichnet.

In der Studie von Lo et al. (2002) wird ein SPH-LES-Verfahren vorgestellt, das dazu herangezogen wird, um die Dynamik von zweidimensionalen Oberflächenwellen zu berechnen, wie diese in Küstenregionen auftreten. Zwar sind die Resultate im Hinblick auf die Validierung der Wellendynamik zufriedenstellend, allerdings ist das eingesetzte Smagorinsky-Modell für die Subfilterspannungen inkompatibel mit der Berechnung von zweidimensionaler Turbulenz (Bofetta et al., 2012; Sagaut, 2006). Außerdem ist das Modell nicht in der Lage, das asymptotische Verhalten in Wandnähe wiederzugeben (Sagaut, 2006). Ferner wird die Wahl des Modells für die Subfilterspannungen in keinsten Weise legitimiert, sondern mutmaßlich aus Gründen der Einfachheit getroffen. Eine Validierung des Modells für die Subfilterspannungen fehlt gänzlich.

Die Arbeit von Dalrymple et al. (2006) ist in dieser Hinsicht nahezu identisch. Auch hier wird die Dynamik von Küstenwellen analysiert, wobei zumindest zwei dreidimensionale Rechnungen mit sehr grober Auflösung durchgeführt werden. Die Autoren stellen fest, dass ein aussagekräftiges Fazit nur für höher aufgelöste Berechnungen getroffen werden könnte. Die Arbeit von Violeau et al. (2007) stellt zu den beiden vorherigen Arbeiten insofern einen Fortschritt dar, dass zumindest erkannt wird, dass das Smagorinsky-Modell für die Subfilterspannungen nur für dreidimensionale Turbulenz eine sinnvolle Wahl sein kann. Dennoch erfolgt keine Diskussion über die Sinnhaftigkeit des Modells im SPH-Kontext. Eine stichprobenartige Validierung des Modells wird anhand einer generischen turbulenten Kanalströmung vorgenommen. Dabei wird das Ziel verfolgt, das logarithmische Wandgesetz für die zeitlich mittlere Strömung nachzuweisen. Letzteres wird gut bis zur unmittelbaren Wandnähe erfasst, obwohl keine Dämpfungsfunktion eingesetzt wird, die in Kombination mit dem Smagorinsky-Modell in konventionellen Methoden erforderlich wäre. Des Weiteren wird eine dreidimensionale Berechnung einer kollabierenden Wassersäule vorgenommen, bei der der Verlauf der Wasseroberfläche derjenigen aus einer experimentellen Untersuchung nahekommt. Dennoch wird in der Arbeit von Violeau et al. (2007) festgehalten, dass keine eindeutigen Schlüsse gezogen werden können, da weitere Berechnungen notwendig wären, um die Robustheit der Resultate nachzuweisen. In der Arbeit von Mayrhofer et al. (2015) wird ebenfalls eine turbulente Kanalströmung mittels eines SPH-LES-Verfahrens untersucht und quantitativ mit der einer DNS-Lösung von Hoyas et al. (2006) verglichen. Es wird in Analogie zu gitterbasierten Verfahren eine Dämpfungsfunktion für die Wand eingeführt und es werden verbesserte Randbedingungen für die Wand vorgegeben. Dennoch weicht die Statistik stark von derjenigen der DNS ab und die Autoren schließen daraus, dass das SPH-LES-Verfahren, vermutlich auflösungsbedingt, nicht in der Lage ist, die Kanalströmung gut wiederzugeben.

Es ist wichtig zu betonen, dass die aufgeführten Arbeiten alle komplexe Strömungsprobleme behandeln, in denen die SPH-Methode weitere Unsicherheiten aufweist, die weit über das ledigliche Abbilden von Turbulenz hinausgehen. Exemplarisch seien hierfür Randbedingungen für wandbegrenzte Strömungen genannt, die bis dato eine der Hauptherausforderungen für die SPH-Methode darstellen (Vacondio et al., 2021). Außerdem sind die Untersuchungen vollkommen dissoziiert von den Konvergenzbetrachtungen in Abschnitt 2.4. Auf Basis der stichprobenartigen Berechnungen wird lediglich geschlossen, dass insgesamt mehr Partikel erforderlich wären, um genauere Lösungen zu erhalten. Es wird aber nicht erwähnt, dass die Anzahl der Nachbarn im Kernel N_{ngb} eine Schlüsselrolle für die SPH-Methode spielt.

Obwohl die Einsichten von Bauer et al. (2012) sowie das numerische Konvergenzverhalten (Abschnitt 2.4) auch nicht in den neuen SPH-LES-Studien von Di Mascio et al. (2017) und Antuono et al. (2021a) thematisiert werden, stellen diese Arbeiten dennoch einen nennenswerten Fortschritt dar. Die Validierung der SPH-LES-Verfahren erfolgt nämlich erstmals anhand generischer turbulenter und periodischer Strömungen, die weitere physikalische Unsicherheiten eliminieren. In der Arbeit von Di Mascio et al. (2017) wird die Ansicht vertreten, dass SPH-LES-Verfahren ein solideres Fundament benötigen als die Intuition der formalen Ähnlichkeit zwischen SPH-Kernel und LES-Filter. Die Autoren argumentieren deshalb, dass die Konzepte mathematisch dahingehend unterschiedlich sind, dass der SPH-Kernel lediglich in räumlichen Koordinaten operiert,

während der LES-Filter auch zeitliche Schwankungen berücksichtigen soll. Diese Verallgemeinerung des LES-Filters ist zwar nach Sagaut (2006) möglich, wird aber kaum praktiziert. Infolge dieser Unterscheidung entstehen bei der Filterung der fluiddynamischen Transportgleichungen neue Terme durch die zusätzliche Zeitfilterung, die gemäß der Autoren zwar SPH-spezifisch sein sollen, aber nachweislich gegenüber den anderen Termen vernachlässigbar sind (Di Mascio et al., 2017). Der größte Unterschied zu vorangegangenen Arbeiten besteht schlussendlich darin, dass auf die Favre-Mittelung (Bilger, 1975) verzichtet wird. Aus dieser LES-Sicht lässt sich der in dieser Arbeit interessierende Transportgleichungssatz in Gl. (2.1) wie folgt umschreiben

$$\begin{aligned}\frac{d\bar{\rho}}{dt} &= -\bar{\rho}\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{T}_\rho \\ \bar{\rho}\frac{d\bar{\mathbf{v}}}{dt} &= -\nabla\bar{p} + \eta\Delta\bar{\mathbf{v}} + \mathbf{T}_\mathbf{v} \\ \bar{p} &= p_{ref} + c_s^2(\bar{\rho} - \rho_{ref})\end{aligned}\tag{2.11}$$

mit den Subfilterbeiträgen \mathbf{T}_ρ in der Kontinuitätsgleichung und $\mathbf{T}_\mathbf{v}$ in der Impulstransportgleichung. Der Überstrich symbolisiert gefilterte Variablen. Die Neuheit des SPH-LES-Ansatzes von Di Mascio et al. (2017) manifestiert sich somit mathematisch in dem Term \mathbf{T}_ρ , der als Diffusionsterm in der Dichte modelliert wird. Solch ein empirischer Dichtediffusionsterm wurde völlig unabhängig von turbulenten Strömungen schon deutlich früher vorgeschlagen (Antuono et al., 2010; Marrone et al., 2011; Molteni et al., 2009), um Dichteschwankungen, die bei einer kleinen N_{ngb} Wahl entstehen (Zhu et al., 2015), sowie deren schädliche Auswirkung auf die Lagrange-sche Partikelbewegung, zu reduzieren. Insofern werden in diesem Ansatz zumindest Symptome der Vernachlässigung von N_{ngb} aktiv bekämpft. Die Verbesserung wird insbesondere für die Verteilung der spektralen Energiedichte $E(k)$ zweidimensionaler periodischer turbulenter Strömungen in Kombination mit dem Smagorinsky-Modell für $\mathbf{T}_\mathbf{v}$ demonstriert. Tatsächlich können numerische Schwankungen auf der Kernelskala reduziert werden, wovon die Statistik der Turbulenz generell profitiert. Antuono et al. (2021a) verbessern diesen SPH-LES-Ansatz nochmals durch ein weiteres empirisches SPH-Verfahren zur Reduktion von künstlichen Schwankungen. In dieser Arbeit wird zusätzlich ein Partikelverschiebungsalgorithmus (engl. *shifting*) eingeführt. Die Idee dabei ist, die Rückwirkung der Partikelanordnung auf numerische Fehler zu adressieren (Price, 2012) und die Partikel, entkoppelt von ihrer eigenen Dynamik, in eine möglichst reguläre Anordnung zu überführen. Dies führt letztendlich zu einer quasi-Lagrangenschen Partikelbewegung und weiteren Termen in Gl. (2.11), die durch Konsistenz bedingt sind (Antuono et al., 2021b; Oger et al., 2016). Die Validierung erfolgt abermals mit dem Schwerpunkt auf zweidimensionale turbulente Strömungen.

Trotz der Tatsache, dass die Autoren zumindest durch empirische Maßnahmen versuchen, das Thema der numerischen Konvergenz zu adressieren, sind die stichprobenartigen dreidimensionalen Simulationen weit fern von belastbar. Die entdimensionierten Spektren für die zerfallende homogen isotrope Turbulenz sind in Abbildung 2.9 dargestellt. Die Spektren in Abb. 2.9 (a) sind zudem vertikal verschoben, um den vermeintlich abgebildeten Inertialbereich durch die schwarze Gerade zu verdeutlichen. In der Studie von Di Mascio et al. (2017) werden die spektralen Energiedichten für drei unterschiedliche Auflösungen $N \in \{64^3, 128^3, 256^3\}$ ermittelt.

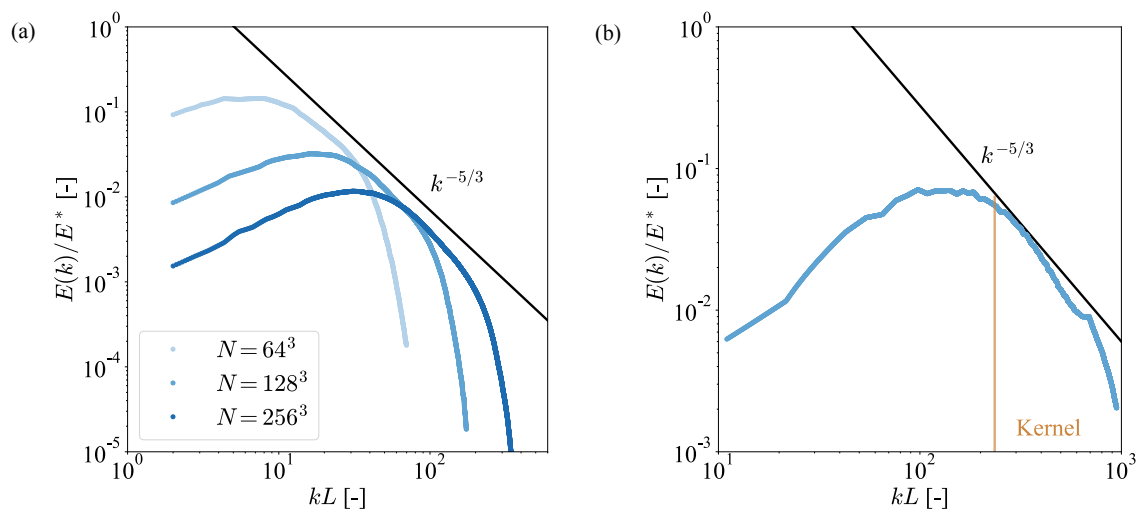


Abbildung 2.9: Resultierende Verteilungen der spektralen Energiedichte $E(k)$ aus den SPH-LES-Simulationen von (a) Di Mascio et al. (2017) und (b) Antuono et al. (2021a). In (a) sind die Verteilungen für die unterschiedlichen Auflösungen vertikal verschoben. Die Daten wurden den Originalveröffentlichungen entnommen.

Dabei lässt sich für alle Auflösungen die Entwicklung kleiner Inertialbereiche beobachten, die als Erfolg des entwickelten SPH-LES-Verfahrens gewertet werden. Allerdings zeigen die drei Spektren in Abb. 2.9 (a) eindeutig auf, dass die Inertialbereiche mit steigender Auflösung zu größeren Wellenzahlen verschoben werden. Für konvergente Simulationen wäre eine Erweiterung in Richtung größerer k zu erwarten. Ein Vergleich von $N = 64^3$ und $N = 256^3$ führt sogar zur Einsicht, dass die Inertialbereiche gar nicht überlappen. Hieraus lässt sich schließen, dass sich selbst noch die kleinsten Wellenzahlen und damit größten turbulenten Strukturen bei den untersuchten Auflösungen entwickeln, weshalb die physikalische Sinnhaftigkeit der Inertialbereiche anzuzweifeln ist. In der Arbeit von Antuono et al. (2021a) wird lediglich eine dreidimensionale SPH-LES-Simulation mit $N = 128^3$ für zerfallende homogen isotrope Turbulenz vorgenommen. Das entsprechende Spektrum ist inklusive der Wellenzahl des Kerneldurchmessers in Abb. 2.9 (b) illustriert. Auch hier ist die physikalische Sinnhaftigkeit der Berechnung fragwürdig, da der vermeintlich abgebildete Inertialbereich, der die spektrale Energiedichte lediglich tangiert, erst unterhalb der Kernelskala auftritt. Dies entspräche anschaulicher der Aussage, dass die energietragenden, nicht-linearen Wirbelstrukturen der Turbulenz und deren Schwankungen durch wenige einzelne SPH-Partikel repräsentiert werden können. In Anbetracht der inhärenten numerischen Schwankungen auf der Kernelskala, unter der die Methode ohne empirische Verbesserungsmaßnahmen leidet, wäre die Robustheit dieses Resultates zumindest durch weitere Rechnungen bei höherer Auflösung zu untermauern. Zusammenfassend sind diese SPH-LES-Verfahren für dreidimensionale Turbulenz deshalb als unvalidiert zu erachten.

Ein weiterer essenzieller Aspekt, der alle bislang publizierten SPH-LES-Verfahren betrifft, ist die Frage nach deren grundsätzlichen Legitimation. In der Arbeit von Bauer et al. (2012) wird beobachtet, dass SPH-Lösungen für turbulente Strömungen durch exzessive numerische Diffusion

charakterisiert sind. Intuitiv lässt sich deshalb die Ansicht vertreten, dass die Einführung von dissipativen Subfiltermodellen in einer stark numerisch diffusiven Methode nicht zielführend sein kann (Rennehan, 2021). Was rechtfertigt dann aber die Einführung des Smagorinsky-Modells für den Beitrag T_v ? Für zweidimensionale Turbulenz lässt sich argumentieren, dass das Modell physikalisch inkompatibel ist. Für dreidimensionale Turbulenz ist nach wie vor unklar, ob das Smagorinsky-Modell in einem SPH-LES-Kontext nützlich sein kann.

2.6 Zielsetzung der Arbeit

Mit den Ausführungen dieses Kapitels lässt sich konstatieren, dass das Thema dreidimensionaler subsonischer Turbulenz nur spärlich im SPH-Kontext untersucht wurde. Die diesbezüglich systematischste Studie wurde von Bauer et al. (2012) publiziert. In deren Arbeit wird resümiert, dass die SPH-Methode für subsonische Turbulenz aufgrund der exzessiven numerischen Diffusion ungeeignet ist. Allerdings sind die Konvergenzaussagen nochmals zu prüfen, da die chronologisch nachfolgenden Arbeiten von Dehnen et al. (2012) und Zhu et al. (2015) aufzeigen (Abschnitt 2.4), dass numerische Konvergenz in der SPH-Methode bei steigendem N_{ngb} und mit geeignetem Kernel möglich ist. Insofern ist auch unklar, welche turbulenten Schwankungen überhaupt aufgelöst werden können und wie gut deren Längenskalen und Energieinhalt abgebildet werden.

Letzteres wird auch von den vorgestellten SPH-LES-Verfahren in der Literatur nicht beantwortet, die dissoziiert von numerischen Konvergenzbetrachtungen der SPH-Methodik und der Arbeit von Bauer et al. (2012) sind. Deren alleinige Legitimation basiert bislang auf der Intuition der formalen Ähnlichkeit zwischen LES-Filter und SPH-Kernel. Systematische dreidimensionale Studien existieren in diesem Kontext nicht und vorhandene Resultate sind nicht belastbar. Meist liegt der Fokus auf zweidimensionaler Turbulenz, die sich qualitativ gänzlich von ihrem dreidimensionalen Pendant unterscheidet. Insbesondere ist die Frage unbeantwortet, inwiefern die explizite Berücksichtigung von dissipativen Subfiltermodellen in einer stark numerisch diffusiven Methode sinnvoll ist. Deshalb soll in dieser Arbeit eine Verknüpfung zwischen subsonischer Turbulenz, numerischen Fehlern und Konvergenzverhalten der SPH-Methode entwickelt werden.

Dafür wird eine drastische physikalische Neuinterpretation der SPH-Methode vorgenommen, um zu begründen, welche turbulenten Schwankungen unter besten Umständen mit der SPH-Methode abgebildet werden können. Zentrale Idee wird dabei sein, eine generelle physikalische Theorie zu entwickeln, bei der von Anfang an Lagrangesche Partikel mittels eines Kernels zu einem Kollektiv gebündelt werden. Diese Theorie soll die resultierende sogenannte Grobstruktur exakt, ohne jegliche Einschränkungen, beschreiben. Hiervon ausgehend kann argumentiert werden, dass die SPH-Methode per se die Grobstruktur approximiert und nicht, wie gängig angenommen, die Strömungsfelder nach den klassischen Transportgleichungen in Gl. (2.1). Das heißt, dass für subsonische turbulente Strömungen die SPH-Methode intrinsisch eine LES-Methode darstellt, wodurch zeitgleich eine Trennung von der bisherigen SPH-LES-Intuition erfolgt. Diese Zusammenhänge werden in Kapitel 3 entwickelt.

Basierend auf den theoretischen Resultaten in Kapitel 3, lässt sich zeigen, dass die SPH-Methode unter impliziten Subfilterspannungen leidet, die im Zusammenhang zur numerischen Diffusion der Methode stehen. Dies soll exemplarisch anhand einer experimentell untersuchten zweidimensionalen turbulenten Strömung illustriert werden. Ferner soll anhand dieser Ergebnisse erläutert werden, welche Ziele und Erwartungen mit expliziten dissipativen Modellen für die Subfilterbeiträge, wie zum Beispiel dem Smagorinsky-Modell, verknüpft sind. Hiermit befasst sich Kapitel 4.

Abschließend wird in Kapitel 5 anhand von systematischen dreidimensionalen Berechnungen subsonischer Turbulenz aufgezeigt, dass die SPH-Methode per se eine SPH-LES-Methode darstellt und unter Berücksichtigung von N_{ngb} turbulente Schwankungen maximal bis zur Kernskala sinnvoll auflösen kann. Es wird angesprochen, dass dispersive Fehler ebenso eine wichtige Rolle spielen wie diffusive Fehler und zukünftig stärkerer Beachtung bedürfen. Ferner wird demonstriert, dass explizite dissipative Modelle für den Subfilterbeitrag ihren Zweck nicht erfüllen können und von diesen im SPH-LES-Kontext abzuraten ist.

Für hochaufgelöste SPH-Berechnungen der Kraftstoffeinspritzung in Flugtriebwerken, wie diese am ITS praktiziert werden, wird diese Arbeit nochmals theoretisch die Belastbarkeit der numerischen Vorhersagen des turbulenzbedingten Primärzerfalls untermauern.

3 Theorie der Grobstruktur

Um einen holistischen SPH-LES-Ansatz zu entwickeln, der die bisherigen wissenschaftlichen Lücken aus Kapitel 2 schließt, wird in diesem Kapitel eine generelle dynamische Transporttheorie für die Grobstruktur einer Strömung entwickelt. Diese soll, wie die SPH-Methode selbst, auf dem Kernelkonzept beruhen, wobei dem Kernel die Aufgabe zuteilwird, Lagrangesche Partikel zu einem lokalen Kollektiv zu bündeln. Damit inkludiert diese allgemeingültige Theorie alle wesentlichen SPH-Charakteristika von Anfang an, wodurch sie sich als geeignete Referenz zur Entwicklung eines SPH-LES-Ansatzes eignet. Die Herleitung dieser Theorie und ihre Verbindung zu LES-Verfahren wird in Abschnitt 3.1 präsentiert und wurde schon als wissenschaftliche Arbeit publiziert (Okrashevski et al., 2021b). Hiervon ausgehend lässt sich über eine Quadratur argumentieren, dass die SPH-Methode intrinsisch die Grobstrukturdynamik anstelle der Gesamtdynamik eines strömenden Kontinuums approximiert. Dies impliziert, dass die Größe des Kernels letztendlich die physikalisch auflösbaren Skalen limitiert. Für turbulente Strömungen sind demnach die Begriffe SPH und SPH-LES synonym verwendbar. Dies ist Gegenstand von Abschnitt 3.2, der an anderer Stelle veröffentlicht wurde (Okrashevski et al., 2022).

3.1 Transportgleichungen der Grobstruktur

Die Zielsetzung dieses Abschnittes ist es, eine konsistente Transporttheorie für die Grobstruktur einer Strömung herzuleiten, die sich als Referenz für die Entwicklung eines SPH-LES-Verfahrens eignet. Dafür ist es zunächst hilfreich, sich ein Bild über das Kontinuumsmodell aus Sicht der statistischen Physik zu verschaffen. Dort existieren unterschiedliche Theorien, um die Transportgleichungen eines Kontinuums, basierend auf der Dynamik von Molekülkollektiven, zu begründen. Diese können in stochastische und deterministische Ansätze unterteilt werden (Admal et al., 2010), wobei die prominentesten Vertreter die Theorien von Irving et al. (1950) und Hardy (1982) sind. Nachfolgend soll die deterministische Hardy-Theorie im Fokus stehen. In dieser werden, über ein Kernelkonzept analog zu Abschnitt 2.1, Moleküle als diskrete Lagrangesche Partikel zu größeren Partikeln mit der Längenskala des Kernels zusammengefasst. Letztere sind in der Strömungsmechanik als Fluidelemente bekannt und ergeben sich folglich aus einem gewichteten Mittelungsprozess, der durch den Kernel realisiert wird. Dies wird in Abb. 3.1 veranschaulicht.

Es ist nun entscheidend zu erkennen, dass die Hardy-Theorie konsekutiv in Richtung größerer Skalen appliziert werden kann (Abb. 3.1). Das heißt, dass das Verfahren mit einem größeren Kernel ebenfalls auf Lagrange Fluidelemente übertragbar ist. Dadurch lässt sich die Dynamik von sogenannten Superfluidelementen als Kollektive von Fluidelementen erschließen, die die Grobstruktur definieren. Hierfür ist allerdings eine Verallgemeinerung erforderlich, da in der klassischen Hardy-Theorie die Anzahl der Moleküle pro Kernel beschränkt ist, wohingegen auf der Kontinuumskala jeder Kernel unendlich viele Fluidelemente umfasst. Diese Verallgemeinerung für den Masse- und Impulstransport, die von Okrashevski et al. (2021b) entwickelt wurde, wird nachfolgend präsentiert, wobei zunächst die mathematische Notation erläutert wird.

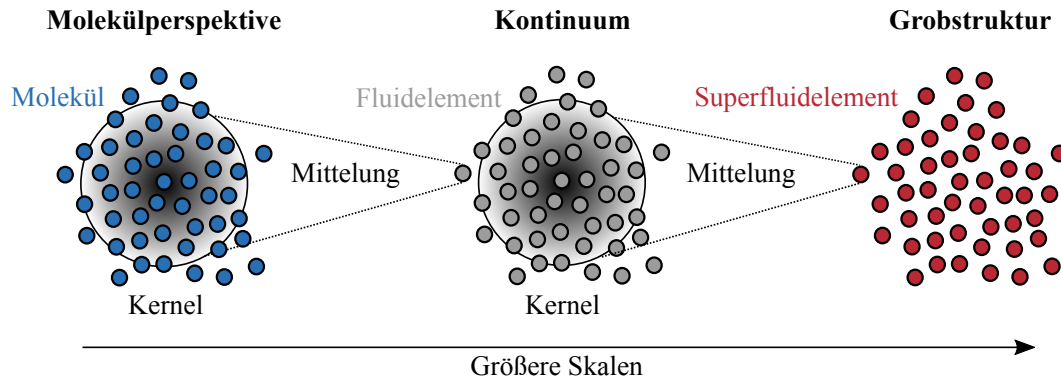


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Theorie von Hardy (1982) und deren Verallgemeinerung zur Beschreibung der Grobstruktur einer Strömung. Abbildung adaptiert aus Okrashevski et al. (2022).

3.1.1 Mathematische Notation

Da die Verallgemeinerung der Hardy-Theorie auf der Lebesgueschen Integrationstheorie beruht, soll hier die gewählte Notation eingeführt werden. Details zur letzteren im Kontext der klassischen Mechanik können dem Lehrbuch von DiBenedetto (2011) entnommen werden. Zur Veranschaulichung ist zudem eine Detailskizze eines Superfluidelementes inklusive eines zugehörigen Fluidelementes in Abb. 3.2 dargestellt.

Detail Superfluidelement

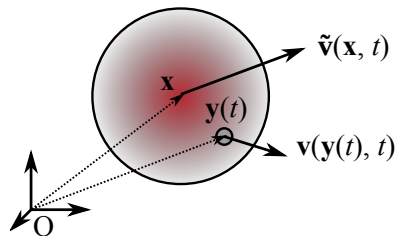


Abbildung 3.2: Skizze eines mit Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}$ konvektierten Superfluidelementes an der Position \mathbf{x} . Zur Veranschaulichung ist ein zugehöriges Fluidelement mit Geschwindigkeit \mathbf{v} an der Position $\mathbf{y}(t)$ eingezeichnet.

Angesichts der Tatsache, dass die Herleitung auf der Kontinuumsebene startet, wird ein einfach zusammenhängendes, dreidimensionales Strömungsgebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ betrachtet, das sich in unendlich viele infinitesimale Fluidelemente zerlegen lässt. Ferner werden zwei räumliche Positionen unterschieden. Die Position $\mathbf{x} \in \Omega$ bezeichnet eine feste Position in Eulerschen Koordinaten, wohingegen $\mathbf{y}(t) \in \Omega$ die Position oder Trajektorie eines individuellen Lagrangeschen Fluidelementes bezeichnet, abhängig davon, ob t fixiert wird oder als Parameter fungiert. Jedem dieser Fluidelemente kann ein differentielles Volumenelement $d\mathbf{y}(t)$ und differentielles Massenelement $dM(\mathbf{y}(t))$ zugeordnet werden, die sich für verschiedene $\mathbf{y}(t)$ im Rahmen der Lebesgue Theorie unterscheiden können. Dies motiviert die Notation mit expliziter Abhängigkeit von

$\mathbf{y}(t)$. Mathematisch sind diese Differentiale sogenannte 3-Formen, die über die lokale Dichte des Fluids gemäß $dM(\mathbf{y}(t)) = \rho(\mathbf{y}(t), t)d\mathbf{y}(t)$ verknüpft sind.

Um die Grobstruktur mit dem Kontinuum über einen Mittelungsprozess zu verbinden, ist die Einführung eines kompakten, isotropen, radial abfallenden Kerns W_h gemäß Abschnitt 2.1 erforderlich. Der Index $h > 0$ repräsentiert dabei ein Maß für den Durchmesser des Kerns $D_K \sim h$, der beliebig wählbar ist. Das kugelförmige Gebiet, das im geometrischen Schwerpunkt \mathbf{x} zentriert ist und das Superfluidelement repräsentiert, wird mit V_x notiert. Da $\mathbf{x} \in \Omega$ das gesamte Strömungsgebiet ausfüllt, werden sich die Superfluidelemente in Folge überlappen. Ferner wird angenommen, dass der Kern in seiner Gestalt an jeder räumlichen Position identisch ist. Mit diesen Mitteln lässt sich nun der kernbasierte Mittelungsprozess für ein beliebiges Skalarfeld $f : \Omega \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ einführen, der die Eigenschaften des Superfluidelements definiert. Das lokale gewichtete Mittel ergibt sich aus einem Faltungsintegral über unendliche viele Fluidelemente und lautet

$$\overline{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} f(\mathbf{y}(t), t)W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) d\mathbf{y}(t) , \quad (3.1)$$

wobei der Überstrich den Mittelungsprozess andeutet. Da sich das resultierende Feld \overline{f} der Grobstruktur per Definition der Details unterhalb der Kernskala entledigt, kann der Prozess synonym als räumliche Filterung bezeichnet werden. Angesichts der Tatsache, dass nachfolgend häufig gemittelte Produkte mit der Fluidsdichte $\overline{\rho f}$ auftauchen, soll angemerkt werden, dass das lokale Volumenintegral in ein massenbezogenes Integral

$$\overline{\rho f}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} \rho f(\mathbf{y}(t), t)W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) d\mathbf{y}(t) = \int_{V_x} f(\mathbf{y}(t), t)W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \quad (3.2)$$

umgeschrieben werden kann, wobei $dM(\mathbf{y}(t)) = \rho(\mathbf{y}(t), t)d\mathbf{y}(t)$ ausgenutzt wird. Die Mittelungsprozesse in Gl. (3.1) und (3.2) lassen sich komponentenweise auf Vektor- und Tensorfelder übertragen.

3.1.2 Herleitung der Massentransportgleichung

Die Kontinuitätsgleichung der Strömungsmechanik ergibt sich in der klassischen Hardy-Theorie aus der zeitlichen Ableitung der lokalen Dichtedefinition

$$\rho(\mathbf{x}, t) := \sum_{j=1}^N W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}_j(t))M_j , \quad (3.3)$$

wobei $\mathbf{y}_j(t) \in \mathbb{R}^3$ die Position des Moleküls j ist und nachfolgend für die Masse $M_j = M = konst$ angenommen wird. Somit ist diese Definition analog zur Dichteabschätzung in der SPH-Methode in Gl. (2.8), jedoch mit dem wesentlichen Unterschied, dass die Moleküle als Lagrangesche Partikel physikalisch existieren und dass die gewählte Kernskala konsistent mit der Kontinuumshypothese sein muss. Basierend auf Gl. (3.3) und den mathematischen Ausführungen in Abschnitt 3.1.1, kann diese Definition nun für die Erschließung der Grobstrukturdichte $\overline{\rho}$

übertragen werden. Formal entspricht das dem Grenzwert $N \rightarrow \infty$ und dem Ersetzen von $\mathbf{y}_j(t) \rightarrow \mathbf{y}(t)$ sowie $M_j \rightarrow dM(\mathbf{y}(t))$, woraus folgt

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) . \quad (3.4)$$

Die Transportgleichung für die Masse der Grobstruktur lässt sich damit identisch zum Vorgehen von Hardy konstruieren, indem die zeitliche Ableitung $\partial_t \bar{\rho}$ von Gl. (3.4) an der statischen Eulerschen Position \mathbf{x} ausgewertet wird. Da das kugelförmige Kernelgebiet V_x in \mathbf{x} festgehalten wird und $dM(\mathbf{y}(t))$ entlang seiner Lagrangeschen Trajektorie konstant bleibt, lassen sich Integration und Differentiation vertauschen, wodurch sich

$$\partial_t \bar{\rho}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} \partial_t W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \quad (3.5)$$

ergibt. Mit der Kettenregel für $\partial_t W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t))$ und der Tatsache, dass die Geschwindigkeit des Fluidelementes $\mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) = \partial_t \mathbf{y}(t)$ ist, folgt

$$\partial_t \bar{\rho}(\mathbf{x}, t) = - \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) dM(\mathbf{y}(t)) , \quad (3.6)$$

wobei das Symbol « \cdot » ein Skalarprodukt darstellt. Wird nun berücksichtigt, dass weder die Integration über die Fluidelemente $\mathbf{y}(t)$ noch deren Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t)$ selbst von der Eulerschen Koordinate \mathbf{x} abhängen, kann der Operator $\nabla_{\mathbf{x}}$ vor das Integral gezogen werden

$$\partial_t \bar{\rho}(\mathbf{x}, t) = - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \int_{V_x} \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) . \quad (3.7)$$

Mit der Abkürzung aus Gl. (3.2) für die rechte Seite von Gl. (3.7) ergibt sich die Massentransportgleichung für die Grobstruktur

$$\partial_t \bar{\rho}(\mathbf{x}, t) = - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) , \quad (3.8)$$

die den Korrelationsterm $\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}$ enthält. Der Korrelationsterm lässt sich eliminieren, indem die Frage beantwortet wird, mit welcher repräsentativen Geschwindigkeit sich die Superfluidelemente bewegen. Wird gefordert, dass Gl. (3.8) dieselbe Struktur wie die Kontinuitätsgleichung der Strömungsmechanik besitzt, muss $\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}} = \bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}$ gelten. Dadurch resultiert auf natürliche Weise die Favre gemittelte Geschwindigkeit (Bilger, 1975), die schon von Reynolds (1895) vorgeschlagen wurde, und nachweislich die Konvektion von Superfluidelementen beschreibt

$$\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) := \frac{\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)}{\bar{\rho}(\mathbf{x}, t)} . \quad (3.9)$$

Sie unterscheidet sich offensichtlich von der lokal gemittelten Geschwindigkeit $\bar{\mathbf{v}}$ durch eine Dichtewichtung.

3.1.3 Herleitung der Impulstransportgleichung

In Analogie zur Hardy-Theorie folgt die Impulstransportgleichung der Grobstruktur aus der zeitlichen Ableitung der entsprechenden Massenstromdichte

$$\partial_t \overline{\rho \mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} \partial_t [\mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t))] dM(\mathbf{y}(t)) . \quad (3.10)$$

Zeitliche Differentiation und räumliche Integration können wie zuvor vertauscht werden. Wird zudem die Kettenregel angewandt und berücksichtigt, dass die Beschleunigung eines Fluidelements $\mathbf{a}(\mathbf{y}(t), t) = \partial_t \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t)$ lautet, so resultiert

$$\partial_t \overline{\rho \mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) \partial_t W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) + \int_{V_x} \mathbf{a}(\mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) . \quad (3.11)$$

Der Ausdruck $\partial_t W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t))$ wurde schon für die Konstruktion der Massentransportgleichung behandelt und kann übernommen werden, sodass mit der Abkürzung in Gl. (3.2) folgt

$$\partial_t \overline{\rho \mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = - \int_{V_x} \mathbf{v} \mathbf{v}^T(\mathbf{y}(t), t) \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) + \overline{\rho \mathbf{a}}(\mathbf{x}, t) . \quad (3.12)$$

In Gl. (3.12) indiziert das Symbol « T » die Transponierte des Geschwindigkeitsfeldes, sodass das dyadische Produkt $\mathbf{v} \mathbf{v}^T \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ein Tensorfeld 2. Stufe darstellt, das auf $\nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t))$ operiert. Da analog zur Herleitung der Massentransportgleichung weder die Integration über die Fluidelemente $\mathbf{y}(t)$ noch der Tensor $\mathbf{v} \mathbf{v}^T(\mathbf{y}(t), t)$ von der Eulerschen Koordinate \mathbf{x} abhängen, kann der Operator $\nabla_{\mathbf{x}}$ vor das Integral gezogen werden. Letzterer wirkt nun auf ein Tensorfeld und wird deshalb durch den Divergenzoperator $div_{\mathbf{x}}$ ersetzt

$$\partial_t \overline{\rho \mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = -div_{\mathbf{x}} \int_{V_x} \mathbf{v} \mathbf{v}^T(\mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) + \overline{\rho \mathbf{a}}(\mathbf{x}, t) . \quad (3.13)$$

Erneute Verwendung der Abkürzung aus Gl. (3.2) führt zur Impulstransportgleichung der Grobstruktur

$$\partial_t \overline{\rho \mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = -div_{\mathbf{x}} \left[\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T} \right] (\mathbf{x}, t) + \overline{\rho \mathbf{a}}(\mathbf{x}, t) , \quad (3.14)$$

die die lokale Kräftebilanz der Superfluidelemente beschreibt. Die dichtegewichtete Beschleunigung $\rho \mathbf{a}$ ist durch die rechte Seite der Impulstransportgleichung auf Kontinuumsebene definiert. Problematisch an Gl. (3.14) ist, dass sie eigentlich die Bestimmungsgleichung für die Geschwindigkeit der Superfluidelemente $\tilde{\mathbf{v}}$ nach Gl. (3.9) darstellt, aber die Korrelationsterme $\overline{\rho \mathbf{v}}$ und $\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T}$ enthält. Der erste Term kann direkt mit Gl. (3.9) durch $\overline{\rho \mathbf{v}} = \overline{\rho} \tilde{\mathbf{v}}$ eliminiert werden. Der letzte Term jedoch führt zu Subfilterbeiträgen, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

3.1.4 Herleitung des Subfilterspannungstensors

Analog zur Hardy-Theorie soll zur Eliminierung der Korrelation mit der Dimension einer Spannung

$$\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T}(\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) \mathbf{v}^T(\mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \quad (3.15)$$

nun eine lokale Relativgeschwindigkeit eingeführt werden, die als Pekuliargeschwindigkeit $\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t)$ bezeichnet wird. Anschaulich lässt sich diese Relativgeschwindigkeit anhand der Detailskizze eines Superfluidelementes mit zugehörigem Fluidelement illustrieren, wie diese in Abbildung 3.3 dargestellt sind.

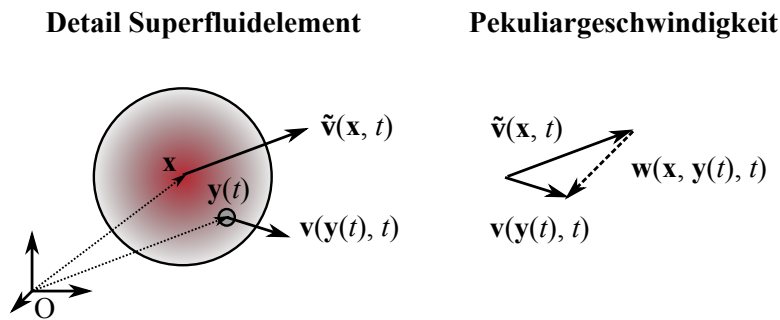


Abbildung 3.3: Veranschaulichung der Pekuliargeschwindigkeit anhand eines skizzierten Superfluidelementes mit zugehörigem Fluidelement.

Die Pekuliargeschwindigkeit $\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t)$ bezieht sich stets auf ein bestimmtes, in \mathbf{x} zentriertes Superfluidelement V_x mit seiner mittleren Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)$ nach Gl. (3.9) und ein zugehöriges Fluidelement $\mathbf{y}(t)$ aus der Kontinuumsebene mit seiner Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t)$. Durch eine virtuelle Verschiebung der Geschwindigkeitsvektoren in denselben Ursprung ergibt sich die entsprechende Pekuliargeschwindigkeit anschaulich aus einer Differenzenbildung. Sie ist definiert als

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) := \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) - \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) . \quad (3.16)$$

Es ist wichtig hervorzuheben, dass in jedem Superfluidelement prinzipiell unendlich viele Pekuliargeschwindigkeiten auftreten und sich untereinander stark unterscheiden können. Dies hängt davon ab, wie nichtlinear das Geschwindigkeitsprofil unterhalb der Kernelskala des Superfluidelementes ist und kann, wie nachfolgend nachgewiesen wird, Subfilterspannungen induzieren.

Mit der in Gl. (3.16) definierten Geschwindigkeitszerlegung, lässt sich die anfängliche Korrelation in Gl. (3.15) in vier Terme zerlegen. Dabei werden Größen, die unabhängig von $\mathbf{y}(t)$ sind, direkt aus der Integration herausgezogen und es folgt

$$\begin{aligned}
\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T}(\mathbf{x}, t) &= \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}^T(\mathbf{x}, t) \int_{V_x} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \\
&+ \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) \int_{V_x} \mathbf{w}^T(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \\
&+ \left[\int_{V_x} \mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \right] \tilde{\mathbf{v}}^T(\mathbf{x}, t) \\
&+ \int_{V_x} \mathbf{w} \mathbf{w}^T(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) .
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Der erste Term in Gl. (3.17) kann mit der Definition der Grobstrukturdichte in Gl. (3.4) zu $\overline{\rho \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}^T}$ zusammengefasst werden. Der zweite und dritte Term sind identisch null, weil sie die Mittelung über die Pekuliargeschwindigkeit, beziehungsweise deren Transponierte, darstellen. Dies kann mit konsekutiver Anwendung von Gl. (3.16), (3.2) und (3.9) demonstriert werden.

$$\begin{aligned}
&\int_{V_x} \mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \\
&= \int_{V_x} \mathbf{v}(\mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) - \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) \int_{V_x} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) \\
&= \overline{\rho \mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) - \overline{\rho \tilde{\mathbf{v}}}(\mathbf{x}, t) = 0 .
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Anschaulich bedeutet Gl. (3.18), dass durch die Pekuliargeschwindigkeiten, integral über ein Superfluidelement betrachtet, kein zusätzlicher Massenfluss verursacht wird. Allerdings entstehen durch die Pekuliargeschwindigkeiten Spannungen, da von Gl. (3.17) folgender Ausdruck verbleibt

$$\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T}(\mathbf{x}, t) = \overline{\rho \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}^T}(\mathbf{x}, t) + \int_{V_x} \mathbf{w} \mathbf{w}^T(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) . \tag{3.19}$$

Wird für das Integral die Abkürzung $\boldsymbol{\tau}_{SFS} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ eingeführt und anschließend Gl. (3.19) in die Impulstransportgleichung Gl. (3.14) eingesetzt, ergibt sich final die Bestimmungsgleichung für die Geschwindigkeit der Grobstruktur

$$\partial_t [\overline{\rho \tilde{\mathbf{v}}}] (\mathbf{x}, t) = -\text{div}_{\mathbf{x}} [\overline{\rho \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}^T}] (\mathbf{x}, t) - \text{div}_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t) + \overline{\rho \mathbf{a}} (\mathbf{x}, t) . \tag{3.20}$$

Es ist essenziell hervorzuheben, dass der resultierende Tensor 2. Stufe, nämlich $\boldsymbol{\tau}_{SFS} = \overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T} - \overline{\rho \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}^T}$, der aus dem LES-Kontext wohlbekannte Subfilterspannungstensor (SFS) ist. Allerdings

nimmt dieser hier eine weniger bekannte Gestalt als quadratische Form über die Pekuliargeschwindigkeit $\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t)$ an

$$\boldsymbol{\tau}_{SFS}(\mathbf{x}, t) := \int_{V_x} \mathbf{w}\mathbf{w}^T(\mathbf{x}, \mathbf{y}(t), t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}(t)) dM(\mathbf{y}(t)) . \quad (3.21)$$

Diese Darstellung wurde auch schon von Vreman et al. (1994) für theoretische Analysen der LES-Filterung hergeleitet, ergibt sich aber über die verallgemeinerte Hardy-Theorie direkt als kontinuierliche Verallgemeinerung des kinetischen Spannungstensors. Sie liefert eine anschauliche Interpretation des Begriffes Subfilterspannungen. Nach Gl. (3.21) und Abbildung 3.3 sind letztere eine Konsequenz von lokalen Geschwindigkeitsunterschieden zwischen Superfluidelement und zugehörigen Fluidelementen unterhalb der Kernelskala, die auf der Grobstrukturebene zum Tragen kommen. Prinzipiell ist zu erwarten, dass diese Spannungen umso stärker ausgeprägt sind, je inhomogener und nichtlinearer das lokale Geschwindigkeitsfeld im Superfluidelement ist. Im Folgenden wird sich zeigen, dass dieser Tensor der Schlüssel zur Erarbeitung einer holistischen SPH-LES-Theorie ist.

3.1.5 Interpretation und Einordnung in den LES-Kontext

Die Grobstrukturgleichungen sollen in diesem Abschnitt nochmals zusammengefasst werden, um eine Interpretation und Einordnung in den LES-Kontext ermöglichen zu können. Mit dem Kontinuumsmodell aus Gl. (2.1), sowie Gl. (3.3) und Gl. (3.20) ergibt sich der geschlossene Transportgleichungssatz für die Grobstruktur dieser Arbeit. Seine Gültigkeit beschränkt sich auf barotrope, stark subsonische Strömungen ($Ma < 0.3$) mit konstanter dynamischer Viskosität η . Die Darstellung erfolgt aus Lagrangescher Sicht eines Superfluidelements. Hierfür wird die Lagrangesche Ableitung auf der Ebene der Grobstruktur als

$$\frac{d}{dt} := \partial_t + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \quad (3.22)$$

interpretiert, da $\tilde{\mathbf{v}}$ nachweislich (Gl. (3.9)) das repräsentative Geschwindigkeitsfeld ist. Wird außerdem die explizite Notation der Abhängigkeit der Grobstruktur von (\mathbf{x}, t) fallen gelassen, lautet der Transportgleichungssatz in Lagrangescher Form

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\rho}}{dt} &= -\bar{\rho} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \\ \bar{\rho} \frac{d\tilde{\mathbf{v}}}{dt} &= -\nabla \bar{p} + \eta \Delta \tilde{\mathbf{v}} - \text{div}_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] \\ \bar{p} &= p_{ref} + c_s^2 (\bar{\rho} - \rho_{ref}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Offensichtlich ist der resultierende Transportgleichungssatz identisch zu den Grundgleichungen der LES für entsprechende Strömungsbedingungen (Garnier et al., 2009; Sagaut, 2006). Diese Einsicht ist nicht verwunderlich, da LES-Verfahren darauf abzielen, mittels Gl. (3.1) die großen Strukturen der Turbulenz abzubilden, was deren deutsche Bezeichnung als Grobstruktursimula-

tion rechtfertigt (Fröhlich, 2006). Allerdings muss hervorgehoben werden, dass Gl. (3.23) eine generelle Theorie für die Grobstruktur der entsprechenden Strömungsklasse darstellt, zumindest wenn ein entsprechendes Modell für τ_{SFS} zur Verfügung steht. Die Spannungen ergeben sich als Konsequenz der willkürlich gewählten Kernelskala D_K und sind im allgemeinen nichtlinear und stochastisch (Eyink et al., 2018). Somit sind die Transportgleichungen der Grobstruktur einer Strömung zunächst vollkommen losgelöst von der numerischen Simulation turbulenter Strömungen, die inhärent Gegenstand von LES-Verfahren sind (Germano, 1992; Leonard, 1975). Es können prinzipiell sowohl laminare als auch turbulente Strömungen mit diesem Modell erfasst werden.

Die Feststellung der physikalischen Allgemeingültigkeit von Gl. (3.23), sowie deren Unabhängigkeit von numerischen Simulationen, ist nicht neu. Insbesondere Studien von Prof. Eyink und dessen Mitarbeitern haben die Technik der kernelbasierten Grobstrukturierung verwendet, um theoretische Resultate im Hinblick auf turbulente Kaskadenprozesse zu erarbeiten (Drivas et al., 2017; Eyink, 2005; Eyink et al., 2009, 2018). Anstelle des hier gewählten Lagrangeschen Weges über die verallgemeinerte Hardy-Theorie, wird stattdessen die Kommutation der kernelbasierten Mittelung mit den Differentialoperatoren des Kontinuummodells ausgenutzt. Letzteres ist das Standardvorgehen in der LES-Gemeinschaft und mathematisch deutlich einfacher in der Durchführung. Dies wirft somit die grundsätzliche Frage nach dem wissenschaftlichen Mehrwert der hier präsentierten Verallgemeinerung auf.

Der Mehrwert erschließt sich im Kontext partikelbasierter Diskretisierungsverfahren, die auf einem Kernelkonzept nach Abschnitt 2.1 basieren. Dazu zählt die SPH-Methode, die im Fokus dieser Arbeit steht. Zweifellos enthält das physikalische allgemeine Grobstrukturmodell alle wesentlichen Merkmale, die auch im Mittelpunkt der SPH-Methode stehen: Lagrangesche Partikel, die über einen Kernel mit willkürlicher Skala D_K zu lokalen Kollektiven verknüpft werden. Diese Beobachtung soll nachfolgend genutzt werden, um einerseits zu argumentieren, dass die SPH-Methode intrinsisch Grobstrukturdynamik approximiert und andererseits, um einen holistischen SPH-LES-Ansatz zu entwickeln.

3.2 SPH als Quadratur der Grobstruktur

Mit den in Gl. (3.23) erarbeiteten Transportgleichungen, lässt sich die SPH-Methode als Quadraturverfahren für die Grobstruktur interpretieren. Hierbei ist es entscheidend zu erkennen, dass das Grobstrukturmodell analog zum Kontinuummodell nur unter starken Einschränkungen analytisch lösbar sein wird. Folglich muss das Problem der räumlichen Diskretisierung zur numerischen Berechnung von Gl. (3.23) adressiert werden.

Bevor jedoch die räumliche Diskretisierung mathematisch ausgeführt wird, soll diese zunächst schematisch veranschaulicht werden. Hierdurch wird später die Abgrenzung der exakten kernelbasierten Grobstrukturtheorie von der SPH-Methode erleichtert. Da die Grobstruktur durch die Lagrangesche Bewegung von Superfluidelementen beschrieben wird, ist es sinnvoll diese Veranschaulichung aus Sicht eines einzelnen Superfluidelementes mit dessen Kerneinfluss vorzunehmen (Abb. 3.4). Im Rahmen der hier entwickelten Grobstrukturtheorie wurde in Ab-

schnitt 3.1.1 ein Superfluidelement als lokales Kollektiv von Fluidelementen definiert, welche durch einen Kernel mit dem Durchmesser D_K gebündelt werden. Ein Superfluidelement stellt somit ein Lagrangesches Partikel mit der Ausdehnung D_K dar, kann aber dennoch wie ein Fluidelement als Punktmasse repräsentiert werden (graue und rote Partikel). Allerdings muss das Superfluidelement dadurch sein Längenmaß D_K als zusätzliche Eigenschaft erhalten, die die Feldgrößen $(\bar{\rho}, \bar{p}, \tilde{\mathbf{v}})$ als Information ergänzt. Prinzipiell kann somit an jedem Ort, an dem sich ein Fluidelement befindet, ein Superfluidelement definiert werden (Approximation in Abb. 3.4). Dies bedeutet jedoch, dass sich die Superfluidelemente überlappen und Details der Strömung unterhalb der Kernelskala D_K verloren gehen. Hier greift die SPH-Methode als Quadraturverfahren für die Grobstruktur an. Wird für ein beliebiges Superfluidelement der zugehörige Kerneinfluss veranschaulicht, ist die Idee der SPH-Methode, die Partikeleigenschaften aus der Mittelung über die benachbarten, überlappenden Superfluidelemente, anstelle der auf der Grobstrukturebene unbekanntem Fluidelementeigenschaften, zu erschließen.

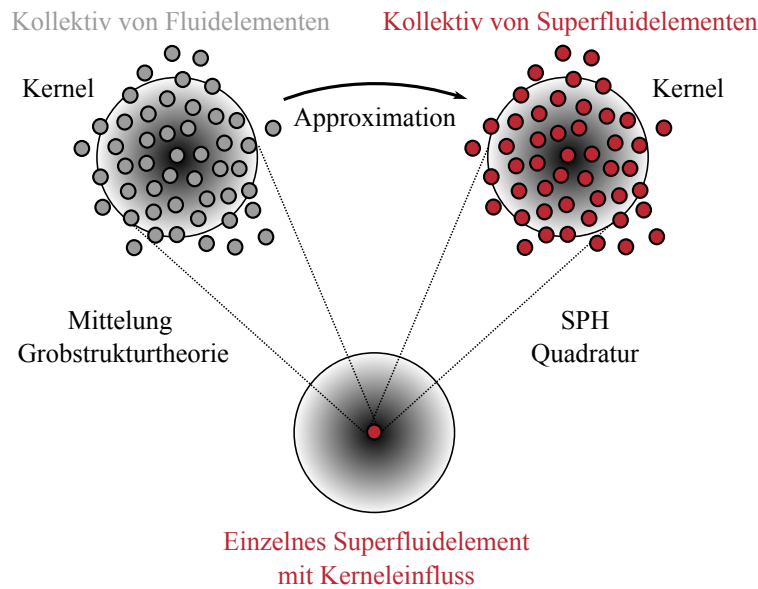


Abbildung 3.4: Abgrenzung der kernelbasierten Grobstrukturtheorie von der Lagrangeschen Quadratur der SPH-Methode. Abbildung adaptiert von Okrashevski et al. (2022).

Da die exakte Grobstrukturtheorie Ausgangspunkt für die Diskretisierung ist, erscheint es zweckmäßig, Gl. (3.23) mit seinen Mittelungsprozessen explizit auszuschreiben und die Kontinuitätsgleichung durch ihr Äquivalent in Gl. (3.4) zu ersetzen. Wird die explizite Zeitabhängigkeit fallen gelassen, ergibt sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \int_{V_x} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) dM(\mathbf{y}) \\ \bar{\rho} \frac{d\tilde{\mathbf{v}}}{dt} &= - \int_{V_x} \nabla_y p(\mathbf{y}) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} + \int_{V_x} \eta \Delta_y \mathbf{v}(\mathbf{y}) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} - \text{div}_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] \\ \bar{p} &= p_{ref} + c_s^2 (\bar{\rho} - \rho_{ref}) . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die räumliche Diskretisierung besteht nun darin, das Strömungsgebiet in eine finite Anzahl von Lagrangeschen Partikeln $i \in \{1, \dots, N\}$ zu zerlegen, die jeweils das Volumen V_i und die Masse M_i besitzen. Ferner sollen die Partikel als Punktmassen mit den Kernelzentren zusammenfallen, also $\forall i \in \{1, \dots, N\} : \mathbf{x}_i = \mathbf{y}_i$. Die Integrale müssen dann durch diskrete Summationsprozesse über $j \in \{1, \dots, N_{ngb}\}$ Nachbarn ersetzt werden, was eine Quadratur über die Lagrangeschen Partikel bedeutet. Diese Partikel haben zum Ziel, die Dynamik von Superfluidelementen zu approximieren, die die Grobstruktur beschreiben. Wie anhand von Abb. 3.4 geschildert, sind demnach die Fluidelementgrößen in den Faltungsintegralen durch Superfluidelementgrößen zu ersetzen ($p \rightarrow \bar{p}$, $\mathbf{v} \rightarrow \tilde{\mathbf{v}}$). Andernfalls würde ein numerisches Schließungsproblem auf der Grobstrukturebene entstehen. Werden für die exakte Diskretisierung zudem Symmetrien ausgenutzt, wie detailliert in Anhang A.1 ausgeführt, ergibt sich mit Gl. (A.2), (A.9) und (A.14) ein dreidimensionales diskretes Partikelmodell für die Grobstruktur

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_i &= M_i \sum_{j=1}^{N_{ngb}} W_{h,ij} = \frac{M_i}{V_i} \quad \text{mit} \quad V_i := \frac{1}{\sum_{j=1}^{N_{ngb}} W_{h,ij}} \\ \bar{\rho}_i \frac{d\tilde{\mathbf{v}}_i}{dt} &= - \sum_{j=1}^{N_{ngb}} (\bar{p}_j + \bar{p}_i) \nabla W_{h,ij} V_j + 10\eta \sum_{j=1}^{N_{ngb}} \frac{(\tilde{\mathbf{v}}_i - \tilde{\mathbf{v}}_j) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^2} \nabla W_{h,ij} V_j \\ &\quad - \text{div} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}]_i \\ \bar{p}_i &= p_{ref} + c_s^2 (\bar{\rho}_i - \rho_{ref}) \end{aligned} \quad (3.25)$$

und die Partikeltrajektorien folgen aus der Kinematik

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \tilde{\mathbf{v}}_i. \quad (3.26)$$

Basierend auf der durchgeführten Lagrangeschen Quadratur ergibt sich das System von Gl. (3.25) und (3.26), das bis auf den Term $\text{div} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}]_i$ formal identisch ist zur SPH-Diskretisierung der schwach kompressiblen Navier-Stokes Gleichung ist. Letzteres Modell ist in der Literatur als WCSPH (engl. *weakly compressible SPH*) bekannt (Lind et al., 2020) und folgt hier aus einer physikalisch allgemeingültigen Theorie für die Grobstruktur. Seine wesentlichen mathematischen und physikalischen Eigenschaften wurden in Kapitel 2 beschrieben und bleiben durch die Grobstrukturperspektive unberührt. Allerdings ist die Beobachtung des zusätzlichen Subfilterspannungsterms $\text{div} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}]_i$ wesentlich. Traditionell ist die Kernelskala D_K in SPH lediglich Gegenstand des Themas Konvergenz (Abschnitt 2.4). Aus Sicht der Grobstrukturtheorie werden jedoch durch die willkürliche Wahl von D_K Subfilterspannungen $\boldsymbol{\tau}_{SFS,i}$ induziert, die weitere, bislang unbeachtete Kräfte verursachen. Das erstmalige Studium des Subfilterspannungstensors $\boldsymbol{\tau}_{SFS,i}$ im SPH-Kontext ist unerlässlich, um die Methode als Lagrangesches Quadraturverfahren für die Grobstruktur zu begründen, und eine wesentliche Neuheit dieser Arbeit. Die Diskretisierung des Tensors für ein Partikel i folgt aus Gl. (3.21) und der in Abb. 3.4 illustrierten Lagrangeschen Quadratur. Das heißt erneut, dass Fluidelementgrößen durch Superfluidelement-

größen zu ersetzen sind, also $\mathbf{v} \rightarrow \tilde{\mathbf{v}}$, bevor die Quadratur durchgeführt wird. Der resultierende Spannungstensor

$$\boldsymbol{\tau}_{SFS,i} \approx \sum_{j=1}^{N_{ngb}} (\tilde{\mathbf{v}}_j - \tilde{\mathbf{v}}_i)(\tilde{\mathbf{v}}_j - \tilde{\mathbf{v}}_i)^T W_{h,ij} M_j \quad (3.27)$$

quantifiziert demnach lokale Geschwindigkeitsunterschiede $\tilde{\mathbf{v}}_j - \tilde{\mathbf{v}}_i$ innerhalb eines Kernels zum Zentralpartikel und wird dort eine entscheidende Rolle spielen, wo diese Unterschiede auf der Kernelskala D_K groß werden. Physikalisch ist dies vor allem in Scherschichten und Wirbeln zu erwarten, in denen numerische Fehler in der SPH-Methode am stärksten ausgeprägt sind und sich in künstlichen Schwankungen auf Kernelskala äußern (Abschnitt 2.2).

Dieser antizipierte Zusammenhang zwischen Subfilterspannungen und numerischen Fehlern wirft eine wesentliche Frage auf. Da die SPH-Methode zwei räumliche Auflösungsstufen aufweist, nämlich den mittleren Partikelabstand Δl und den Kerneldurchmesser D_K , kann der Spannungstensor nach Gl. (3.27) selbst dann evaluiert werden, wenn die traditionelle SPH-Perspektive vertreten wird. Dort wird der Beitrag $div[\boldsymbol{\tau}_{SFS}]_i$ zwar nicht explizit berücksichtigt, könnte aber eine implizite Folge numerischer Fehler sein. Dies lässt sich in folgender zentralen Hypothese zusammenfassen: *Wird in der SPH-Methode, bedingt durch implizite Subfilterspannungen, intrinsisch die Grobstruktur einer Strömung diskretisiert?* Die Beantwortung dieser Frage wird einer der Hauptgegenstände der nächsten Kapitel sein und bedingt eine detaillierte Analyse des Subfilterspannungstensors in Gl. (3.27). Diese wird sich auf subsonische Turbulenz fokussieren, in der numerische Fehler der SPH-Methode gemäß der Arbeit von Bauer et al. (2012) prohibitiv werden und eine Auflösung der turbulenten Feinstruktur verhindern. Lässt sich in diesen Systemen demonstrieren, dass numerische Fehler tatsächlich implizite Subfilterspannungen bedingen, würde dies implizieren, dass

- (i) die maximal physikalisch auflösbaren Skalen durch die Kernelskala D_K und die impliziten Subfilterspannungen $\boldsymbol{\tau}_{SFS}$ limitiert sind. Demnach wären für turbulente Strömungen die Begriffe SPH und SPH-LES synonym verwendbar.
- (ii) numerisch bedingte Schwankungen auf der Kernelskala D_K durch ein geeignetes explizites Modell für $\boldsymbol{\tau}_{SFS}$ adressiert werden, wovon die berechnete Grobstruktur profitieren könnte.

In Kapitel 4 wird die Hypothese zunächst stichprobenartig anhand einer experimentell validierten, näherungsweise zweidimensionalen turbulenten Strömung verifiziert. Es wird gezeigt, dass der Subfilterspannungstensor impliziter Bestandteil der SPH-Methode ist und mit numerischen Fehlern aus Abschnitt 2.2 korreliert. Die Reduktion der Dimensionalität lässt zudem eine vergleichsweise einfache Analyse der räumlichen Struktur des Tensors zu, die ein essentielles Fundament zur Formulierung expliziter Subfilterspannungsmodelle nach (ii) darstellt. Die Erkenntnisse werden anschließend in Kapitel 5 auf dreidimensionale Turbulenz übertragen. Die Hypothese wird dort nochmals systematisch geprüft, mit dem positiven Ergebnis, dass die SPH-Methode inhärent die Grobstruktur einer Strömung beschreibt, aber explizite Subfilterspannungsmodelle aus traditionellen gitterbasierten Methoden nicht einfach übertragen werden können.

4 Implizite Subfilterspannungen

In dem vorangegangenen Kapitel wurde diskutiert, dass die SPH-Methode als Lagrangesches Quadraturverfahren für die Transportgleichungen der Grobstruktur einer Strömung uminterpretiert werden kann. Dies bedingt allerdings neue, bislang unbeachtete Kräfte durch Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ (Gl. (3.27)), die zentraler Gegenstand dieses Kapitels sind. Anhand der experimentell untersuchten Strömung von Rivera et al. (2000), bei der es sich um eine dreidimensionale Realisierung einer zweidimensionalen turbulenten Strömung handelt, soll exemplarisch veranschaulicht werden, dass die SPH-Methode implizit durch Subfilterspannungen beeinflusst wird. Selbst in traditionellen SPH-Modellen, in denen der Term $div[\tau_{SFS}]_i$ in Gl. (3.25) nicht explizit berücksichtigt wird, ist $\tau_{SFS,i}$ aufgrund der zwei Auflösungsskalen D_K und Δl stets existent und korreliert, wie sich herausstellen wird, mit numerischen Diffusionseffekten.

Es ist wichtig hervorzuheben, dass dieses Kapitel zum Ziel hat, einen möglichst einfachen und anschaulichen Zugang zum Subfilterspannungstensor $\tau_{SFS,i}$ zu vermitteln. Deshalb wird hier eine zweidimensionale turbulente Strömung analysiert. Obwohl diese Reduktion der Dimensionalität den qualitativen Charakter der Turbulenz vollständig ändert (Boffetta et al., 2012; Sagaut, 2006), ist nicht bekannt, dass sich die Fehlercharakteristik der SPH-Methode durch einen Übergang von zweidimensionalen Systemen auf dreidimensionale Systeme ändert. Da der Tensor $\tau_{SFS,i}$ im Zusammenhang mit dieser Fehlercharakteristik steht, ist anzunehmen, dass die hier erarbeiteten Zusammenhänge auf dreidimensionale Strömungen übertragbar sind. Diese werden in Kapitel 5 thematisiert. Folglich sind die Ergebnisse als erste Bestätigung der Hypothese aus Abschnitt 3.2 zu verstehen. Die wesentlichen Resultate wurden schon an anderer Stelle publiziert (Okrashevski et al., 2021a) und die numerische Konvergenz des SPH-Modells in Gl. (3.25) und (3.26), ohne den Zusatzterm $div[\tau_{SFS}]_i$, wurde in der Masterarbeit von Siber (2021) untersucht.

Der Aufbau dieses Kapitels gliedert sich wie folgt: Zunächst wird das Referenzexperiment von Rivera et al. (2000) mit der zugrundeliegenden zweidimensionalen SPH-Abstraktion in Abschnitt 4.1 beschrieben und die Zielsetzung erläutert. Anschließend wird in Abschnitt 4.2 die numerisch approximierten Strömung der experimentellen Referenz gegenüber gehalten und kritisch evaluiert. Es wird argumentiert, dass sich die Abweichungen auf numerische Diffusionsfehler zurückführen lassen und mit den Subfilterspannungen korrelieren. Die Korrelation wird in Abschnitt 4.3 behandelt. Abschließend wird in Abschnitt 4.4 gezeigt, dass die räumliche Organisation des Subfilterspannungstensors charakteristisch ist und ein wichtiges Fundament zur Formulierung expliziter Subfilterspannungsmodelle darstellt. Bevor letzteres Thema in Abschnitt 4.6 adressiert wird, erfolgt ein Zwischenfazit in Abschnitt 4.5.

4.1 Referenzexperiment & Vorgehen

Das Strömungsproblem, das im Rahmen dieses Kapitel zur Untersuchung des Subfilterspannungstensors $\tau_{SFS,i}$ herangezogen wird, basiert auf der experimentellen Arbeit von Rivera et al. (2000) und stellt eine dreidimensionale Realisierung einer zweidimensionalen turbulenten Strömung dar. Es handelt sich um einen dünnen, elektrisch leitenden Flüssigkeitsfilm mit der Dicke $d = 50 \mu\text{m}$ und Horizontalausdehnung $L \times L = 7 \times 7 \text{ cm}^2$ über einer periodisch angeordneten

Magnetkonfiguration, dem von außen eine Potenzialdifferenz aufgeprägt wird (Abb. 4.1). Als Konsequenz wirkt auf die Flüssigkeit in der Filmebene eine periodische Lorentzkraft, die durch die Bewegung von Ladungen im elektrischen Feld (E-Feld) und dem dazu orthogonalen Magnetfeld (B-Feld) verursacht wird. Dies führt zur Ausbildung einer Strömung in der Filmebene, die mit wachsender Lorentzkraft zunächst die Form einer stabilen, sinusförmigen Schichtenströmung annimmt, dann aber instabil wird und in eine quasi-stationäre turbulente Strömung umschlägt.

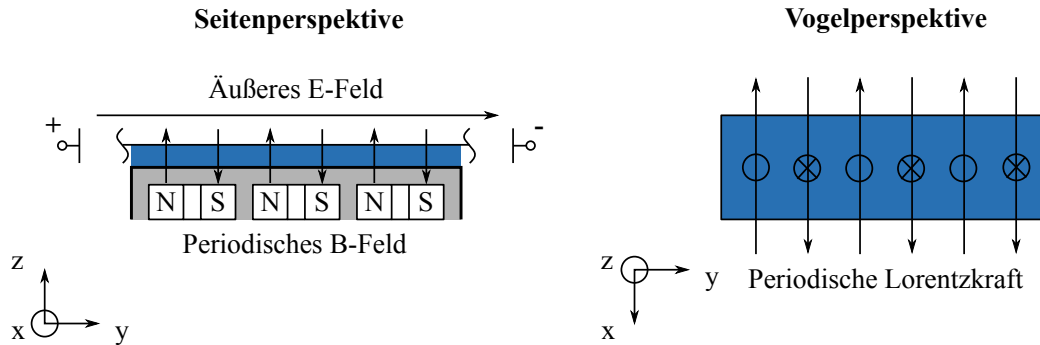


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Experiments von Rivera et al. (2000). Der dünne, elektrisch leitende Flüssigkeitsfilm ist blau dargestellt.

Das Experiment ist aus numerischer Sicht deshalb interessant, da die Autoren mittels der Particle Tracking Velocimetry (PTV) Methode (Tropea et al., 2007) nachweisen, dass die inkompressible dreidimensionale Strömung aufgrund des Ausdehnungsverhältnisses ($d \ll L$) aus der Vogelperspektive zweidimensional abstrahiert werden kann. Allerdings ist hierfür die Impulstransportgleichung adäquat zu erweitern. Abgesehen von einem zusätzlichen sinusförmigen Quellterm $\mathbf{a}_\chi = \chi \sin(k_y y) \mathbf{e}_x$ mit Amplitude χ , Wellenzahl k_y und der Richtung $\mathbf{e}_x = (1, 0)^T$, ist ein linearer Reibungsterm $\mathbf{a}_\mu = \mu \mathbf{v}$ mit der Konstanten μ zu berücksichtigen. Letzterer quantifiziert die Reibung der Filmoberfläche zur umgebenden Luft. Das Vorgehen resultiert in der sogenannten Kolmogorov Strömung (Boffetta et al., 2012), deren Impulstransportgleichung in Lagrange Form

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} + \rho (\mathbf{a}_\chi - \mathbf{a}_\mu) \quad (4.1)$$

lautet. Anhand von Gl. (4.1) lässt sich antizipieren, dass ein quasi-stationärer Zustand existiert, in dem sich Quell- und Senkenterme ausgleichen. Tatsächlich wird von Rivera et al. (2000) ein solcher Zustand beobachtet, in dem der mittlere Gehalt der kinetischen Energie konstant ist. Er lässt sich über die quadratisch gemittelte Geschwindigkeit u_{rms} (engl. *root mean square* - rms) quantifizieren. Diese lautet mit dem Flächen- $\langle \cdot \rangle_A$ und Zeitmittel $\langle \cdot \rangle_T$, sowie den experimentellen Parametern in Tabelle 4.1

$$\langle u_{rms} \rangle_T := \left\langle \sqrt{\langle \mathbf{v}^2 \rangle_A} \right\rangle_T = 0.11 \pm 0.01 \text{ m/s} , \quad (4.2)$$

wobei die Abweichung vom Mittelwert die zeitliche Instationarität während der Messung und nicht den Messfehler beschreibt. Ferner lässt sich aus Gl. (4.1) eine Energiebilanz für den quasi-

Tabelle 4.1: Experimentelle Parameter nach Rivera et al. (2000).

| ρ [kg/m ³] | η [Pas] | k_y [1/m] | μ [1/s] | L_{Box} [m] |
|-----------------------------|---------------------|-------------|-------------|---------------|
| 1000 | $1.6 \cdot 10^{-3}$ | 1047.2 | 0.7 | 0.042 |

stationären Zustand herleiten, in der sich die mittleren Änderungsraten der kinetischen Energie für den sinusförmigen Quellterm $\langle \epsilon_{inj} \rangle_T$, den viskosen Reibungsterm $\langle \epsilon_v \rangle_T$ und den linearen Reibungsterm $\langle \epsilon_{film} \rangle_T$ die Waage halten. Mit der skalaren Wirbelstärke $\omega := \partial_x v_y - \partial_y v_x$ für zweidimensionale Strömungen und der kinematischen Viskosität ν lautet die Bilanz

$$\langle \epsilon_{inj} \rangle_T = \langle \epsilon_v \rangle_T + \langle \epsilon_{film} \rangle_T \Leftrightarrow \langle \chi \sin(k_y y) v_x \rangle_{A,T} = \nu \langle \omega^2 \rangle_{A,T} + \mu \langle u_{rms}^2 \rangle_T. \quad (4.3)$$

Es ist essenziell zu betonen, dass über die PTV Messtechnik lediglich das Geschwindigkeits- und Wirbelstärkefeld in der Filmebene erschlossen werden können. Demnach ist ausschließlich die rechte Seite von Gl. (4.3) experimentell zugänglich und die Injektionsrate ϵ_{inj} ergibt sich indirekt

$$\langle \epsilon_v \rangle_T = 55 \pm 5 \text{ cm}^2/\text{s}^3, \quad \langle \epsilon_{film} \rangle_T = 85 \pm 35 \text{ cm}^2/\text{s}^3 \quad \Rightarrow \quad \langle \epsilon_{inj} \rangle_T = 140 \pm 40 \text{ cm}^2/\text{s}^3. \quad (4.4)$$

Die indirekte Bestimmung von $\langle \epsilon_{inj} \rangle_T$ mittels der PTV Messtechnik ist alternativlos, da die Amplitude χ des sinusförmigen Quellterms nicht zugänglich ist und somit eine Unbekannte darstellt. Obwohl letztere Tatsache intuitiv von Nachteil zu sein scheint, ist es exakt diese Unbekannte, die das Experiment zur Validierung von numerischen Lösungsverfahren für zweidimensionale, nichtlinear interagierende Wirbelsysteme herausstellt. Das ist insbesondere für die SPH-Methode interessant, die in solchen Strömungssituationen nachweislich durch exzessive numerische Diffusion gekennzeichnet ist (Abschnitt 2.2.1). Die Idee, die hierbei verfolgt wird, ist, die Amplitude χ so zu kalibrieren, dass $\langle u_{rms} \rangle_T$ in Gl. (4.2) korrekt wiedergegeben wird. Anschließend lässt sich prüfen, inwiefern die Energiebilanz im quasi-stationären Zustand nach Gl. (4.3) und (4.4) durch das numerische Lösungsverfahren beeinflusst wird und warum. Dies ermöglicht einen quantitativen Aufschluss über Dissipationseffekte durch numerische Diffusion.

Nachfolgend wird mit dieser Strategie das Standard WCSPH-Modell evaluiert. Es entspricht dem diskretisierten Grobstrukturmodell aus Gl. (3.25), jedoch ohne explizite Berücksichtigung des Subfilterspannungsterms. Es ist ferner mit dem sinusförmigen Quellterm \mathbf{a}_χ und dem linearen Reibungsterm \mathbf{a}_μ in Gl. (4.1) erweitert, um das Experiment auf dem periodisch angenommenen Gebiet $L_{Box} \times L_{Box}$ zu reproduzieren. Es wird lediglich eine einzelne Konfiguration mit hoher Auflösung analysiert. Die Parameter der Zustandsgleichung werden zu $\rho_{ref} = 1000 \text{ kg/m}^3$, $c_s = 2 \text{ m/s}$ und $p_{ref} = \rho_{ref} c_s^2 / 10 = 400 \text{ Pa}$ gesetzt. Dies entspricht einerseits der Dichte und der Schallgeschwindigkeit aus dem Experiment (Rivera et al., 2000), andererseits wurde der stabilitätskritische Parameter p_{ref} möglichst klein gewählt, um assoziierte numerische Diffusionseffekte gering zu halten. Für den Kerneldurchmesser wird ein Wert von $D_K = 8\Delta l$ angenommen und der Partikelabstand Δl zur Hälfte des kleinsten dissipativen Längenmaßes $l_\eta = 250 \text{ }\mu\text{m}$ nach Rivera et al. (2000) gesetzt. Aus der Wahl von Δl könnte für konventionelle

Tabelle 4.2: Numerische Parameter des SPH-Modells zur Reproduktion der Strömung von Rivera et al. (2000).

| ρ_{ref} [kg/m ³] | c_s [m/s] | p_{ref} [Pa] | Δl [μ m] | D_K [μ m] |
|-----------------------------------|-------------|----------------|-----------------------|------------------|
| 1000 | 2 | 400 | 125 | 1000 |

gitterbasierte Methoden geschlossen werden, dass eine DNS im Sinne der Statistik 2. Ordnung durchgeführt wird (Moin et al., 1998; Sreenivasan et al., 2021; Yakhot et al., 2005; Yeung et al., 2018). Für das eingesetzte SPH-Modell ist dies nachweislich nicht der Fall. Stattdessen wird die effektive Auflösung, wie in Abschnitt 3.2 antizipiert, durch die Kernelskala D_K und den unterhalb dieser Skala induzierten impliziten Subfilterspannungen diktiert. Diese spielen somit selbst in hochaufgelösten SPH-Rechnungen eine signifikante Rolle.

Zur Bewertung der Simulationsergebnisse werden die Wirbelstärke ω und die Verteilung der spektralen Energiedichte $E(k)$ nach Gl. (2.6) herangezogen, die im Postprocessing berechnet werden. Es soll nochmals hervorgehoben werden, dass $E(k)$ die Verteilung der kinetischen Energie der turbulenten Schwankungen über verschiedene Längenskalen beschreibt. Nachfolgend wird für die Berechnung das erforderliche Geschwindigkeitsfeld auf ein kartesisches Gitter interpoliert. Dieses Vorgehen wird auch in der Arbeit von Rivera et al. (2000) für die Lagrangeschen Tracerpartikel der PTV Messtechnik angewandt, was vorteilhaft im Hinblick auf die Vergleichbarkeit ist. Die Gitterweite wird mit $\Delta l/2$ spezifiziert und die Geschwindigkeiten der SPH-Partikel dem nächsten Gitterpunkt zugeordnet, was gemäß der Arbeit von Bauer et al. (2012) die spektrale Energiedichte $E(k)$ bis zur Nyquist Wellenzahl $k_{res} = 2\pi/(2\Delta l) = \pi/\Delta l$ ohne Informationsverlust korrekt wiedergibt. Anschließend lässt sich die Wirbelstärke über eine zentrale FDM 2. Ordnung erschließen und die spektrale Energiedichte über die Methode von Durran et al. (2017) für periodische Gebiete mittels räumlicher Mittelwertbildung berechnen. Letztere Methode garantiert, dass die kinetische Energie der Schwankungen erhalten bleibt und somit die diskrete Parsevalsche Gleichung erfüllt wird.

Abschließend soll angemerkt werden, dass alle numerischen Parameter zur Übersicht in Tabelle 4.2 gelistet sind. Die praktische Lösung des resultierenden SPH-Modells erfolgt mit dem hauseigenen *turboSPH* Code. Für Details sei auf die Arbeit von Chaussonnet et al. (2020) verwiesen.

4.2 Analyse der Strömung

Nachdem durch Kalibrierung $\chi = 1.8 \text{ m/s}^2$ als geeignet Amplitude für die sinusförmige Beschleunigung \mathbf{a}_χ identifiziert wurde, lässt sich zeigen, dass die experimentelle quadratisch gemittelte Geschwindigkeit $\langle u_{rms} \rangle_T$ aus Gl. (4.2) reproduziert werden kann. In Abb. 4.2 (a) ist die zeitliche Evolution von u_{rms} über ein Zeitintervall von $[0, 20]$ s dargestellt. Nach einer kurzen initialen Phase von $\Delta t = 5$ s, in der die Strömung transient aus einem Ruhezustand heraus beschleunigt wird, erreicht sie den quasi-stationären turbulenten Zustand. Im Intervall $[5, 20]$ s

stimmt u_{rms} nachweislich mit der experimentellen Charakteristik und deren instationären zeitlichen Schwankungen überein. Dies rechtfertigt, dass die zeitliche Mittelung $\langle \cdot \rangle_T$ nachfolgend auf das Intervall $[5, 20]$ s bezogen wird. Qualitativ lässt sich das Erreichen des turbulenten Zustandes anhand des Verlaufs der Axialgeschwindigkeitsverteilung v_x in Abb. 4.3 (a) und (b) erkennen. Während in Abb. 4.3 (a) eine Verteilung im initialen transienten Zeitabschnitt gezeigt wird, die durch eine stabile, laminare Schichtung gekennzeichnet ist, weist das Feld im quasi-stationären Bereich in Abb. 4.3 (b) eine komplexe, chaotische Verteilung auf. Alleine aus diesen Beobachtungen lässt sich schon schließen, dass die turbulente Strömung des Experimentes im Wesentlichen mittels der durchgeführten SPH-Simulation reproduziert werden kann.

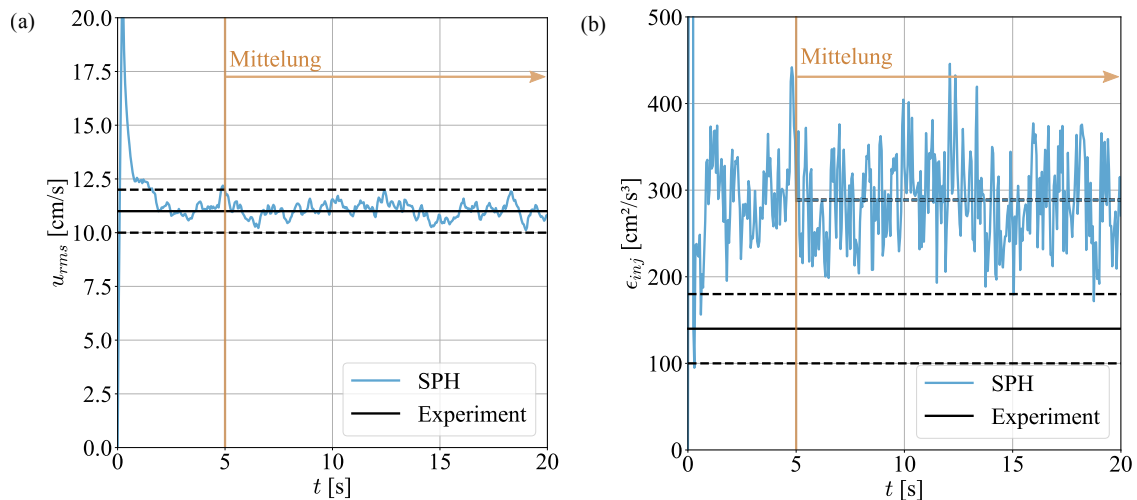


Abbildung 4.2: Vergleich der numerischen und experimentellen zeitlichen Evolution für die (a) quadratisch gemittelte Geschwindigkeit u_{rms} und (b) Energiezufuhr rate ϵ_{inj} .

Allerdings zeigt eine Auswertung der Energiebilanz nach Gl. (4.3) im quasi-stationären Bereich $[5, 20]$ s eindeutig auf, dass dafür gegenüber dem Experiment eine deutlich stärkere Energiezufuhr in das System notwendig ist. Die zeitliche Evolution der Energiezufuhr rate durch den Quellterm ϵ_{inj} ist in Abb. 4.2 illustriert. Selbst im quasi-stationären Bereich $[5, 20]$ s gibt es zwischen dem experimentellen Bereich und dem SPH-Signal keine Überlappung. Der zeitliche Mittelwert des SPH-Signals ist als gestrichelte Linie dargestellt, beträgt $\langle \epsilon_{inj} \rangle_T = 288.64 \text{ cm}^2/\text{s}^3$ und weicht somit nach Gl. (4.4) um 106 % von dem experimentellen Mittelwert ab. Anschaulich bedeutet das, dass mehr als das doppelte an Energie zugeführt werden muss, um das mittlere kinetische Energieniveau des Experiments wiederzugeben. Die Ursache dafür lässt sich eindeutig in der Energiebilanz in Gl. (4.3) identifizieren. Da u_{rms} aufgrund der Kalibrierung identisch mit der experimentellen Charakteristik übereinstimmt, wird dies auch für den linearen Reibungsterm $\mu \langle u_{rms}^2 \rangle_T$ zutreffen und zwar unabhängig von der genauen Wahl der numerischen Parameter im SPH-Modell. Umstellen von Gl. (4.3) liefert somit

$$\langle \epsilon_{film} \rangle_T = \langle \epsilon_{inj} \rangle_T - \langle \epsilon_v \rangle_T \Leftrightarrow \langle \epsilon_{film} \rangle_T = \langle \chi \sin(k_y y) v_x \rangle_{A,T} - \nu \langle \omega^2 \rangle_{A,T} = konst . \quad (4.5)$$

Daraus lässt sich schließen, dass jegliche überschüssige Energiezufuhr auf überschüssige viskose Reibung $\epsilon_v = \nu \langle \omega^2 \rangle_A$ zurückzuführen ist. Diese Beobachtung ist entscheidend, da, wie in Abschnitt 2.2.1 anhand von Gl. (2.3) erklärt, der Term nach Colagrossi et al. (2013) im Zusammenhang zum numerischen Diffusionsverhalten der SPH-Methode steht. Numerische Diffusionsfehler äußern sich durch künstliche Wirbelstärkeschwankungen, die aufgrund des quadratischen Zusammenhangs zwischen ϵ_v und ω zu zusätzlicher numerischer Dissipation führen. Die künstlichen Wirbelstärkeschwankungen lassen sich optisch direkt in beliebigen Momentaufnahmen verorten, wie in Abb. 4.3 (c) und (d) dargestellt. Obwohl das Wirbelstärkefeld

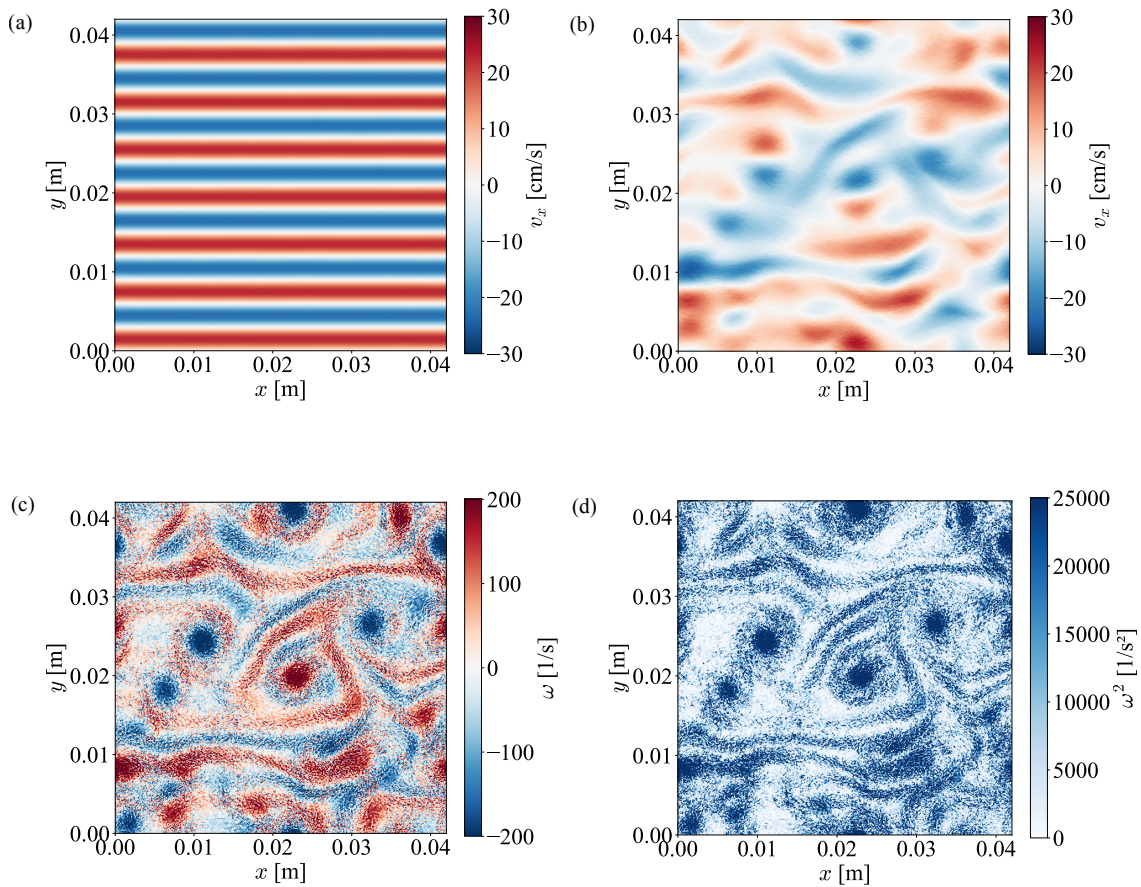


Abbildung 4.3: Momentaufnahmen des Axialgeschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt (a) $t = 0.15$ s und (b) $t = 15.9$ s, sowie des Wirbelstärkefeldes (c) und seiner Quadrierten (d) zum Zeitpunkt $t = 15.9$ s.

(Abb. 4.3 (c)) und dessen Quadrierte (Abb. 4.3 (d)) ausgedehnte Filamentstrukturen um die Wirbelkerne herum erfassen, die als qualitatives Charakteristikum zweidimensionaler turbulenter Strömungen gelten (Boffetta et al., 2012), sind die Felder maßgeblich von Rauschen betroffen. Letzteres ist die Manifestation der künstlichen Wirbelstärkeschwankungen und resultiert, wie anhand Abb. 4.2 (b) und Gl. (4.5) argumentiert, in erheblicher numerischer Dissipation.

Ausgehend von diesen Beobachtungen, ist es äußerst interessant zu hinterfragen, auf welchen Skalen diese Wirbelstärkeschwankungen stattfinden, die nachweislich die globale Energiebi-

lanz der Strömung beeinflussen. Dies lässt sich mittels der spektralen Energiedichte $E(k)$ im Zeitraum $[5, 20]$ s klären. Die Verteilung der spektralen Energiedichte $E(k)$ ist in Abb. 4.4 illustriert und mit der mittleren kinetischen Energie $e_v = \langle \mathbf{v}^2/2 \rangle_{A,T}$ normiert. Neben der resultierenden SPH-Verteilung sind zudem die Wellenzahl des sinusförmigen Quellterms und des Kerneldurchmessers (vertikale Linien), sowie die charakteristischen Skalierungen aus dem Experiment dargestellt (Rivera et al., 2016). Letztere sind ein quantitativer, statistischer Nachweis dafür, dass sich eine zweidimensionale turbulente Strömung ausbildet.

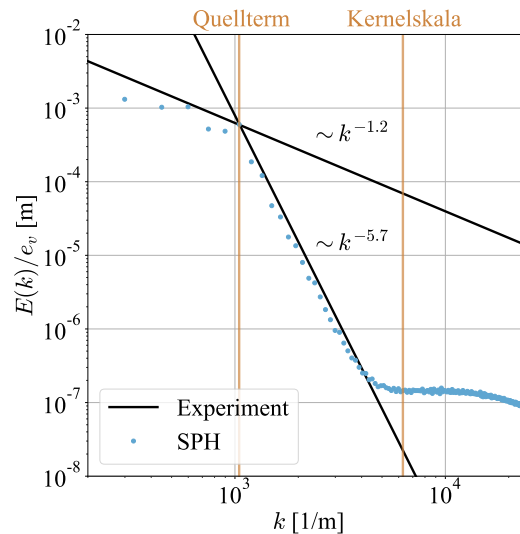


Abbildung 4.4: Abweichung der spektralen Energiedichte $E(k)$ von der experimentellen Charakteristik nach Rivera et al. (2016).

Anhand von Abb. 4.4 ist erkennbar, dass die SPH-Simulation die Energieverteilung der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen bis hin zur Kernelskala wiedergeben kann, dann jedoch in einer Art Sättigung unterhalb der Kernelskala mündet. Diese Sättigung der kinetischen Energie für Skalen unterhalb des Kerns ist rein numerisch bedingt, da das zugrunde liegende Kontinuumsmodell einen exponentiell abfallenden Dissipationsbereich auf den kleinsten Skalen aufweisen sollte (Gotoh, 1998). Interessanterweise sind es allerdings genau diese energetisch gesättigten Geschwindigkeitsschwankungen auf den kleinsten Skalen, die mit den künstlichen Wirbelstärkeschwankungen im Zusammenhang stehen und die globale Energiebilanz gemäß Gl. (4.5) drastisch verfälschen. Dies lässt sich analytisch mittels einer Relation begründen, die die viskose Dissipation ϵ_v in einer periodischen turbulenten Strömung eindeutig mit den Wirbelstärkeschwankungen ω' und der spektralen Energiedichte $E(k)$ in Zusammenhang bringt. Wird die Wirbelstärkeschwankung mit dem räumlichen Mittelwert $\langle \omega \rangle_A$ definiert, also $\omega' := \omega - \langle \omega \rangle_A$, ist aufgrund der Periodizität des Geschwindigkeitsfeldes und dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung $\langle \omega \rangle_A = 0$, woraus $\omega' = \omega$ folgt. Damit lautet der gesuchte Zusammenhang (Bailey et al., 2015)

$$\epsilon_v = \nu \langle \omega^2 \rangle_A = 2\nu \int_0^\infty k^2 E(k) dk . \quad (4.6)$$

In Anbetracht der Tatsache, dass die experimentellen Skalierungsgesetze oberhalb der Kernelskala korrekt erfasst werden und Dissipationseffekte aufgrund der k^2 Wichtung in Gl. (4.6) auf den kleinen Skalen dominant sind, kann nur der vom Experiment abweichende Sättigungsbereich unterhalb des Kernels für künstliche Wirbelstärkeschwankungen verantwortlich gemacht werden. Es sind folglich die Fehler auf den numerischen kleinsten Skalen, die die globale Energiebilanz durch numerische Dissipation verfälschen. Würde die exzessive Dissipation nicht durch die kalibrierte Energiezufuhr kompensiert werden, wäre zu erwarten, dass auch turbulente Schwankungen oberhalb der Kernelskala bei gegebener Auflösung massiv in Mitleidenschaft gezogen werden würden.

All diese Erkenntnisse sind mit der Grobstrukturperspektive in Kapitel 3 vereinbar. Augenscheinlich werden in der hochaufgelösten SPH-Simulation, trotz der durchgeführten Kalibrierung, nur turbulente Schwankungen bis nahezu der Kernelskala statistisch reproduziert. Die Grobstruktur der Strömung, begrenzt durch den Kerneldurchmesser D_K , wird physikalisch erfasst. Über diese Skalen hinaus werden allerdings Schwankungen auf der Kernelskala dominant, die im Widerspruch zu einem theoretisch erwarteten exponentiell abfallenden Dissipationsbereich stehen und nach Abschnitt 3.2 womöglich implizite Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ bedingen. Der Nachweis, dass die numerischen Fehler mit impliziten Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ korrelieren, wird im folgenden Abschnitt erbracht.

4.3 Interpretation diffusiver Fehler als Subfilterspannungen

Im vorherigen Abschnitt wurde demonstriert, dass die hochaufgelöste SPH-Simulation der turbulenten Filmströmung eine Grobstrukturlösung darstellt. Sie erfasst die turbulenten Schwankungen bis hin zur Kernelskala statistisch korrekt, wohingegen auf kleineren Skalen numerische Diffusionseffekte durch künstliche Schwankungen dominant werden. Hier soll aufgezeigt werden, dass diese Schwankungen in bestimmten Zonen der Strömung implizite Subfilterspannungen bedingen. Angesichts dessen, dass die SPH-Methode zwei räumliche Auflösungsskalen aufweist, nämlich den mittleren Partikelabstand Δl und den Kerneldurchmesser D_K , ist die Bestimmung des Spannungstensors $\tau_{SFS,i}$ nach Gleichung (3.27) im Postprocessing stets möglich. Dies gilt selbst für SPH-Simulationen, in denen der Subfilterbeitrag $div[\tau_{SFS}]_i$ in Gl. (3.25) nicht explizit berücksichtigt wird.

In Abb. 4.5 sind Momentaufnahmen der quadrierten Wirbelstärke ω^2 und der Frobeniusnorm des Tensors $\tau_{SFS,i}$ vergleichend zum Zeitpunkt $t = 15.9$ s gegenübergestellt. Im letzten Abschnitt 4.2 wurde erklärt, weshalb ω^2 ein räumlicher Indikator für numerische Diffusionseffekte darstellt. Die Frobeniusnorm quantifiziert die Stärke der impliziten Subfilterspannungen und kann als Betrag des Tensors in jedem Raumpunkt aufgefasst werden. Sie ist gegeben durch

$$\tau_{SFS,i} := \|\tau_{SFS,i}\|_F = \sqrt{\tau_{SFS,i,xx}^2 + \tau_{SFS,i,xy}^2 + \tau_{SFS,i,yx}^2 + \tau_{SFS,i,yy}^2}, \quad (4.7)$$

also als Wurzel der Summe der quadrierten Tensorkomponenten. Offensichtlich korrelieren die beiden Felder räumlich miteinander und die impliziten Subfilterspannungen sind entweder groß, wo kreisförmige Wirbelkerne vorliegen oder alternativ schmale Filamente der Wirbelstärke, die

Scherschichten repräsentieren. Dies ist gemäß Gl. (3.27) plausibel, da der Subfilterspannungstensor quadratisch auf lokale Geschwindigkeitsunterschiede ($\tilde{\mathbf{v}}_j - \tilde{\mathbf{v}}_i$) reagiert, die in solchen Zonen mit ausgeprägtem Geschwindigkeitsgradienten hoch sind. Zudem sind es auch genau diese Stellen, an denen die größten numerischen Diffusionsfehler in der SPH-Methode zu erwarten sind (Abschnitt 2.2.1). Dies bestätigt anschaulich, dass Diffusionsfehler mit impliziten Subfilterspannungen verknüpft sind.

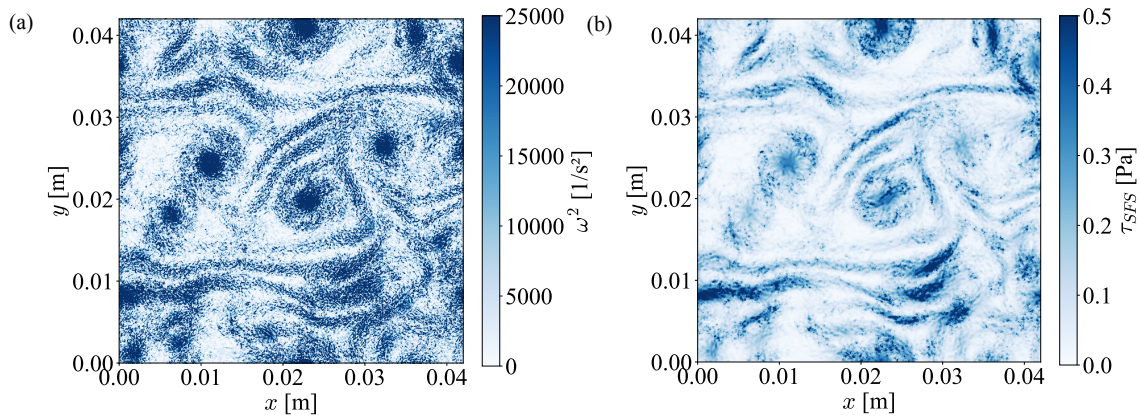


Abbildung 4.5: Vergleich der Momentaufnahmen für die (a) quadrierte Wirbelstärke ω^2 und (b) Frobeniusnorm des Subfilterspannungstensors τ_{SFS} zum Zeitpunkt $t = 15.9$ s.

Um auszuschließen, dass die Korrelation nicht nur ein zufälliges momentanes Ereignis darstellt, soll das Resultat statistisch abgesichert werden. Dafür wird im quasi-stationären Intervall [5, 20] s für jeden Zeitpunkt die Anzahl ΔN der Tupel $(\tau_{SFS,i}^*, \omega^{2*})$ gezählt, wobei die einzelnen Werte mit den entsprechenden Maxima normiert werden. Dies wird über das * Symbol notiert. Gewichtet mit der Gesamtanzahl N_{ens} des Ensembles (*ens*), lässt sich damit die bivariate Häufigkeitsverteilung in Abb. 4.6 extrahieren. Die logarithmische Farbskala repräsentiert die prozentuale Häufigkeit, mit der ein bestimmtes Tupel anzutreffen ist, und die schwarze qualitative Trendlinie grenzt weiße sehr unwahrscheinliche Zonen von blauen wahrscheinlicheren Zonen ab. Die Verteilung beschränkt sich auf $\tau_{SFS,i}^* < 0.2$ und $\omega^{2*} < 0.4$, wodurch $\sum \Delta N / N_{ens} = 99.74$ % aller statistischen Daten erfasst werden. Obwohl die häufigsten Paare insbesondere für niedrige Werte von $\tau_{SFS,i}^*$ auftreten, was sich qualitativ anhand von Abb. 4.5 plausibilisieren lässt, ist zweifellos eine kegelförmige Korrelation zwischen $\tau_{SFS,i}^*$ und ω^{2*} erkennbar. Große Werte für die quadrierte Wirbelstärke werden prinzipiell mit steigenden Werten für die Subfilterspannungen wahrscheinlicher, auch wenn diese absolut gesehen nicht häufig sind. Letzteres ist jedoch nicht zwingend erforderlich, da intensive Scherschichten und Wirbelkerne eine räumlich begrenzte Ausdehnung haben (vgl. Abb. 4.5 (b)). Folglich ist die Evidenz ausreichend, um die aus Abb. 4.5 abgeleitete Korrelationen statistisch zu stützen und der stichprobenartige Nachweis erbracht, dass implizite Subfilterspannungen selbst in hochaufgelösten SPH-Simulation auftreten. Sie sind dort signifikant, wo Zonen hoher Geschwindigkeitsgradienten anzutreffen sind und sich numerische Diffusionseffekte am stärksten äußern.

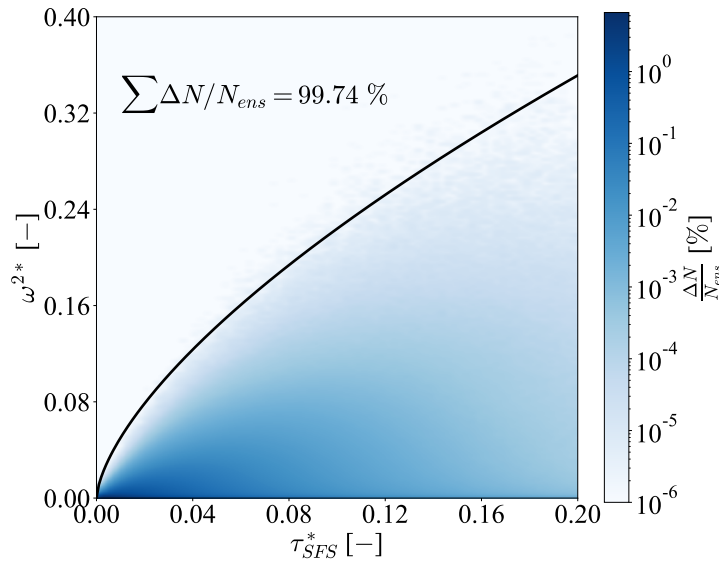


Abbildung 4.6: Bivariate Häufigkeitsverteilung für das Tupel $(\tau_{SFS,i}^*, \omega^{2*})$.

Mit diesen Erkenntnissen verbleibt abschließend zu klären, wie sich die impliziten Subfilterspannungen räumlich organisieren, das heißt in welche Richtung die resultierenden Spannungen wirken und wie stark diese ausgeprägt sind. Dies wird im folgenden Abschnitt diskutiert.

4.4 Räumliche Organisation der Subfilterspannungen

Um Einblicke in die räumliche Organisation der impliziten Subfilterspannungen generieren zu können, soll in diesem Abschnitt eine Eigenwertzerlegung des symmetrischen Tensors $\tau_{SFS,i}$ studiert werden. Damit lässt sich anhand der beiden lokalen Eigenvektoren $\mathbf{t}_{I,II}$ und Eigenwerte $\tau_{I,II}$ verstehen, in welche Richtung die resultierenden Spannungen wirken und wie stark diese Spannungen ausgeprägt sind. Das Eigenwertproblem für jedes Partikel i lautet

$$\tau_{SFS,i} \mathbf{t}_{I,II} = \tau_{I,II} \mathbf{t}_{I,II}, \quad (4.8)$$

wobei die Eigenwerte nachfolgend als Hauptspannungen und die Eigenvektoren als Hauptspannungsrichtungen bezeichnet werden. Da es sich um einen zweidimensionalen Spannungszustand handelt, lassen sich analytische Beziehungen für die Hauptspannungen und deren Richtungen entwickeln, die beispielsweise in dem Lehrbuch von Lubliner (2017) dokumentiert sind. Nach der Berechnung der gesuchten Größen werden die Eigenvektoren zudem mit ihrer euklidischen Norm $\|\cdot\|_2$ normiert und mit dem korrespondierenden Eigenwert skaliert

$$\mathbf{t}_{I,II} \rightarrow \tau_{I,II} \frac{\mathbf{t}_{I,II}}{\|\mathbf{t}_{I,II}\|_2}. \quad (4.9)$$

Die resultierenden Hauptspannungen und Hauptspannungsrichtungen sind in Abb. 4.7 illustriert, wobei letztere zur besseren Orientierung im Strömungsfeld dem entsprechenden Wirbelstärke-

feld überlagert sind. Nachfolgend soll zunächst wieder die Verteilung für die Momentaufnahme $t = 15.9$ s diskutiert werden, bevor auf die Statistik eingegangen wird.

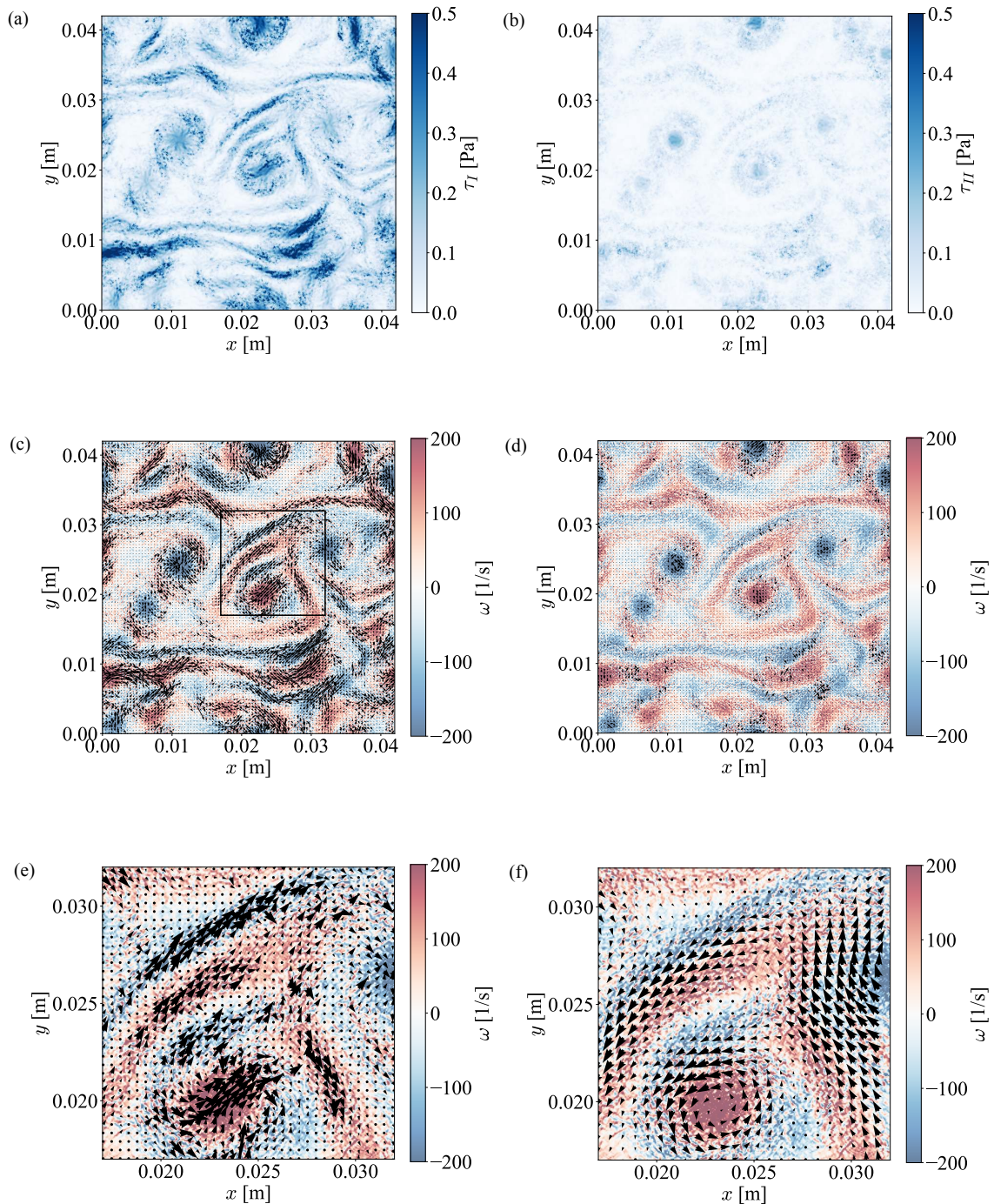


Abbildung 4.7: Visualisierung der Eigenspannungen $\tau_{I,II}$ in (a) und (b) sowie der skalierten Eigenspannungsrichtungen $\mathbf{t}_{I,II}$ in (c) und (d) für die Momentaufnahme $t = 15.9$ s. In (e) ist die schwarz eingerahmte Zone der Eigenspannungsrichtung \mathbf{t}_I aus (c) im Detail dargestellt und vergleichend dem lokalen Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} in (f) gegenübergestellt.

Anhand von Abb. 4.7 (a) und (b) ist eindeutig erkennbar, dass die resultierenden Hauptspannungen τ_I und τ_{II} die Charakteristik der Frobeniusnorm von $\tau_{SFS,i}$ in Abb. 4.5 (b) reproduzieren. Wie zu erwarten, sind die Hauptspannungen in Zonen hoher Geschwindigkeitsgradienten signifikant, also in Wirbelkernen und Scherschichten. Allerdings ist auch erkennbar, dass die Hauptspannung τ_I gegenüber τ_{II} dominant ist. Dies äußert sich direkt in den skalierten Hauptspannungsrichtungen \mathbf{t}_I und \mathbf{t}_{II} in Abb. 4.7 (c) und (d). Dort sind die resultierenden Vektorfelder als schwarze Pfeile illustriert und dem Wirbelstärkefeld der Momentaufnahme überlagert. Als Konsequenz der dominanten Hauptspannung τ_I sind lediglich in Abb. 4.7 (c) die Vektoren in besagten Zonen stark konzentriert. Diese Beobachtung rechtfertigt, die verbleibende Diskussion auf die Hauptspannungsrichtung \mathbf{t}_I zu fokussieren. Um die räumliche Organisation der Hauptspannungsrichtung nachvollziehen zu können, erfolgt beispielhaft eine Einschränkung auf die in Abb. 4.7 (c) schwarz eingerahmte Zone. Sie ist im Detail in Abb. 4.7 (e) illustriert und umfasst sowohl einen Wirbelkern als auch umgebende Scherzonen, in denen die impliziten Subfilterspannungen relevant werden. Ein Vergleich mit dem lokalen Geschwindigkeitsfeld in Abb. 4.7 (f) zeigt, dass die räumliche Ausrichtung der Hauptspannungsrichtungen ebenfalls charakteristisch ist. Im Wirbelkern scheinen \mathbf{t}_I und \mathbf{v} hauptsächlich orthogonal zueinander angeordnet zu sein, wohingegen in Scherzonen die Ausrichtung der Vektoren parallel erscheint. Somit ließe sich zumindest aus diesem kleinen räumlichen Ausschnitt schließen, dass sich die Hauptspannungen in zwei räumlich dominanten Moden organisieren. Einerseits sogenannte Schermoden, die implizite Subfilterspannungen in Hauptströmungsrichtung verursachen und an Scherzonen geknüpft sind, und andererseits sogenannte Kompressionsmoden, die implizite Subfilterspannungen orthogonal zur Hauptströmungsrichtung verursachen und in Wirbelkernen auftreten.

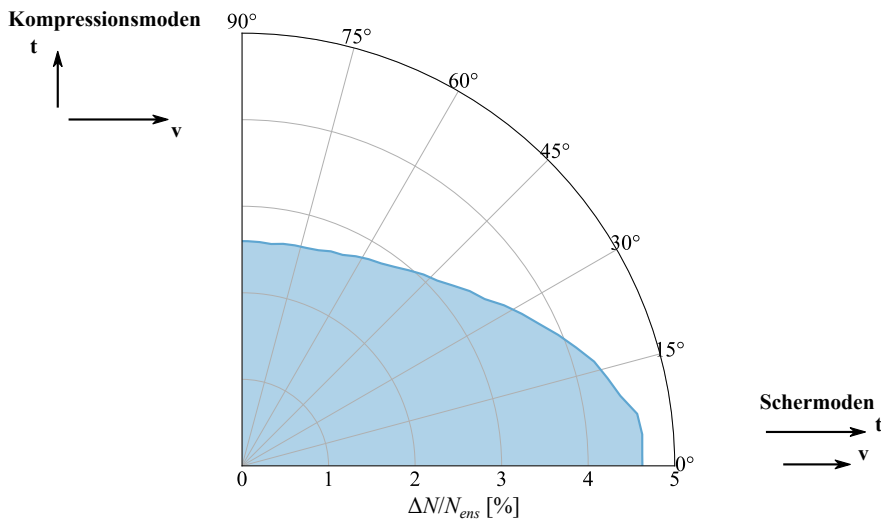


Abbildung 4.8: Prozentuale univariate Häufigkeitsverteilung $\Delta N/N_{ens}$ als Polardiagramm für den kleinsten einschließenden Winkel γ zwischen \mathbf{t}_I und \mathbf{v} unter der Kondition $\tau_{SFS,i}^* > 0.1$.

Dass dieses Bild der räumlichen Organisation der impliziten Subfilterspannungen tatsächlich stark vereinfacht ist, wird durch eine statistische Analyse des kleinsten einschließenden Winkels

$\gamma \in [0, \frac{\pi}{2}]$ zwischen \mathbf{t}_I und \mathbf{v} im quasi-stationären Intervall $[5, 20]$ s deutlich. Die prozentuale univariate Häufigkeitsverteilung $\Delta N/N_{ens}$ für den Winkel γ ist in Abb. 4.8 als Polardiagramm dargestellt, wobei die Radien die prozentuale Häufigkeit angeben und die Umfangskoordinate die erfassten Winkel. Um zu gewährleisten, dass die Statistik nur die interessanten Scherzonen und Wirbelkerne erfasst, in denen die impliziten Subfilterspannungen relevant sind, werden lediglich Hauptspannungsrichtungen berücksichtigt, für deren normierten Spannungsbetrag $\tau_{SFS,i}^* > 0.1$ gilt. Anschaulich gesprochen bedeutet dies, dass die nahezu weißen Zonen in Abb. (4.7) (a) und (b) die Statistik nicht verfälschen. Das Resultat in Abb. 4.8 gibt eindeutigen Aufschluss darüber, dass der Übergang zwischen Schermoden und Kompressionsmoden fließend ist. Wider Erwarten ist die Verteilung nicht bimodal. Es ist keine lokale Häufung in $\gamma = 0$ und $\gamma = \pi/2$ zu beobachten, sondern stattdessen ein monotoner Abfall der Häufigkeiten mit dem Winkel von den Schermoden hin zu den Kompressionsmoden. Diese Einsicht ist dennoch höchst interessant, da aus der Verteilung deutlich wird, dass sich implizite Subfilterspannungen statistisch meistens als Schermoden äußern. In den beiden Extremfällen $\gamma \approx 0$ und $\gamma \approx \pi/2$ beträgt das Verhältnis der Häufigkeiten $\frac{4.6\%}{2.6\%} \approx 1.77$. Aber selbst wenn die Intervalle $\gamma \in [0, \pi/4]$ und $\gamma \in [\pi/4, \pi/2]$ als verschmierte Scher- und Kompressionsmoden aufgefasst werden, beträgt das kumulierte Häufigkeitsverhältnis $\frac{59\%}{41\%} \approx 1.44$. Anschaulich lässt sich daraus schlussfolgern, dass die impliziten Subfilterspannungen nicht nur mit den numerischen Diffusionsfehlern korrelieren, sondern auch kausal einen primär diffusiven Impulstransport quer zur Hauptströmungsrichtung bedingen. Die resultierenden Spannungen in Hauptströmungsrichtung bewerkstelligen ein lokales Angleichen der Geschwindigkeiten, das phänomenologisch von Basa et al. (2009) beschrieben wurde und modellhaft in Abb. 2.2 dargestellt ist.

4.5 Zwischenfazit

Mittels der in diesem Abschnitt durchgeführten Analyse der näherungsweise zweidimensionalen turbulenten Filmströmung von Rivera et al. (2000), lässt sich erstmals die in Abschnitt 3.2 formulierte Hypothese bestätigen. Die SPH-Methode approximiert intrinsisch die Grobstruktur der Strömung. Dies ist selbst für die hier präsentierte hochaufgelöste und kalibrierte SPH-Simulation der Fall. Die effektive Auflösung wird nachweislich durch die Kernelskala D_K , sowie implizite Subfilterspannungen begrenzt, wie in Punkt (i) in Abschnitt 3.2 antizipiert. Insofern wurde in diesem Kapitel eine SPH-LES präsentiert, deren Subfilterbeiträge implizit durch numerische Fehler realisiert werden und sich in messbaren Subfilterspannungen äußern. Anhand der Verteilung der spektralen Energiedichte $E(k)$ in Abb. 4.4, sowie der Verteilung der quadrierten Wirbelstärke ω^2 , konnte argumentiert werden, dass numerische Fehler auf der Kernelskala mit impliziten Subfilterspannungen korrelieren. Ferner wurde mittels der Untersuchung des Eigenwertproblems in Gl. (4.8) demonstriert, dass die resultierenden impliziten Subfilterspannungen statistisch dominant als Schermoden auftreten. Damit ist gemeint, dass die resultierenden Spannungen primär in Richtung der Hauptströmung wirken, was ein Angleichen der Strömungsgeschwindigkeit in Querrichtung bedingt. Somit bewerkstelligen die Subfilterspannungen einen diffusiven Impulstransport, der demjenigen in Scherschichten ähnelt. Zwar ist das numerisch diffusive Verhalten aus empirischer Sicht nicht sonderlich überraschend (Ab-

schnitt 2.2.1), lässt sich nun aber durch den Tensor der impliziten Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ mathematisch fassen.

Obwohl diese Einsichten starke Indizien für die intrinsische Grobstrukturperspektive der SPH-Methode darstellen, wurde in diesem Abschnitt nicht geklärt, wie sich die impliziten Subfilterspannungen mit höherer Auflösung verhalten, also auf kleinere D_K und zunehmende N_{ngb} reagieren. Außerdem ist ungeklärt, ob die Zusammenhänge auf dreidimensionale Turbulenz übertragbar sind. Zwar ist die SPH-Fehlercharakteristik durch die Dimensionalität unberührt und somit auch für dreidimensionale SPH-Simulationen eine Limiterung durch den Kerneldurchmesser D_K und implizite Subfilterspannungen zu erwarten, ein konkreter Nachweis ist jedoch noch zu erbringen. Diese beiden Punkte werden im folgenden Kapitel 5 adressiert.

Des Weiteren stellt sich die Frage, inwiefern sich dieses Wissen nutzen lässt, um den Einsatz expliziter Subfilterspannungsmodelle, wie zum Beispiel des populären Smagorinsky-Modells (Abschnitt 2.5), zu rechtfertigen. Welche Erwartungen müssen an diese Modelle im SPH-Kontext gestellt werden und welche Ziele müssen diese verfolgen? Dies soll im nächsten Abschnitt diskutiert werden, bevor deren praktische Eignung im Kontext dreidimensionaler Turbulenz in Kapitel 5 überprüft wird.

4.6 Reduktion von Subfilterspannungen durch explizite Modellierung

Nachdem für die hier betrachtete zweidimensionale turbulente Strömung nachgewiesen werden konnte, dass die SPH-Methode intrinsisch als LES mit impliziten numerisch bedingten Subfilterspannungen auftritt, stellt sich eine wesentliche Frage. Können durch explizite Subfilterspannungsmodelle Verbesserungen der Grobstrukturdynamik erzielt werden? Wie in Abschnitt 2.5 angesprochen, wurde diese Frage noch nie im SPH-LES-Kontext beantwortet. Bislang überwiegt die Meinung, mit Ausnahmen der Arbeiten von Monaghan (2011), Adami et al. (2012) und Hu et al. (2015), dass SPH-LES-Ansätze zwangsläufig ein explizites Modell für die Subfilterbeiträge erfordern. Beispielhaft hierfür seien die Arbeiten aus Abschnitt 2.5 nochmals aufgeführt (Antuono et al., 2021a; Dalrymple et al., 2006; Di Mascio et al., 2017; Lo et al., 2002; Mayrhofer et al., 2015; Violeau et al., 2007). Diese vermeintliche Notwendigkeit ist aus Sicht der hier erarbeiteten Grobstrukturperspektive nachweislich falsch. Auch in konventionellen gitterbasierten Verfahren existieren eine Reihe von LES-Ansätzen, die als implizite LES-Verfahren bekannt sind (iLES) und in denen numerische Fehlerterme die Subfilterbeiträge realisieren (Fröhlich, 2006; Sagaut, 2006). Das bedeutet allerdings nicht, dass explizite Modelle nicht notwendig oder gar unattraktiv wären.

Diese Diskussion im SPH-LES-Kontext ist Gegenstand dieses Abschnitts und erhebt den Anspruch möglichst generell zu sein. Damit ist gemeint, dass im Gegensatz zu diesem Kapitel auch diejenigen Situationen zu berücksichtigen sind, in denen eine Kalibrierung der mittleren kinetischen Energie der Geschwindigkeitsschwankungen nicht möglich ist. Wie von Bauer et al. (2012) für subsonische dreidimensionale Turbulenz demonstriert, können die turbulenten Fluktuationen dann nicht mehr korrekt bis hin zur Kernelskala wiedergegeben werden. Als

Diskussionsgrundlage sind deshalb die qualitativen Spektren aus Abschnitt 2.3 nochmals mit Ergänzungen in Abb. 4.9 reproduziert.

In Abb. 4.9 sind eine DNS-Lösung sowie eine SPH-Lösung mit identischem Δl einander gegenübergestellt. Während die DNS den Inertialbereich und den exponentiell abfallenden Dissipationsbereich der Turbulenz korrekt wiedergibt, weist die SPH-Lösung auf den kleinsten Skalen die typischen Kernelschwankungen auf. Wie in diesem Kapitel demonstriert wurde, induzieren sie implizite Subfilterspannungen, die für das charakteristische Energiedefizit im Inertialbereich verantwortlich sein müssen. In Analogie zum molekülbedingten Impulstransport, der sich auf Kontinuumsebene als viskose Reibung äußert und die Ausbildung des Dissipationsbereichs in $E(k)$ begründet, wirken die Subkernelschwankungen kollektiv als Dissipation auf der Grobstrukturebene. Dies führt zur Abweichung der Grobstrukturdynamik vom idealen Skalierungsgesetz $E(k) \sim k^{-5/3}$ und besteht selbst oberhalb der Kernelskala. Das Ziel von expliziten Subfilterspannungsmodellen muss demnach sein, die numerischen Schwankungen zu reduzieren oder gar zu eliminieren. Dies wird in Abb. 4.9 anhand des 1. roten Pfades illustriert, der in der idealen SPH-Lösung mit explizitem Subfilterspannungsmodell resultiert (blaue Kurve - SFS) und eine Behebung des Energiedefizits nach dem 2. roten Pfad impliziert. Unter Berücksichtigung des Konvergenzverhaltens der SPH-Methode könnte somit bestenfalls erreicht werden, dass der Inertialbereich der turbulenten Schwankung bis hin zur Kernelskala D_K statistisch wiedergegeben wird. Dies ist natürlich mit erheblichen Kosten gegenüber einer konventionellen gitterbasierten DNS verknüpft, was bedeutet, dass der Einsatz der SPH-Methode für den Einzelfall stark abzuwägen ist.

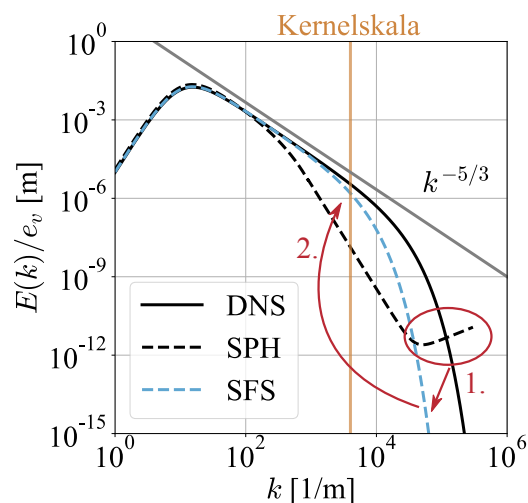


Abbildung 4.9: Schematischer Verlauf der spektralen Energiedichte $E(k)$ zur Erörterung der Anforderungen und Zielsetzung an explizite Subfilterspannungsmodelle im SPH-Kontext.

Obwohl es plausibel erscheint, die numerischen Schwankungen unterhalb der Kernelskala mit expliziten Modellen zu bekämpfen und dadurch die Entstehung von impliziten Subfilterspannungen zu verhindern, ist konkret zu klären, wie dieses Ziel mathematisch zu erreichen ist. In konventionellen gitterbasierten LES-Verfahren existieren eine überwältigende Anzahl von expli-

ziten Subfilterspannungsmodellen, die nach verschiedenen Kriterien klassifiziert werden können und verschiedene Zwecke erfüllen. Die Lehrbücher von Fröhlich (2006) und Sagaut (2006) geben einen guten Überblick, aber auch neuere Übersichtsarbeiten von Silvis et al. (2017) und Moser et al. (2021) sind zu empfehlen. Die wohl größte und bekannteste Klasse von Modellen in diesem Kontext sind dissipative Wirbelviskositätsmodelle, die sich der Boussinesq-Hypothese bedienen (Schmitt, 2007). Auch das Smagorinsky-Modell, das exklusiv in vorherigen SPH-LES-Arbeiten verwendet wurde (Abschnitt 2.5), ist dieser Klasse zuzuordnen. Diese Modelle sind in der Lage, das im statistischen Mittel dissipative Verhalten der Turbulenzkaskade wiederzugeben und sind verhältnismäßig simpel (Moser et al., 2021; Silvis et al., 2017). Allerdings wird häufig kritisiert, dass sie die tatsächliche Physik der unaufgelösten Feinstruktur unterhalb der Filterskala nur unzureichend repräsentieren. Dies ist allerdings unproblematisch, da explizite Subfiltermodelle nicht zwangsläufig die Subfilterphysik korrekt wiedergeben müssen. Stattdessen ist ihr primäres Ziel die aufgelöste Grobstruktur vor schädlichen, numerisch dissipativen Schwankungen unterhalb der Filterskala zu isolieren (Aluie et al., 2022; Dairay et al., 2017). Unter diesem Gesichtspunkt erfüllen dissipative Wirbelviskositätsmodelle auf den ersten Blick die theoretischen Anforderungen expliziter Subfilterspannungsmodelle im SPH-Kontext und scheinen für die hier verfolgten Ziele zweckmäßig. Die Kernidee ist somit, die unkontrollierte numerische Dissipation durch explizite Dissipation zu ersetzen, die die kleinsten, verrauschten Skalen zum Erliegen bringt.

Um zu prüfen, ob traditionelle Wirbelviskositätsmodelle praktisch den beschriebenen Anforderungen gerecht werden, werden in Kapitel 5 folgende Modelle für den Term $div [\tau_{SFS}]_i$ in Gl. (3.25) auf ihre Eignung hin untersucht. Für die Filterweite des Modells wird $\Delta = D_K$ gewählt, was im Einklang mit der Grobstrukturperspektive ist. Abweichungen hiervon werden entsprechend indiziert. Es stehen dabei folgende Ansätze im Fokus, die detailliert in Anhang A.1.4 ausgeführt sind:

- **SMAG**: Das klassische Smagorinsky-Modell diskretisiert nach Gl. (A.18), (A.19) und (A.21). Dieses ist für $N_{ngb} \rightarrow \infty$ Drehmoment erhaltend (Sijacki et al., 2006).
- **SIGMA**: Das verbesserte σ -Modell von Nicoud et al. (2011) diskretisiert nach Gl. (A.18), (A.19) und (A.22). Dieses ist für $N_{ngb} \rightarrow \infty$ Drehmoment erhaltend (Sijacki et al., 2006) und eliminiert Nachteile des Smagorinsky-Modells, wie beispielsweise die Dissipation in laminaren Strömungszonen (Nicoud et al., 2011; Silvis et al., 2017).
- **SMAG-MCG**: Das klassische Smagorinsky-Modell, allerdings diskretisiert nach Gl. (A.21) und (A.23) in der sogenannten Monaghan-Cleary-Gingold (MCG) Form (Cleary et al., 1999; Colagrossi et al., 2017). Es zeichnet sich dadurch aus, dass es auch Drehmoment im diskreten Partikelmodell erhält.

5 SPH-LES subsonischer dreidimensionaler Turbulenz

Im vorherigen Kapitel 4 konnte die in Kapitel 3 eingeführte theoretische Grobstrukturperspektive auf die SPH-Methode exemplarisch anhand einer näherungsweise zweidimensionalen turbulenten Strömung bestätigt werden. Trotz Kalibrierung des Systems konnten turbulente Schwankungen, limitiert durch implizite Subfilterspannungen, lediglich bis zum Kerneldurchmesser korrekt wiedergegeben werden. Dies verdeutlicht erstmals, dass die SPH-Methode im Kontext turbulenter Strömung intrinsisch als SPH-LES-Verfahren operiert.

In diesem Kapitel soll überprüft werden, ob diese Einsichten auch bei subsonischer dreidimensionaler Turbulenz standhalten. Da Turbulenz in der Natur inhärent dreidimensional ist, ist dieser Nachweis zur Überprüfung der Grobstrukturtheorie und Beantwortung der ursprünglichen Leitfrage dieser Arbeit zwingend erforderlich. Als Referenzproblem soll ein möglichst herausforderndes und gleichzeitig validiertes Strömungsproblem herangezogen werden, um die Belastbarkeit der Resultate zu untermauern. Abgesehen von der Dreidimensionalität soll es sich von der Strömung in Kapitel 4 dahingehend unterscheiden, dass sich die Turbulenz von wohl definierten Anfangsbedingungen ausgehend frei entwickelt und keine Energiezufuhr vorgesehen ist. Letzteres bedeutet, dass etwaige Defizite, wie beispielsweise exzessive Dissipation, nicht durch eine Kalibrierung des Quellterms kompensiert werden können.

Die Gliederung des Kapitels ist wie folgt. In Abschnitt 5.1 wird das Referenzproblem und die verfolgte Strategie erörtert. Danach wird das Kapitel in zwei Hauptteile aufgeschlüsselt. Im ersten Teil wird das Referenzproblem mittels des SPH-Modells aus Gl. (3.25) und (3.26) in Abschnitt 5.2 analysiert. Zunächst wird auf ein explizites Modell für den Subfilterbeitrag $div [\tau_{SFS}]_i$ verzichtet. Es werden folgende Ziele verfolgt: Erstens soll der Stand der Wissenschaft nach Bauer et al. (2012) für ein alternatives Turbulenzproblem aufgegriffen und demonstriert werden, dass die Konvergenzaussage der Autoren für steigende N_{ngb} einer Revision bedarf (Abschnitt 2.4). Zweitens soll, analog zu Kapitel 4, die Limitierung der effektiven Auflösung durch implizite Subfilterspannungen aufgezeigt werden. Ausgehend von diesen Resultaten wird dann im zweiten Teil in Abschnitt 5.3 die Eignung von expliziten Modellen für $div [\tau_{SFS}]_i$ in Gl. (3.25) untersucht. Im Sinne von Abschnitt 4.6 wird diskutiert, ob traditionelle dissipative Modelle für den Subfilterbeitrag $div [\tau_{SFS}]_i$ zu einer besseren Approximation der turbulenten Strömung führen. Im abschließenden Abschnitt 5.4 wird ein Ausblick auf weitere Arbeiten präsentiert, der aufzeigt, dass die in dieser Arbeit entwickelte Grobstrukturtheorie keine Erklärungsansätze für numerische Dispersionsfehler liefert. Diese könnten jedoch eine wesentliche Rolle bei der Berechnung subsonischer Turbulenz mittels SPH spielen, wie exemplarisch demonstriert wird. Es sei angemerkt, dass der Kern dieses Kapitels schon an anderer Stelle publiziert wurde (Okrashevski et al., 2022).

5.1 Referenzproblem & Vorgehen

Das generische Strömungsproblem, das im Rahmen dieses Kapitels analysiert werden soll, wurde ursprünglich von Taylor et al. (1937) vorgeschlagen. Es handelt sich dabei um eine

sich frei entwickelnde, periodische Strömung auf dem Gebiet $\Omega = [0, 2\pi]^3$ deren initiales Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} durch die Komponenten

$$\begin{aligned} v_{0,x}(x, y, z) &= +v_0 \sin(x) \cos(y) \cos(z) \\ v_{0,y}(x, y, z) &= -v_0 \cos(x) \sin(y) \cos(z) \\ v_{0,z}(x, y, z) &= 0 \end{aligned} \quad (5.1)$$

gegeben ist. Das korrespondierende Druckfeld im inkompressiblen Grenzfall ergibt sich aus Lösung einer Poisson-Gleichung (Pereira et al., 2021) und lautet

$$p_0(x, y, z) = p_{ref} + \frac{\rho_{ref} v_0^2}{16} (2 + \cos(2z)) (\cos(2x) + \cos(2y)) . \quad (5.2)$$

Da sich die Strömung von laminaren Anfangsbedingungen aus frei entwickelt und bei ausreichend großer Reynoldszahl Re über einen komplexen wirbeldynamischen Prozess in näherungsweise homogen isotrope Turbulenz kaskadiert, ist die Strömung ein beliebtes und herausforderndes Referenzproblem zur Validierung von LES-Verfahren (Dairay et al., 2017; Drikakis et al., 2007; Moura et al., 2017; Pereira et al., 2021). Dies motiviert ebenfalls die Auswahl für diese Arbeit. Insbesondere soll die Strömung hier bei einer hohen Reynoldszahl von $Re = 10^4$ mit $v_0 = 1$ m/s analysiert werden, was einen Vergleich mit der DNS-Lösung von Dairay et al. (2017) ermöglicht. Letztere wurde von den besagten Autoren mit dem Finite Differenzen Code *Incompact3d* (Laietz et al., 2011) und einem Verfahren sechster Ordnung berechnet und öffentlich zur Verfügung gestellt.

Die im Folgenden analysierten SPH-LES-Simulationen nach Gl. (3.25) und (3.26) wurden wie in Kapitel 4 mit dem hauseigenen Code *turboSPH* durchgeführt. Sie umfassen ein Zeitintervall von $[0, 15]$ s und sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Die Fälle 1-11 und 20-21 stellen SPH-LES-Simulationen mit impliziten Subfilterspannungen dar und werden in Abschnitt 5.2 und 5.4 thematisiert. Die verbleibenden Fälle 12-19 repräsentieren Simulationen mit explizitem Subfilterspannungsmodell und sind Gegenstand von Abschnitt 5.3. Generell werden Kombinationen aus vier unterschiedlichen Partikelzahlen $N \in \{128^3, 192^3, 256^3, 512^3\}$, zwei unterschiedlichen Kernen, sowie drei unterschiedlichen Kerneldurchmessern $D_K \in \{4, 6, 8\} \Delta l$ untersucht. Als Kernel kommen der quintische Spline-Kernel (QS) und der Wendland C4 Kernel (WC4) zum Einsatz (Dehnen et al., 2012). Der mittlere Partikelabstand ergibt sich aus der gewählten Partikelanzahl nach $\Delta l = 2\pi/\sqrt[3]{N}$ und die in der Tabelle angegebenen Nachbarn N_{ngb} sind für das gewählte Verhältnis $D_K/\Delta l$ auf einem kartesischen Gitter berechnet. Alle SPH-Partikel werden initial auf einem kartesischen Gitter platziert, um diese dann in Vorsimulationen mittels des Packing-Algorithmus von Colagrossi et al. (2012) in ihre stabilste Anordnung zu überführen. Erst im Anschluss werden den Partikeln die Anfangsbedingungen aus Gl. (5.1) und (5.2) aufgebracht. Um das initiale Druckfeld reproduzieren zu können, wird aus Gl. (5.2) und der barotropen Zustandsgleichung in Gl. (3.25) ein korrespondierendes Dichtefeld ρ_0 bestimmt, das sich in eine konsistente Massenverteilung $M_0 = \rho_0 \Delta l^3$ umrechnen lässt. Für die barotrope Zustandsgleichung in Gl. (3.25) wird zudem $\rho_{ref} = 1$ kg/m³, $c_s = 5$ m/s und $p_{ref} = \rho_{ref} c_s^2 / 4 = 6.25$ Pa vorgegeben. Die Wahl $c_s = 5$ m/s bedingt eine stark subsonische Strömung mit initialer Mach-

Tabelle 5.1: SPH-LES-Simulationen der Taylor-Green Strömung.

| Fall | Kernel | Partikelanzahl N | | | | Kernelskala D_K | | | | Nachbarn N_{rgb} | | | Explizites SFS Modell | | | Anmerkung | |
|------|--------|--------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------|--------------|--------------|--------------|--------------------|-----|-----|-----------------------|-------|----------|-----------|--------------------|
| | | 128 ³ | 192 ³ | 256 ³ | 512 ³ | 4 Δl | 6 Δl | 8 Δl | 8 Δl | 30 | 120 | 250 | SMAG | SIGMA | SMAG-MCG | | |
| 1 | QS | × | | | | × | | | | | × | | | | | | |
| 2 | QS | | × | | | × | | | | | × | | | | | | |
| 3 | QS | | | × | | × | | | | | × | | | | | | |
| 4 | QS | | | | × | × | | | | | × | | | | | | |
| 5 | WC4 | | | × | | × | | | × | | | | | | | | |
| 6 | WC4 | | | × | | × | | | | | × | | | | | | |
| 7 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | | | | |
| 8 | WC4 | × | | | | | | | × | | | | | | | | |
| 9 | WC4 | | × | | | | | | × | | | | | | | | |
| 10 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | | | | |
| 11 | WC4 | | | | × | | | | × | | | | | | | | |
| 12 | WC4 | × | | | | | | | × | | | | | × | | | |
| 13 | WC4 | | × | | | | | | × | | | | | × | | | |
| 14 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | × | | | |
| 15 | WC4 | | | | × | | | | × | | | | | × | | | |
| 16 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | × | | | |
| 17 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | | × | | |
| 18 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | × | | | $C_S = 0.075$ |
| 19 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | × | | | $C_S = 0.3$ |
| 20 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | | | | Erhöhtes p_{ref} |
| 21 | WC4 | | | × | | | | | × | | | | | | | | $v_{0,z} = \pi$ |

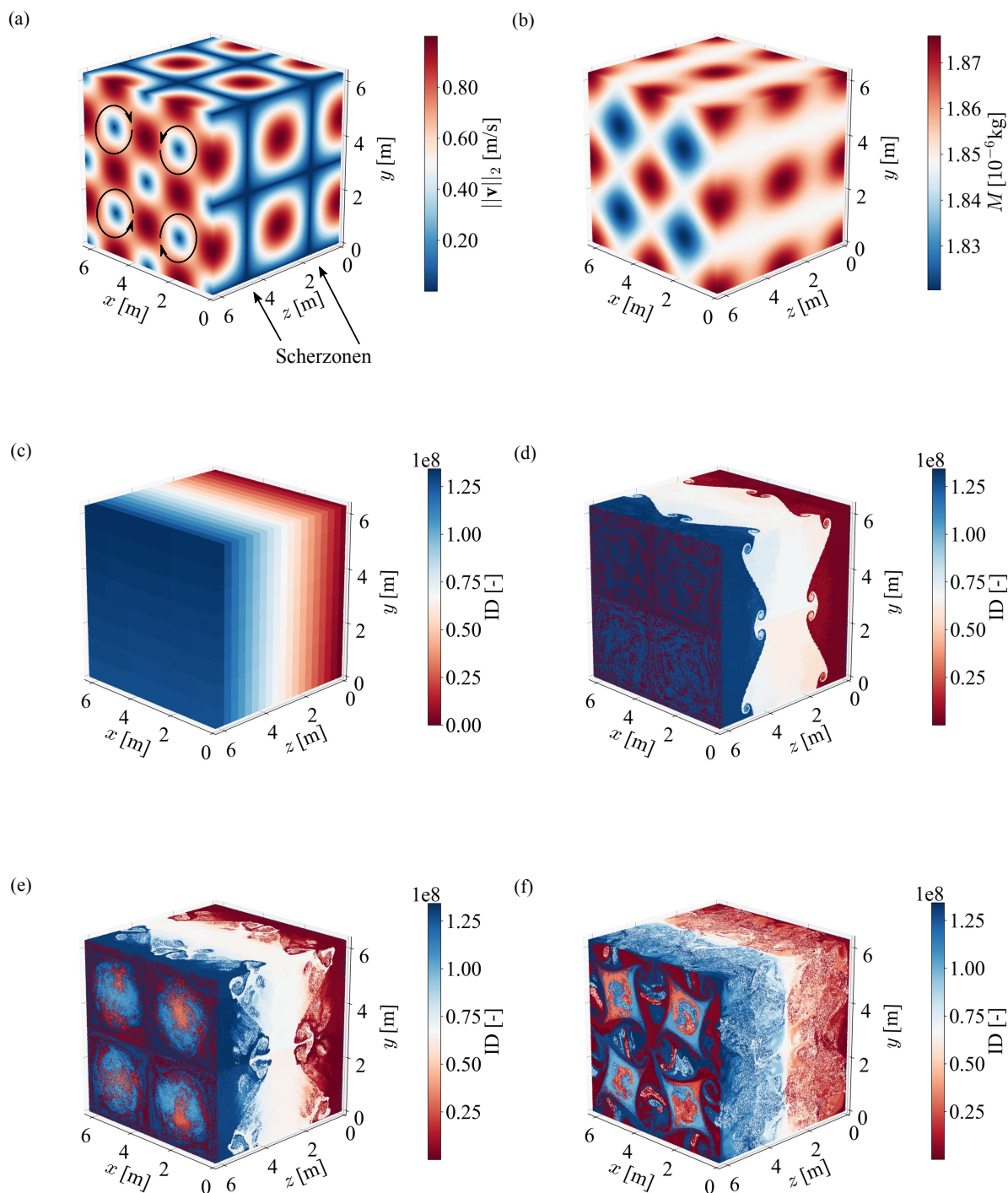


Abbildung 5.1: Initiale Verteilung der (a) Norm des Geschwindigkeitsfeldes $||\mathbf{v}||_2$, (b) konsistenten Massenverteilung M_0 , (c) Partikelidentitäten (ID) sowie der zeitlichen Evolution der letzteren für Fall 11 (höchste Auflösung). Die Momentaufnahmen entsprechen: (d) $t = 5$ s, (e) $t = 9$ s, (f) $t = 14$ s.

zahl $Ma = 0.2$ und die Wahl für p_{ref} ist ein Kompromiss zwischen Stabilität und numerischer Dissipation (Marrone et al., 2013).

Die resultierende Initialisierung sowie eine qualitative zeitliche Entwicklung des Strömungsfeldes für Fall 11 (genaueste Lösung) ist in Abb. 5.1 illustriert. In Abb. 5.1 (a) ist die Norm des Geschwindigkeitsfeldes $\|\mathbf{v}\|_2$ inklusive des Drehsinns der laminaren Wirbel auf der Stirnseite $z = 2\pi$ dargestellt. Zudem sind Scherzonen als Konsequenz des Wirbelsystems hervorgehoben. In Abb. 5.1 (b) ist die korrespondierende Massenverteilung M_0 visualisiert, die eindeutig die lokalen Druckminima in den Wirbelkernen wiedergibt. Zudem ist in Abb. 5.1 (c) die anfängliche Verteilung der einzigartigen Partikelidentitäten (ID) dargestellt, um qualitativ anhand der Lagrangeschen Vermischung aufzuzeigen, dass das hier untersuchte SPH-LES-Modell für die höchste Auflösung in der Lage ist, die wesentlichen Eigenschaften der Strömung zu erfassen. Wie erwartet, bilden sich zunächst primäre Instabilitäten aus (Abb. 5.1 (d)), die weitere Instabilitätsmechanismen (Abb. 5.1 (e)) und letztendlich Turbulenz bedingen (Abb. 5.1 (f)).

Zur Bewertung der Qualität der berechneten SPH-LES-Lösungen werden nachfolgend verschiedene Metriken in Analogie zur Studie von Dairay et al. (2017) analysiert. Um die Dissipation im Volumen des gesamten Strömungsgebietes quantifizieren zu können, wird zunächst die mittlere kinetische Energie

$$e_v(t) := \frac{1}{2} \frac{\sum_{i=1}^N \tilde{\mathbf{v}}_i^2 M_i}{\sum_{i=1}^N M_i} \quad (5.3)$$

eingeführt. Sie enthält eine Massenwichtung, um den leicht unterschiedlichen Partikelmassen, bedingt durch die Druckfeldinitialisierung, Rechnung zu tragen. Aus diesem Signal lässt sich direkt die mittlere Dissipationsrate ϵ_v als zeitliche Ableitung erschließen

$$\epsilon_t(t) = -\frac{de_v}{dt} = \epsilon_v, \quad (5.4)$$

da es sich um eine sich frei entwickelnde periodische Strömung handelt. Als wichtigste quantitative Metrik wird darüber hinaus die spektrale Energiedichte $E(k)$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s berechnet, an dem gemäß der DNS-Lösung eine entwickelte turbulente Strömung mit ausgedehntem Inertialbereich $E(k) \sim k^{-5/3}$ vorliegen sollte (Dairay et al., 2017). Damit lässt sich einerseits bewerten, ob das Grobstrukturmodell in Gl. (3.25) in der Lage ist, die Statistik turbulenter Schwankungen wiederzugeben, und andererseits, bis zu welchen effektiven Skalen diese Schwankungen aufgelöst werden können. Praktisch erfolgt die Berechnung im Postprocessing mit derselben Strategie wie in Abschnitt 4.1. Das heißt, dass die Geschwindigkeiten der SPH-Partikel den nächstgelegenen Knotenpunkten eines äquidistanten, kartesischen Gitters mit Weite $\Delta l/2$ zugeordnet werden, um anschließend nach Durran et al. (2017) die spektrale Energiedichte berechnen zu können. Da zudem in Abschnitt 4.2 und 4.3 identifiziert wurde, dass die Dissipationsrate ϵ_v dem funktionalen Zusammenhang

$$\epsilon_v = f(\omega^2, E(k), \tau_{SFS,i}) \quad (5.5)$$

unterliegt, wird auf demselben kartesischen Gitter mittels einer zentralen Finiten-Differenzen-Methode 2. Ordnung die Wirbelstärke $\omega := \nabla \wedge \tilde{\mathbf{v}}$ berechnet. Gemäß Abschnitt 4.3 lässt sich dann erneut anhand der Korrelation von quadrierter Wirbelstärke ω^2 und Frobeniusnorm des

Subfilterspannungstensors $\tau_{SFS,i} := \|\tau_{SFS,i}\|_F$ demonstrieren, dass die SPH-Methode durch implizite Subfilterspannungen limitiert wird.

5.2 SPH-LES mit impliziten Subfilterspannungen

In diesem Unterkapitel wird das SPH-LES-Modell aus Gl. (3.25) und (3.26) für das zuvor eingeführte Referenzproblem ohne den expliziten Subfilterbeitrag $div[\tau_{SFS}]_i$ überprüft. Formal entspricht dies einer gewöhnlichen WCSPH-Studie. Ziel ist eine Revision der numerischen Konvergenzaussage von Bauer et al. (2012) im Sinne von Abschnitt 2.4. Deshalb wird in Abschnitt 5.2.1 demonstriert, dass die SPH-Methode durchaus in der Lage ist, turbulente Schwankungen unter der Voraussetzung eines geeigneten Kernels und ausreichend Nachbarn N_{ngb} aufzulösen (Dehnen et al., 2012; Zhu et al., 2015). Allerdings wird sich in Abschnitt 5.2.2 herausstellen, dass die effektive Auflösung dieser Schwankungen durch den Kerneldurchmesser D_K und implizite Subfilterspannungen begrenzt ist. Damit wird die intrinsische Grobstrukturperspektive der SPH-Methode nach Abschnitt 3.2 auch für dreidimensionale Turbulenz bestätigt.

5.2.1 Numerische Konvergenz

Zunächst werden die quantitativen Metriken aus Abschnitt 5.1 für die Fälle 1-4 aus Tabelle 5.1 diskutiert. Es wird der Einfluss eines kleiner werdenden quintischen Spline-Kernels mit Durchmesser D_K , unter der Bedingung $D_K = 6\Delta l$, auf die numerische Konvergenz des SPH-LES-Modell ohne explizites Subfiltermodell untersucht. Die Verkleinerung des Durchmessers D_K ist aufgrund der Nebenbedingung gleichbedeutend mit einer Steigerung der Partikelzahl N bei konstanter Nachbarzahl von $N_{ngb} \approx 120$. Die gewählte Kombination ist eine gängige Kernspezifikation (Bauer et al., 2012; Chaussonnet et al., 2020), für die deshalb ähnliche Resultate wie in der Studie von Bauer et al. (2012) zu erwarten sind.

In Abb. 5.2 (a) ist die zeitliche Evolution der mittleren kinetischen Energie nach Gl. (5.3) dargestellt. Dunklere Blautöne repräsentieren steigende N , die schwarze Kurve stellt die DNS-Lösung von Dairay et al. (2017) dar. Augenscheinlich nähern sich die Verläufe schwach mit steigendem N dem kinetischen Energieniveau der DNS an. Allerdings ist erstaunlich, dass selbst für $N = 512^3 \approx 130$ Mio. Partikel eine signifikante Differenz zur DNS-Lösung verbleibt. LES-Vergleichsrechnungen mit dem FDM-Code *Incompact3d*, die in der Arbeit von Dairay et al. (2017) präsentiert werden, weisen schon bei $N = 256^3 \approx 16$ Mio. Zellen nur noch einen verschwindend kleinen Unterschied zur DNS-Lösung auf. Der Grund hierfür lässt sich eindeutig in dem Verlauf der mittleren Dissipationsrate nach Gl. (5.4) erkennen, der in Abb. 5.2 (c) dargestellt ist. Es ist auffällig, dass das SPH-Modell insbesondere in der initialen laminaren Phase $[0, 5]$ s gegenüber der DNS eine von null verschiedene Dissipationsrate aufweist. Dies führt nachweislich zu Abweichungen der Dynamik zu späteren Zeitpunkten. Am wichtigsten ist zu erkennen, dass das Wirbelsystem früher instabil wird, da ein deutlicher Anstieg der mittleren Dissipationsrate schon vor $t < 5$ s erfolgt. Die blaue Kurvenschar ist deshalb gegenüber der DNS nach links zu früheren Zeitpunkt verschoben. Positiv hervorzuheben ist jedoch, dass mit

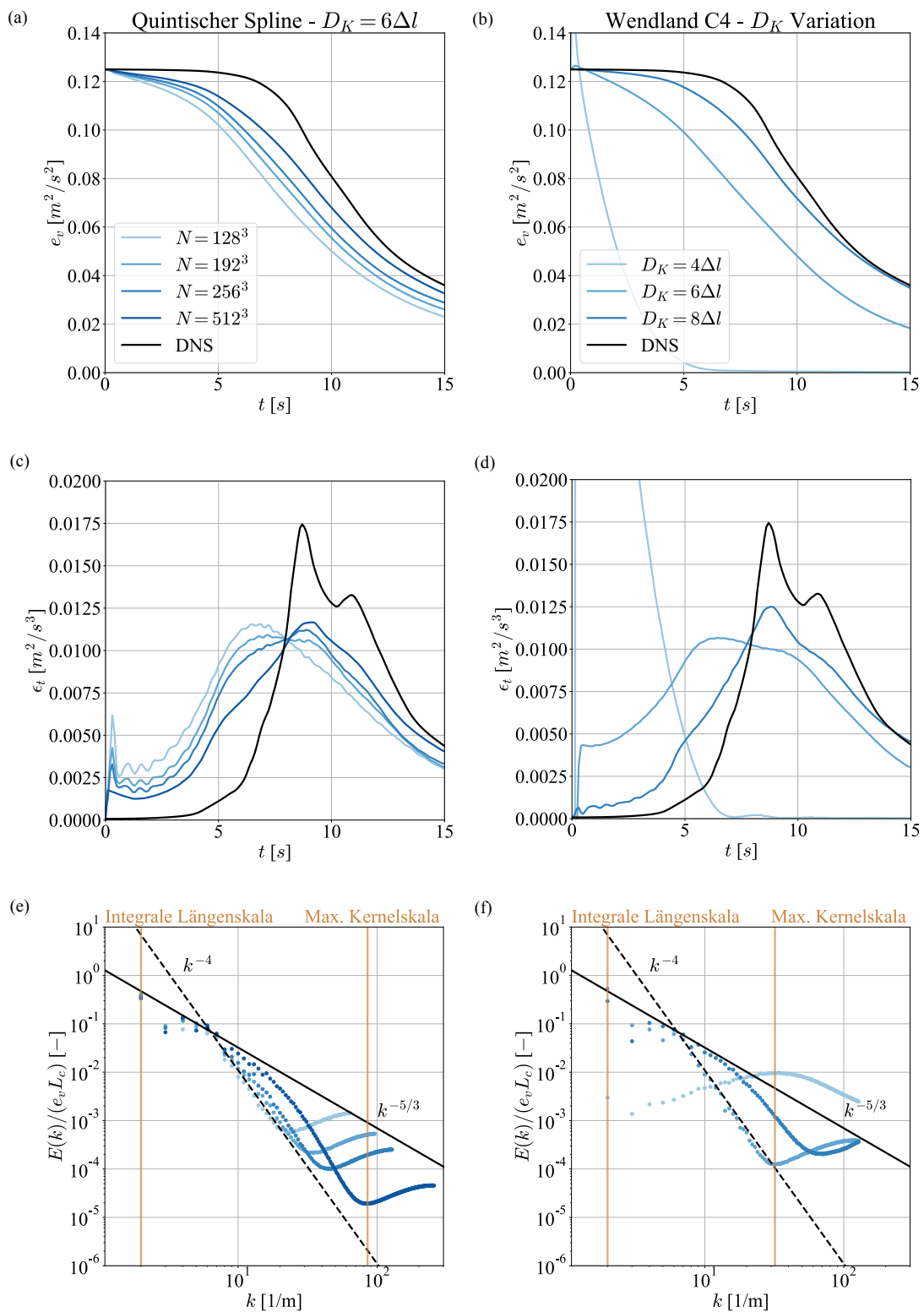


Abbildung 5.2: Vergleich quantitativer Metriken zur Analyse der numerischen Konvergenz des SPH-LES-Modells. In der ersten Spalte (a,c,e) wird die Abhängigkeit der Partikelzahl N für den quintischen Spline-Kernel mit $D_K = 6\Delta l$ aufgezeigt und in der zweiten Spalte (b,d,f) die Abhängigkeit des Kernendurchmessers D_K für den Wendland C4 Kernel bei $N = 256^3$.

steigenden N immerhin die Lage der ersten Dissipationsspitze bei $t = 9$ s reproduziert werden kann, das für $N = 128^3$ Partikel noch bei $t = 6$ s liegt.

Die wesentliche Frage, die sich nun stellt, ist, ob sich trotz dieser qualitativen Abweichung des Dissipationsverhaltens subsonische Turbulenz zum Zeitpunkt $t = 14$ s entwickelt. Dies soll anhand der Ausbildung des Inertialbereichs in der spektralen Energiedichte $E(k)$ geklärt werden. Letztere ist doppelt logarithmisch in Abb. 5.2 (e) dargestellt, wobei anzumerken ist, dass die spektralen Verteilungen mit den abweichenden Energieniveaus $e_v(t = 14$ s) für verschiedene N und dem integralen Längenmaß $L_c = \pi$ normiert sind. Letzteres entspricht der initialen laminaren Wirbellänge nach Abb. 5.1 (a) und somit der halben Boxlänge. Die Kurvenfarbe ist in Anlehnung an Abb. 5.2 gewählt. Zudem sind zur Orientierung im Spektralbereich vertikale Linien eingetragen, die die Wellenzahlen des integralen Längenmaßes sowie des Kerneldurchmessers der Simulation mit der höchsten effektiven Auslösung kennzeichnen. Obwohl die Partikelanzahl für die Fälle 1-4 um etwa zwei Größenordnungen zunimmt, ist ein ausgedehnter Inertialbereich mit $E(k) \sim k^{-5/3}$ nicht erkennbar. Für die Fälle 1-4 nähern sich die Spektren kaum der schwarzen Idealkurve an, sondern weisen stattdessen ein Energiedefizit mit der Skalierung von $E(k) \sim k^{-4}$ auf. Selbst für Fall 4 mit $N = 512^3 \approx 130$ Mio. Partikeln, ist nur eine schwache Annäherung an den Inertialbereich im Bereich $k \in [4; 16]$ 1/m zu erkennen. Die qualitative Charakteristik der Spektren stimmt unabhängig von N überein. Sie ist, wie am Fall $N = 512^3$ zu erkennen, oberhalb der Kernelskala durch das Energiedefizit zum $E(k) \sim k^{-5/3}$ Gesetz gekennzeichnet, sowie den energetisch sättigenden, numerischen Schwankungen unterhalb der Kernelskala. Diese Beobachtungen sind kongruent zu den Einsichten der Studie von Bauer et al. (2012). Deshalb muss auch hier gefolgert werden, dass die SPH-Methode mit der gewählten Kernelkonfiguration nicht in der Lage ist, die Statistik turbulenter Schwankungen im Inertialbereich aufzulösen.

Es lässt sich jedoch entgegen der Auffassung von Bauer et al. (2012) zeigen, dass sich die Situation mit steigender Nachbarzahl N_{ngb} und geeignetem Kernel verbessert (Abschnitt 2.4). Durch den Einsatz eines Wendland C4 Kernels kann die Paarungsinstabilität umgangen werden, die für Spline-Kernel ab einer kritischen Nachbarzahl einsetzt (Dehnen et al., 2012) und in der Studie von Bauer et al. (2012) limitierend war. Für die Fälle 5-7 in Tabelle 5.1 wird deshalb für die Partikelanzahl $N = 256^3$ der quintische Spline-Kernel durch einen Wendland C4 Kernel ersetzt und der Kerneldurchmesser mit $D_K \in \{4, 6, 8\}\Delta l$ variiert. Für eine lokale kartesische Partikelanordnung würde die Wahl von D_K in etwa $N_{ngb} \in \{30, 120, 250\}$ resultieren. Durch dieses Vorgehen wird zwar der Fehler der Kernelapproximation $\mathcal{O}(D_K^2)$ vergrößert, zeitgleich aber der Fehler durch die Quadratur der Faltungsintegrale $\mathcal{O}(N_{ngb}^{-\gamma})$, $\gamma \in [\frac{1}{2}; 1]$ verringert (Zhu et al., 2015). In der zweiten Spalte von Abb. 5.2 zeigt sich, dass die Quadraturfehler für die untersuchten Fälle dominant sind und somit die Anzahl der Nachbarn N_{ngb} zur Auflösung subsonischer turbulenter Schwankungen ein entscheidender Hebel ist. Wie von Zhu et al. (2015) herausgearbeitet, wird die Intensität von numerischen Dichteschwankungen in der SPH-Methode stark durch steigende N_{ngb} reduziert. Letztere erzeugen wiederum diffusive Druckkräfte (Read et al., 2010), die die starke Sensitivität der numerischen Lösung auf N_{ngb} begründen. Bei dem kleinsten Kerneldurchmesser $D_K = 4\Delta l$ sind die anfänglichen Dichteschwankungen sogar so groß (lokal bis zu 20% zu ρ_{ref}), dass Kompressibilitätseffekte in den ersten Zeitschritten zu einer Zufuhr kinetischer Energie führen, bevor ein rapides Abklingen der kinetischen Energie

im Volumen erfolgt (Abb. 5.2 (b)). Dieses ist derart stark ausgeprägt, dass das Strömungsfeld bei $t \approx 5$ s nahezu zum Erliegen kommt. Das Verhalten spiegelt sich auch in der mittleren Dissipationsrate in Abb. 5.2 (d) wider und in der nahezu konstanten Verteilung der spektralen Energiedichte in Abb. 5.2 (f). Offensichtlich entwickelt sich keine Turbulenz. Im Kontrast dazu steht das Ergebnis für $D_K = 8\Delta l$, das sogar die Charakteristiken für den zuvor untersuchten quintischen Spline-Kernel mit $N = 512^3$ Partikel und $D_K = 6\Delta l$ (Fall 4) schlägt - trotz einer Größenordnung weniger Partikel in dem Strömungsgebiet. In der initialen laminaren Phase kann durch die erhöhte Nachbarpartikelzahl N_{ngb} die mittlere Dissipationsrate reduziert werden, was sich nachweislich positiv auf den konsekutiven Verlauf der mittleren kinetischen Energie sowie der mittleren Dissipationsrate auswirkt. Dies wird aus dem Vergleich von Abb. 5.2 (a) und (b), sowie Abb. 5.2 (c) und (d) deutlich. Am interessantesten ist jedoch, dass in Abb. 5.2 (f) erstmals die Ausbildung eines kleinen Inertialbereichs für $k \in [4; 16]$ 1/m zum Zeitpunkt $t = 14$ s verzeichnet werden kann. Der Bereich des Energiedefizites mit $E(k) \sim k^{-4}$ oberhalb der Kernelskala D_K wird somit durch eine steigende Nachbarzahl N_{ngb} reduziert, was die Wiedergabe turbulenter Schwankungen ermöglicht.

Basierend auf diesen Beobachtungen wurden die Fälle 1-4 in Tabelle 5.1 mit dem Wendland C4 Kernel und $D_K = 8\Delta l$, also mit erhöhter Nachbarzahl $N_{ngb} \approx 250$, wiederholt. Die resultierenden Lösungen der Fälle 8-11 sind den entsprechenden quintischen Spline-Kernel Fällen in Abb. 5.3 gegenübergestellt. Alle Metriken liegen deutlich näher an der idealen Lösung, wie visuell aus der zweiten Spalte in Abb. 5.3 hervorgeht, und bestätigen den positiven Einfluss von N_{ngb} unabhängig von N . Auch wenn das laminare Wirbelsystem immer noch früher instabil wird als vorgesehen und selbst für $N = 512^3$ eine merkliche Diskrepanz der mittleren kinetischen Energie im Intervall $[2.5; 10]$ s verbleibt (Abb. 5.3 (b)), kann das qualitative globale Dissipationsverhalten aufgrund von erhöhtem N_{ngb} erfasst werden. So lässt sich das theoretische Abklingverhalten von zerfallender Turbulenz mit $e_v \sim t^{-1.2}$ reproduzieren (Skrbek et al., 2000). Dies geht aus Abb. 5.3 (b) und dem Vergleich mit den schwarz gestichelten Kurven hervor. Letztere sind um den willkürlichen Zeitverzugsparameter t_0 verschoben, der das verfrühte Abklingen der SPH-Rechnung gegenüber der DNS berücksichtigt. Aber auch der qualitative Verlauf der mittleren Dissipationsrate approximiert das Verhalten der DNS deutlich besser (Abb. 5.3 (d)). Im Vergleich zu den zeitlichen Entwicklungen der mittleren Dissipationsraten für die Spline-Kernel Konfigurationen in Abb. 5.3 (c) weisen die Kurven deutlich schärfere Dissipationsspitzen bei $t = 9$ s auf. Selbst für $N = 128^3$ Partikel wird die Primärspitze in seiner Lage korrekt erfasst und für steigende N deutet sich die Ausbildung der Sekundärspitze bei $t = 11$ s an, die für die Spline-Kernel Lösung in Abb. 5.3 (c) nicht sichtbar ist. Am positivsten ist jedoch, dass durch das zeitgleiche Steigern von N_{ngb} und N , wie von Zhu et al. (2015) prognostiziert, die Entwicklung eines signifikanten Inertialbereichs erzielt werden kann. Das wird anhand von Abb. 5.3 (f) verdeutlicht. Während für $N = 128^3$ kein Inertialbereich identifiziert werden kann, führt die Steigerung von N bei ausreichend großem N_{ngb} zur physikalisch korrekten Ausbildung von turbulenten Fluktuationen. Für $N = 512^3$ lässt sich ein Inertialbereich erkennen, der sich nahezu über eine Größenordnung in $k \in [4; 32]$ 1/m erstreckt.

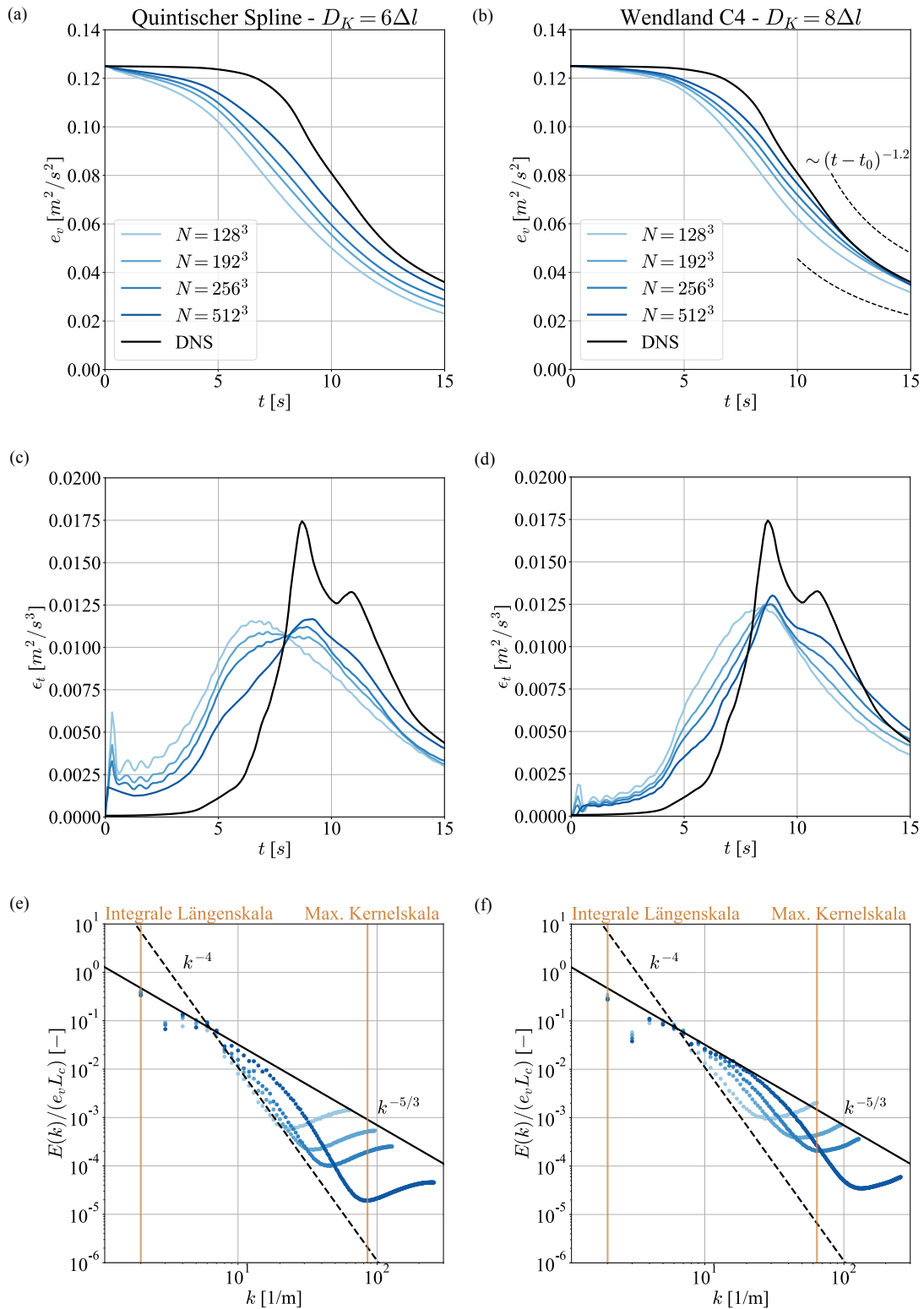


Abbildung 5.3: Gegenüberstellung quantitativer Metriken für das analysierte SPH-LES-Modell. In der ersten Spalte (a,c,e) wird die Abhängigkeit der Partikelzahl N für den quintischen Spline-Kernel mit $D_K = 6\Delta l$ aufgezeigt und in der zweiten Spalte (b,d,f) für den Wendland C4 Kernel bei $D_K = 8\Delta l$.

Dies verdeutlicht nachweislich, dass subsonische Turbulenz prinzipiell mit einem konventionellem SPH-Verfahren unter Berücksichtigung der Konvergenzeigenschaften (Abschnitt 2.4) aufgelöst werden kann.

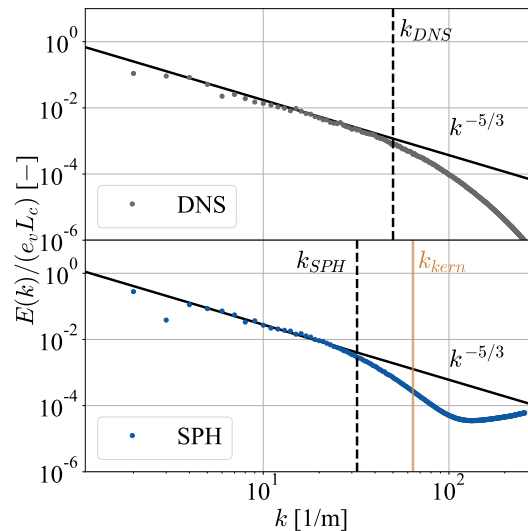


Abbildung 5.4: Vergleich der spektralen Energiedichte $E(k)$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s zwischen DNS nach Dairay et al. (2017) und der genauesten SPH-Lösung (Tabelle 5.1 - Fall 11).

Zum Abschluss dieses Abschnittes verbleibt zu klären, wie gut die turbulenten Schwankungen quantitativ approximiert werden können. Deshalb soll die spektrale Energiedichte der genauesten SPH-Lösung (Fall 11) mit derjenigen der DNS zum Zeitpunkt $t = 14$ s verglichen werden. Dieser Vergleich ist Abb. 5.4 zu entnehmen. Aus Sicht der Grobstrukturtheorie gemäß Kapitel 3 wäre zu erwarten, dass die SPH-Lösung die turbulenten Schwankungen idealerweise bis zur Kernelwellenzahl von $k_{kern} = 64$ 1/m wiedergeben könnte. Offensichtlich ist dies nicht der Fall, da der Inertialbereich der DNS-Lösung durch $k_{DNS} \approx 50$ 1/m begrenzt wird, die effektive Auflösung der SPH-Lösung aber durch $k_{SPH} = 32$ 1/m gegeben ist. Folglich verbleibt ein spektrales Energiedefizit im Bereich $k \in [32; 50]$ 1/m, das unter dem Gesichtspunkt der großen, jedoch finiten Nachbarzahl N_{ngb} plausibel ist. Solange $N_{ngb} < \infty$ ist, entstehen für $k > k_{kern}$ numerisch bedingte Kernelschwankungen (Zhu et al., 2015), die im Spektrum klar als Sättigung erkennbar sind und nach Kapitel 4 implizite Subfilterspannungen induzieren. Letztere sind verantwortlich für das spektrale Energiedefizit der aufgelösten Grobstruktur, da sie primär in den Scherschichten zum Tragen kommen, wo auch die Entstehung der Turbulenz stattfindet. Dies wird im folgenden Abschnitt demonstriert. Es wird sich zeigen, dass auch in dreidimensionalen SPH-Simulationen die effektive Auflösung turbulenter Skalen durch den Kerneldurchmesser D_K sowie implizite Subfilterspannungen limitiert ist.

5.2.2 Implizite Subfilterspannungen

Anhand der zweidimensionalen hochaufgelösten, in Kapitel 4 vorgestellten SPH-Simulation konnte erstmals aufgezeigt werden, dass die effektive räumliche Auflösung turbulenter Schwankungen durch den Kerneldurchmesser D_K und implizite Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ limitiert wird. Obwohl letztere auf den kleinsten, numerisch dissipativen Skalen entstehen, bewirken sie dennoch eine negative Beeinflussung der Skalen oberhalb des Kernels. Dies hat sich in Kapitel 4 in einer überschüssigen Energiezufuhr bedingt durch Exzessdissipation geäußert. Für die hier betrachtete, sich frei entwickelnde Strömung hingegen, wird zusätzlich zur Exzessdissipation (Abb. 5.3 (b)) ein spektrales Energiedefizit oberhalb des Kernels mit $E(k) \sim k^{-4}$ (Abb. 5.3 (f)) sichtbar, das nach Abb. 5.3 mit zunehmender Auflösung reduziert wird.

Analog zu Kapitel 4 soll erneut anhand der Korrelation zwischen spektraler Energiedichte $E(k)$, quadrierter Wirbelstärke ω^2 und induzierten impliziten Subfilterspannungen nach Gl. (3.27) argumentiert werden, dass letztere die Auflösung turbulenter Schwankungen oberhalb der Kernelskala hemmen und somit das spektrale Energiedefizit der Grobstruktur verantworten. Dies soll an der Momentaufnahme des Strömungsfeldes zu $t = 14$ s in der Schnittebene $x = \pi$ illustriert werden, in der die Turbulenzentstehung in den Scherzonen (vgl. Abb. 5.1 (a)) sichtbar wird. Dort ist nach Kapitel 4 die stärkste Ausprägung impliziter Subfilterspannungen zu erwarten, da lokale Geschwindigkeitsunterschiede $(\tilde{v}_j - \tilde{v}_i)$ groß sind. Um den Einfluss eines kleiner werdenden Kerneldurchmessers D_K bei konstanter Nachbarzahl $N_{ngb} \approx 250$ herauszuarbeiten, erreicht durch steigende N , werden die Fälle 8, 10 und 11 in Tabelle 5.1 herangezogen. Sie umfassen auch die genaueste SPH-Lösung (Fall 11). In Abb. 5.5 sind die quadrierte Wirbelstärke ω^2 (erste Spalte) und die korrespondierenden impliziten Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ (zweite Spalte) der genannten Fälle einander vergleichend gegenübergestellt. Die Lage der Scherzonen ist mittels der gestrichelten vertikalen Linien verdeutlicht. Zudem ist in den $\tau_{SFS,i}$ Feldern in der rechten oberen Ecke ein maßstabsgetreues Kernelement eingezeichnet, um Größenverhältnisse in der Strömung zu veranschaulichen.

Anhand der Verteilung der quadrierten Wirbelstärke ω^2 in der ersten Spalte von Abb. 5.5 wird unabhängig von der Partikelanzahl N deutlich, dass die Dissipation kinetischer Energie dominant in den beiden Scherzonen der Strömung erfolgt. Es sind genau diese Zonen, wo die Turbulenz entsteht. Dies folgt unmittelbar aus Gl. (4.6), nach der der Zusammenhang $\epsilon_v = \nu \langle \omega^2 \rangle_V$ gilt. Für steigende Partikelanzahl N ergeben sich jedoch drei wesentliche Veränderungen, wie aus dem Vergleich zwischen Abb. 5.5 (a), (c) und (e) hervorgeht. Erstens werden in der ω^2 Verteilung zunehmend feinere kohärente Strukturen erkennbar, die qualitativ zeigen, dass die Strömung mit zunehmendem N besser aufgelöst wird. Zweitens nimmt die Intensität der ω^2 Verteilung in den Scherzonen zu, was aus der verstärkten Blaufärbung geschlossen werden kann. Dies ist angesichts der steigenden Trends für die mittlere Dissipationsrate ϵ_v mit zunehmenden N in Abb. 5.3 (d) zum Zeitpunkt $t = 14$ s plausibel. Aufgrund von $\epsilon_v = \nu \langle \omega^2 \rangle_V$ müssen sich erhöhte Dissipationsraten simultan in höheren ω^2 Intensitäten äußern. Drittens werden künstliche, numerisch dissipative Wirbelstärkeschwankungen mit steigendem N abgebaut, was sich direkt aus der Reduktion des Rauschens in den ω^2 Verteilungen erschließt. Auch dies ist im Angesicht der Verteilung der spektralen Energiedichte in Abb. 5.3 (f) nachvollziehbar. Da die Energie von numerischen

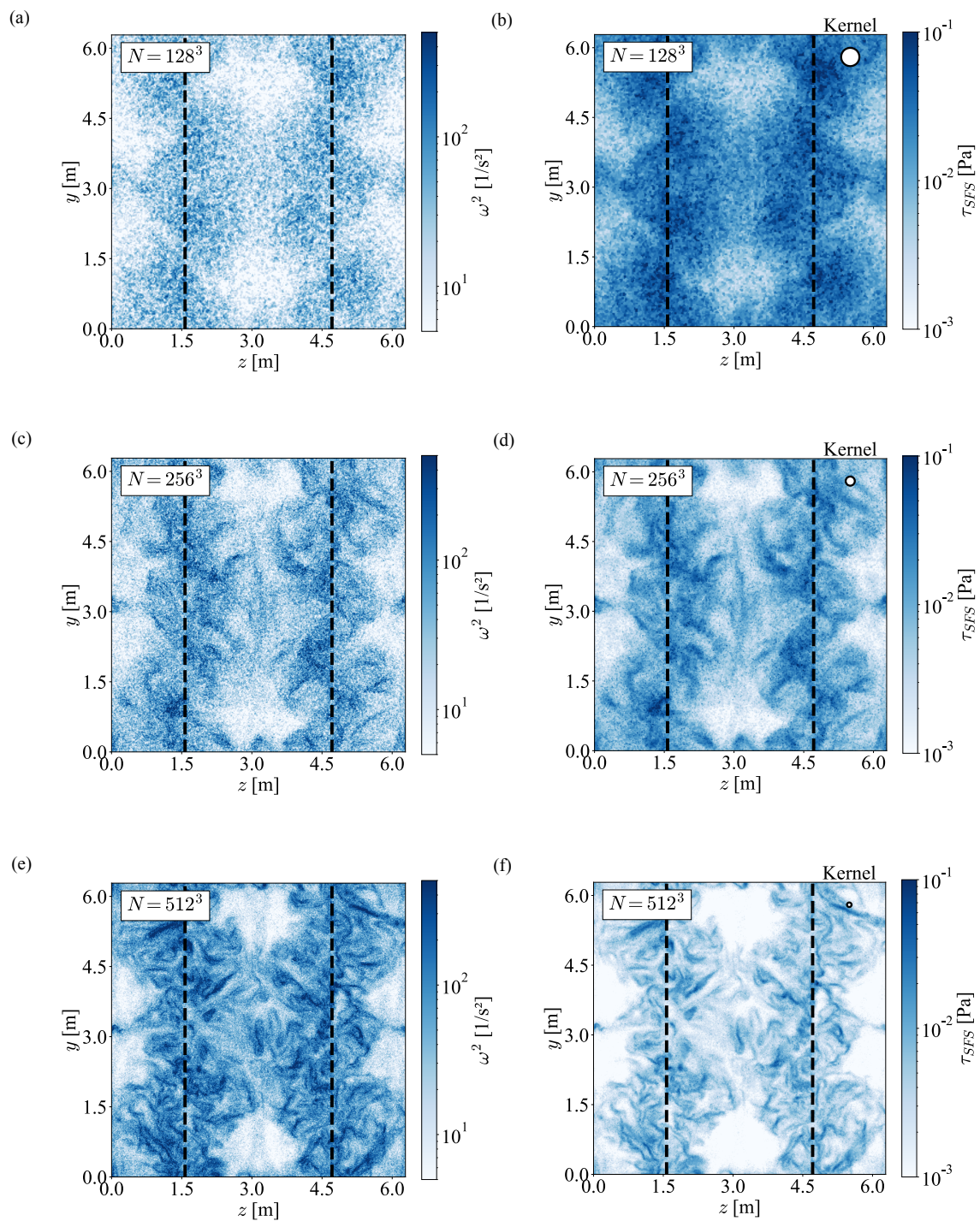


Abbildung 5.5: Gegenüberstellung der quadrierten Wirbelstärke ω^2 und Frobeniusnorm der impliziten Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$ in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s für verschiedene N . Die Kernelkonfiguration entspricht einem Wendland C4 Kernel und $D_K = 8\Delta l$.

Kernelschwankungen mit N reduziert wird, muss wegen $\langle \omega^2 \rangle_V \sim k^2 E(k)$ nach Gl. (4.6) auch die Wichtigkeit der kleinsten verrauschten Strukturen in ω^2 abnehmen.

Interessant ist nun, dass die impliziten Subfilterspannung $\tau_{SFS,i}$, die nach Kapitel 4 die Zonen mit ausgeprägter numerischer Diffusion lokalisieren, das Verhalten der ω^2 Verteilung bei entsprechendem N perfekt widerspiegeln. Dies offenbart der Vergleich der ersten und zweiten Spalte in Abb. 5.5. Die räumliche Korrelation, die auch schon in Kapitel 4 für eine zweidimensionale Strömung identifiziert wurde, bleibt offensichtlich auch in dreidimensionalen Strömungen erhalten. Folglich werden numerische Diffusionseffekte insbesondere dort relevant, wo die Turbulenz entsteht. Wichtig ist nun jedoch zu beobachten, dass die Intensität der impliziten Subfilterspannungen mit höherer Partikelzahl N reduziert wird. Dieser Effekt wurde im Rahmen der Arbeit noch nicht adressiert, ist aber eine logische Konsequenz der reduzierten Geschwindigkeitsschwankungen unterhalb der Kernelskala mit steigendem N . Letzterer Trend kann erneut anhand der energetischen Sättigungen in $E(k)$ für steigende N in Abb. 5.3 (f) erkannt werden. Da $\tau_{SFS,i}$ nach Gl. (3.27) quadratisch von den Geschwindigkeitsunterschieden $(\tilde{\mathbf{v}}_j - \tilde{\mathbf{v}}_i)$ auf der Kernelskala abhängt, muss eine Reduktion von künstlichen Geschwindigkeitsschwankungen zwangsläufig auch in einer Minderung der impliziten Subfilterspannungen resultieren.

Die entscheidende verbleibende Frage, die noch in diesem Zusammenhang mit den $\tau_{SFS,i}$ Verteilungen zu klären ist, ist, inwiefern letztere das spektrale Energiedefizit in Abb. 5.3 (f) verantworten und somit die effektive Auflösung turbulenter Schwankungen der Grobstruktur limitieren. Dies lässt sich verstehen, indem die Längenskalen der kohärenten Strukturen in $\tau_{SFS,i}$ mit denjenigen des Kernels verglichen werden. Deshalb ist jeweils in der rechten oberen Ecke von Abb. 5.5 (b), (d) und (f) ein maßstabsgetreues Kernelement illustriert. Offensichtlich demonstriert ein qualitativer Vergleich, dass die Ausdehnung kohärenter Strukturen in $\tau_{SFS,i}$ diejenige des entsprechenden Kernels für alle N übersteigen kann. Selbst für die genaueste SPH-Lösung weist die $\tau_{SFS,i}$ Verteilung in Abb. 5.5 (f) fadenförmige Strukturen auf, die sich über Vielfache des Kerneldurchmesser D_K erstrecken. Unter diesem Gesichtspunkt ist es verständlich, dass die impliziten Subfilterspannungen die Dynamik turbulenter Schwankungen auch oberhalb des Kernels hemmen können und damit die Ausbildung eines spektralen Energiedefizites verantworten.

Insofern lässt sich dieser Abschnitt mit der Einsicht schließen, dass die entwickelte Grobstrukturperspektive auf die SPH-Methode aus Kapitel 3 auch im Fall dreidimensionaler subsonischer Turbulenz gilt. Die SPH-Methode präsentiert sich erneut als intrinsisches LES-Verfahren für turbulente Strömungen selbst ohne die explizite Berücksichtigung eines Modells für den Subfilterbeitrag $div[\tau_{SFS}]_i$ in Gl. (3.25). Die effektive Auflösung turbulenter Schwankungen ist einerseits durch den Kerneldurchmesser D_K limitiert, andererseits aber auch durch implizite Subfilterspannungen als Konsequenz numerischer Kernelschwankungen durch eine finite Anzahl von Nachbarn N_{ngb} . Letztere spielen selbst in hochaufgelösten SPH-Simulationen eine wesentliche Rolle und können nachweislich die turbulente Dynamik oberhalb der Kernelskala hemmen.

5.3 SPH-LES mit explizitem Subfilterspannungsmodell

Nachdem im vorangegangenen Abschnitt gezeigt wurde, dass die SPH-Methode auch für dreidimensionale subsonische Turbulenz als intrinsisches Grobstrukturverfahren und somit LES unter Berücksichtigung der Konvergenzeigenschaften operiert, soll in diesem zweiten Unterkapitel überprüft werden, ob dissipative explizite Subfiltermodelle für $div [\tau_{SFS}]_i$ in Gl. (3.25) ihren theoretischen Anforderungen, nach Abschnitt 4.6, gerecht werden können. Ziel dieses Abschnittes ist zu beantworten, ob durch gezielt eingebrachte explizite Dissipation implizite Subfilterspannungen zugunsten der turbulenten Grobstruktur reduziert werden können. Wäre dies der Fall, müssten zwei wesentliche Effekte zu beobachten sein:

1. Es müsste sich eine verbesserte Wiedergabe in der mittleren Dissipationsrate abzeichnen, da aufgrund der Beziehung $\epsilon_v = f(\omega^2, E(k), \tau_{SFS,i})$ nach Gl. (5.5) eine Reduktion von $\tau_{SFS,i}$ gleichermaßen mit einer Reduktion der kinetischen Energie $E(k)$ der Kernelschwankungen und somit auch ω^2 einhergeht.
2. Eine Abschwächung der Kernelschwankungen führt zur Rückbildung des spektralen Energiedefizites.

Ob diese Ziele erreicht werden, wird in folgender Abfolge diskutiert. Zunächst werden die Simulationen der konvergierenden Fälle 8-11 in Tabelle 5.1 mit dem klassischen Smagorinsky-Modell (SMAG) nach Gl. (A.18), (A.19) und (A.21) für den Beitrag $div [\tau_{SFS}]_i$ wiederholt. Die resultierenden Lösungen der Fälle 12-15 werden ihrem Pendant ohne expliziten Subfilterbeitrag in Abschnitt 5.3.1 gegenübergestellt. Anschließend wird in Abschnitt 5.3.2 überprüft, inwiefern alternative Wirbelviskositätsmodelle die Lösung beeinflussen. Ferner wird in Abschnitt 5.3.3 die Sensitivität der Modellkonstanten und Filterweite des Smagorinsky-Modells untersucht. Alle diese Fälle werden aufzeigen, dass traditionelle dissipative Modelle für den expliziten Beitrag $div [\tau_{SFS}]_i$ nicht einfach in den SPH-Kontext übertragen werden können. Abschnitt 5.3.4 wird einen phänomenologischen Erklärungsansatz liefern, weshalb diese Modelle scheitern.

5.3.1 Einfluss des Smagorinsky-Modells

In Abb. 5.6 sind die quantitativen Metriken aus Abschnitt 5.1 erneut vergleichend gegenübergestellt. Die erste Spalte repräsentiert dabei die Referenzfälle ohne explizites Subfiltermodell und die zweite Spalte die Varianten mit Smagorinsky-Modell (SMAG). Folglich wird der Einfluss des Modells bei der Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ bei steigender Partikelanzahl N analysiert.

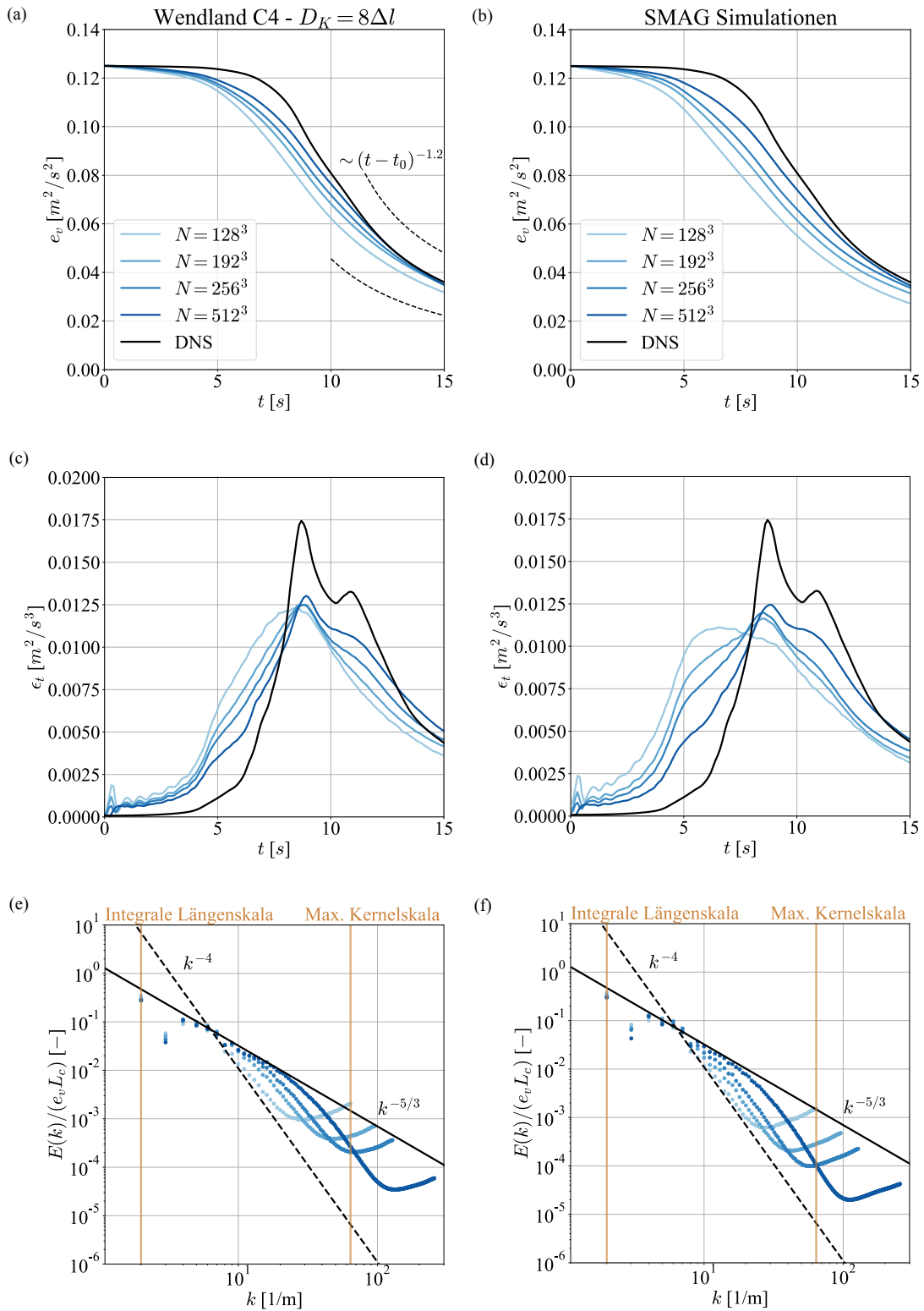


Abbildung 5.6: Vergleich quantitativer Metriken zur Analyse des Einflusses des klassischen Smagorinsky-Modells. In der ersten Spalte (a,c,e) wird die Abhängigkeit der Partikelzahl N für die Referenzfälle aufgezeigt und in der zweiten Spalte (b,d,f) entsprechend mit ergänztem Subfiltermodell. Abbildung adaptiert von Okraschewski et al. (2022).

Der Vergleich legt offensichtlich dar, dass die antizipierten Ziele nicht erreicht werden können und das Modell zu einer durchgängigen Verschlechterung der Lösung unabhängig von N führt. Aus den Verläufen der mittleren kinetischen Energie in Abb. 5.6 (a) und (b) geht eindeutig hervor, dass die Energie der aufgelösten Grobstruktur im gesamten Zeitintervall reduziert wird. Begründen lässt sich dies anhand von Abb. 5.6 (c) und (d). Dort ist erkennbar, dass das SMAG Modell zu einer Erhöhung der mittleren Dissipationsraten in der initialen laminaren Phase führt, die konsekutiv die globale Dissipationsdynamik negativ beeinflusst. So ist beispielsweise zu beobachten, dass die glockenförmigen Verläufe für ϵ_v verbreitert werden, was wiederum zu einem früheren Einsetzen des Instabilitätsmechanismus führt. Dies ist an den linken Flanken der glockenförmigen Verläufe zu erkennen, die zu früheren Zeiten ($t < 5$ s) verschoben werden. Für die niedrigste Auflösung ist das Verhalten sogar so stark ausgeprägt, dass die erste Dissipationsspitze bei $t = 6$ s anstatt bei $t = 9$ s auftritt. Es lässt sich festhalten, dass der erste positiv antizipierte Effekt nicht beobachtet werden kann und das SMAG Modell seine Funktion im SPH-Kontext nicht erfüllt.

Begründen lässt sich dies anhand der spektralen Energiedichteverteilungen $E(k)$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s in Abb. 5.6 (e) und (f), die ebenfalls Aufschluss über die Beeinflussung der subsonischen Turbulenz durch das SMAG Modell geben. Im Wesentlichen lassen sich hierbei zwei entscheidende Beobachtungen unabhängig von der Partikelanzahl N machen. Erstens wird die Energie der Kernelschwankungen unterhalb der Kernelskala zwar wie erwartet reduziert, jedoch nicht eliminiert. Dies ist gut am Vergleich der $N = 512^3$ Fälle (dunkelblaue Kurven) erkennbar. Zweitens führt diese Reduktion der Kernelschwankungen nicht wie erhofft zu einer Minderung des spektralen Energiedefizites oberhalb der Kernelskala. Stattdessen ist seine Intensivierung zu beobachten, die sich nachweislich negativ auf die Ausbildung des Inertialbereichs mit $E(k) \sim k^{-5/3}$ Gesetz auswirkt. Insofern scheint das SMAG Modell nicht nur die Dynamik der numerischen, dissipativen Kernelschwankungen zu hemmen, sondern auch die aufgelöste Dynamik der Grobstruktur, was konsistent ist mit den Beobachtungen für die mittlere kinetische Energie und korrespondierenden Dissipationsraten.

Selbstverständlich wird hierdurch die Frage aufgeworfen, ob die entwickelte Theorie zu den expliziten Subfilterspannungsmodellen in Abschnitt 4.6 korrekt ist. Deshalb soll demonstriert werden, dass das dissipative SMAG Modell tatsächlich in der Lage ist, implizite Subfilterspannungen zu reduzieren und das Problem darin liegt, dass die zusätzlich eingebrachte Dissipation auch direkt auf Grobstrukturskalen wirkt. Um die korrekte Funktionsweise des SMAG Modells zu gewährleisten, soll zunächst exemplarisch verifiziert werden, dass die turbulente Wirbelviskosität η_t des SMAG Modells räumlich dort erhöht wird, wo auch die impliziten Subfilterspannungen hoch sind. Dies ist, wie in Abschnitt 5.2.2 erklärt, in den Scherzonen des Wirbelsystems der Fall. Insofern ist es zweckmäßig, die Momentaufnahme des Strömungsfeldes zu $t = 14$ s in der Schnittebene $x = \pi$ heranzuziehen, um die Frobeniusnorm von $\tau_{SFS,i}$ mit dem Feld für η_t zu vergleichen. Die Scherzonen sind wieder über vertikale gestrichelte Linien veranschaulicht.

In Abb. 5.7 ist ein solcher Vergleich für den Fall 14 mit $N = 256^3$ illustriert. Zweifellos lässt sich hieran bestätigen, dass die erwünschte räumliche Korrelation der beiden Felder vorliegt und die Wirbelviskosität örtlich in den Scherzonen erhöht wird. Es ist somit naheliegend, dass die dissipativen Kräfte des SMAG Modells in den Scherzonen eingebracht werden, wo die impliziten

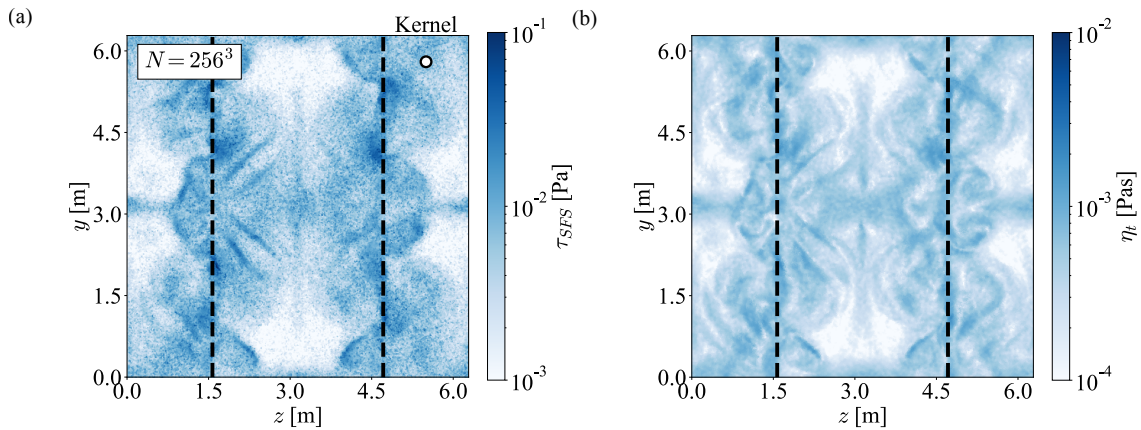


Abbildung 5.7: Gegenüberstellung der (a) Frobeniusnorm von $\tau_{SFS,i}$ und der (b) turbulenten Wirbelviskosität η_t in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s für $N = 256^3$ (Fall 14).

Subfilterspannungen ihre schädliche Wirkung entfalten. Dass letztere dadurch reduziert werden, ist Abb. 5.8 zu entnehmen. Erneut erfolgt der Fokus auf die Scherzonen (gestrichelte Linien) in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s. In der ersten Spalte sind die Varianten ohne explizites Subfiltermodell für verschiedene N dargestellt und in der zweiten Spalte die Varianten mit ergänztem SMAG Modell. Der Vergleich der Blaufärbung für unterschiedliche Partikelzahlen N verdeutlicht, dass durch die Verwendung des dissipativen Subfiltermodells die Intensität der $\tau_{SFS,i}$ Felder reduziert wird. Die Intensität nimmt von der ersten zur zweiten Spalte hin augenscheinlich ab und bestätigt damit die Theorie aus Abschnitt 4.6. Allerdings wird simultan anhand der Abbildungen die Problematik des verwendeten SMAG Modells deutlich. Wider Erwarten wird nicht nur die Intensität der Verteilungen reduziert, sondern es werden auch die kohärenten fadenförmigen Strukturen in ihrer Ausbildung gehemmt. Deutlich wird dies insbesondere am optischen Vergleich von Abb. 5.8 (c) und (d) sowie Abb. 5.8 (e) und (f). Die fadenförmigen Strukturen umfassen Vielfache der Kernelskala D_K (vgl. Kernelement in der oberen rechten Ecke von Abb. 5.8 (a,c,e)) und verdeutlichen, dass das SMAG Modell nicht nur lokal auf Subkernelskala kinetische Energie dissipiert, sondern auch auf Grobstrukturskalen. Die Dissipation ist vermutlich so intensiv, dass die positive Wirkung durch Reduktion numerischer Kernelschwankungen kompensiert wird und sich letztendlich in einer Verstärkung des spektralen Energiedefizites oberhalb des Kernels äußert. Letzteres wird in $E(k)$ in Abb. 5.6 (f) festgehalten. Aus diesem Grund kann auch der zweite positiv antizipierte Effekt nicht beobachtet werden.

Ein phänomenologischer Erklärungsansatz für diese nicht-lokale Wirkung traditioneller dissipativer Subfilterspannungsmodelle wird in Abschnitt 5.3.4 präsentiert. Davor soll jedoch aufgezeigt werden, dass die Beobachtungen dieses Abschnittes keine Folge der Limitierungen des SMAG Modells sind, sondern ein systematisches Problem der SPH-Methode. Weder fortschrittlichere dissipative Subfilterspannungsmodelle noch eine Kalibrierung der Modellkonstanten C_S und Filterweite Δ des SMAG Modells führen zu einer verbesserten Approximation der turbulenten

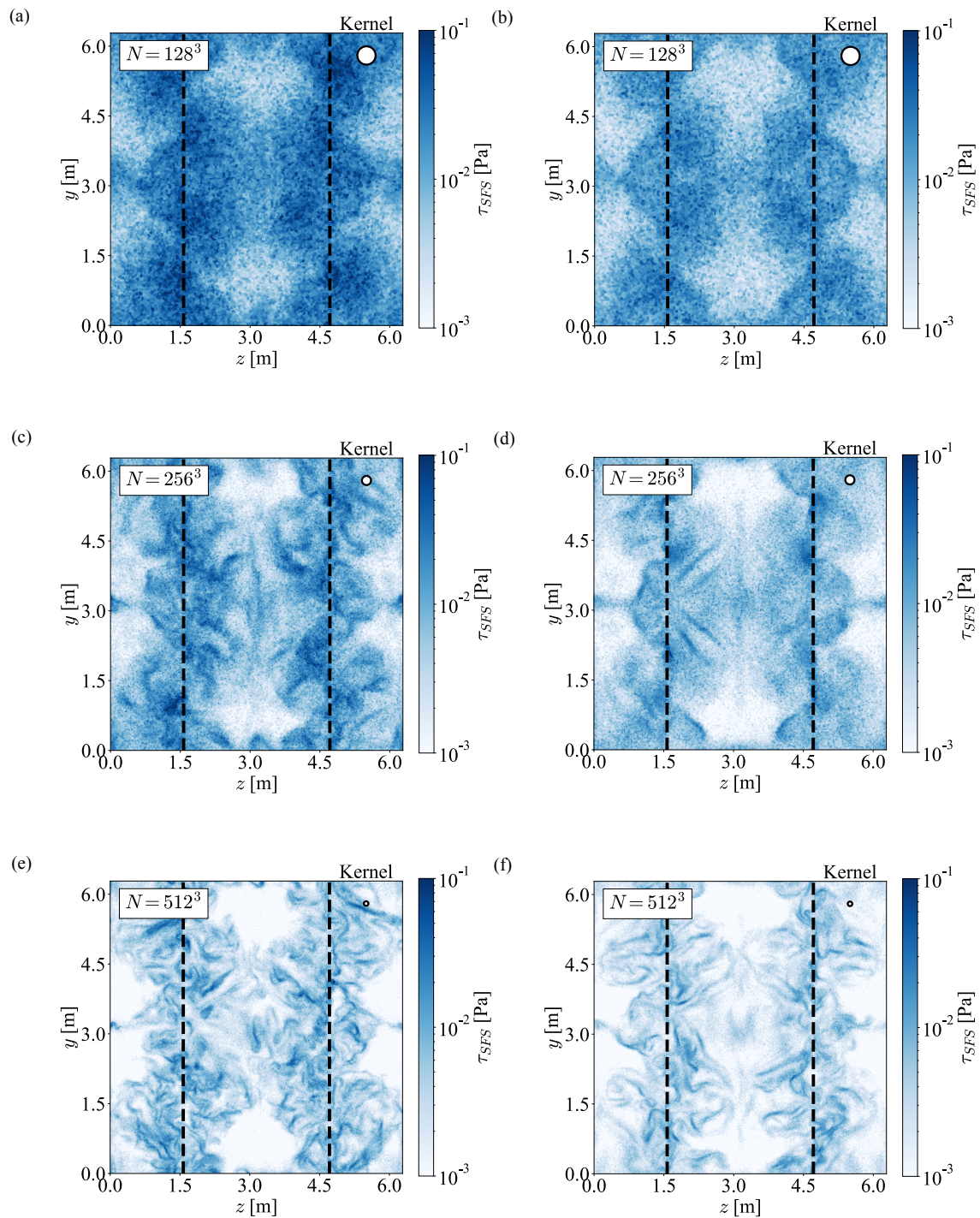


Abbildung 5.8: Gegenüberstellung der Frobeniusnorm von $\tau_{SFS,i}$ in der Ebene $x = \pi$ zum Zeitpunkt $t = 14$ s für verschiedene N . In der ersten Spalte (a,c,e) sind die Varianten ohne explizites Modell und in der zweiten Spalte (b,d,f) diejenigen mit SMAG Modell dargestellt.

Strömung. Dies wird in den folgenden Abschnitten 5.3.2 und 5.3.3 für die mittlere Partikelanzahl $N = 256^3$ und die Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ dargelegt.

5.3.2 Einfluss von alternativen Subfilterspannungsmodellen

Anhand der bisherigen Beobachtungen, die zeigen, dass das SMAG Modell auch die initiale laminare Phase der Dissipationsdynamik wesentlich beeinflussen (vgl. Abb. 5.6 (c) und (d)), ließe sich kritisieren, dass das Scheitern des Subfiltermodells mit dessen Limitierungen zusammenhängen könnte. Es ist bekannt, dass das SMAG Modell dazu neigt, auch in laminaren Strömungszonen kinetische Energie zu dissipieren. Letzteres hat die Entwicklung zahlreicher alternativer Wirbelviskositätsmodelle motiviert, die diese Problematik eliminieren. Ein Beispiel hierfür ist das σ -Modell (SIGMA) von Nicoud et al. (2011) nach Gl. (A.22), das hier vergleichend für die mittlere Partikelanzahl $N = 256^3$ und die Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ untersucht werden soll.

Allerdings wird anhand der Metriken der ersten Spalte von Abb. 5.9 deutlich, dass sich die Lösung unter dem SIGMA Modell qualitativ kaum von der SMAG Lösung unterscheidet. Im Vergleich zur Lösung ohne explizites Subfilterspannungsmodell (Implizit) wird die mittlere kinetische Energie der Grobstruktur in Abb. 5.9 (a) im gesamten Zeitraum wieder reduziert, was sich gleichermaßen in den mittleren Dissipationsraten in Abb. 5.9 (c) widerspiegelt. Die spektrale Energiedichte zum Zeitpunkt $t = 14$ s in Abb. 5.9 (e) zeigt ebenfalls keine Verbesserung auf. Erneut werden zwar die numerischen Kernelschwankungen reduziert, jedoch auch die kinetische Energie von Grobstrukturskalen in Mitleidenschaft gezogen. Im Vergleich zur Referenz wird somit das spektrale Energiedefizit wiederum auf Kosten der effektiven Auflösung turbulenter Schwankungen verstärkt.

Ein weiterer Aspekt, der an der bisherigen Form des untersuchten SMAG Modells kritisiert werden kann, ist derjenige, dass die Diskretisierung des expliziten Subfilterbeitrags $div [\tau_{SFS}]_i$ auf Partikelebene nicht Drehmoment erhaltend ist (Sijacki et al., 2006). Um auszuschließen, dass die Beobachtungen in Abschnitt 5.3.1 eine Konsequenz dessen sind, soll eine alternative Diskretisierung für $div [\tau_{SFS}]_i$ in Kombination mit dem Smagorinsky-Modell untersucht werden. Sie ist im SPH-Kontext als Monaghan-Cleary-Gingold (MCG) Form bekannt (Colagrossi et al., 2017) und resultiert in Gl. (A.23). Die entsprechende Lösung wird als SMAG-MCG bezeichnet und ist ebenfalls in der ersten Spalte von Abb. 5.9 illustriert. Sowohl im Verlauf der mittleren kinetischen Energie in Abb. 5.9 (a) als auch in der korrespondierenden Dissipationsrate in Abb. 5.9 (b) ist trotz diskreter Drehmomenterhaltung kaum ein Unterschied zur Lösung mit SIGMA Modell zu verzeichnen. Im Vergleich zur Referenz wird global die Dissipation erneut intensiviert. Die spektrale Energiedichte in Abb. 5.9 (e) macht deutlich, dass auch eine Drehmoment erhaltende Diskretisierung die wesentliche Charakteristik des Spektrums nicht positiv beeinflusst. Zwar werden die Kernelschwankungen stärker reduziert, aber dennoch maßgeblich kinetische Energie von Skalen oberhalb des Kernels entzogen.

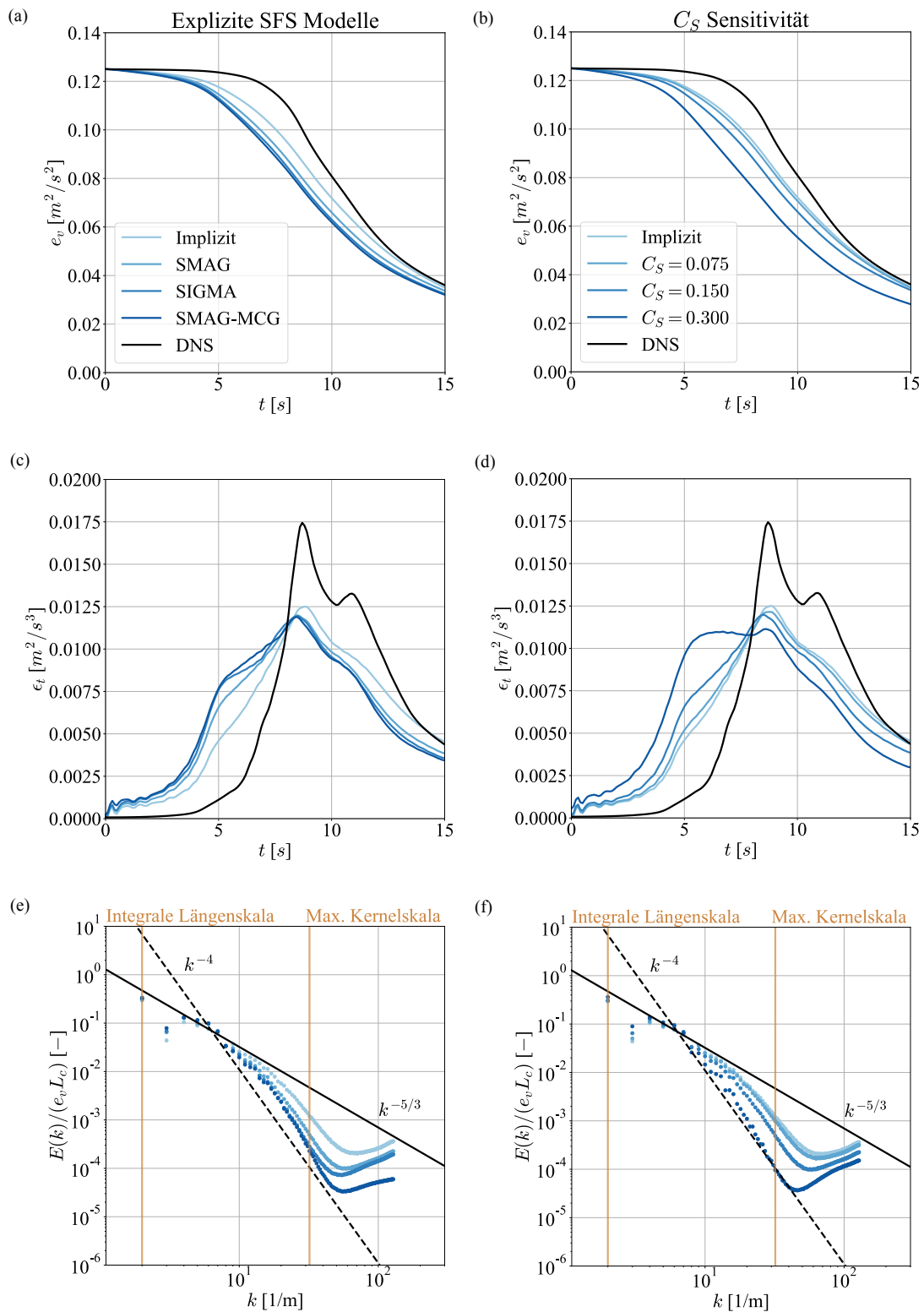


Abbildung 5.9: Vergleich quantitativer Metriken zur Analyse des Einflusses von unterschiedlichen expliziten Subfilterspannungsmodellen (erste Spalte - (a,c,e)) und der Modellkonstanten C_S (zweite Spalte - (b,d,f)). Die Untersuchungen wurden für eine Partikelanzahl $N = 256^3$ und die Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ durchgeführt. Abbildung adaptiert von Okrashevski et al. (2022).

Dies zeigt auf, dass das Scheitern von traditionellen dissipativen Subfilterspannungsmodellen im SPH-Kontext mit intrinsischen Eigenschaften der Methode zusammenhängen muss, da die Lösungen nachweislich insensitiv auf das konkrete explizite Subfilterspannungsmodell reagieren. Bevor jedoch ein phänomenologischer Erklärungsansatz für das Scheitern präsentiert wird, soll zunächst gezeigt werden, dass auch eine Anpassung der Modellkonstanten C_S und Filterweite Δ des SMAG Modells keine Verbesserung der turbulenten Dynamik bedingen. In konventionellen gitterbasierten Verfahren kann eine solche Anpassung über den Erfolg des dissipativen Subfilterspannungsmodells entscheiden (Fröhlich, 2006).

5.3.3 Sensitivität hinsichtlich Modellkonstante und Filterweite

In diesem Abschnitt soll das SMAG Modell hinsichtlich seiner Sensitivität in Bezug auf die Modellkonstante C_S und auf die Filterweite Δ analysiert werden. Es wird erneut die mittlere Partikelanzahl $N = 256^3$ und die Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ herangezogen.

Die Resultate für die quantitativen Metriken sind der zweiten Spalte von Abb. 5.9 zu entnehmen. Der ursprünglich festgelegte Wert der Modellkonstanten $C_S = 0.15$ wird sowohl halbiert als auch verdoppelt. Da nach Gl. (A.21) für die turbulente Wirbelviskosität $\nu_t \sim (C_S\Delta)^2$ gilt, ist dies gleichbedeutend zur Situation $C_S = 0.15$ und einer Halbierung und Verdopplung von Δ .

Aus den Metriken in der zweiten Spalte von Abb. 5.9 geht eindeutig hervor, dass eine verschwindende Wirbelviskosität, bedingt durch kleiner werdendes C_S oder Δ , die DNS am besten approximiert. Offensichtlich führen eine Vergrößerung der Parameter zu einer signifikanten Steigerung der globalen Dissipation, wie aus Abb. 5.9 (b) und (d) hervorgeht. Für den größten C_S Wert wird sogar die qualitative Form der mittleren Dissipationsraten in Abb. 5.9 (d) derart negativ beeinflusst, dass aus der primären Dissipationsspitze bei $t = 9$ s ein regelrechtes Dissipationsplateau wird, welches sich von $t = 6$ s bis $t = 9$ s erstreckt. Auch die Entwicklung der Statistik turbulenter Schwankungen wird durch das Steigern der Parameter negativ beeinflusst, wie in Abb. 5.9 (f) illustriert. Erneut werden die Kernelschwankungen in der spektralen Energiedichte zwar mit steigenden Parametern reduziert, jedoch auch die kinetische Energie von Schwankungen der Grobstruktur in Mitleidenschaft gezogen. Folglich wird die Ausbildung des Inertialbereichs bei Steigerung der Parameter gehemmt.

All dies zeigt auf, dass die beste Annäherung an die tatsächliche Strömung ohne explizites Subfilterspannungsmodell erzielt wird. Insofern kann geschlussfolgert werden, dass traditionelle Subfilterspannungsmodelle aus der Welt gitterbasierter Verfahren nicht einfach in den SPH-Kontext übertragen werden können. Der Grund hierfür liegt in der Konstruktion der Lagrangeschen Quadratur für das Grobstrukturmodell, die in Abschnitt 3.2 eingeführt wurde. Sie soll im folgenden Abschnitt 5.3.4 nochmals im Detail beleuchtet werden.

5.3.4 Phänomenologie der Partikeldualität

Wie die Betrachtungen des Abschnittes 5.3 darlegen, können konventionelle dissipative Subfilterspannungsmodelle die theoretischen Anforderungen, die in Abschnitt 4.6 erläutert wurden,

nicht erfüllen. Obwohl sie, wie antizipiert, dissipative numerische Kernschwankungen und damit auch implizite Subfilterspannungen reduzieren (Abb. 5.8), wirken sie primär dissipativ auf Skalen oberhalb des Kerndurchmessers. Letztendlich wird hierdurch die Grobstruktur in ihrer Dynamik gehemmt und die Ausbildung turbulenter Schwankungen blockiert. Der Grund für das Scheitern der Modelle aufgrund der nicht-lokalen Wirkung der Dissipation kann direkt anhand der Lagrangeschen Quadratur erklärt werden, die für die Lösung der Grobstrukturgleichungen in Abschnitt 3.2 eingeführt wurde und in dem SPH-Modell in Gl. (3.25) und (3.26) resultiert.

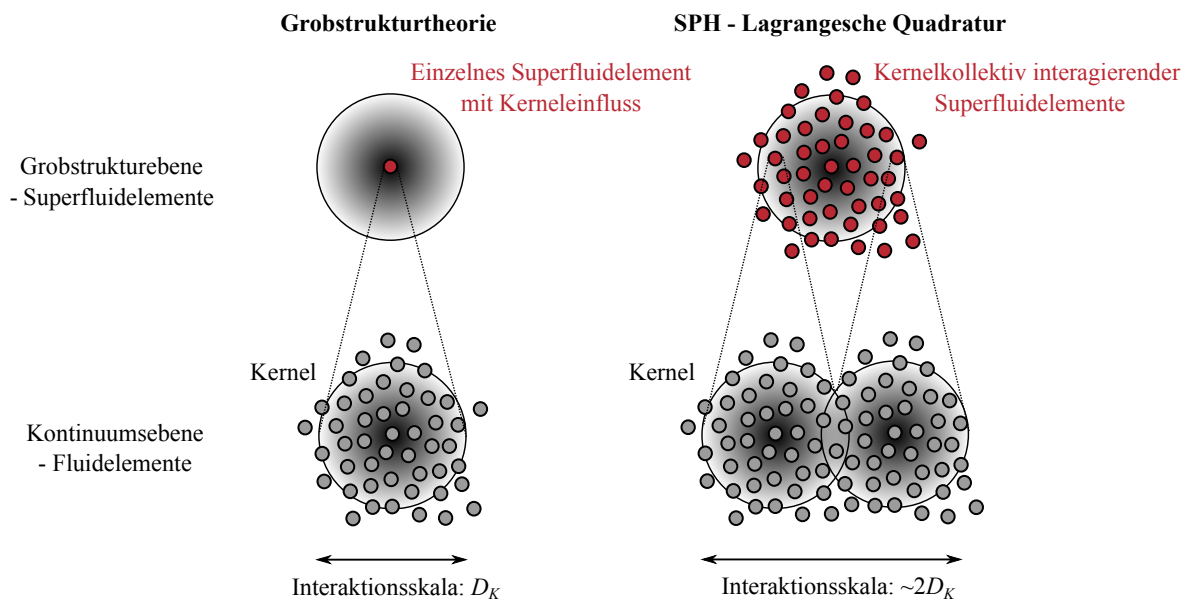


Abbildung 5.10: Veranschaulichung der Partikeldualität und deren Wirkung.

Wie in Abschnitt 3.2 erläutert, ist ein wesentlicher Aspekt bei der Durchführung der Lagrangeschen Quadratur, dass Fluidelementgrößen durch Superfluidelementgrößen ersetzt werden, die die Grobstrukturdynamik beschreiben. Das bedeutet, dass die SPH-Partikel eine duale Rolle einnehmen. Einerseits zielen sie darauf ab, Superfluidelemente zu approximieren, andererseits aber zeitgleich Fluidelemente zu substituieren, um ein Schließungsproblem auf der Grobstrukturebene zu vermeiden. Die Konsequenz dieser Partikeldualität ist in Abb. 5.10 veranschaulicht. Sie hebt hervor, inwiefern sich die ideale Grobstrukturtheorie von einem SPH-Modell unterscheidet. Während sich in der idealen Grobstrukturtheorie die Eigenschaften eines Superfluidelementes als Konsequenz der Kernelmittelung über ein Fluidelementkollektiv mit der Kernelskala D_K ergeben, und seine Eigenschaften somit prinzipiell unabhängig von benachbarten Superfluidelementen sind, wird im SPH-Kontext die Eigenschaft eines Zentralpartikels i durch seine N_{ngb} Nachbarn bestimmt. Letztere sind allerdings ebenfalls Superfluidelemente, also Lagrangesche Punktmassen mit der intrinsischen Längenskala D_K , die nun direkt miteinander kommunizieren können. Randpartikel eines Kernelkollektives können somit effektiv eine Interaktionsskala aufspannen, die sich über zwei Kerneldurchmesser erstreckt, und die nicht-lokale Wirkung der Lagrangeschen Quadratur auf das Zentralpartikel i verdeutlicht.

Aufgrund der Partikeldualität ist es somit nachvollziehbar, weshalb die Übertragung expliziter dissipativer Subfilterspannungsmodelle aus konventionellen Gittermethoden im SPH-Kontext

scheitert. Durch die implizit erhöhte Interaktionsskala wird die explizite Dissipation nicht nur auf der Kernelskala D_K eingebracht, um numerisch dissipativen Schwankungen entgegenzuwirken, sondern wirkt ebenfalls auf Grobstrukturskalen oberhalb des Kernels, die ebenfalls in ihrer Dynamik gehemmt werden. Dies hat sich in Abschnitt 5.3 in einer Verstärkung des spektralen Energiedefizites in $E(k)$ geäußert und verdeutlicht, dass turbulente Schwankungen der Grobstruktur nicht von konventionellen Subfilterspannungsmodellen profitieren. Deshalb ist von deren Nutzung im SPH-Kontext nachweislich abzuraten, was ein zentrales Resultat dieser Arbeit ist und erstmals nachgewiesen wurde. Allerdings bedeutet dies nicht, dass explizite dissipative Subfilterspannungsmodelle im SPH-Kontext nicht attraktiv wären. Wie in Abschnitt 4.6 erklärt, müssten diese Modelle jedoch lokal auf der Kernelskala wirken. Die Fragestellung, wie solche Modelle unter dem Gesichtspunkt der inhärent nicht-lokalen SPH-Methode gestaltet werden können, ist eine Fragestellung für Folgearbeiten.

5.4 Ausblick - Numerische Dispersion und Galilei-Invarianz

Nachdem im Rahmen dieser Arbeit in Abschnitt 3.2 nachgewiesen wurde, dass die SPH-Methode aus Sicht der Grobstrukturperspektive intrinsisch als LES-Verfahren für subsonische Turbulenz operiert, limitiert durch die Kernelskala D_K und implizite Subfilterspannungen $\tau_{SFS,i}$, soll hier perspektivisch auf Dispersionsfehler eingegangen werden. Diese werden nicht im Rahmen der entwickelten Theorie der impliziten Subfilterspannungen erfasst, die nach Kapitel 4 im Zusammenhang zur numerischen Diffusion steht. Es werden lediglich die beiden weiteren Fälle 20-21 in Tabelle 5.1 diskutiert, sodass dieser Abschnitt als Ausblick auf weitere detailliertere Arbeiten zu verstehen ist.

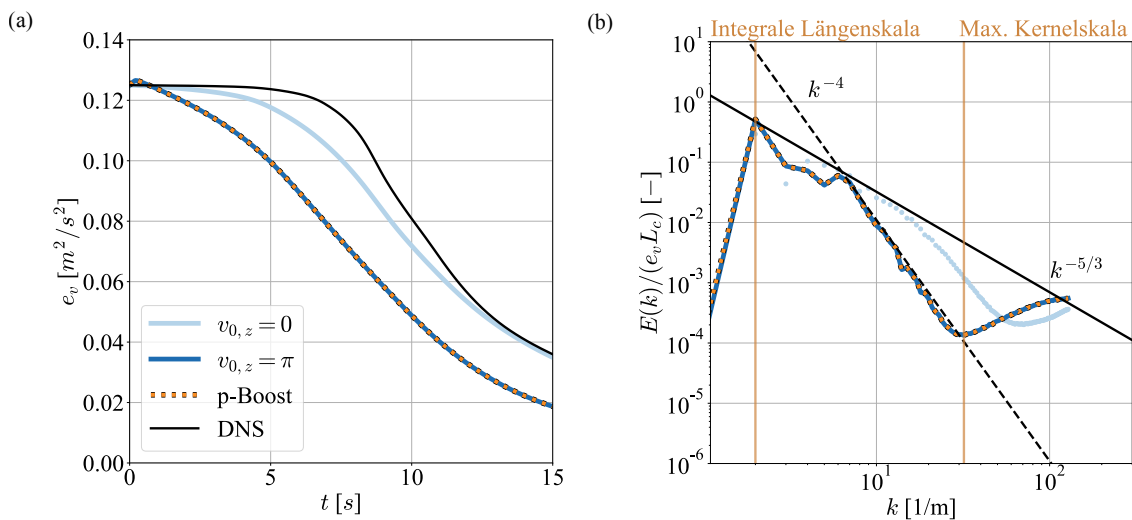


Abbildung 5.11: Verhalten quantitativer Metriken bei Untersuchung der Galilei-Invarianz für die mittlere Partikelzahl $N = 256^3$ und der Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$. (a) Mittlere kinetische Energie und (b) Spektrale Energiedichte zum Zeitpunkt $t = 14$ s.

Wie in Abschnitt 2.2.2 erläutert, wurde in der Studie von Yalla et al. (2021b) für konventionelle gitterbasierte Methoden argumentiert und aufgezeigt, dass Dispersionfehler für LES-Verfahren eine wichtige Rolle spielen. Sie können nachweislich den spektralen Energietransfer des Kaskadenprozesses von den großen zu den kleinen Skalen hin inhibieren. Physikalisch äußert sich dies darin, dass die Galilei-Invarianz der Strömungsgleichungen verletzt wird. Das bedeutet, dass sich die Statistik turbulenter Schwankungen ändert, wenn der Turbulenz eine mittlere Konvektion mit konstanter Geschwindigkeit überlagert wird. Obwohl unklar ist, ob die Argumentation vollständig auf den SPH-Kontext übertragbar ist, soll dennoch überprüft werden, ob die Galilei-Invarianz der Taylor-Green Strömung in Gl. (5.1) und (5.2) mittels des SPH-Modells in Gl. (3.25) und (3.26) erhalten werden kann. Sollte letztere verletzt werden, könnte dies eine Indikation dafür sein, dass numerische Dispersionsfehler für SPH-Simulationen subsonischer Turbulenz eine entscheidende Rolle spielen.

Deshalb soll nachfolgend Fall 10 in Tabelle 5.1 mit einer konstanten überlagerten Geschwindigkeit $v_{0,z} = \pi$ in Gl. (5.1) wiederholt werden (Fall 21). Es wird erneut die mittlere Partikelzahl $N = 256^3$ und die Kernelkonfiguration Wendland C4 mit $D_K = 8\Delta l$ herangezogen. Da aus der DNS-Lösung $e_v(t = 14 \text{ s}) \approx 0.04 \text{ m}^2/\text{s}^2$ bekannt ist, ist folglich $u_{rms} = \sqrt{2e_v(t = 14 \text{ s})} \approx 0.28 \text{ m/s}$. Hiermit lässt sich der Turbulenzgrad Tu der konvektierenden Strömung abschätzen, der bei etwa $Tu \approx u_{rms}/v_{0,z} = 0.09$ liegt. Letzterer Wert ist typisch für Strömungen in Flugtriebwerksbrennkammern. Um die initiale Machzahl $Ma = v_{max}/c_s = 0.2$ nachzubilden, muss zudem die Schallgeschwindigkeit neu kalibriert werden, was sich auch auf das stabilisierende Referenzdruckniveau p_{ref} auswirkt. Aufgrund der neuen Maximalgeschwindigkeit $v_{max} = \sqrt{1 + \pi^2} \approx 3.3 \text{ m/s}$ zu Beginn, ergibt sich $c_s = 16.5 \text{ m/s}$, was wiederum $p_{ref} = \rho_{ref} c_s^2 / 4 = 68 \text{ Pa}$ impliziert. Das Verhältnis zwischen dem neuen und alten Referenzdruckniveau ist bei geforderter Mach-Ähnlichkeit $Ma = konst$ durch folgendes Skalierungsgesetz gegeben

$$\frac{p_{ref,neu}}{p_{ref,alt}} = \frac{\rho_{ref} c_{s,neu}^2 / 4}{\rho_{ref} c_{s,alt}^2 / 4} = \frac{c_{s,neu}^2}{c_{s,alt}^2} = \frac{(Ma v_{max,neu})^2}{(Ma v_{max,alt})^2} = \frac{v_{max,neu}^2}{v_{max,alt}^2} \quad (5.6)$$

und somit eine reine Konsequenz der angepassten Geschwindigkeitsverhältnisse.

Bevor der Vergleich des Referenzfalls 10 mit dem konvektierenden Fall 21 präsentiert wird, soll zunächst der Einfluss des erhöhten Referenzdruckniveaus auf die Strömung ohne überlagerte Konvektion aufgezeigt werden (Fall 20). Dieser Fall wird als "p-Boost" bezeichnet. Die Resultate sind in Abb. 5.11 illustriert. Anhand der mittleren kinetischen Energie in Abb. 5.11 (a) ist erkennbar, dass die alleinige Steigerung des Referenzdruckniveaus, die Dynamik der Grobstruktur durch verstärkte Dissipation signifikant hemmt. Die Abweichung der zeitlichen Evolution von e_v zur DNS nimmt offensichtlich stark zu, was sich mittels eines SPH-charakteristischen Fehlers nullter Ordnung in der Impulstransportgleichung erklären lässt. Dieser Fehler manifestiert sich in einer zusätzlichen volumenbezogenen Kraft, die mit p_{ref} skaliert, und

$$(\rho \mathbf{a})_i = 2p_{ref} \sum_{j=1}^{N_{ngb}} \nabla W_{h,ij} V_j \quad (5.7)$$

lautet (Colagrossi et al., 2012; Price, 2012; Read et al., 2010). Zwar sorgt dieser Fehlerterm für eine stabilisierende Umverteilung der Partikel bei stark irregulärer Anordnung, führt aber zugleich zu einem Quertransport der SPH-Partikel, der numerische Diffusion und damit auch Dissipation bewirkt. Insofern ist das Resultat in Abb. 5.11 (a) nachvollziehbar. Nach Abb. 5.11 (b) hat dies auch signifikante Auswirkungen auf die Entwicklung der Turbulenz. Die Verteilung der spektralen Energiedichte demonstriert, dass durch die Steigerung von p_{ref} die Intensität der Kernelschwankungen steigt, aber auch das spektrale Energiedefizit derart intensiviert wird, dass im Vergleich zur Referenz kein Inertialbereich mehr identifiziert werden kann. Dies zeigt, dass die Wahl von p_{ref} bei einer bestimmten Nachbarzahl $N_{ngb} = konst$ vollständig über die Ausbildung turbulenter Schwankungen entscheiden kann.

Es ist nun interessant festzuhalten, dass sich das konvektierende Problem identisch zum Fall "p-Boost" verhält, welcher die Kurven der konvektierenden Lösung in Abb. 5.11 nahezu perfekt überdeckt. Insofern ist die Lösung ausschließlich Galilei invariant unter der Bedingung $p_{ref} = konst$, die aber praktisch bei überlagerter Konvektion aufgrund von Mach-Ähnlichkeit nicht eingehalten werden kann.

Obwohl anhand von Abb. 5.11 (a) intuitiv gefolgert werden könnte, dass die Intensivierung des spektralen Energiedefizits in Abb. 5.11 (b) ein reiner Dissipationseffekt ist, haben Yalla et al. (2021b) ein ähnliches spektrales Verhalten in konventionellen Methoden beobachtet, das auf Dispersionsfehler zurückzuführen ist. Insbesondere die Tatsache, dass Dispersionsfehler in der SPH-Methode nach Abschnitt 2.2.2 und Gl. (2.5) auch von p_{ref} abhängen, indiziert, dass letztere auch bei der Berechnung subsonischer Turbulenz mittels SPH eine entscheidende Rolle spielen könnten. Inwiefern dies der Fall ist, wurde noch nie in der Literatur adressiert und sollte in Folgearbeiten thematisiert werden, um ein noch besseres Verständnis im Kontext subsonischer Turbulenz zu akquirieren. Für Turbulenz in Flugtriebwerksbrennkammern, die im Mittel zusätzlicher Konvektion ausgesetzt ist, bedeutet dies jedoch sicherlich, dass noch höhere Nachbarzahlen N_{ngb} erforderlich sind als die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten. Nur dann kann die schädliche Wirkung des erhöhten Referenzdruckes p_{ref} in Gl. (5.7) durch Reduktion des Summenterms kompensiert werden. Im Grenzfall eines konstanten Kerneldurchmessers D_K mit $N_{ngb} \rightarrow \infty$ muss letzterer per definitionem verschwinden (Dehnen et al., 2012; Read et al., 2010).

6 Zusammenfassung

In den letzten Jahren wurde am Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS) ein massiv parallelisierter Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Code - *turboSPH* - entwickelt, um den unverstandenen Primärzerfall der Kraftstoffaufbereitung in Flugtriebwerksbrennkammern entschlüsseln zu können. Mit dieser Methodik konnten wesentliche Fortschritte auf dem Gebiet des turbulenzinitiierter Primärzerfalls erzielt werden. Seit der Studie von Bauer et al. (2012), die die Eignung der SPH-Methode zur Simulation subsonischer Turbulenz in generellen Zweifel zieht, stellt sich allerdings auch die Frage nach der Belastbarkeit der Primärzerfallsrechnungen. Deshalb wurde in dieser Arbeit folgende Leitfrage beantwortet: *Welche turbulente Strömungsschwankungen, die über die Entwicklung von einzelnen Zerfallsereignisse entscheiden, können mittels der SPH-Methode tatsächlich abgebildet werden?*

Hierfür wurde ein neuer holistischer SPH-LES-Ansatz unter Berücksichtigung neuerer Konvergenzuntersuchungen von Dehnen et al. (2012), sowie Zhu et al. (2015) entwickelt. Dieser Ansatz widerlegt einerseits die absoluten Aussagen von Bauer et al. (2012) und beantwortet andererseits, ob die Approximation subsonischer turbulenter Strömungen von klassischen dissipativen Subfilterspannungsmodellen, wie dem Smagorinsky Modell, profitieren kann. Letzter Punkt wurde trotz schon existierender SPH-LES-Theorien, wie derjenigen von Antuono et al. (2021a), erstmals in dieser Arbeit adressiert.

In Kapitel 3 wurde im ersten Schritt eine physikalische Neuinterpretation der SPH-Methode vorgenommen. Durch Verallgemeinerung der Theorie von Hardy (1982) aus der statistischen Physik wurde zunächst eine allgemeingültige, kernelbasierte Theorie entwickelt, die die Grobstruktur einer Strömung beschreibt. Deren Lagrangesche Dynamik wird durch Superfluidelemente des Kerneldurchmessers D_K beschrieben, die lokale Kollektive von Fluidelementen darstellen. Hiervon ausgehend, lies sich erkennen, dass die Grobstrukturtheorie alle zentralen Konzepte der SPH-Methode von Beginn an umfasst und es naheliegend ist, die SPH-Methode als inhärentes Lagrangesches Quadraturverfahren für die Grobstrukturgleichungen zu identifizieren. Damit erschließt sich die wesentliche und neue Einsicht, dass die räumliche Auflösung der Methode einerseits durch den Kerneldurchmesser D_K und andererseits durch implizite Subfilterspannungen als Konsequenz der Grobstrukturierung limitiert sein muss.

Um dies zu verifizieren und ein detailliertes Verständnis über die bislang vernachlässigten impliziten Subfilterspannungen aufzubauen, wurde in Kapitel 4 eine experimentell untersuchte, näherungsweise zweidimensionale turbulente Strömung mittels eines hochaufgelösten SPH-Modells nachgebildet. Es konnte demonstriert werden, dass die effektive Auflösung der turbulenten Schwankungen tatsächlich durch den Kerneldurchmesser D_K und implizite Subfilterspannungen begrenzt ist. Die impliziten Subfilterspannungen treten insbesondere dort auf, wo hohe Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung vorliegen. Zudem sind sie mit numerisch dissipativen Kernelschwankungen verknüpft und induzieren einen dominanten diffusiven Impulstransport quer zur Hauptströmungsrichtung. Letzteres konnte über eine Eigenwertanalyse des Subfilterspannungstensors erschlossen werden. Ferner ließen sich durch diese Einsichten Anforderungen an explizite dissipative Subfilterspannungsmodelle formulieren. Deren Aufgabe muss es sein, die Ausbildung dissipativer Kernelschwankungen und somit impliziter Subfil-

terspannungen zu hemmen und dadurch eine schädliche Rückwirkung auf die Grobstruktur zu unterbinden.

In Kapitel 5 wurde die entwickelte Grobstrukturtheorie systematisch für eine dreidimensionale turbulente Strömung unter Probe gestellt. Unter Berücksichtigung der Konvergenzstudien von Dehnen et al. (2012), sowie Zhu et al. (2015) wurde aufgezeigt, dass die SPH-Methode für turbulente Strömungen intrinsisch als LES-Verfahren operiert. Für hohe Partikelanzahlen N und eine geeignete Kernelkonfiguration, die sich insbesondere durch viele Nachbarn N_{ngb} auszeichnet, konnten turbulente Schwankungen bis zu einer effektiven Längenskala von einem doppelten Kerneldurchmesser reproduziert werden. Das verbleibende spektrale Defizit bis zum Kerneldurchmesser D_K konnte erneut auf implizite Subfilterspannungen zurückgeführt werden. Ferner konnte erstmals nachgewiesen werden, dass die Übertragung expliziter dissipativer Subfilterspannungsmodelle aus dem Bereich gitterbasierter Methoden zu einer verschlechterten Approximation der turbulenten Strömung führt. Dies ist in dem nicht-lokalen Charakter der SPH-Methode begründet. Dadurch wirken die dissipativen Modelle nicht nur auf Kernelskalen, sondern auch darüber hinweg, was letztendlich in einer unerwünschten Hemmung der Grobstrukturdynamik resultiert. Folglich ist im SPH-Kontext die Entwicklung gänzlich neuer expliziter Subfilterspannungsmodelle unter Berücksichtigung der Methodencharakteristik erforderlich. Dies stellt eine anspruchsvolle und herausfordernde Aufgabe für Folgearbeiten dar. Außerdem ist in diesen Arbeiten auch zu klären, inwiefern dispersive Fehler die Turbulenz beeinflussen. Die perspektivischen Untersuchungen am Ende des Kapitels 5 zeigen, dass nicht nur numerische Diffusion die Turbulenz beeinflusst, sondern auch Dispersionsfehler eine signifikante Rolle spielen könnten.

Abschließend lässt sich die Leitfrage der Arbeit damit beantworten, dass turbulente Schwankungen mittels der SPH-Methode prinzipiell bis zum Kerneldurchmesser D_K wiedergegeben werden können. Hierfür ist allerdings der Grenzfall $N_{ngb} \rightarrow \infty$ erforderlich. Praktisch ist dies nicht realisierbar, wodurch diffusive implizite Subfilterspannungen durch numerische Kernelschwankungen die effektive Auflösung limitieren. Allerdings zeichnet sich basierend auf den Resultaten dieser Arbeit ab, dass mit einer hohen finiten Nachbarzahl von $N_{ngb} \approx 250$ eine effektive Auflösung erreicht werden kann, die zwei Kerneldurchmessern mit $D_K = 8\Delta l$ entspricht und den mittleren Partikelabstand Δl somit um mehr als eine Größenordnung übersteigt. Für $\Delta l = 10 \mu\text{m}$, wie für Primärzerfallsrechnung typisch, könnten somit turbulente Schwankungen bis zur Auflösung von etwa $160 \mu\text{m}$ reproduziert werden. Ob turbulente Schwankungen unterhalb dieses Längenmaßes noch energetisch relevant gegenüber Grenzflächenspannungseffekten sind, verbleibt zu klären.

Literatur

- Adami, S., Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2012). „Simulating three-dimensional turbulence with SPH“. In: *Center for Turbulence Research Proceedings of the Summer Program 2012*.
- Admal, N. C. und Tadmor, E. B. (2010). „A Unified Interpretation of Stress in Molecular Systems“. In: *J. Elast.*, Band 100, S. 63–143.
- Aluie, H., Rai, S., Yin, H., Lees, A., Zhao, D., G., S. M., Adcroft, A. und Shang, J. K. (2022). „Effective drift velocity from turbulent transport by vorticity“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 7 (10), S. 104601.
- Amicarelli, A., Marongiu, J.-C., Leboeuf, F., Leduc, J., Neuhauser, M., Fang, L. und Caro, J. (2011). „SPH truncation error in estimating a 3D derivative“. In: *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Band 87, Heft 7, S. 677–700.
- Antuono, M., Colagrossi, A., Marrone, S. und Molteni, D. (2010). „Free-surface flows solved by means of SPH schemes with numerical diffusive terms“. In: *Comput. Phys. Commun.*, Band 181, Heft 3, S. 532–549.
- Antuono, M., Marrone, S., Di Mascio, A. und Colagrossi, A. (2021a). „Smoothed particle hydrodynamics method from a large eddy simulation perspective. Generalization to a quasi-Lagrangian model“. In: *Phys. Fluids*, Band 33, S. 015102.
- Antuono, M., Sun, P. N., Marrone, S. und Colagrossi, A. (2021b). „The δ -ALE-SPH model: An arbitrary Lagrangian-Eulerian framework for the δ -SPH model with particle shifting technique“. In: *Comput. Fluids*, Band 216, S. 104806.
- Bailly, C. und Comte-Bellot, G. (2015). *Turbulence*. Springer Cham.
- Bandak, D., Goldenfeld, N., Mailybaev, A. A. und Eyink, G. (2022). „Dissipation-range fluid turbulence and thermal noise“. In: *Phys. Rev. E*, Band 105 (6), S. 065113.
- Basa, M., Quinlan, N. J. und Lastiwka, M. (2009). „Robustness and accuracy of SPH formulations for viscous flow“. In: *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Band 60, Heft 10, S. 1127–1148.
- Bauer, A. und Springel, V. (2012). „Subsonic turbulence in smoothed particle hydrodynamics and moving-mesh simulations“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 423, S. 2558.
- Bell, J., Nonaka, A., Garcia, A. und Eyink, G. (2022). „Thermal fluctuations in the dissipation range of homogeneous isotropic turbulence“. In: *J. Fluid Mech.*, Band 939, A12.
- Bicknell, G. V. (1991). „The Equations of Motion of Particles in Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Band 12, S. 1198–1206.
- Bilger, R. W. (1975). „A Note on Favre Averaging in Variable Density Flows“. In: *Combust. Sci. Technol.*, Band 11, S. 215–217.
- Boffetta, G. und Ecke, R. E. (2012). „Two-Dimensional Turbulence“. In: *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Band 44, S. 427–451.
- Braun, S., Wieth, L., Holz, S., Dauch, T. F., Keller, M. C., Chaussonnet, G., Gepperth, S., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2019). „Numerical prediction of air-assisted primary atomization using Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Int. J. Multiphase Flow*, Band 114, S. 303–315.
- Brookshaw, L. (1985). „A method of calculating radiative heat diffusion in particle simulations“. In: *Proc. Astron. Soc. Aust.*, Band 6, S. 207.
- Cha, S.-H. und Whitworth, A. P. (2003). „Implementations and tests of Godunov-type particle hydrodynamics“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 340, S. 73–90.

- Chaussonnet, G., Dauch, T., Keller, M., Okrashevski, M., Ates, C., Schwitzke, C., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2020). „Progress in the Smoothed Particle Hydrodynamics Method to Simulate and Post-process Numerical Simulations of Annular Airblast Atomizers“. In: *Flow Turbul. Combust.*, Band 105, S. 1119–1147.
- Cleary, P. W. und Monaghan, J. J. (1999). „Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 148, S. 227–264.
- Colagrossi, A., Bouscasse, B., Antuono, M. und Marrone, S. (2012). „Particle packing algorithm for SPH schemes“. In: *Comput. Phys. Commun.*, Band 183, S. 1641.
- Colagrossi, A., Durante, D., Bonet, A. J. und Souto-Iglesias, A. (2017). „Discussion of Stokes’ hypothesis through the smoothed particle hydrodynamics model“. In: *Phys. Rev. E*, Band 96, S. 023101.
- Colagrossi, A., Souto-Iglesias, A., Antuono, M. und Marrone, S. (2013). „Smoothed-particle-hydrodynamics modeling of dissipation mechanisms in gravity waves“. In: *Phys. Rev. E*, Band 87, S. 023302.
- Dairay, T., Lamballais, E., Laizet, S. und Vassilicos, J. C. (2017). „Numerical dissipation vs. subgrid-scale modelling for large eddy simulation“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 337, S. 252–274.
- Dalrymple, R. A. und Rogers, B. D. (2006). „Numerical modeling of water waves with the SPH method“. In: *Coastal Eng.*, Band 53, S. 141–147.
- Dauch, T. F., Chaussonnet, G., Keller, M. C., Okrashevski, M., Ates, C., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021). „3D Predictions of the Primary Breakup of Fuel in Spray Nozzles for Aero Engines“. In: Springer eBook Collection. High Performance Computing in Science und Engineering 20 : Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2020.
- Dehnen, W. und Aly, H. (2012). „Improving convergence in smoothed particle hydrodynamics simulations without pairing instability“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 425, S. 1068–1082.
- Di Mascio, A., Antuono, M., Colagrossi, A. und Marrone, S. (2017). „Smoothed particle hydrodynamics method from a large eddy simulation perspective“. In: *Phys. Fluids*, Band 29, S. 035102.
- DiBenedetto, E. (2011). *Classical Mechanics : Theory and Mathematical Modeling*. Birkhäuser Boston.
- Drikakis, D., Fureby, C., Grinstein, F. F. und Youngs, D. (2007). „Simulation of transition and turbulence decay in the Taylor–Green vortex“. In: *J. Turbul.*, Band 8, N20.
- Drivas, T. D., Johnson, P. L., Lalescu, C. C. und Wilczek, M. (2017). „Large-scale sweeping of small-scale eddies in turbulence: A filtering approach“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 2 (10), S. 104603.
- Durrán, D., Weyn, J. A. und Menchaca, M. Q. (2017). „Practical Considerations for Computing Dimensional Spectra from Gridded Data“. In: *Mon. Weather Rev.*, Band 145, S. 3901–3910.
- Durst, F. (2006). *Grundlagen der Strömungsmechanik : Eine Einführung in die Theorie der Strömung von Fluiden*. Springer Berlin Heidelberg.
- Ellero, M., Español, P. und Adams, N. A. (2010). „Implicit atomistic viscosities in smoothed particle hydrodynamics“. In: *Phys. Rev. E*, Band 82, S. 046702.

- Español, P. und Revenga, M. (2003). „Smoothed dissipative particle dynamics“. In: *Phys. Rev. E*, Band 67, S. 026705.
- Eyink, G. L. (2005). „Locality of turbulent cascades“. In: *Phys. D: Nonlinear Phenom.*, Band 207, Heft 1, S. 91–116.
- Eyink, G. L. und Aluie, H. (2009). „Localness of energy cascade in hydrodynamic turbulence. I. Smooth coarse graining“. In: *Phys. Fluids*, Band 21, Heft 11, S. 115107.
- Eyink, G. L. und Drivas, T. D. (2018). „Cascades and Dissipative Anomalies in Compressible Fluid Turbulence“. In: *Phys. Rev. X*, Band 8, S. 011022.
- Fröhlich, J., Hrsg. (2006). *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Wiesbaden.
- Garnier, E., Adams, N. A. und Sagaut, P. (2009). *Large Eddy Simulation for compressible flows*. Springer Dordrecht.
- Germano, M. (1992). „Turbulence: the filtering approach“. In: *J. Fluid Mech.*, Band 238, S. 325–336.
- Gingold, R. A. und Monaghan, J. J. (1977). „Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 181, S. 375–389.
- Gotoh, T. (1998). „Energy spectrum in the inertial and dissipation ranges of two-dimensional steady turbulence“. In: *Phys. Rev. E*, Band 57 (3), S. 2984–2991.
- Hardy, R. J. (1982). „Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: Shock waves“. In: *J. Chem. Phys.*, Band 76, S. 622–628.
- Heisenberg, W. (1948). „Zur statistischen Theorie der Turbulenz“. In: *Z. Physik*, Band 124, S. 628–657.
- Hopkins, P. F. (2015). „A new class of accurate, mesh-free hydrodynamic simulation methods“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 450, S. 53.
- Hoyas, S. und Jiménez, J. (2006). „Scaling of the velocity fluctuations in turbulent channels up to $Re=2003$ “. In: *Phys. Fluids*, Band 18, Heft 1, S. 011702.
- Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2006a). „A multi-phase SPH method for macroscopic and mesoscopic flows“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 213, S. 844–861.
- Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2006b). „Angular-momentum conservative smoothed particle dynamics for incompressible viscous flows“. In: *Phys. Fluids*, Band 18, S. 101702.
- Hu, X. Y. und Adams, N. A. (2015). „A SPH Model for Incompressible Turbulence“. In: *Procedia IUTAM*, Band 18, S. 66–75.
- Irving, J. H. und Kirkwood, J. G. (1950). „The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes. IV. The Equations of Hydrodynamics“. In: *J. Chem. Phys.*, Band 18, Heft 6, S. 817–829.
- Kawai, Y. und Tomita, H. (2021). „Numerical Accuracy of Advection Scheme Necessary for Large-Eddy Simulation of Planetary Boundary Layer Turbulence“. In: *Mon. Weather Rev.*, Band 149, Heft 9.
- Kolmogorov, A. N. (1941). „The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers“. In: *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, Band 30, S. 4.
- Laizet, S. und Li, N. (2011). „Incompact3d: A powerful tool to tackle turbulence problems with up to $O(10^5)$ computational cores“. In: *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Band 67, Heft 11, S. 1735–1757.

- Landau, L. D. und Lifschitz, E. M. (1991). *LEHRBUCH DER THEORETISCHEN PHYSIK - VI HYDRODYNAMIK*. Verlag Europa-Lehrmittel.
- Lefebvre, A. H. und McDonell, V. G. (2017). *Atomization and Sprays*. CRC Press Boca Raton.
- Leonard, A. (1975). „Energy Cascade in Large-Eddy Simulations of Turbulent Fluid Flows“. In: *Turbulent Diffusion in Environmental Pollution*. Hrsg. von F. Frenkiel und R. Munn. Bd. 18. Advances in Geophysics. Elsevier, S. 237–248.
- Lind, S. J., Rogers, B. D. und Stansby, P. K. (2020). „Review of smoothed particle hydrodynamics: towards converged Lagrangian flow modelling“. In: *Proc. R. Soc. A*, Band 476, S. 20190801.
- Lo, E. Y. M. und Shao, S. (2002). „Simulation of near-shore solitary wave mechanics by an incompressible SPH method“. In: *Appl. Ocean Res.*, Band 24, Heft 5, S. 275–286.
- Lubliner, J., Hrsg. (2017). *Introduction to Solid Mechanics : An Integrated Approach*. Springer Cham.
- Lucy, L. B. (1977). „A numerical approach to the testing of the fission hypothesis“. In: *Astron. J.*, Band 82, S. 1013–1024.
- Marrone, S., Antuono, M., Colagrossi, A., Colicchio, G., Le Touzé, D. und Graziani, G. (2011). „ δ -SPH model for simulating violent impact flows“. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, Band 200, Heft 13, S. 1526–1542.
- Marrone, S., Colagrossi, A., Antuono, M., Colicchio, G. und Graziani, G. (2013). „An accurate SPH modeling of viscous flows around bodies at low and moderate Reynolds numbers“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 245, S. 456–475.
- Mayrhofer, A., Laurence, D., Rogers, B. und Violeau, D. (2015). „DNS and LES of 3-D wall-bounded turbulence using Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Comput. Fluids*, Band 115, S. 86–97.
- McMullen, R. M., Krygier, M. C., Torczynski, J. R. und Gallis, M. A. (2022). „Navier-Stokes Equations Do Not Describe the Smallest Scales of Turbulence in Gases“. In: *Phys. Rev. Lett.*, Band 128, S. 114501.
- Moin, P. und Mahesh, K. (1998). „DIRECT NUMERICAL SIMULATION: A Tool in Turbulence Research“. In: *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Band 30, Heft 1, S. 539–578.
- Molteni, D. und Colagrossi, A. (2009). „A simple procedure to improve the pressure evaluation in hydrodynamic context using the SPH“. In: *Comput. Phys. Commun.*, Band 180, Heft 6, S. 861–872.
- Monaghan, J. (2005). „Smoothed particle hydrodynamics“. In: *Rep. Prog. Phys.*, Band 68, S. 1703–1759.
- Monaghan, J. (2011). „A turbulence model for Smoothed Particle Hydrodynamics“. In: *Eur. J. Mech. B. Fluids*, Band 30, S. 360–370.
- Morris, J. P. (1996). „A Study of the Stability Properties of Smooth Particle Hydrodynamics“. In: *Publ. Astron. Soc. Aust.*, Band 13, Heft 1, S. 97–102.
- Moser, R. D., Haering, S. W. und Yalla, G. R. (2021). „Statistical Properties of Subgrid-Scale Turbulence Models“. In: *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Band 53, S. 255–286.
- Moura, R. C., Mengaldo, G., Peiró, J. und Sherwin, S. J. (2017). „On the eddy-resolving capability of high-order discontinuous Galerkin approaches to implicit LES / under-resolved DNS of Euler turbulence“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 330, S. 615–623.

- Nicoud, F., Toda, H. B., Cabrit, O., Bose, S. und Lee, J. (2011). „Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations“. In: *Phys. Fluids*, Band 23, S. 085106.
- Obukhov, A. M. (1941). „On the Distribution of Energy in the Spectrum of Turbulent Flow“. In: *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, Band 32, S. 22–24.
- Oger, G., Marrone, S., Le Touzé, D. und de Leffe, M. (2016). „SPH accuracy improvement through the combination of a quasi-Lagrangian shifting transport velocity and consistent ALE formalisms“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 313, S. 76–98.
- Okraschevski, M., Buerkle, N., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021a). „Implicit molecular stresses in weakly compressible particle-based discretization methods for fluid flow“. In: *Phys. Rev. E*, Band 103, S. 033304.
- Okraschevski, M., Buerkle, N., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2022). „Smoothed particle hydrodynamics physically reconsidered: The relation to explicit large eddy simulation and the issue of particle duality“. In: *Phys. Fluids*, Band 34, Heft 11, S. 115108.
- Okraschevski, M., Hoffmann, S., Stichling, K., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021b). „Fluid dynamics beyond the continuum: A physical perspective on large-eddy simulation“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 6, S. L102601.
- Okraschevski, M., Mesquita, L. C. C., Koch, R., Mastorakos, E. und Bauer, H.-J. (2023). „A Numerical Study of Aero Engine Sub-idle Operation: From a Realistic Representation of Spray Injection to Detailed Chemistry LES-CMC“. In: *Flow Turbul. Combust.*, Band 111, Heft 2, S. 493–530.
- Onsager, L. (1945). „The Distribution of Energy in Turbulence“. In: *Phys. Rev.*, Band 68, S. 281.
- Pereira, F. S., Grinstein, F. F., Israel, D. M., Rauenzahn, R. und Girimaji, S. S. (2021). „Modeling and simulation of transitional Taylor-Green vortex flow with partially averaged Navier-Stokes equations“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 6, S. 054611.
- Posch, H. A., Hoover, W. G. und Kum, O. (1995). „Steady-state shear flows via nonequilibrium molecular dynamics and smooth-particle applied mechanics“. In: *Phys. Rev. E*, Band 52 (2), S. 1711–1720.
- Price, D. J. (2012). „Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics“. In: *J. Comput. Phys.*, Band 231, S. 759–794.
- Quinlan, N. J., Basa, M. und Lastiwka, M. (2006). „Truncation error in mesh-free particle methods“. In: *Int. J. Numer. Methods Eng.*, Band 66, Heft 13, S. 2064–2085.
- Rasio, F. A. (2000). „Particle Methods in Astrophysical Fluid Dynamics“. In: *Prog. Theor. Phys.*, Band 138, S. 609–621.
- Read, J. I., Hayfield, T. und Agertz, O. (2010). „Resolving mixing in smoothed particle hydrodynamics“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 405, Heft 3, S. 1513–1530.
- Rennehan, D. (2021). „Mixing matters“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 506, S. 2836–2852.
- Reynolds, O. (1895). „IV. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion“. In: *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, Band 186, S. 123–164.
- Richardson, L. F. (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press.
- Rivera, M. und Ecke, R. E. (2016). „Lagrangian statistics in weakly forced two-dimensional turbulence“. In: *Chaos*, Band 26, S. 013103.

- Rivera, M. und Wu, X. L. (2000). „External Dissipation in Driven Two-Dimensional Turbulence“. In: *Phys. Rev. Lett.*, Band 85, S. 976–979.
- Robinson, M. und Monaghan, J. J. (2012). „Direct numerical simulation of decaying two-dimensional turbulence in a no-slip square box using smoothed particle hydrodynamics“. In: *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Band 70, S. 37–55.
- Rossi, E., Colagrossi, A. und Graziani, G. (2015). „Numerical simulation of 2D-vorticity dynamics using particle methods“. In: *Comput. Math. Appl.*, Band 69, S. 1484.
- Sagaut, P. (2006). *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer Berlin Heidelberg.
- Schmitt, F. G. (2007). „About Boussinesq’s turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and a direct evaluation of its validity“. In: *C. R. Mecanique*, Band 335, S. 617–627.
- Shadloo, M., Oger, G. und Le Touze, D. (2016). „Smoothed particle hydrodynamics method for fluid flows, towards industrial applications: Motivations, current state, and challenges“. In: *Comput. Fluids*, Band 136, S. 11–34.
- Siber, M. (2021). „A Critical Comparison of the Finite-Volume-Method and Smoothed Particle Hydrodynamics for Physically Forced Turbulence Simulations“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc.
- Sigalotti, L., Klapp, J. und Gesteira, M. (2021). „The Mathematics of Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Consistency“. In: *Front. Appl. Math. Stat.*, Band 7.
- Sijacki, D. und Springel, V. (2006). „Physical viscosity in smoothed particle hydrodynamics simulations of galaxy clusters“. In: *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, Band 371, S. 1025–1046.
- Silvis, M. H., Remmerswaal, R. A. und Verstappen, R. (2017). „Physical consistency of subgrid-scale models for large-eddy simulation of incompressible turbulent flows“. In: *Phys. Fluids*, Band 29, S. 015105.
- Skrbek, L. und Stalp, S. R. (2000). „On the decay of homogeneous isotropic turbulence“. In: *Phys. Fluids*, Band 12, Heft 8, S. 1997–2019.
- Springel, V. (2010). „Smoothed Particle Hydrodynamics in Astrophysics“. In: *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, Band 48, S. 391–430.
- Sreenivasan, K. R. und Yakhot, V. (2021). „Dynamics of three-dimensional turbulence from Navier-Stokes equations“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 6 (10), S. 104604.
- Tartakovsky, A. M., Trask, N., Pan, K., Jones, B. D., Pan, W. und Williams, J. R. (2015). „Smoothed particle hydrodynamics and its applications for multiphase flow and reactive transport in porous media“. In: *Comput. Geosci.*, Band 20, S. 807–834.
- Taylor, G. I. und Green, A. E. (1937). „Mechanism of the production of small eddies from large ones“. In: *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, Band 158, S. 499–521.
- Tropea, C., Alexander, L. Y. und John, F. F., Hrsg. (2007). *Springer handbook of experimental fluid mechanics*. Springer Berlin.
- Vacondio, R., Altomare, C., De Leffe, M., Hu, X., Le Touzé, D., Lind, S., Marongiu, J.-C., Marrone, S., Rogers, B. D. und Souto-Iglesias, A. (2021). „Grand challenges for Smoothed Particle Hydrodynamics numerical schemes“. In: *Comput. Part. Mech.*, Band 8, S. 575–588.
- Vila, J. P. (1999). „ON PARTICLE WEIGHTED METHODS AND SMOOTH PARTICLE HYDRODYNAMICS“. In: *Math. Models Methods Appl. Sci.*, Band 09, Heft 02, S. 161–209.

- Violeau, D. und Issa, R. (2007). „Numerical modelling of complex turbulent free-surface flows with the SPH method: an overview“. In: *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Band 53, S. 277–304.
- Vreman, B., Geurts, B. und Kuerten, H. (1994). „Realizability conditions for the turbulent stress tensor in large-eddy simulation“. In: *Journal of Fluid Mechanics*, Band 278, S. 351–362.
- Yakhot, V. und Sreenivasan, K. R. (2005). „Anomalous Scaling of Structure Functions and Dynamic Constraints on Turbulence Simulations“. In: *J. Stat. Phys.*, Band 121, S. 823–841.
- Yalla, G. R., Oliver, T. A., Haering, S. W., Engquist, B. und Moser, R. D. (2021a). „Effects of resolution inhomogeneity in large-eddy simulation“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 6 (7), S. 074604.
- Yalla, G. R., Oliver, T. A. und Moser, R. D. (2021b). „Numerical dispersion effects on the energy cascade in large-eddy simulation“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 6 (9), S. L092601.
- Ye, T., Pan, D., Huang, C. und Liu, M. (2019). „Smoothed particle hydrodynamics (SPH) for complex fluid flows: Recent developments in methodology and applications“. In: *Phys. Fluids*, Band 31, S. 011301.
- Yeung, P. K., Sreenivasan, K. R. und Pope, S. B. (2018). „Effects of finite spatial and temporal resolution in direct numerical simulations of incompressible isotropic turbulence“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 3 (6), S. 064603.
- Zhu, Q., Hernquist, L. und Li, Y. (2015). „NUMERICAL CONVERGENCE IN SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS“. In: *Astrophys. J.*, Band 800, S. 6.

Mitbetreute studentische Arbeiten

- Küstner, C. (2019). „Direkte numerische Simulation zweidimensionaler, turbulenter Strömungen mittels Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc.
- Nguyen, B.-D. (2020). „Evaluierung des Grenzflächenspannungsmodells nach Tartakovsky zur Erfassung von dynamischen Prozessen in Mehrphasensystemen“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc.
- Sester, C. (2019). „Dynamische Modellierung eines Wärmetransportsystems in Satelliten“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc. & Thomas Gellrich, M. Sc. (FZI).
- Siber, M. (2021). „A Critical Comparison of the Finite-Volume-Method and Smoothed Particle Hydrodynamics for Physically Forced Turbulence Simulations“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc.
- Tune, J. T. (2021). „Development and Validation of a Wall Function Approach for Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc. & Shreyas Joshi, M. Sc. (Fifty2).
- Wicker, M. (2022). „Development and Validation of a Surface Tension Model for the Meshless-Finite-Mass Method“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Max Okrashevski, M. Sc.
- Yu, Y. (2019). „Untersuchung der örtlichen Adaptivität im Rahmen der Smoothed Particle Hydrodynamics Methode“. Masterarbeit. Institut für Thermische Strömungsmaschinen (ITS), Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Betreuer: Prof. Hans-Jörg Bauer, Mitbetreuer: Johannes Kaden, M. Sc. & Max Okrashevski, M. Sc.

Publikationsliste

- Ates, C., Gundogdu, C., Okrashevski, M., Bürkle, N., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2023a). „Characterization of flow-blurring atomization with Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)“. In: *Int. J. Multiph. Flow*, Band 164, S. 104442.
- Ates, C., Karwan, F., Okrashevski, M., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2023b). „Conditional Generative Adversarial Networks for modelling fuel sprays“. In: *Energy AI*, Band 12, S. 100216.
- Chaussonnet, G., Dauch, T., Keller, M., Okrashevski, M., Ates, C., Schwitzke, C., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2020). „Progress in the Smoothed Particle Hydrodynamics Method to Simulate and Post-process Numerical Simulations of Annular Airblast Atomizers“. In: *Flow Turbul. Combust.*, Band 105, S. 1119–1147.
- Chaussonnet, G., Dauch, T., Keller, M. C., Okrashevski, M., Ates, C., Schwitzke, C., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021). „Influence of the Flow Physics on the Load Balancing During SPH Simulations“. In: Springer eBook Collection. High Performance Computing in Science und Engineering 19 : Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2019.
- Dauch, T. F., Ates, C., Rapp, T., Keller, M. C., Chaussonnet, G., Kaden, J., Okrashevski, M., Koch, R., Dachsbacher, C. und Bauer, H.-J. (2019). „Analyzing the Interaction of Vortex and Gas–Liquid Interface Dynamics in Fuel Spray Nozzles by Means of Lagrangian-Coherent Structures (2D)“. In: *Energies*, Band 12, Heft 13.
- Dauch, T. F., Chaussonnet, G., Keller, M. C., Okrashevski, M., Ates, C., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021). „3D Predictions of the Primary Breakup of Fuel in Spray Nozzles for Aero Engines“. In: Springer eBook Collection. High Performance Computing in Science und Engineering 20 : Transactions of the High Performance Computing Center, Stuttgart (HLRS) 2020.
- Okrashevski, M., Buerkle, N., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021a). „Implicit molecular stresses in weakly compressible particle-based discretization methods for fluid flow“. In: *Phys. Rev. E*, Band 103, S. 033304.
- Okrashevski, M., Buerkle, N., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2022). „Smoothed particle hydrodynamics physically reconsidered: The relation to explicit large eddy simulation and the issue of particle duality“. In: *Phys. Fluids*, Band 34, Heft 11, S. 115108.
- Okrashevski, M., Hoffmann, S., Stichling, K., Koch, R. und Bauer, H.-J. (2021b). „Fluid dynamics beyond the continuum: A physical perspective on large-eddy simulation“. In: *Phys. Rev. Fluids*, Band 6, S. L102601.
- Okrashevski, M., Mesquita, L. C. C., Koch, R., Mastorakos, E. und Bauer, H.-J. (2023). „A Numerical Study of Aero Engine Sub-idle Operation: From a Realistic Representation of Spray Injection to Detailed Chemistry LES-CMC“. In: *Flow Turbul. Combust.*, Band 111, Heft 2, S. 493–530.

Anhang

A.1 Lagrangesche Quadratur des Grobstrukturmodells

In diesem Anhang wird die Diskretisierung des Modells in Gl. (3.24) mittels Lagrangescher Quadratur detailliert ausgeführt und mit SPH-Approximationen in Verbindung gesetzt. Die folgende Darstellung wurde in ähnlicher Weise in Okrashevski et al. (2022) publiziert.

A.1.1 Dichte der Grobstruktur

Um die Dichte eines Partikels $i \in \{1, \dots, N\}$ in Gl. (3.24) zu approximieren, muss das Integral über $j \in \{1, \dots, N_{ngb}\}$ Nachbarartikel diskretisiert werden. Das Massenelement $dM(\mathbf{y})$ wird folglich durch $M_j := M(\mathbf{y}_j)$ ersetzt. Mit der Abkürzung $W_{h,ij} := W_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j)$ ergibt sich

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j=1}^{N_{ngb}} M_j W_{h,ij} + O(N_{ngb}^{-\gamma}), \quad \gamma \in [\frac{1}{2}; 1]. \quad (\text{A.1})$$

Die Näherung in Gl. (A.1) ist die traditionelle Dichteschätzung in SPH gemäß Gl. (2.8) in Abschnitt 2.4 (Monaghan, 2005; Price, 2012; Springel, 2010). Sie enthält einen Fehlerterm, der nach Zhu et al. (2015) mit $N_{ngb} \rightarrow \infty$ verschwindet. Der Fehlerterm, der nach Abschnitt 2.2 mit D_K^2 skaliert, entfällt, da das Ziel ist, die Dichte der Grobstruktur zu approximieren.

Für eine homogene Massenverteilung $M_i = M_j$ kann die Definition eines Partikelvolumens aus Gl. (A.1) erschlossen werden

$$\bar{\rho}_i \approx M_i \sum_{j=1}^{N_{ngb}} W_{h,ij} = \frac{M_i}{V_i} \quad \Rightarrow \quad V_i := \frac{1}{\sum_{j=1}^{N_{ngb}} W_{h,ij}}. \quad (\text{A.2})$$

In Gl. (A.2) wird eine alternative SPH-Dichteapproximation erfasst, die häufig für subsonische Mehrphasenströmungen mit Dichtesprung verwendet wird, selbst wenn $M_i \neq M_j$ gilt (Español et al., 2003; Hu et al., 2006a). Aufgrund des weiteren Anwendungsspektrums der Dichteapproximation in Gl. (A.2), wird diese im Rahmen der vorliegenden Arbeit benutzt.

A.1.2 Druckgradient der Grobstruktur

Für die Approximation des Druckgradienten in der Transportgleichung der Grobstruktur in Gl. (3.24), wird zunächst eine partielle Integration durchgeführt

$$\begin{aligned} & - \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &= - \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{y}} [p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y})] \, d\mathbf{y} + \int_{V_x} p(\mathbf{y}, t) \nabla_{\mathbf{y}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Mit dem Integralsatz nach Gauss-Ostrogradsky und der Tatsache, dass der Kernel per definitionem auf dem Rand ∂V_x des Superfluidelementes $W_h = 0$ ist, ergibt sich für den ersten Term auf der rechten Seite von Gl. (A.3)

$$\int_{\partial V_x} p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{o} = 0, \quad (\text{A.4})$$

wobei $d\mathbf{o}$ ein Differentialelement der Oberfläche ist. Für den zweiten Term auf der rechten Seite von Gl. (A.3) kann die Kettenregel appliziert werden, um zu zeigen, dass

$$- \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = - \int_{V_x} p(\mathbf{y}, t) \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \quad (\text{A.5})$$

Bevor nun eine Quadratur für Gl. (A.5) durchgeführt wird, ist es aus Symmetriegründen sinnvoll, den Term $p(\mathbf{x}, t) \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = 0$ zu addieren. Dieser verschwindet identisch, da der Kernelgradient antisymmetrisch ist. Es ergibt sich

$$- \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = - \int_{V_x} (p(\mathbf{y}, t) + p(\mathbf{x}, t)) \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \quad (\text{A.6})$$

Mit der Indexnotation für Partikel lautet die Quadratur von Gl. (A.6)

$$- \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \approx - \sum_{j=1}^{N_{ngb}} (p_j + p_i) \nabla W_{h,ij} V_j. \quad (\text{A.7})$$

Basierend auf dieser Diskretisierung kann die Addition des Nullterms in Gl. (A.6) nachvollzogen werden. Sie führt dazu, dass antisymmetrische Druckkräfte zwischen Partikel i & j resultieren, die im Einklang mit dem dritten Newtonschen Axiom sind (Monaghan, 2005). Dadurch erhält auch die diskretisierte Form der Impulstransportgleichung Druckkräfte und ist folglich konservativ. Häufig wird diese Antisymmetrie über die Variation eines Lagrange Funktionals für eine ideale Euler Strömung hergeleitet (Monaghan, 2005; Price, 2012; Springel, 2010).

Schlussendlich verbleibt zu erkennen, dass die Drücke der Fluidelemente p_i & p_j in Gl. (A.7) Unbekannte auf der Grobstrukturebene sind. Sie lassen sich durch die Grobstrukturgrößen ersetzen, was allerdings in den klassischen SPH-Fehlern resultiert (Sigalotti et al., 2021; Zhu et al., 2015)

$$p_i = \bar{p}_i + \mathcal{O}(D_K^2) + \mathcal{O}(N_{ngb}^{-\gamma}), \quad \gamma \in [\frac{1}{2}; 1]. \quad (\text{A.8})$$

Die Fehler gehen, wie in Abschnitt 2.4 erklärt, einerseits auf die Approximation mittels des Faltungsintegrals zurück ($\sim D_K^2$), andererseits auf die Quadratur ($\sim N_{ngb}^{-\gamma}$ mit $\gamma \in [\frac{1}{2}; 1]$). Es resultiert eine bekannte SPH-Approximation des Druckgradienten aus der Quadratur

$$- \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \approx - \sum_{j=1}^{N_{ngb}} (\bar{p}_j + \bar{p}_i) \nabla W_{h,ij} V_j, \quad (\text{A.9})$$

die die klassischen SPH-Probleme aufweist. Die Diskretisierung hängt vom Referenzdruck p_{ref} der Zustandsgleichung in Gl. (3.24) ab und bricht damit die sogenannte Eichinvarianz. Zeitgleich führt sie aber auch zu erforderlichen Partikelverschiebungen hinsichtlich der Stabilität des Verfahrens (Colagrossi et al., 2012; Price, 2012).

A.1.3 Viskose Reibung der Grobstruktur

Um den viskosen Reibungsterm in Gl. (3.24) zu diskretisieren, soll zunächst der viskose Term umgeschrieben werden. Für stark subsonische Strömungen mit der Einschränkung $\eta = konst$ gilt $\eta\Delta\mathbf{v} = \Delta(\eta\mathbf{v}) = div(2\eta\mathbf{D})$ (Landau et al., 1991), wobei

$$\mathbf{D} := \frac{1}{2}(J_{\mathbf{v}} + J_{\mathbf{v}}^T) \quad (\text{A.10})$$

den Deformationsgeschwindigkeitstensor bezeichnet und $J_{\mathbf{v}}$ den Jacobi-Tensor des Geschwindigkeitsfeldes. Damit ergibt sich für den viskosen Reibungsterm mit partieller Integration und dem Integralsatz von Gauss-Ostrogradsky (analog Abschnitt A.1.2)

$$\int_{V_x} \eta\Delta_{\mathbf{y}}\mathbf{v}(\mathbf{y})W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = 2div_{\mathbf{x}}[\overline{\eta\mathbf{D}}](\mathbf{x}, t) . \quad (\text{A.11})$$

Mit dem Favre Mittel nach Gl. (3.9) ist $\overline{\eta\mathbf{D}} = \bar{\eta}\tilde{\mathbf{D}}$, sodass mit der Einschränkung $\eta = \bar{\eta} = konst$ aus Gl. (A.11) folgt

$$\int_{V_x} \eta\Delta_{\mathbf{y}}\mathbf{v}(\mathbf{y})W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = 2\eta div_{\mathbf{x}}[\tilde{\mathbf{D}}](\mathbf{x}, t) = \eta\Delta\tilde{\mathbf{v}} . \quad (\text{A.12})$$

Ausgehend von dieser Form, soll die letztendliche Diskretisierung erfolgen. Hierfür wird eine Technik aus der SPH-Gemeinschaft genutzt, die von Brookshaw (1985) eingeführt wurde, um die Approximation von zweiten Ableitungen basierend auf einem Integralausdruck zu ermöglichen. Diese Technik wurde von Español et al. (2003) und Hu et al. (2006b) weiterentwickelt und soll hier nicht weiter ausgeführt werden. Sie resultiert im Ausdruck (Colagrossi et al., 2017)

$$\begin{aligned} \int_{V_x} \eta\Delta_{\mathbf{y}}\mathbf{v}(\mathbf{y})W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} &= \eta\Delta\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) \\ &= 2(2+n)\eta \int_{V_x} \frac{(\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{y}, t)) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2} \nabla_{\mathbf{x}}W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &+ O(D_K^2) , \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

mit n als Dimension des Problems. Für Gl. (A.13) lässt sich nun eine Quadratur einführen, die formal für $N_{ngb} \rightarrow \infty$ exakt ist und auf diskreter Partikelebene Drehmoment erhält, da

die Partikelkraft kollinear zu den Interaktionspfaden der Partikel sind (Colagrossi et al., 2017). Diese lautet für $n = 3$

$$\int_{V_x} \eta \Delta_{\mathbf{y}} \mathbf{v}(\mathbf{y}) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \approx 10\eta \sum_{j=1}^{N_{ngb}} \frac{(\tilde{\mathbf{v}}_i - \tilde{\mathbf{v}}_j) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j)}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j)^2} \nabla W_{h,ij} V_j. \quad (\text{A.14})$$

A.1.4 Subfilterspannungen der Grobstruktur

Zur Diskretisierung des Subfilterspannungsterms $div_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t)$ in Gl. (3.24) wird der Term zunächst durch sein gemitteltes, nicht-lokales Pendant ersetzt (Sigalotti et al., 2021; Zhu et al., 2015)

$$div_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t) = \int_{V_x} div_{\mathbf{y}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{y}, t) W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{A.15})$$

Dies eröffnet die Möglichkeit, den Divergenzoperator $div_{\mathbf{x}}$ auf den Kernel selbst zu verschieben, was im analytisch berechenbaren Kernelgradienten resultiert. Mit den selben Argumenten wie für den gemittelten Druckgradienten in Gl. (A.3) & (A.4) folgt das Analog von Gl. (A.5). Es lautet

$$div_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t) \approx \int_{V_x} \boldsymbol{\tau}_{SFS}(\mathbf{y}, t) \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \quad (\text{A.16})$$

Gemäß Gl. (A.6) kann hierzu $\boldsymbol{\tau}_{SFS}(\mathbf{x}, t) \int_{V_x} \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = 0$ addiert werden, um eine antisymmetrische Kraft nach dem dritten Newtonschen Axiom zu generieren. Es ergibt sich

$$div_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t) \approx \int_{V_x} (\boldsymbol{\tau}_{SFS}(\mathbf{y}, t) + \boldsymbol{\tau}_{SFS}(\mathbf{x}, t)) \nabla_{\mathbf{x}} W_h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \quad (\text{A.17})$$

Durchführung einer Lagrangeschen Quadratur für Gl. (A.17) führt mit Partikelnotation zur Approximation

$$div_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t) \approx \sum_{j=1}^{N_{ngb}} (\boldsymbol{\tau}_{SFS,j} + \boldsymbol{\tau}_{SFS,i}) \nabla W_{h,ij} V_j. \quad (\text{A.18})$$

Die interessanteste Aufgabe besteht nun darin, wie für LES-Verfahren üblich, ein Modell für den Subfilterspannungstensor $\boldsymbol{\tau}_{SFS}$ selbst einzuführen.

Der Standardansatz, der hierbei verfolgt wird, ist die Einführung von Wirbelviskositätsmodellen in Verbindung mit der Boussinesq-Hypothese (Moser et al., 2021; Sagaut, 2006; Schmitt, 2007; Silvis et al., 2017). Obwohl diese Subfilterspannungsmodelle für ihre starke Vereinfachung von physikalischen Subfiltereffekten kritisiert werden (Moser et al., 2021; Sagaut, 2006; Schmitt, 2007; Silvis et al., 2017), sind sie dennoch kompatibel mit der dissipativen Statistik der Energiekaskade (Eyink et al., 2018; Moser et al., 2021). Das bedeutet, dass der Transport kinetischer Energie von turbulenten Schwankungen von großen zu kleinen Skalen gewährleistet wird. Da das Ziel ist, numerisches Rauschen unterhalb des Kerns für eine Verbesserung der Grobstrukturdynamik zu eliminieren (Abschnitt 4.6), scheinen Wirbelviskositätsmodelle im SPH-Kontext

somit zweckmäßig. Der Subfilterspannungstensor lässt sich dann ansetzen als (Garnier et al., 2009)

$$\boldsymbol{\tau}_{SFS}(\mathbf{x}, t) \approx -2\nu_t \bar{\rho} \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{x}, t), \quad (\text{A.19})$$

wobei der isotrope Teil des Tensors für stark subsonische Strömungen vernachlässigbar ist. In Gl. (A.19) notiert das Skalarfeld ν_t die kinematische Wirbelviskosität und das Tensorfeld $\tilde{\mathbf{D}}$ den Favre gemittelten Deformationsgeschwindigkeitstensor nach Gl. (A.10). Da für dessen Berechnung der Favre gemittelte Jacobi-Tensor des Geschwindigkeitsfeldes $\tilde{\mathbf{J}}_i$ erforderlich ist, wird dieser mit einer Lagrangeschen Quadratur approximiert, die aus der SPH-Gemeinschaft bekannt ist, und für $N_{ngb} \rightarrow \infty$ konsistent erster Ordnung ist. Sie lautet für eine spezifisches Partikel (Price, 2012)

$$\tilde{\mathbf{J}}_i := \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{x}_i, t) \approx \sum_{j=1}^{N_{ngb}} (\tilde{\mathbf{v}}_j - \tilde{\mathbf{v}}_i) \nabla W_{h,ij}^T V_j. \quad (\text{A.20})$$

Für die verbleibende Unbekannte ν_t in Gl. (A.19) sollen zwei verschiedene Modelle untersucht werden. Das erste Modell ist das klassische Smagorinsky-Modell mit der Konstanten $C_S = 0.15$ und der Filterweite Δ . Es ist gegeben durch (Garnier et al., 2009; Sagaut, 2006; Silvis et al., 2017)

$$\nu_t := (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \operatorname{tr}\{\tilde{\mathbf{D}}^2\}}, \quad (\text{A.21})$$

wobei der Tensor $\tilde{\mathbf{D}}$ wie zuvor geschildert aus Gl. (A.10) & (A.20) folgt und $\operatorname{tr}\{\cdot\}$ die Spur des Tensors notiert. Das zweite Modell ist das σ -Modell, das von Nicoud et al. (2011) entwickelt wurde, um wesentliche Limitierungen des Smagorinsky-Modells zu beseitigen. Es gewährleistet beispielsweise verschwindende Dissipation in laminaren Strömungsbereichen sowie statistisch korrektes asymptotisches Wandverhalten (Nicoud et al., 2011; Silvis et al., 2017). Basierend auf den Singulärwerten σ_k , $k \in \{1, 2, 3\}$ des Tensors $\tilde{\mathbf{J}}^T \tilde{\mathbf{J}}$ lautet das alternative Wirbelviskositätsmodell mit der Konstanten $C_\sigma = 1.35$ somit (Nicoud et al., 2011; Silvis et al., 2017)

$$\nu_t := (C_\sigma \Delta)^2 \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2}. \quad (\text{A.22})$$

Es soll ferner angemerkt werden, dass der Subfilterspannungsterm nach Gl. (A.18) nur im Grenzfall $N_{ngb} \rightarrow \infty$ das Drehmoment des Systems erhält, jedoch nicht im diskreten Partikelmodell (Sijacki et al., 2006). Deshalb soll zum Vergleich eine heuristische Erweiterung des gemittelten viskosen Reibungsterms in Gl. (A.14) auf variable Wirbelviskositäten berücksichtigt werden, die auf Cleary et al. (1999) zurückgeht. Sie wurde beispielsweise auch in den SPH-LES-Ansätzen von Di Mascio et al. (2017) und Antuono et al. (2021a) verwendet. Sie ist selbst in diskreter Form Drehmoment erhaltend und ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_{\mathbf{x}} [\boldsymbol{\tau}_{SFS}] (\mathbf{x}, t) \approx \\ 2(2+n) \sum_{j=1}^{N_{ngb}} \bar{\rho}_i \bar{\rho}_j \frac{\nu_{t,i} + \nu_{t,j}}{\bar{\rho}_i + \bar{\rho}_j} \frac{(\tilde{\mathbf{v}}_i - \tilde{\mathbf{v}}_j) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j)}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j)^2} \nabla W_{h,ij} V_j. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Diese Form wird nachfolgend als Monaghan-Cleary-Gingold (MCG) Form bezeichnet (Colagrossi et al., 2017).