

Mathematik – die virtuelle Erschließung der Realität

RWTHTHEMEN 2/2008

Die großen aktuellen Herausforderungen wie etwa Klimawandel, Limitierung fossiler Brenn- und anderer Rohstoffe, Bevölkerungswachstum und Globalisierung – um nur einige zu nennen – eröffnen in ihrer Komplexität kaum überschaubare Problemfelder, die jedoch als zentrale Komponente die Forderung nach nachhaltiger und somit höchst effizienter Nutzung der immer knapper werdenden Ressourcen unterstreichen. Vor diesem Hintergrund müssen fortwährend etablierte ingenieurwissenschaftliche Konzepte und Praktiken neu hinterfragt und in manchen Bereichen signifikant verbessert werden. Damit ist nicht eine ohnehin stattfindende inkrementelle Verbesserung gemeint, sondern gefragt sind Durchbrüche hinsichtlich der Optimierung beziehungsweise Intensivierung bestehender sowie der Entwicklung gänzlich neuer Prozessklassen. Dies betrifft nicht nur die Ebene der Produktionstechnik sondern auch den Innovationsnachschub aus dem Grundlagenbereich. Exemplarisch wird in der chemischen Großindustrie der mittelfristig unumgängliche Wechsel von petrochemischen Chemikalien auf beispielsweise Biomasse als Ausgangsstoff völlig neue Prozessrouten mit sich bringen, die verfahrenstechnisch effektiv und effizient umzusetzen sind. Um dies zu erreichen, ist ein tiefergehendes Verständnis auf mechanistischer Ebene notwendig, das allein auf Basis experimenteller Untersuchungen nicht zu erzielen ist. Ein Schlüssel zur Umgehung der skalen- und materialbedingten Begrenzungen von Experimenten liegt in der virtuellen Erschließung des untersuchten Problemfeldes. Die moderne Rechnertechnologie eröffnet hierzu noch bis vor kurzem ungeahnte Möglichkeiten. Um diese Technologie jedoch überhaupt einsetzen und dann zur vollen Entfaltung bringen zu können, bedarf es einer geeigneten Schnittstelle zwischen realer Welt und ihrer Bearbeitung durch den Computer. Diese Schnittstelle liefert die Mathematik in der Form einer

mathematischen Modellierung der zu untersuchenden Prozesse. Je realitätsnäher die Modelle sind, umso größer sind meist die damit verbundenen Herausforderungen an die Mathematik. Bei ausreichender Realitätsnähe der Modelle erlaubt dieser Ansatz eine Nachbildung der realen Prozesse oder auch nur einzelner relevanter Teilaspekte in Computersimulationen. Auf dieser Basis sind virtuelle Experimente möglich, die „echten“ Experimenten häufig sogar überlegen sind, da alle im Modell erfassten Systemgrößen zumindest prinzipiell zeitlich und räumlich lokal berechnet werden können. Im Gegensatz dazu können in Experimenten meist nur einige der benötigten Größen direkt gemessen werden und diese auch meist nicht überall und zu jedem Zeitpunkt. Die Untersuchung technischer und ingenieurwissenschaftlicher Systeme auf diese rechnergestützte Art und Weise ist das wesentliche Element im modernen Ansatz des Computational Engineering Science, kurz CES.

CES und Mathematik

Um virtuelle Experimente in Form von Computersimulationen realitätsnah durchführen zu können, gilt es, eine ganze Reihe an Schwierigkeiten zu überwinden. Dies gelingt nur in der interdisziplinären Zusammenarbeit von Wissenschaftlern insbesondere aus den Bereichen Ingenieurwissenschaften, Informatik und Mathematik. Dass hierbei Mathematik eine zentrale Rolle spielt, ist schon deshalb offensichtlich, weil die zugrunde liegenden Modelle aus mathematischen Beziehungen – oft in Form gewöhnlicher oder partieller Differentialgleichungen – bestehen. Auf dieser Ebene stellt die Mathematik die Sprache bereit, in der einerseits alle beteiligten Disziplinen missverständnisfrei über die betrachteten Prozesse und Systeme kommunizieren können und in der schließlich Rechner überhaupt zum Einsatz kommen können. Allerdings sind etliche Schritte für den Weg hin zum modell- und rechnergestützten Verständnis und zur Optimie-

rung eines Prozesses erforderlich. Dies beginnt mit der Erarbeitung eines mathematischen Modells. Kann dies auf first principles aufgebaut werden, so ist die grundsätzliche Formulierung oft zum Beispiel aus physikalischen Prinzipien heraus bekannt. Diese sind durch konstituierende Gleichungen zu vervollständigen, durch welche das Verhalten der beteiligten „Materialien“ beschrieben wird. Ob die Gleichungen, auf denen das resultierende Modell beruht, überhaupt Lösungen besitzen, hängt von der Form dieser Gleichungen ab und kann nur im Zusammenspiel mit mathematischer Analysis beantwortet werden. Oft ist die Lösung dieser aus Grundprinzipien abgeleiteten Modelle zu aufwändig. Dann sind vereinfachte Modelle gesucht, welche die relevanten Aspekte dennoch realitätsnah erfassen. Solche Modelle können durch mathematische Techniken wie beispielsweise Homogenisierung, Störungstheorie oder asymptotische Entwicklungen in rigoroser Weise aus höherwertigen Modellen abgeleitet werden. In beiden Fällen ergeben sich mathematische Modelle, deren Lösung nicht in analytisch geschlossener Form angegeben werden kann, sondern nur durch numerische Berechnung angenähert werden kann. Zu diesem Zweck werden Diskretisierungsverfahren entwickelt, wobei ein ursprünglich kontinuierliches Problem in ein diskretes, und deshalb mit Hilfe eines Computers im Prinzip behandelbares, Problem umgesetzt wird. Bei einer Diskretisierungsmethode wird das Gebiet, auf dem das Modell formuliert ist, zum Beispiel das Umfeld eines Tragflügels bei einem Aerodynamikmodell, in viele kleine Zellen unterteilt. Für jede Zelle soll dann ein Wert bestimmt werden, der zum Beispiel den Mittelwert der tatsächlichen Lösung gut annähert. Die Entwicklung und Implementierung von Diskretisierungsverfahren und Methoden zur Behandlung der sich ergebenden diskreten Probleme bilden ein zentrales Thema des Fachgebietes Numerische Mathematik.

Innovative wissenschaftliche Herausforderungen

Die Simulationsaufgaben in CES können in vielen Fällen nicht mit herkömmlichen Blackbox-Softwarepaketen angegangen werden. Es gibt eine Klasse von Problemen, die auf einem grundlegenden Niveau behandelt werden müssen, weil sie nur durch das enge Zusammenspiel mehrerer Aspekte handhabbar werden, die Anwendungshintergründe, Modellierung, Analyse und Simulation des Modells betreffen. Das ist zum Beispiel dann der Fall, wenn verschiedene Skalen wichtig sind, die mit derzeitig und in naher Zukunft verfügbaren Rechenressourcen nicht adäquat aufgelöst werden können. Das Erfassen der relevanten Interaktionen zwischen diesen Skalen stellt ein mathematisches Problem dar, das für die Formulierung des zugrunde liegenden mathematischen Modells und den Entwurf von Verfahren zur Lösung dieses Modells entscheidend ist. In zahlreichen Anwendungsgebieten, die auf den ersten Blick sehr unterschiedlich erscheinen, wie beispielsweise der Werkstoffkunde, der Fluidodynamik, der Molekulardynamik und den damit verbundenen Mehrphasenproblemen, liegen solche Situationen vor. Die Stärke der Mathematik besteht darin, ein besseres Verständnis des gemeinsamen Kerns dieser Probleme zu vermitteln, und auf dieser Basis neue allgemeine Lösungskonzepte zu entwickeln. Dabei sind effiziente iterative Lösungstechniken oder adaptive Diskretisierungskonzepte, die analytisch fundiert sind, typische Bestandteile moderner Simulationsmethoden. Oft liegt das eigentliche Ziel nicht allein in der Simulation komplexer Prozesse selbst. Die hocheffiziente Simulation realer Prozesse ist typischerweise notwendig, um solche Prozesse in einen gewünschten optimalen Zustand zu steuern oder sogar fehlende Komponenten eines adäquaten Modells identifizieren zu können. Die zugehörigen „inversen“ Probleme stellen massive Herausforderungen für die ma-

Die Rolle der Mathematik in Computational Engineering Science

thematischen Lösungskomponenten dar. Dies gilt insbesondere dann, wenn Mehrskalensphänomene auftreten und eine geeignete Regularisierungsstrategie nicht mehr ad hoc gewählt werden kann. Ein Merkmal der Forschungsarbeiten im CES-Bereich ist die Interdisziplinarität. An vielen Stellen, zum Beispiel bei der Modellierung und der Validierung der Simulationsergebnisse aber auch bei der Methodenimplementierung, ist eine intensive Zusammenarbeit zwischen Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Disziplinen erforderlich.

CES in der Fachgruppe Mathematik

Die RWTH Aachen hat der Bedeutung des zukunftsweisenden Themas CES bereits vor mehreren Jahren durch die Einführung des interdisziplinären Diplomstudiengangs „Computational Engineering Science“ Rechnung getragen, der inzwischen auf ein Bachelor/Master-Studium umgestellt wurde. Der Studiengang CES wird durch ein modernes Promotionsprogramm in der im Rahmen der Exzellenzinitiative eingerichteten Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science“, kurz AICES, sowie forschungsseitig durch den interakultativen „Center for Computational Engineering Science“, kurz CCES, komplettiert. Die Fachgruppe Mathematik hat zum Aufbau des Studiengangs CES und zur Gründung des CCES sowie der Graduiertenschule AICES maßgeblich beigetragen. Vor diesem Hintergrund hat die Fachgruppe ihre Struktur in Richtung CES geändert.

Die aktuellen Forschungsaktivitäten der Fachgruppe Mathematik im Bereich CES sollen im Folgenden beispielhaft an vier Themen angerissen werden.

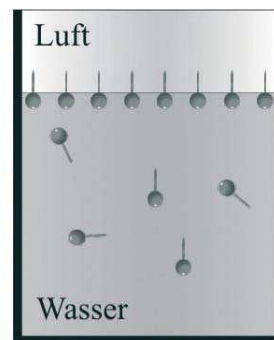
Analysis und Simulation fluider Grenzflächen unter Tensideinfluss

Hautcremes und Mayonnaise sind zwei aus dem Alltag bekannte Beispiele für Emulsionen in der Kosmetik beziehungsweise der Lebensmitteltechnik, bei denen kleine Öltröpfchen fein

hydrophober Rest



hydrophiler Kopf



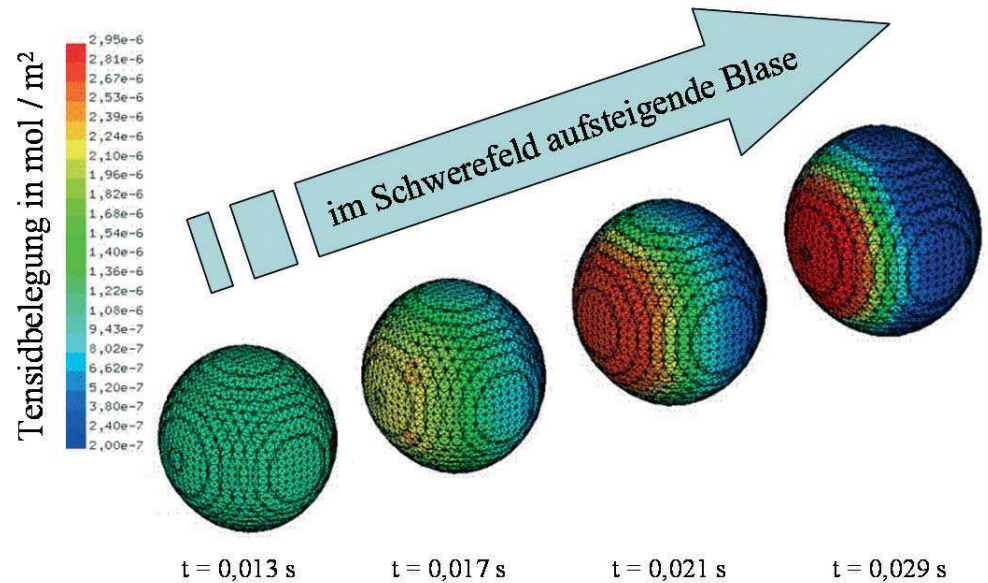
verteilt in Wasser vorliegen. Kommt es zum Zusammenfließen der Tröpfchen, so gehen die positiven Eigenschaften dieser Produkte verloren. Um dies zu verhindern, werden Tenside zugesetzt. Tensidmoleküle haben amphiphilen Charakter durch einen hydrophilen – wasserliebenden – Kopf und einen hydrophoben – wasserabweisenden – Schwanz. Aufgrund dieser Eigenschaft lagern sich Tenside bevorzugt an Phasengrenzflächen an und ändern deren physikochemische Eigenschaften. Insbesondere wird die Oberflächenspannung abhängig vom Belegungsgrad herabgesetzt, siehe Bild 1. Dies beeinflusst die lokalen Kräfte an der fluiden Grenzfläche, wodurch Strömungen einerseits gedämpft, andererseits auch angefacht werden können – bis hin zur so genannten Grenzflächenturbulenz. In Emulsionen nutzt man den dämpfenden Effekt, durch den ein Abfließen der Flüssigkeit zwischen zwei Tröpfchen stark verzögert wird. Diese stabilisierende Eigenschaft der Tenside wird auch in der Verfahrenstechnik genutzt, etwa um disperse Zweiphasenströmungen mit einer engen Größenverteilung der Blasen oder Tropfen zu rea-

lisieren. Beispielsweise lässt man in Blasensäulen Gas durch eine Flüssigkeit zu lösen, um ein Gas in der Flüssigkeit zu lösen, wo es anschließend mit einem in der Flüssigkeit vorgelegten Reaktionspartner ein gewünschtes Produkt bildet. Wieviel von der gasförmigen Komponente in die umgebene Flüssigkeit übergeht, hängt wesentlich von der Größe der Gasblasen ab. Je kleiner diese sind, desto größer ist die insgesamt für den Stoffübergang zur Verfügung stehende Austauschfläche. Andererseits bewirken Wirbel hinter größeren Gasblasen einen schnelleren Abtransport der Übergangskomponente, was zu einer Beschleunigung des Stoffübergangs führt. Deshalb ist man beim Betreiben von Gas-Flüssig-Reaktoren um eine optimale Blasengröße bemüht. Hier können Tenside eingesetzt werden, um selbst bei kleinsten Konzentrationen die Koaleszenz der Blasen zu vermeiden. Hierdurch werden die lokalen Strömungsgeschwindigkeiten in Nähe der Blasenoberfläche und damit der Stoffübergang deutlich beeinflusst. Die Effizienz des Stoffübergangs ist damit in sehr komplexer Weise an die Blasendynamik und den

Bild 1: Tensid, Molekulaufbau und Adsorption an Wasseroberfläche.

Transport der Tenside gekoppelt. Um diesen Einfluss genauer zu verstehen, sind Computersimulationen von Einzelblasen sehr nützlich. Das mathematische Modell zur Beschreibung der Transportprozesse in den Volumenphasen und auf der Phasengrenzfläche basiert auf der Bilanzierung der Erhaltungsgrößen Masse, Impuls und Tensidstoffmenge. Dies liefert partielle Differentialgleichungen innerhalb der Phasen, die an der Phasengrenzfläche durch Transmissionsbedingungen gekoppelt sind. Mathematisch handelt es sich hierbei um freie Randwertprobleme, bei denen die Lage und Form der Grenzfläche wesentlicher Teil der Lösung ist. Die mathematische Analysis solcher Modelle ist eines der Hauptforschungsthemen am Lehrstuhl für Mathematik (CCES). Hinzu kommt die numerische Simulation mittels effizienter Verfahren, die auch die Phasengrenzfläche er-

Bild 2: Entwicklung der Tensidverteilung auf der Oberfläche einer aufsteigenden Blase.



fassen. Bekannte Vertreter sind die Volume-of-Fluid (VOF)-Methode, die Level-Set-Methode und das Front-Tracking-Verfahren. Eine an der RWTH entwickelte VOF-basierte Methode ermöglicht die Simulation von Transportprozessen auf der Phasengrenzfläche und deren Wirkung auf die Partikeldynamik wie etwa die Abbremsung von aufsteigenden oder absinkenden Fluidpartikeln. Bild 2 zeigt die numerisch berechnete Tensidverteilung auf der Oberfläche einer aufsteigenden Gasblase zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Das Tensid sammelt sich aufgrund der grenzflächen-nahen Strömungsverhältnisse zunehmend an der hinteren Blasenkappe an, während die Belegung im vorderen Bereich der Blasenoberfläche immer geringer wird. Dies hat Auswirkungen sowohl auf die Aufstiegs-geschwindigkeit als auch auf den lokalen Stoffübergang. Durch solche „virtuellen Experimente“ wird Wissen und Verständnis generiert, welches dann zur Weiterentwicklung von vereinfachten Ingenieur-Modellen wie hier dem „Stagnant Cap Modell“ nutzbar ist.

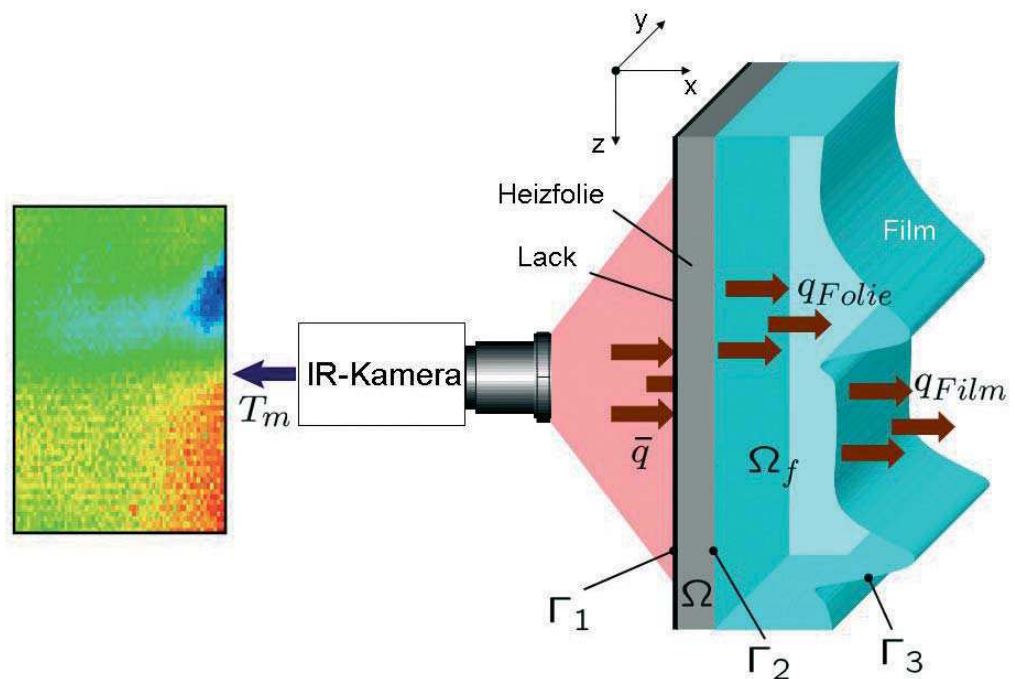


Bild 3: Detailansicht des Messausschnitts.

Numerische Methoden für ein inverses Wärmeleitproblem

Viele mathematische Modelle zur Beschreibung technischer physikalischer Prozesse beruhen auf Bilanzgesetzen für Masse, Impuls und Energie. Solche Bilanzen bringen Änderungsraten der involvierten physikalischen Größen ins Spiel, und man erhält partielle Differentialgleichungen als mathematisches Modell. Ein Standardbeispiel ist die so genannte Wärmeleitungsgleichung zur Beschreibung der Temperaturverteilung zum Beispiel in einer beheizten Platte. Die Lösung dieser partiellen Differentialgleichung erlaubt die Bestimmung der Temperaturverteilung, die sich bei einer gegebenen Anfangstemperatur und gegebenen Wärmeströmen am Gebietsrand im zeitlichen Verlauf einstellt. Aus Problemparametern, wie den Anfangs- und Randbedingungen, werden Systemzustände, wie die Tempera-

turverteilung, ermittelt. Man nennt dies auch „Vorwärtssimulation“. Andererseits ist es offensichtlich von praktischem Interesse, bestimmte Problemparameter wie Anfangs- und Randbedingungen oder auch Materialparameter zu ermitteln, die einen gewünschten Zustand wie eine vorgegebene Temperaturverteilung induzieren. Aus den Zuständen, die experimentell gemessen oder durch Vorwärtssimulation berechnet werden, soll auf die entsprechenden Problemparameter zurückgeschlossen werden. Dies nennt man ein „inverses Problem“. In vielen ingenieurtechnischen Fragestellungen geht es letztlich um solche inversen Probleme.

Am Lehrstuhl für Numerische Mathematik werden im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 540 „Modellgestützte experimentelle Analyse kinetischer Phänomene in mehrpha-

sigen fluiden Reaktionssystemen“ Verfahren zur Lösung inverser Wärmeleitprobleme zum Beispiel in welligen Rieselfilmen entwickelt. Die Aufklärung von Wärme- und Stofftransportmechanismen in Rieselfilmen ist von großem Interesse, da diese aufgrund zahlreicher Anwendungsbereiche in der Industrie von hoher Relevanz sind. Anwendungsgebiete sind zum Beispiel die Absorption in Rohrbündelkolonnen, die Aufkonzentrierung von Flüssigkeiten in Fallfilmverdampfern, die Kühlung von flüssigen Lebensmitteln in Fallfilm-Wärmetauschern und die Verdampfungskühlung in Kühlturm-Füllkörpern. In vielen Studien wurde beobachtet, dass sowohl der Wärme- als auch der Stofftransport in Rieselfilmen durch die Welligkeit des Flüssigkeitsfilms signifikant beeinflusst werden. Die Transportmechanismen und die Strömungssei-

genschaften von welligen Rieselfilmen können aber bis heute nur unzureichend durch mathematische Modelle beschrieben werden. Um den Einfluss der Wellenstruktur auf den Wärmetransport in Rieselfilmen zu studieren, werden am Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung Messungen in einem Fallfilmapparat durchgeführt. Das Ergebnis einer hochauflösenden Temperaturmessung mit einer Infrarot-Kamera ist in Bild 4 gezeigt. Die Schätzung des Wärmestroms auf der Oberfläche Γ_3 des Rieselfilms, siehe Bild 3, aus solchen Temperaturmessdaten, die auf der Rückseite Γ_1 der Heizfolie aufgenommen wurden, stellt ein sehr komplexes inverses Problem dar, da es an die Fluidmechanik des Films gekoppelt ist. In einem ersten Schritt wird deshalb ein einfacheres und dennoch anspruchsvolles Problem betrachtet, bei dem

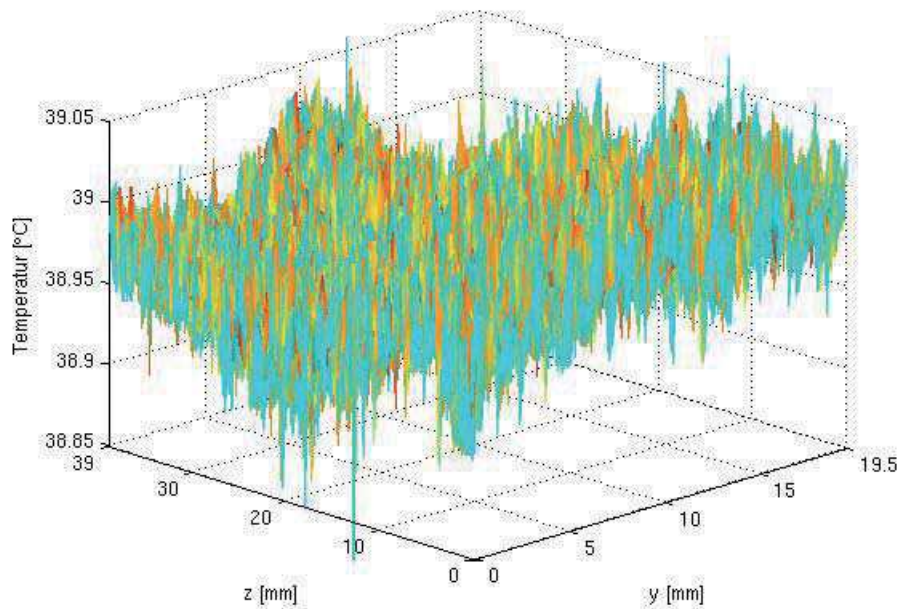


Bild 4: Temperaturmessung mit der Infrarot-Kamera am Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung.

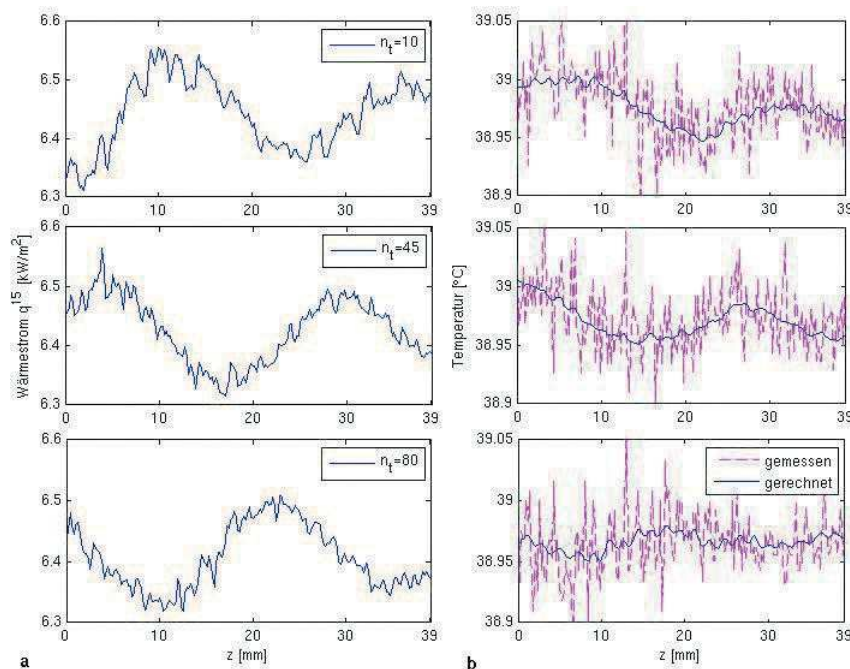


Bild 5: Schätzung des Wärmestroms (links), gemessene und geschätzte Temperatur (rechts).

diese Kopplung entfällt: Es soll der instationäre Wärmestrom von der Heizfolie zum Film als Funktion von Ort und Zeit auf Basis der Temperaturmessungen geschätzt werden. In nachfolgenden Schritten kann dann die Schätzgröße mit anderen für den Fallfilm charakteristischen Größen, wie zum Beispiel der mittleren Filmtemperatur und dem Strömungsprofil, korreliert werden. In diesem stark interdisziplinären Forschungsprojekt sind experimentelle Arbeiten am Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung mit numerischen Simulationen am Lehrstuhl für Numerische Mathematik und der Entwicklung einer systematischen Modellierungsmethodik am Lehrstuhl für Prozesstechnik eng verzahnt. Eine Schätzung des Wärmestroms von der Heizfolie zum Film aus den Temperaturmessungen zu drei verschiedenen Zeitpunkten wird

in Bild 5 gezeigt. Die Schätzgröße weist eine wellenförmige Struktur auf, die sich in der Zeit mit der Wellenfrequenz des Rieselfilms bewegt, was den Einfluss der welligen Filmoberfläche auf den Wärmeaustausch widerspiegelt. Ziel der Methodenentwicklung am Lehrstuhl für Numerische Mathematik ist nicht nur das Lösen dieses beispielhaften und in sich sehr herausfordernden inversen Problems. Vielmehr soll auch ein besseres Verständnis der unterschiedlichen Verfahren zur Lösung mehrdimensionaler und nichtlinearer inverser Probleme für Systeme von partiellen Differentialgleichungen zur Beschreibung mehrphasiger reaktiver Strömungssysteme geschaffen werden. Ein solches Verständnis wird als eine notwendige Grundlage zur längerfristigen Behandlung des vollständigen inversen Filmproblems,

wobei Wärmeübergang durch den strömenden Film, Stoffübergang zwischen Film und Umgebungsgas, Reaktion im Film berücksichtigt wird, in der Zukunft angesehen.

Entwicklung numerischer Verfahren für die Maxwell-Gleichungen

Die Interaktionen elektrischer und magnetischer Felder werden durch die Maxwell'schen partiellen Differentialgleichungen beschrieben. Damit können sowohl elektrische Maschinen wie Motoren oder Transformatoren, als auch elektromagnetische Wellen wie beim Mobilfunk bis hin zum sichtbaren Licht modelliert werden. Auch diese Maxwell-Gleichungen lassen sich mit modernen Verfahren der numerischen Mathematik am Computer simulieren. Die Arbeitsgruppe von Univ.-Prof. Dr. Joachim Schöberl vom Lehr-

Bild 6: Die Verlustdichten durch Wirbelströme.

und Forschungsgebiet Wissenschaftliches Rechnen ist sowohl in der theoretischen Analyse solcher Verfahren tätig, als auch in der programmtechnischen Umsetzung. Hier wird das Finite Elemente Paket Netgen/NGSolve entwickelt.

Seit etwa zehn Jahren besteht Zusammenarbeit mit der Firma VA Tech Elin EBG mit Sitz in Linz, Österreich, bei der Simulation von Leistungstransformatoren. Im Transformator wird der Großteil des magnetischen Flusses durch den Kern geführt. Ein kleiner Streufluss dringt jedoch ins Stahlgehäuse und interne massive Konstruktionselemente ein, und verursacht dort Wirbelströme und Verluste. Um den Streufluss zu bündeln, werden Abschirmungen angebracht. Ziel der Simulation ist es, die Verlustdichte möglichst genau zu bestimmen, um damit die Abschirmung optimieren zu können. Die Bilder 6 und 7 zeigen die Simulationsergebnisse eines dreiphasigen Leistungstransformators. Bild 7 zeigt die induzierten Wirbelströme im Gehäuse. Man erkennt deutlich den Schatten der angebrachten Abschirmungen. In Bild 6 sind die Verlustdichten durch Wirbelströme im Gehäuse und in den Pressplatten farbig dargestellt. Die Simulation umfasste rund eine Million komplexe Unbekannte, und kann auf einem PC in etwa 15 Minuten durchgeführt werden.

Bei der Chipproduktion werden einzelne Prozessschritte mittels optischer Messtechnik überwacht. Aus der Intensität eines reflektierten Laserstrahls kann zum Beispiel geschlossen werden, wie tief eine Ätzung bereits vorgedrungen ist. Um den Effekt der Reflektion zu verstärken, werden hunderte Leiterbahnen oder Kontaktierungen periodisch angeordnet. Mittels eines Bloch-Floquet-Ansatzes kann die Simulation auf eine Einheitszelle beschränkt werden. Bild 8 zeigt die Streuung einer einfallenden Lichtwelle von 400 nm Wellenlänge an einem in zwei Richtungen periodisch fortgesetzten Zylinderloch durch den aufgetragenen Photolack.

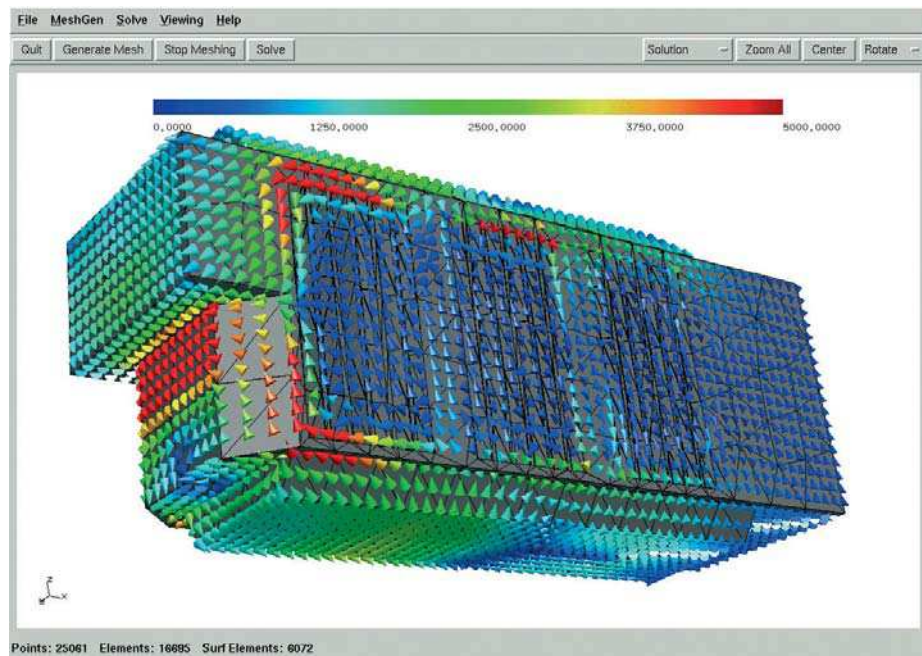
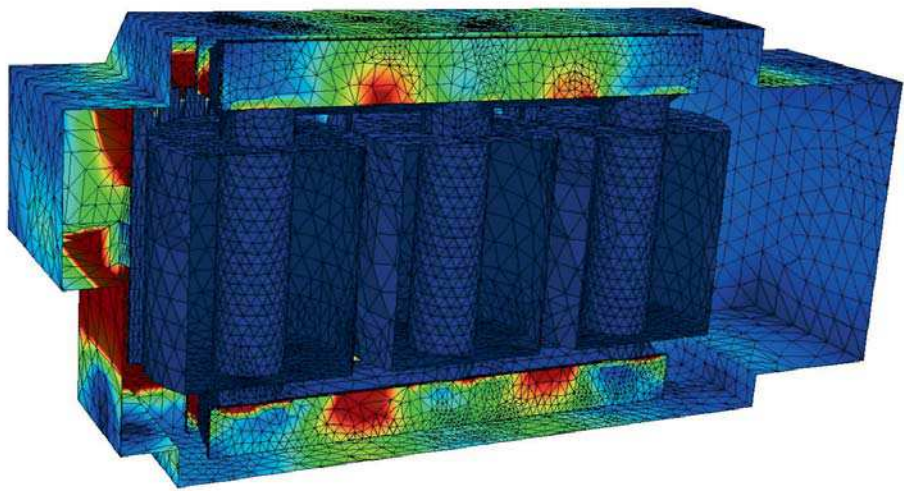


Bild 7: Induzierte Wirbelströme im Gehäuse.

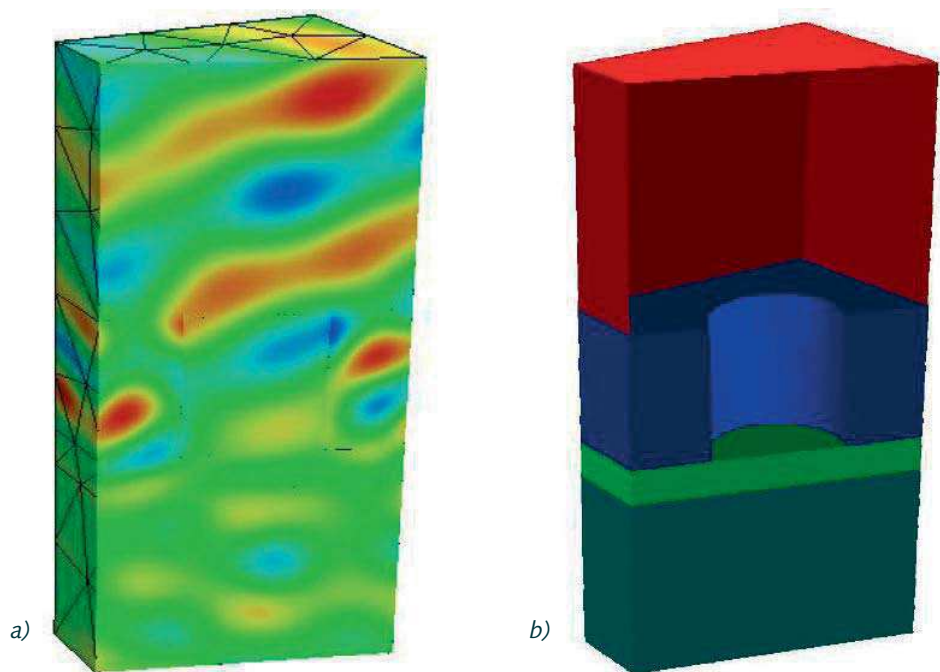


Bild 8: Streuung einer einfallenden Lichtwelle.

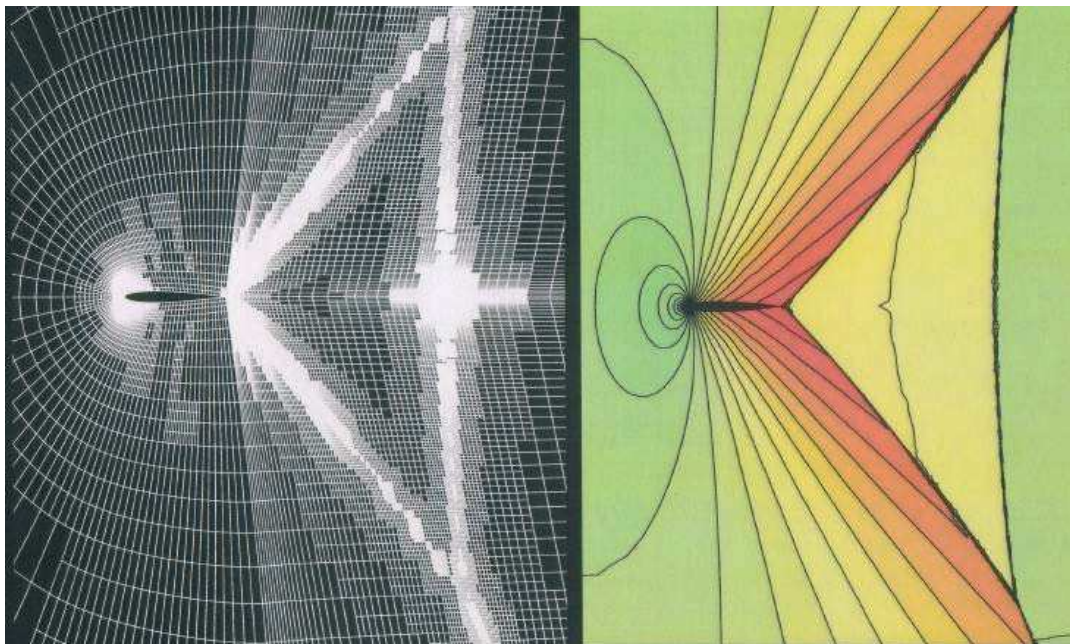


Bild 9: Druckverteilung einer Strömung um ein Tragflügelprofil.

Adaptive Lösungskonzepte

Das mathematische Modell als Grundlage rechnergestützter Simulation ist immer eine Idealisierung der Realität, deren Grad sich unter anderem an der verfügbaren Rechnerleistung orientieren muss. Trotz der rasanten Leistungssteigerung moderner Rechenanlagen werden sich beispielsweise turbulente Strömungen noch auf absehbare Zeit einer direkten numerischen Simulation entziehen, da die Spannweite der dabei relevanten Längenskalen nicht zu bewältigen ist. Um den Einfluss kleinskaliger Wirbel auf das makroskopische Strömungsfeld korrekt zu erfassen, müssen nicht aufgelöste Skalen modelliert werden. Je realitätsnäher dieses Modell ist, umso aufwändiger wird die numerische Realisierung. Im gewissen Sinne werden die Anforderungen moderner Simulationsszenarien stets die verfügbare Rechnerkapazität überfordern. Es wird demnach stets darum gehen, den Bereich des derzeit Rechenbaren durch „intelligente“ Diskretisierungskonzepte so weit wie möglich auszuschöpfen, indem man eine gewünschte Lösungsqualität mit möglichst geringem Rechenaufwand gewährleistet. In diesem Sinne sollte dann ein „intelligenter“ Algorithmus so angelegt sein, dass während seines Verlaufs abhängig vom bereits erlangten Zwischenergebnis zusätzliche Freiheitsgrade zur Verbesserung der Approximation so platziert werden, dass die gewünschte Genauigkeit mit möglichst kleiner Gleichungssystemgröße erzielt wird. Solche Algorithmen nennt man adaptiv. Die Entwicklung geeigneter Adaptioniskonzepte ist im Kern eine Anforderung an die Mathematik. Am Lehrstuhl für Mathematik wird diese Thematik seit Jahren aus unterschiedlichen Blickwinkeln behandelt. In theoretischer Hinsicht konnten für viele Problemklassen erstmals Konvergenz- und Komplexitätsraten bewiesen werden, die aufzeigen, in welchem Verhältnis die erreichte Genauigkeit zum entsprechenden Rechenaufwand steht. Dies gelang unter ande-

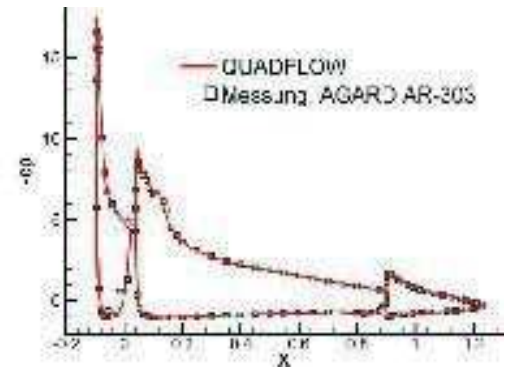
rem über eine Zusammenführung neuer Konzepte aus verschiedenen mathematischen Bereichen wie Approximationstheorie und Harmonische Analyse. Einerseits führte dies auf neue algorithmische Bausteine, andererseits erwiesen sich diese Konzepte auch in scheinbar ganz anderen Bereichen wie Bildkodierung/Kompression oder in der Mathematischen Lerntheorie als ähnlich tragend.

Nun bietet die RWTH und speziell das CCES ein ideales Umfeld, eine solche eher grundlagenorientierte Forschung in hochaktuelle Anwendungen umzusetzen. Im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 401 „Strömungsbeeinflussung und Strömungs-Struktur-Wechselwirkungen an Tragflügeln“ wurde in enger Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern aus der Fakultät für Maschinenwesen ein adaptives Verfahren zur Behandlung kompressibler Strömungen mit dem langfristigen Ziel entwickelt, bereits auf algorithmischer Ebene eine signifikante Komplexitätsreduktion bei der Behandlung von Fluid-Struktur-Wechselwirkungs-Problemen zu erwirken. Gerade bei der Entwicklung von Großraumflugzeugen ist es entscheidend, absehen zu können, wie die Flügelbeziehungsweise Rumpfstruktur auszulegen ist, um einerseits einen ökonomischen Betrieb zu gewährleisten und andererseits die Kräfte der umströmenden Luft so aufnehmen zu können, dass Instabilität und Materialversagen vermieden wird. In der Kombination von Experiment und numerischer Simulation zur Klärung solcher Fragen möchte man das Gewicht mehr und mehr in Richtung Simulation verschieben. Hierbei stößt man allerdings schnell an die Grenzen des derzeit Rechenbaren. Alleine die kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen als Modell für die Strömungsphase stellen enorme Anforderungen an die Numerik, die durch die Wechselwirkungen mit der umströmten Struktur, durch die dadurch bedingte zeitliche Instationarität der Wechselwirkungsprozesse und durch die zeitlich variablen Re-

chengemetrien noch erheblich gesteigert werden. Deshalb wurde ein adaptiver Strömungslöser in enger Abstimmung mit einer Gittergenerierungsmethode entwickelt, der insbesondere die zeitliche Variation der Rechenetze optimal unterstützt. Hierzu wurden insbesondere Methoden des Computer Aided Geometric Design, kurz CAGD, verwendet. Das entstandene Verfahren wird nun ständig weiterentwickelt, etwa in Richtung Parallelität aber auch in Bezug auf bessere Turbulenzmodellierung oder Einbeziehung von chemischem und thermischem Nichtgleichgewicht. Es spielt eine zentrale Rolle bei der Auswertung des laufenden Großexperiments „High Reynolds Number Aerostructural Dynamics“ im European Transonic Wind Tunnel. Es bietet ferner vielversprechende Möglichkeiten, die beim Start eines Flugzeugs entstehenden abrollenden Wirbelschleppen in einem weitaus größeren Bereich als bisher möglich berechnen zu können. Ein genaues Verständnis dieser Wirbelstrukturen und darauf aufbauend eine zerfallsbeschleunigende Einflussnahme ist für die Startfrequenz von Flugzeugen und damit für den ökonomischen Betrieb von Flughäfen wesentlich.

Der Adaptionseffekt wird in Bild 9 zunächst anhand eines klassischen Benchmark-Problems gezeigt. Hierbei handelt es sich um eine transsonische reibungsfrei modellierte Strömung um ein Tragflügelprofil unter den typischen Bedingungen des Reiseflugs. Insbesondere soll hier die Fähigkeit des Strömungslösers getestet werden, die Interaktion der unterschiedlichen Verdichtungsstöße auch noch in größerer Entfernung vom Flügel genau auflösen zu können. Die unterschiedliche Färbung deutet die Variation des Drucks im Strömungsfeld an. Das überlagerte Gitter zeigt die stark örtlich variierenden Diskretisierungstiefen, die wiederum die relevanten kleinskaligen Strömungsanteile widerspiegeln, während in anderen Bereichen eine grobe Diskretisierung ausreicht. Auf

Bild 10: c_p -Wertverteilung für eine Hochauftriebskonfiguration.



der Grundlage rigoroser mathematischer Analyse werden solche Bereiche im Verlauf des Lösungsprozesses automatisch detektiert. Extrem kleine Gitterweiten sind erwartungsgemäß in der Umgebung der Verdichtungsstöße zu erkennen. Mit einem herkömmlichen Verfahren auf der Grundlage uniformer Diskretisierungen würde die erreichte Genauigkeit etwa 70 Millionen Freiheitsgrade benötigen, während das adaptive Verfahren eine vergleichbare Qualität bei nur 55.000 Freiheitsgraden liefert. Bild 10 zeigt das Strömungsfeld um eine Hochauftriebskonfiguration, diesmal unter Berücksichtigung der Reibung. Der rechte Teil der Abbildung zeigt die hohe Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Bild 11 zeigt ein ähnliches Strömungsfeld nun jedoch für eine Hyperschallströmung, etwa 8.5 Mach. Hier ist unter anderem die korrekte Erfassung der dem Bug vorgelagerten Stoßfront wichtig, über die thermische Energie abgeleitet wird.

www.aices.rwth-aachen.de
www.cces.rwth-aachen.de
www.ces.rwth-aachen.de

Autoren:

Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Dieter Bothe ist Inhaber des Lehrstuhls für Mathematik am Center for Computational Engineering Science.

Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Wolfgang Dahmen ist Inhaber des Lehrstuhls für Mathematik und Leiter des Instituts für Geometrie und Praktische Mathematik.

Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Arnold Reusken ist Inhaber des Lehrstuhls für Numerische Mathematik.

Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Joachim Schöberl leitet das Lehr- und Forschungsgebiet Wissenschaftliches Rechnen.

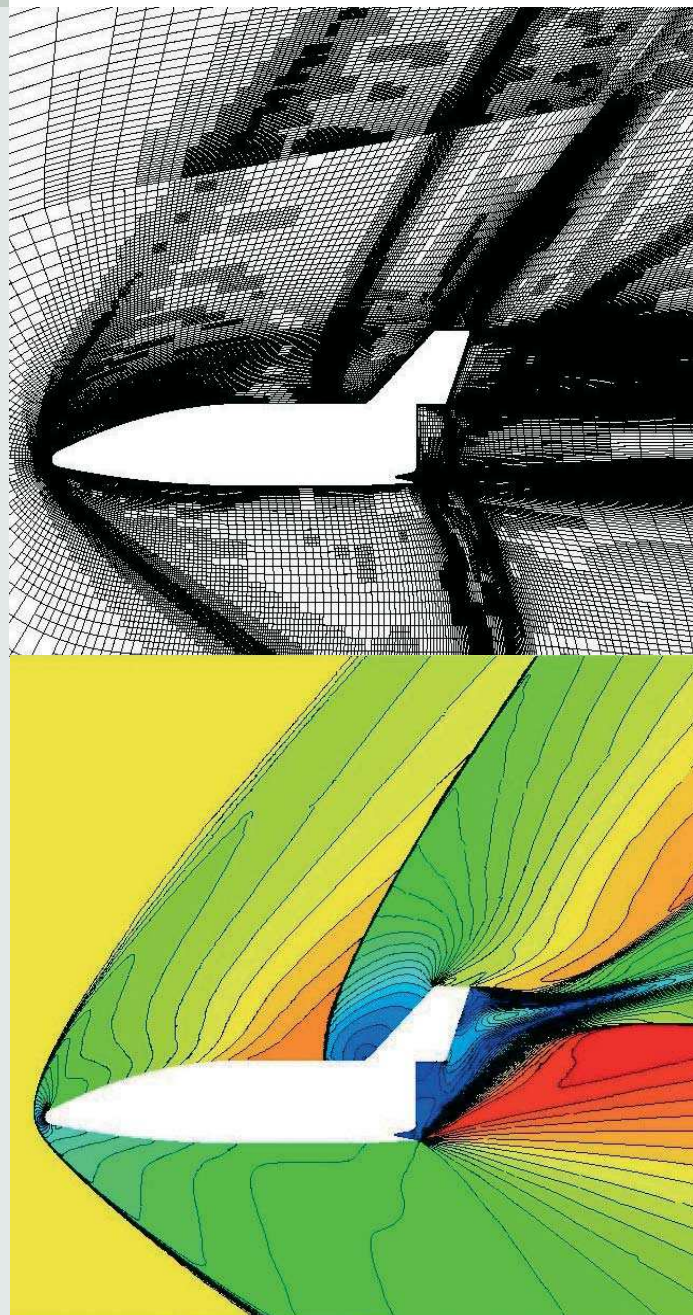


Bild 11: Strömungsfeld für eine Hyperschallströmung.