Simulationstechnik V

Vorlesung/Praktikum an der RWTH Aachen

Numerische Simulation von Strömungsvorgängen

B. Binninger

Institut für Technische Verbrennung

Templergraben 64

5. Teil

Zusammenfassende Darstellung der verschiedenen Upwind-Formulierungen

Die Diskretisierung der stationären eindimensionalen Konvektions-Diffusions Gleichung

$$\int_{\Omega} \frac{d(\rho u\,\phi)}{dx}\,dV \;-\; \int_{\Omega} \frac{d}{dx}\left(\lambda\,\frac{d\phi}{dx}\right)\,dV = 0 \quad (\,dV \equiv dx\,)$$

bzw. mit Gaußschem Integralsatz: $$\int_{\delta\Omega}\left(\rho u\,\phi \;-\; (\lambda\,\frac{d\phi}{dx})\right)dA = 0$$

Flussfunktion (analytisch) : $$f(\phi) \;=\; \rho u\,\phi - \lambda\,\frac{d\phi}{dx}$$

Numerische Flussfunktion: $$f^*(\phi^*) \;=\; \rho u\,\phi^* - \lambda\,\frac{\Delta\phi^*}{\Delta x}$$

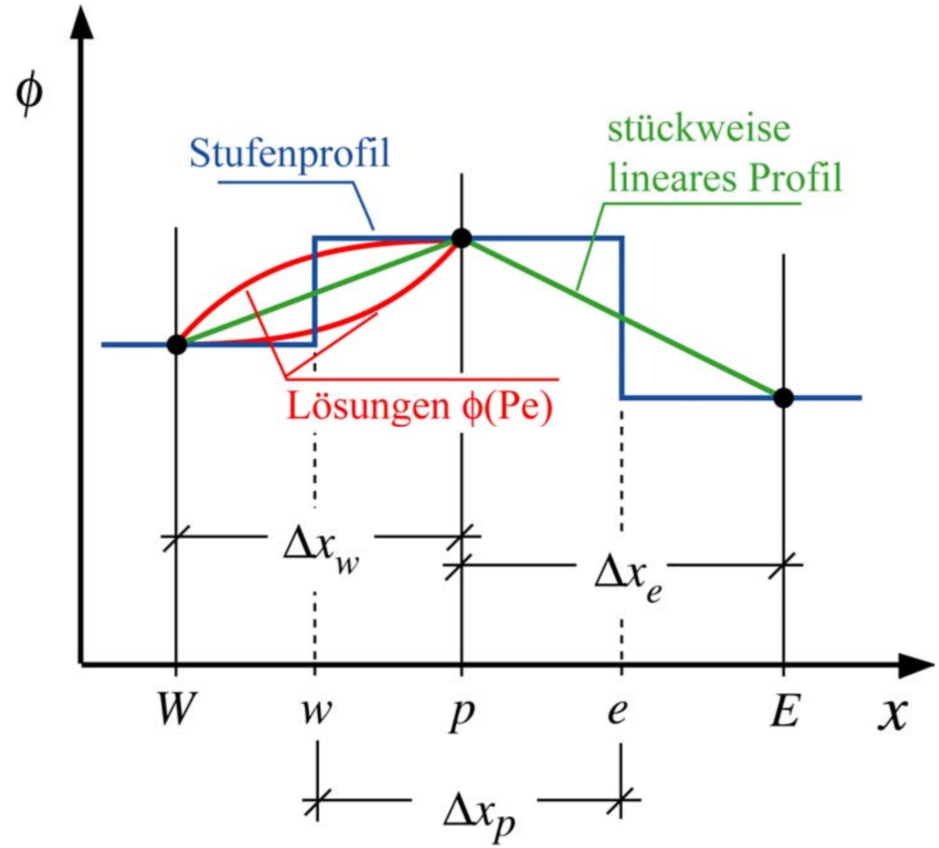
Berechnung/Approximationen des numerischen Flusses: $f^*(\phi^*) = \rho u \, \phi^* - \lambda \dfrac{\Delta \phi^*}{\Delta x}$

Ohne Berücksichtigung der Strömungsrichtung:

- stückweise lineare Verteilung

Berücksichtigung der Strömungsrichtung:

- Stufenprofil (1. Ordnung Upwind)
- Analytische Lösung



Auswertung der analytischen Lösung zur Bestimmung des numerischen Flusses

$$f^*(\phi^*) \;=\; \rho u\, \phi^* - \lambda\, \frac{\Delta \phi^*}{\Delta x}$$

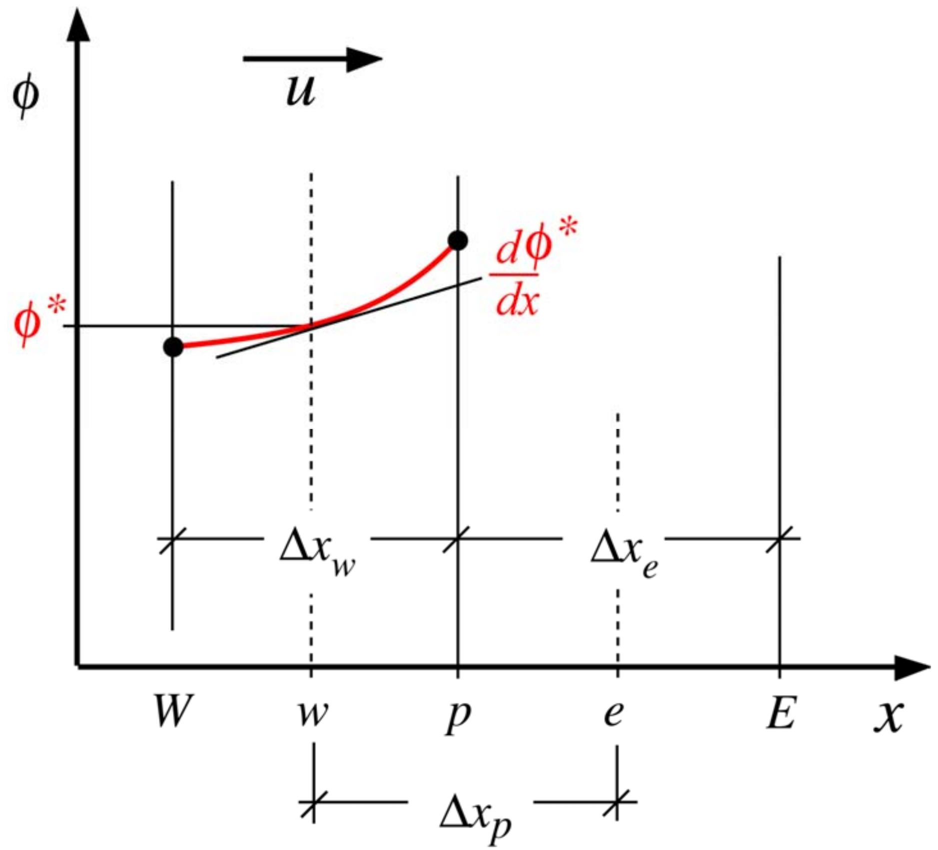
Beispiel:

Strömung in positive *x*-Richtung

$u > 0$

Bestimmung des Wertes und der

Ableitung an der Zellgrenze

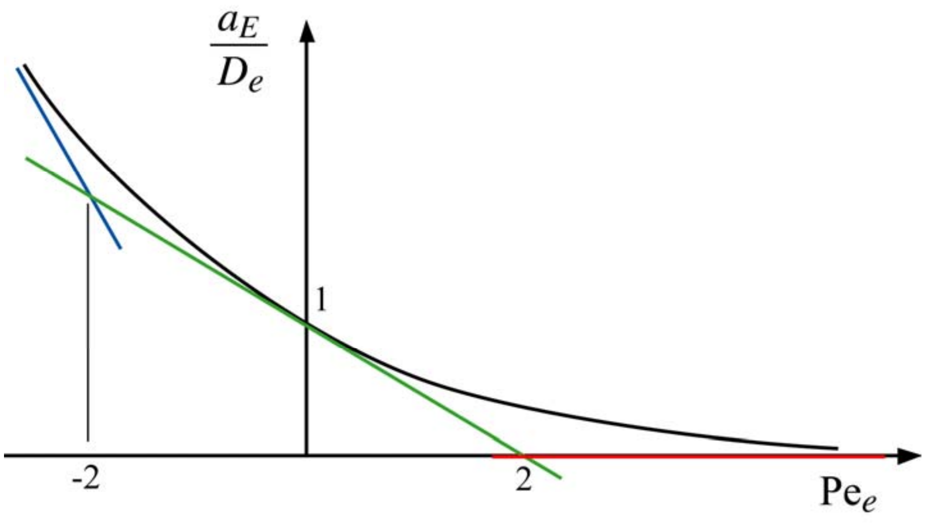


Programmierung

Die Diskretisierung der instationären Konvektions-Diffusions-Gleichung führt auf_algebraische Gleichungen der Form:

$$a_p\,\phi_p = a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W$$

Wir haben den Verlauf der Koeffizienten a_E als Funktion der Peclet-Zahl Pe für die Exponentialfunktion und die stückweise lineare Verteilung diskutiert.



Uns fehlt noch die Berechnung von a_W und a_p für die verschiedenen Verfahren.

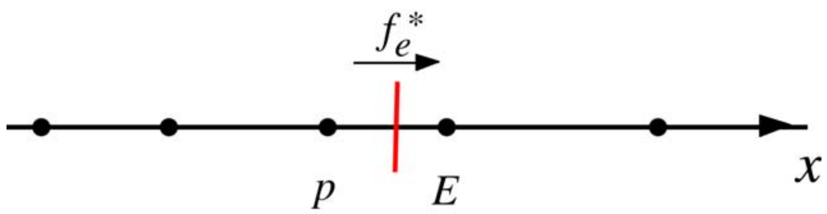
Dazu führen wir in den konvektiv-diffusiven Fluss $f = \rho u \phi - \lambda \frac{d\phi}{dx}$ die Pe-Zahl $\mathrm{Pe}_l = \rho u l / \lambda$ ein:

$$f^* = \frac{f}{\lambda / l} = \mathrm{Pe}_l \, \phi - \lambda \frac{d\phi}{dx/l}$$

Um die Koeffizienten a_E, a_W und a_p zu bestimmen, schauen wir uns den Fluss über die Bilanzgrenze bei e an.

Alle Verfahren wichten den Einfluss der Punkte E und p in geeigneter Weise, um den Fluss f^* darzustellen:

$$f_e^* = B\,\phi_p - A\,\phi_E$$



A und B sind dabei dimensionslose Zahlen, die Funktion der Peclet-Zahl Pe sind.

Eselsbrücke: *A* steht für *A*head von der Bilanzfläche und B für *B*ehind.

Eigenschaften der Koeffizienten *A* und *B*

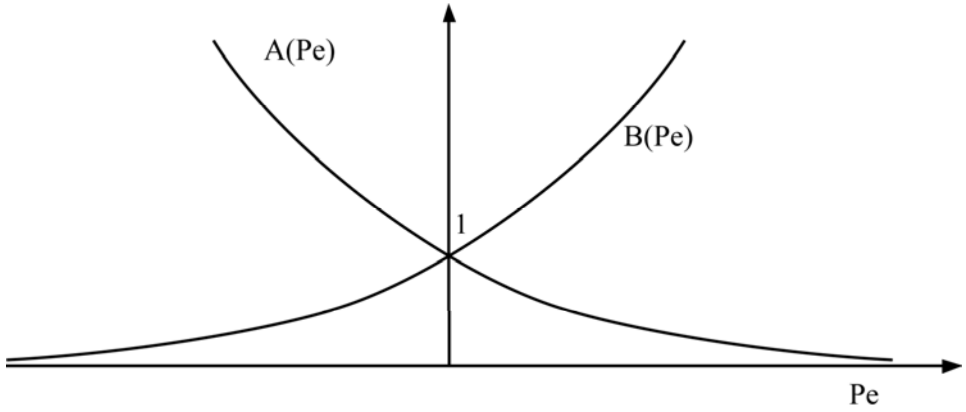
1. Die Koeffizienten *A* und *B* sind Funktionen der Peclet-Zahl (analytische Lösung)

Falls die Funktion $\phi(x)$ konstant ist, entfällt der Diffusionsfluss. Es ergibt sich:

$$f^*(\phi_{\mathrm{const}}) = \mathrm{Pe}\,\phi_p = \mathrm{Pe}\,\phi_E = B\,\phi_p - A\,\phi_E \qquad \Rightarrow \qquad B(\mathrm{Pe}) = A(\mathrm{Pe}) + \mathrm{Pe}$$

2. Wird die Koordinatenachse gespiegelt, geht Pe in –Pe über. *A* und *B* vertauschen ihre Rollen. Es gelten daher die Symmetrien:

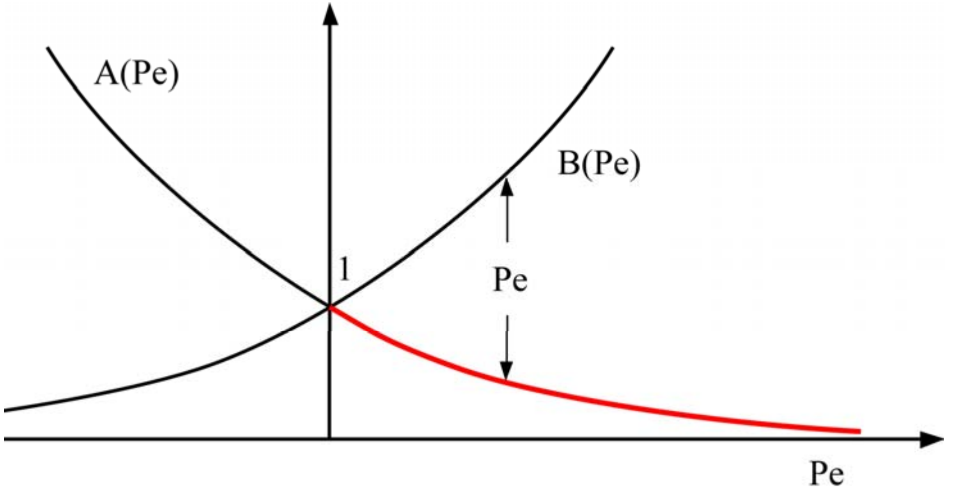
$$A(-\mathrm{Pe}) = B(\mathrm{Pe})\,, \quad B(-\mathrm{Pe}) = A(\mathrm{Pe})$$



Folgerung aus den Eigenschaften der Koeffizienten *A* und *B*

Die Symmetrieeigenschaften lassen erkennen, dass der Abstand zwischen den Graphen gerade die Peclet-Zahl Pe ist.

Da die Graphen symmetrisch zur Ordinate sind, können aus der Funktion *A(* Pe*)* für positive Peclet-Zahlen, sowohl *A(* -Pe*)* als auch *B(* Pe*)* und *B(* -Pe*)* berechnet werden.



A(Pe*)* und *B(* Pe*)* sind demnach vollständig bekannt, wenn die Funktion *A(* Pe*)* für positive Pe berechnet wird (roter Kurvenzweig).

Für Pe < 0 folgt:

$$A(\mathrm{Pe}) = A(|\mathrm{Pe}|) - \mathrm{Pe}$$

Für Pe < 0 und Pe > 0 folgt:

$$A(\mathrm{Pe}) = A(|\mathrm{Pe}|) + \max(-\mathrm{Pe}, 0)\,, \quad B(\mathrm{Pe}) = A(|\mathrm{Pe}|) + \max(\mathrm{Pe}, 0)$$

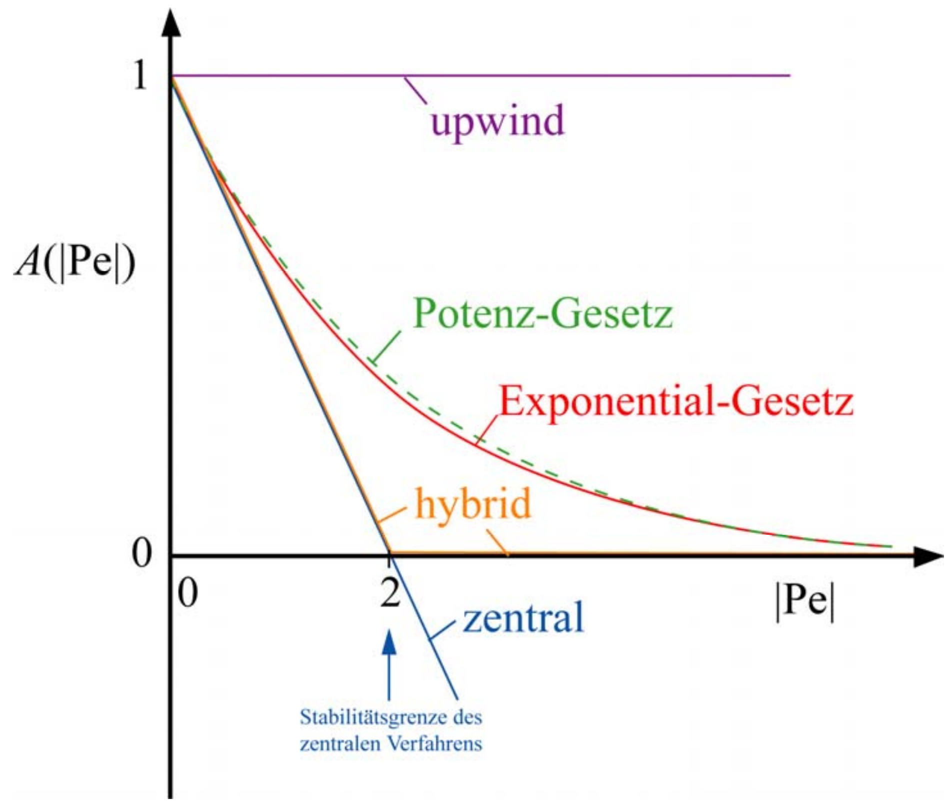
Es wird mit $f_e^* = B\,\phi_p - A\,\phi_E$:

$$\begin{aligned}
a_p\,\phi_p &= a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W \\
a_E &= D_e\,A(|\mathrm{Pe}_e|) + \max(-f_e, 0) \\
a_W &= D_w\,A(|\mathrm{Pe}_w|) + \max(f_w, 0) \\
a_p &= a_E + a_W + (f_e - f_w)
\end{aligned}$$

Folgerung aus den Eigenschaften der Koeffizienten *A* und *B (Forts.)*

Tabelle für die verschiedenen Schemata:

Schema	Formel für $A(\lvert\mathrm{Pe}\rvert)$
Zentrale Differenzen	$1 - 0,5\,\lvert\mathrm{Pe}\rvert$
Upwind 1. Ordnung	1
Hybrid	$\max\big(\,0,\;1 - 0,5\,\lvert\mathrm{Pe}\rvert\big)$
Potenzgesetz	$\max\big(\,0,\;(1 - 0,1\,\lvert\mathrm{Pe}\rvert)^5\big)$
Exponentialgesetz	$\lvert\mathrm{Pe}\rvert/\big(\exp(\lvert\mathrm{Pe}\rvert) - 1\big)$



Stabile Verfahren gehen mit positivem Koeffizienten *A* einher.

Mehrdimensionales, stationäres Problem auf nichtäquidistantem kartesischen Gitter

Modellgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u\,\phi - \lambda\,\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\rho v\,\phi - \lambda\,\frac{\partial \phi}{\partial y}\right) = 0$$

$$\begin{aligned}
a_p\,\phi_p &= a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S \\
a_E &= D_e \Delta y\, A(|\mathrm{Pe}_e|) + \max(-f_e \Delta y, 0) \\
a_W &= D_w \Delta y\, A(|\mathrm{Pe}_w|) + \max(f_w \Delta y, 0) \\
a_N &= D_n \Delta x\, A(|\mathrm{Pe}_n|) + \max(-g_n \Delta x, 0) \\
a_S &= D_s \Delta x\, A(|\mathrm{Pe}_s|) + \max(g_s \Delta x, 0) \\
a_p &= a_E + a_W + a_N + a_S + (f_e - f_w)\Delta y + (g_n - g_s)\Delta x
\end{aligned}$$

mit $f = \rho u\,,\ g = \rho v$

Instationäres Problem auf nichtäquidistantem kartesischen Gitter

Modellgleichung: $$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\Big(\rho u\,\phi - \lambda\,\partial\phi/\partial x\Big) + \frac{\partial}{\partial y}\Big(\rho v\,\phi - \lambda\,\partial\phi/\partial y\Big) = 0$$

Diskretisierung der Zeitableitung: $$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \approx \frac{\rho\phi_p^{\nu+1} - \rho\phi_p^{\nu}}{\Delta t}$$

Wir hatten ferner:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\Big(\rho u\,\phi - \lambda\,\partial\phi/\partial x\Big) + \frac{\partial}{\partial y}\Big(\rho v\,\phi - \lambda\,\partial\phi/\partial y\Big)\right)\Delta x\Delta y = 0 \quad \rightarrow \quad a_p\,\phi_p = a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S$$

Es gilt also:

$$\frac{\rho\phi_p^{\nu+1} - \rho\phi_p^{\nu}}{\Delta t}\Delta x\Delta y = -a_p\,\phi_p + a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S$$

Vorzeichenkontrolle:

Es ist $a_p = a_E + a_W + (f_e - f_w)\,\Delta y + (f_n - f_s)\,\Delta x$, und es sei ϕ = const (keine Diffusion), dann gilt:

$$\frac{\rho\phi_p^{\nu+1} - \rho\phi_p^{\nu}}{\Delta t}\Delta x\Delta y = (f_w - f_e)\Delta y\,\phi + (g_s - g_n)\Delta x\,\phi \quad \leftarrow \quad \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\Big(\rho u\,\phi\Big) - \frac{\partial}{\partial y}\Big(\rho v\,\phi\Big)$$

Instationäres Problem auf nichtäquidistantem kartesischen Gitter (Forts.)

Aus
$$\frac{\rho\phi_p^{\nu+1} - \rho\phi_p^{\nu}}{\Delta t}\Delta x \Delta y = -a_p\,\phi_p + a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S$$

folgt
$$\left(a_p + \frac{\rho}{\Delta t}\Delta x \Delta y\right)\phi_p^{\nu+1} = a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S + \frac{\rho}{\Delta t}\Delta x \Delta y\,\phi_p^{\nu}$$

Es gilt:
$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + (f_e - f_w)\Delta y + (g_n - g_s)\Delta x$$

Ist die Kontinuitäts-Gleichung erfüllt gilt: $(f_e - f_w)\Delta y + (g_n - g_s)\Delta x = 0$

Es folgt die Rechenvorschrift:

$$\boxed{\begin{aligned}
\tilde{a}_p\,\phi_p^{\nu+1} &= a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S + b \\
b &= a_p^{\nu}\,\phi_p^{\nu} \\
a_p^{\nu} &= \rho\Delta x\Delta y/\Delta t \\
\tilde{a}_p &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_p^{\nu}
\end{aligned}}$$

3. Praktikumsaufgabe:

Formulieren Sie die Finite-Volumen-Bilanz für die Differentialgleichung

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{F} = 0 \quad \text{mit} \quad \vec{F} = \begin{pmatrix} \rho u\phi - \lambda\,\partial\phi/\partial x \\ \rho v\phi - \lambda\,\partial\phi/\partial y \end{pmatrix}$$

auf einem nichtäquidistanten kartesischen Gitter.

a) Bestimmen Sie die Koeffizienten in der Gleichung $a_p\,\phi_p = a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W + a_N\,\phi_N + a_S\,\phi_S + b$ als Funktion von $A(|\mathrm{Pe}|)$ für die verschiedenen vorgestellten Diskretisierung des konvektiv-diffusiven Operators!
Berücksichtigen Sie bei der Bestimmung des Koeffizienten a_p auch die Aussage der Kontinuitäts-Gleichung.

b) Programmieren Sie den Code zur numerischen Integration der Differentialgleichung!

c) Überprüfen Sie Ihr Programm anhand von geeigneten Testfällen, und berechnen Sie ein Beispiel für ein instationäres Konvektions-Diffusionsproblem!

Ergänzungen

1. Zur Konvergenz iterativer Methoden

Für die Konvergenz eines iterativen Verfahrens müssen Konsistenz und Stabilität gegeben sein (Laxsches Äquivalenzkriterium).

a) 1. Regel: Konsistenz

Eine konsistente Flussformulierung ist gegeben, wenn die Finite-Volumen-Diskretisierung die konservativen Eigenschaften der Differentialgleichung erhält.

Dazu muss die Flussformulierung so gestaltet sein, dass der approximierte Fluss an gemeinsamen Zellgrenzen benachbarter Kontrollvolumen durch ein und denselben Ausdruck gegeben ist. Ferner muss die Formulierung für den numerische Fluss für eine konstante Transportgröße mit dem physikalischen Fluss übereinstimmen.

Ergänzungen (Forts.)

b) Regel 2: Beschränktheit der Lösung

Die Diskretisierung der Konvektions-Diffusionsgleichung liefert algebraische Gleichung der Form:

$$a_p \, \phi_p \; = \; a_E \, \phi_E \; + \; a_W \, \phi_W$$

Die untersuchte Transportgleichung für $\phi(x)$ enthält konvektiven und diffusiven Transport (keine Quellen).

In diesem Fall muss eine Erhöhung (Verringerung) von $\phi(x)$ an einem Ort zu einer Erhöhung (Verringerung) in der Nachbarschaft führen.

Dies liefert folgende Bedingung für die Koeffizienten der algebraischen Gleichung:

Die a_p, a_E, a_W sind entweder alle positiv oder alle negativ.

b) Regel 3: Beschränktheit der Lösung (Forts.)

Da in der Transportgleichung nur Ableitungen der Temperatur vorkommen, muss wenn $\phi(x)$ Lösung ist auch $\phi(x)+const$ Lösung sein. Diese Eigenschaft sollte von dem diskreten Gleichung

$$a_p\,\phi_p = a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W$$

ebenfalls erfüllt ein.

Diese Forderung liefert folgenden Zusammenhang: $a_p = a_E + a_W$

Verallgemeinert: Für die Koeffizienten einer algebraischen Gleichung

$$a_p\,\phi_p = \sum_{\mu=1,\mu\neq p}^{n} a_\mu\,\phi_\mu \quad \text{muss gelten:} \quad a_p = \sum_{\mu=1,\mu\neq p}^{n} a_\mu$$

c) Beschränktheit der Lösung (Forts.) – Scarborough-Kriterium

Die algebraische Gleichung $a_p\,\phi_p = a_E\,\phi_E + a_W\,\phi_W$ hat beschränkte Lösungen ϕ_p, wenn

$$\frac{1}{|\,a_p\,|}\sum_{\mu=1,\mu\neq p}^{n} |\,a_\mu\,| \begin{cases} \leq & 1 \text{ an allen Knoten} \\ < & 1 \text{ an mindestens einem Knoten} \end{cases}$$

Ist dieses Kriterium erfüllt, so ist die Koeffizientenmatrix diagonal dominant. Bei Abwesenheit von Quellen in der Transportgleichung ist dieses Kriterium identisch mit der physikalischen Vorstellung, dass die Lösungswerte im Integrationsgebiet innerhalb der Grenzen bleiben, die durch die Randwerte gegeben sind.

Ergänzungen

Übung:

Zeigen Sie für die zentrale Diskretisierung der Differentialgleichung

$$\frac{d(\rho u\,\phi)}{dx} = \frac{d}{dx}\left(\lambda\,\frac{d\phi}{dx}\right)$$

nämlich

$$(\rho u)_e\,\phi_e - (\rho u)_w\,\phi_w = \left(\frac{\lambda_e\,(\phi_E - \phi_p)}{\Delta x_e} - \frac{\lambda_w\,(\phi_p - \phi_W)}{\Delta x_w}\right)\,,$$

dass aus dem vorgenannten Regeln und dem Scarborough-Kriterium folgt, dass die Beschränktheit der numerischen Lösung dann gegeben ist, falls

$$\frac{\rho u \Delta x}{\lambda} = \mathrm{Pe}_{\Delta x}\,<\,2\,,$$

das heißt, dass die mit der Maschenweite gebildete Peclet-Zahl für Stabilität kleiner als 2 sein muss.

2. Variable Transportkoeffizienten

Die Diskretisierung des Diffusionsflusses in der Form

$$\left(\lambda \frac{d\phi}{dx}\right)_e \approx \left(\frac{\lambda_e \left(\phi_E - \phi_p\right)}{\Delta x_e}\right) , \quad \left(\lambda \frac{d\phi}{dx}\right)_w \approx \left(\frac{\lambda_w \left(\phi_p - \phi_W\right)}{\Delta x_w}\right)$$

impliziert die Kenntnis des Diffusionkoeffizienten λ an den Zellgrenzen.

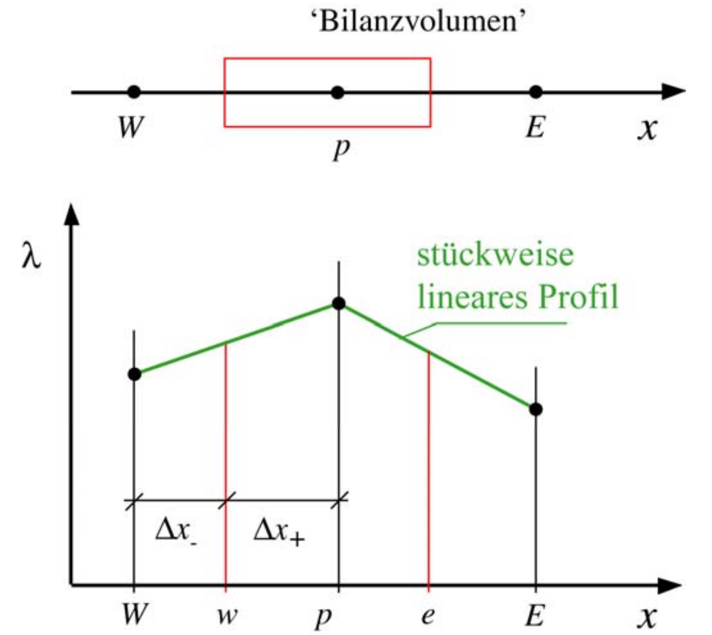
Variable Diffusionskoeffizienten, zum Beispiel als Funktion der Temperatur, können aber zunächst nur an den Knoten angegeben werden, da hier die Temperatur gegeben ist.

Sie müssen also geeignet auf die Zellflächen „interpoliert“ werden.

Eine geeignete Formulierung:

Nahe liegend ist die lineare Interpolation (arithmetisches Mittel)

$$\lambda_w = \lambda_W + \frac{\lambda_p - \lambda_W}{\Delta x_- + \Delta x_+} \Delta x_-$$



Uns interessiert eigentlich, dass die Formulierung den richtigen Fluss an der Zellgrenze wiedergibt, also:

$$f_w = -\lambda_w \frac{T_p - T_W}{\Delta x_- + \Delta x_+}$$

Dieser einfache Ansatz führt zu schlechten Ergebnissen, falls die Zellgrenzen mit Phasengrenzen zusammenfallen und Sprünge in den Diffusionskoeffizienten auftreten.

Eine bessere Approximation liefert in solchen Fällen das harmonische Mittel, das auch im Falle stetiger Variation der Transportkoeffizienten gute Ergebnisse liefert:

$$\lambda_w = \left(\frac{\Delta x_+}{\Delta x_- + \Delta x_+} \frac{1}{\lambda_W} + \frac{\Delta x_-}{\Delta x_- + \Delta x_+} \frac{1}{\lambda_p} \right)^{-1}$$

Übung:

Leiten Sie ab, dass die harmonischen Mittelung eine gute Approximation des numerischen Flusses an der Zellgrenze liefert, wenn sich an der Zellgrenze der Transportkoeffizient sprunghaft ändert.

Hinweis: Untersuchen Sie dazu die approximative Lösung des eindimensionalen stationären Diffusionsproblems Problems ohne Quellen

$$\frac{d}{dx}\left(\lambda \frac{d\phi}{dx}\right) = 0$$

auf einem nichtäquidistanten Gitter.

Zeigen Sie, dass die harmonische Mittelung der Transportkoeffizienten die Flüsse für die Grenzfälle, wenn eins der benachbarten Material „ein Isolator“ ($\lambda = 0$) oder ein „unendlich guter Leiter“ ($\lambda \to \infty$) ist, richtig wiedergibt.