Simulationstechnik V

Vorlesung/Praktikum an der RWTH Aachen

Numerische Simulation von Strömungsvorgängen

B. Binninger

Institut für Technische Verbrennung

Templergraben 64

4. Teil

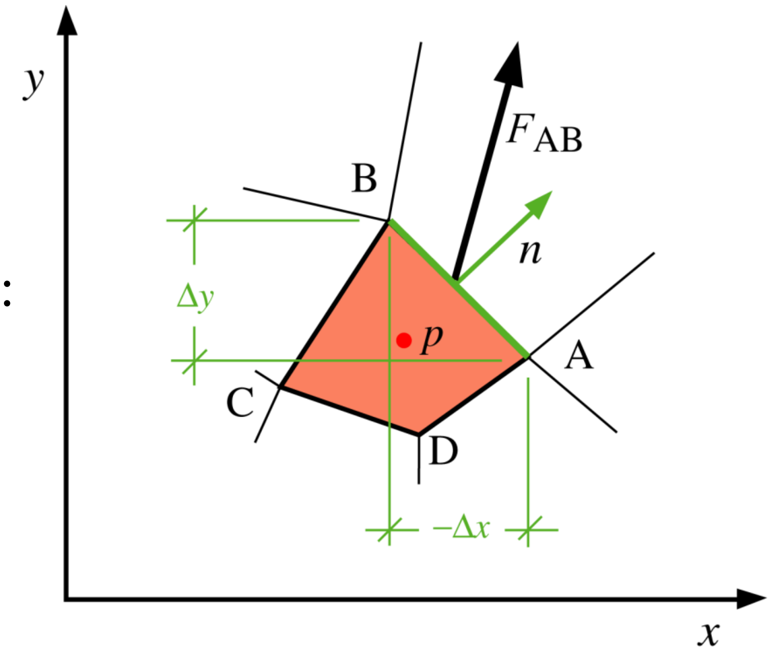
Finite-Volumen-Methode (2)

Formulierung in konservativer Form:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega \rho\,\phi(x,t)\,\mathrm{d}V + \oint_{\delta\Omega} \vec{F}(\phi)\cdot \mathrm{d}\vec{A} = \int_\Omega s\,\mathrm{d}V$$

Anwendung auf ein finites Kontrollvolumen ΔV_p:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\,\phi_p)\,\Delta V_p + \sum_{\text{Seiten}} \vec{F}(\phi)\cdot\Delta\vec{A} = s_p\,\Delta V_p$$



Fluss beispielsweise durch die Oberfläche AB:

$$\vec{F}_{\mathrm{AB}} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad (\vec{F}\cdot\vec{n}\sqrt{\Delta x^2+\Delta y^2})_{\mathrm{AB}} = (f\Delta y - g\Delta x)_{\mathrm{AB}}$$

Ausführung für alle Seiten:

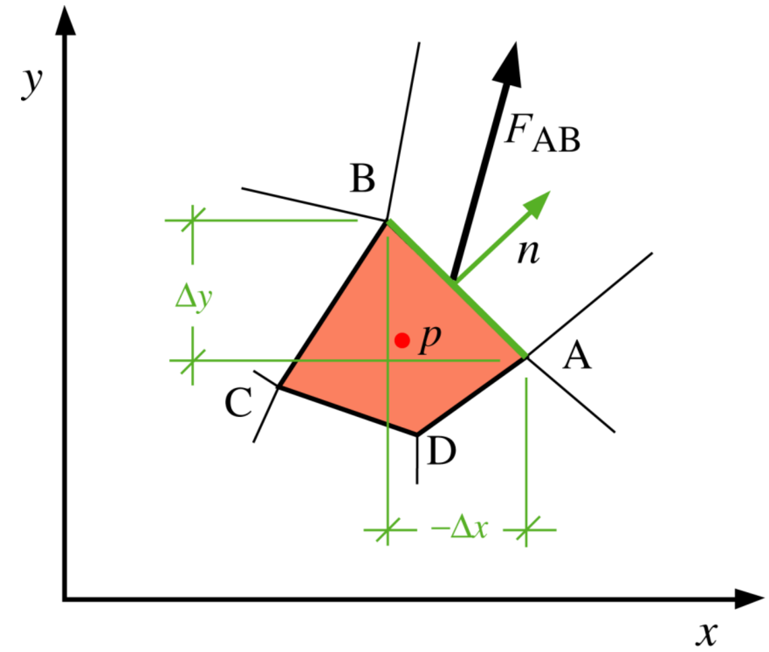
$$\rho\,\phi_p = \rho\,\phi_{\mathrm{ABCD}}\,, \qquad \Delta V_p = V_{\mathrm{ABCD}}\,, \qquad \frac{\partial}{\partial t}(\rho\,\phi_p)\,\Delta V_p + \sum_{\text{Seiten}}(f\,\Delta y - g\,\Delta x) = s_p\,\Delta V_p$$

Beispiel: Instationäre Diffusionsgleichung ohne Quellterme

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \mathrm{div}(\alpha\,\mathrm{grad}\phi)$$

bzw.:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega \rho\phi\, dV = \int_\Omega \mathrm{div}(\alpha\,\mathrm{grad}\,\phi) dV$$



Umformung mir dem Gaußschen Integralsatz:

$$\int_\Omega \mathrm{div}\,(\alpha\,\mathrm{grad}\phi)\ \mathrm{d}V \;=\; \oint_{\delta\Omega} \alpha\,\mathrm{grad}\phi\cdot\vec{n}\,\mathrm{d}A$$

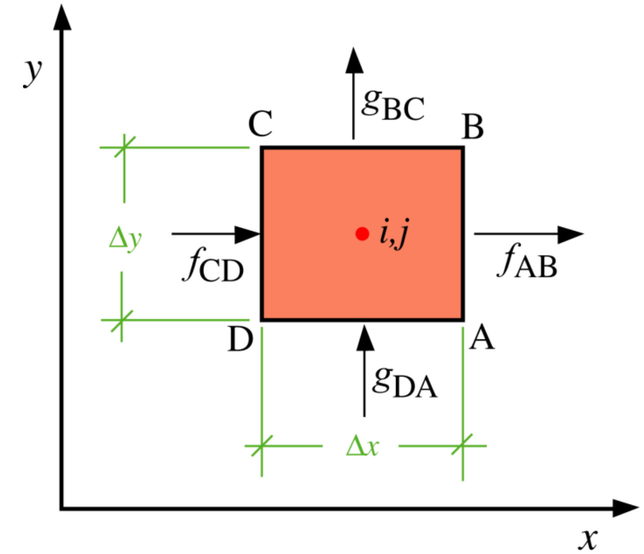
Die Flussfunktion und Normalenvektor lauten:

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = -\alpha\,\mathrm{grad}\phi\,,\ f = -\alpha\frac{\partial\phi}{\partial x}\,,\ g = -\alpha\frac{\partial\phi}{\partial y}\,,\quad \vec{n} = \begin{pmatrix} \Delta y \\ -\Delta x \end{pmatrix}$$

Anwendung auf das finite Volumen: $$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_j\,V_j) + \sum_{\mathrm{Seiten}} -\alpha\frac{\partial\phi}{\partial x}\Delta y - \alpha\frac{\partial\phi}{\partial y}\Delta x = 0$$

Beispiel: Bilanz am kartesischen Kontrollvolumen V_{ij} für äquidistante Gitter:

$$\frac{\partial(\rho\phi_{i,j})}{\partial t}\Delta x\Delta y + (f_{AB} - f_{CD})\,\Delta y + (g_{BC} - g_{DA})\,\Delta x = 0$$



Wahl der diskreten Flussformulierung

(zentrale Differenz um die Zellfläche)

$$f_{\mathrm{AB}} = -\alpha_{\mathrm{AB}}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{AB} \approx -\alpha_{\mathrm{AB}}\frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x}$$

liefert $$f_{\mathrm{AB}} - f_{\mathrm{CD}} \approx -\alpha_{\mathrm{AB}}\frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} + \alpha_{\mathrm{CD}}\frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} \approx \alpha_{i,j}\,\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x}$$

und analog: $$g_{\mathrm{BC}} - g_{\mathrm{DA}} \approx -\alpha_{\mathrm{BC}}\frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\Delta y} + \alpha_{\mathrm{CD}}\frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta y} \approx \alpha_{i,j}\,\frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y}$$

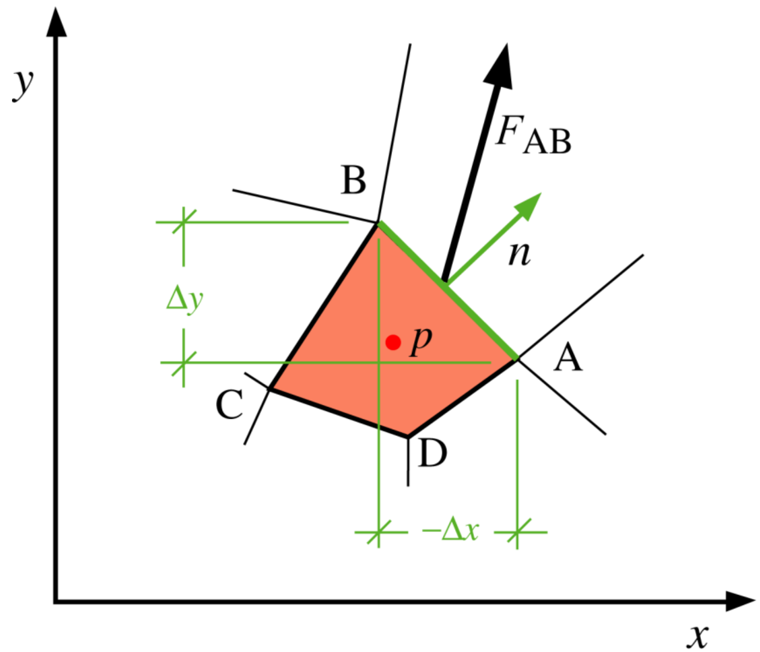
Es folgt also die bekannte diskrete Formulierung mit zentralen Differenzen:

Übung:

Formulieren Sie mit der Finiten-Volumen-Methode eine diskrete Form der <u>instationären</u> Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \mathrm{div}(\alpha\,\mathrm{grad}\phi)$$

für ein nichtkartesisches Kontrollvolumen nach der Skizze.



Diskrete Formulierung des konvektiven Transports

Bisher: Diskrete Formulierung des diffusiven Transports einer Größe
Dieser Transport ist grundlegend für Ausgleichsvorgänge in Festkörpern.

Bei Strömungsproblemen kommt ein wesentlicher Transport nämlich der durch Konvektion zustande.

Ein typisches Beispiel ist die Ausbildung einer Temperaturverteilung in einer Strömung. Eine Einschränkung auf inkompressible Strömungen vereinfacht die Betrachtung wesentlich, da das Geschwindigkeitsfeld vom Temperaturfeld unabhängig ist.

Modellgleichung:

Eindimensionaler konvektiv-diffusiven Transports bei bekannter Geschwindigkeitsverteilung

Für eindimensionale Strömungen lautet die Differentialgleichung für das ein skalares Feld ϕ in konservativer Form

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\,\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)$$

Darin sind ρ die Dichte und u die Strömungsgeschwindigkeit sowie λ der Diffusionskoeffizient.

Wir wollen uns mit der Berechnung der Feld ϕ im Strömungsfeld beschäftigen und voraussetzen, dass das Geschwindigkeitsfeld bekannt ist. (Berechnung in einem vorausgegangenen Schritt, Integration von Massen- und Impulsbilanz).

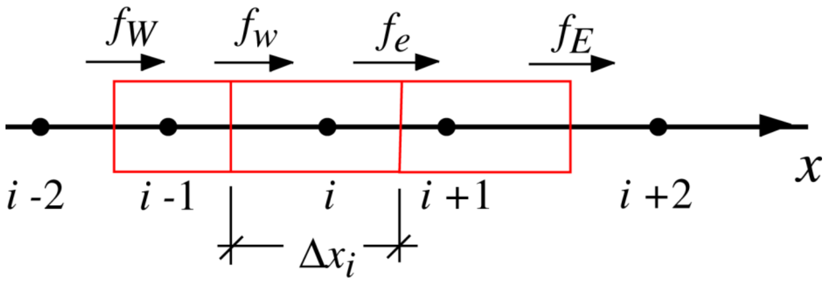
Untersuchung dieses Standardtypes in mehreren Schritten

1. Stationärer Fall ohne Quellterm: $$\frac{\mathrm{d}(\rho u\,\phi)}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\lambda\,\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right)$$

Ferner gilt die Kontinuitätsgleichung: $$\frac{\mathrm{d}(\rho u)}{\mathrm{d}x} = 0$$

Finite-Volumen-Bilanz der Dgl.

für Zelle *i* liefert:



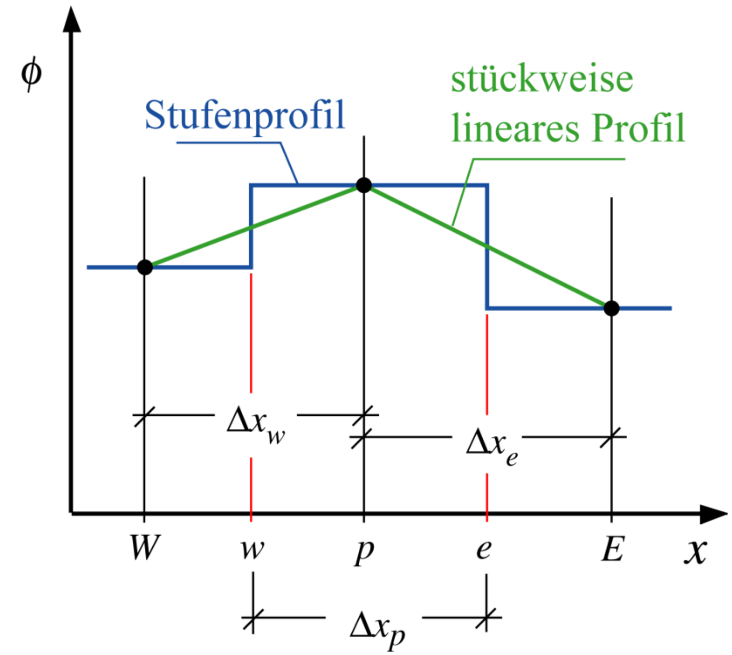
$$\left((\rho u\phi)_e + (-\lambda\,\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x})_e\right) - \left((\rho u\phi)_w + (-\lambda\,\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x})_w\right) = 0$$

Dies bedeutet: die über die Zellgrenzen ein- und austretenden konvektiven und diffusiven Flüsse sind im stationären Fall in der Summe gleich groß.

Diskretisierung des Diffusionsterms:

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

Diskretisierung des Konvektionstermes:



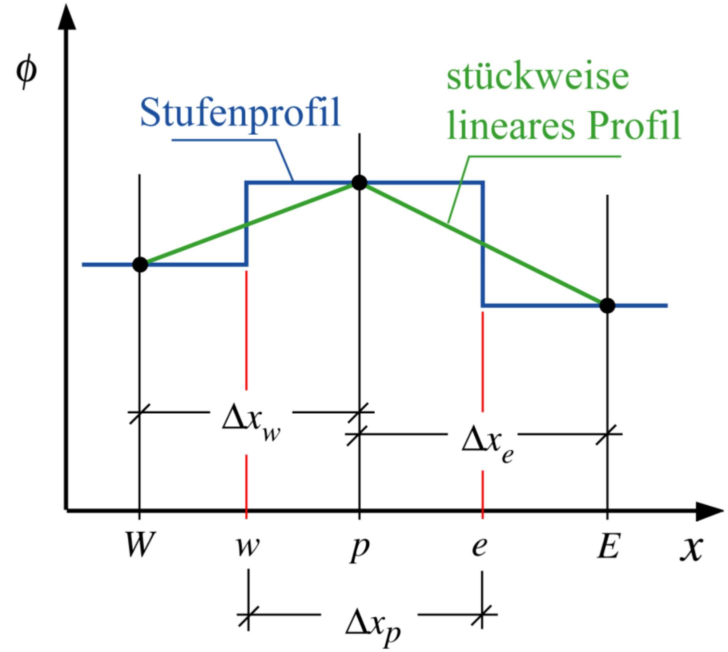
1. Die zunächst naheliegende Annahme stückweiser linearer Profile führt auf eine lineare Interpolation der an den Zellzentren gespeicherten Werten. Sind die Grenzen des roten Kontrollvolumens mittig zu den Knoten angeordnet, folgt:

$$\rho u\,\phi_e \approx \frac{\rho u\,\phi_E + \rho u\,\phi_p}{2},$$

$$\rho u\,\phi_w \approx \frac{\rho u\,\phi_p + \rho u\,\phi_W}{2}$$

$\Rightarrow$ Ergebnis isgesamt: zentrale Diskretisierung aller Ableitungen der part. Dgl.

2. Wird ein Stufenprofil angenommen -Sprungstelle an der Zellgrenze-, besteht für den konvektiven Fluss eine Wahlmöglichkeit, da die Zellgrenze mit der Sprungstelle zusammenfällt.



$$\rho u\,\phi_w = \begin{cases} \rho u\,\phi_P \\ \rho u\,\phi_W \end{cases}$$

Diese einseitige Formulierung hat, obwohl sie zunächst als die gröbere Diskretisierung erscheint, entscheidende Vorteile, da sie die Physik des konvektiven Terms besser abbilden kann.

$\rightarrow$ Upwind-Diskretisierung.

Bem.: Die Stellen w, e müssen sowohl bei der Formulierung des Diffusionsflusses als auch bei der Formulierung des konvektiven Flusses nicht notwendig in der Mitte zwischen W und p bzw. p und E liegen.

Übung:

Untersuchen Sie die Konsistenz und die Stabilität der vorgeschlagenen Diskretisierung

$$\frac{\mathrm{d}(\rho u \phi)}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\lambda \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$(\rho u)_e \, \phi_e - (\rho u)_w \, \phi_w + \left(-\frac{\lambda_e \left(\phi_E - \phi_p\right)}{\Delta x_e} + \frac{\lambda_w \left(\phi_p - \phi_W\right)}{\Delta x_w}\right) = 0$$

wenn der konvektive Term und der diffusive Term zentral diskretisiert werden.

Upwind-Diskretisierung des Konvektionsterms

Gegenüber der zentralen Diskretisierung stellt die Upwind-Diskretisierung eine an die physikalische Bedeutung des Konvektionsterms besser angepasste Diskretisierung des Konvektionsterms stellt

Dabei wird im einfachsten Fall der Wert an der Bilanzgrenze gleich gesetzt mit dem Wert der Funktion stromauf der Bilanzfläche:

$$\rho u\,\phi_e = \begin{cases} (\rho u)_e\,\phi_P & , \quad u_e > 0 \\ (\rho u)_e\,\phi_E & , \quad u_e < 0 \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad (\rho u)_w\,\phi_w = \begin{cases} (\rho u)_w\,\phi_W & , \quad u_w > 0 \\ (\rho u)_w\,\phi_P & , \quad u_w < 0 \end{cases}$$

Die Überlegenheit der Upwind-Diskretisierung wird im Folgenden begründet.

Übung:

Überprüfen Sie die Konsistenz und die Stabilität der Upwind-Diskretisierung!
Welche Ordnung hat der Abbruchfehler der Reihenentwicklung?
Vergleichen Sie dies mit derjenigen Fehlerordnung der zentralen Diskretisierung!

Verbesserung der Approximationsordnung (1)

Upwind-Diskretisierung des Konvektionsterms mit einem Verfahren höherer Ordnung

Das dargestellte Upwind-Verfahren ist auch auf äquidistanten kartesischen Gittern nur von erster Ordnung im Raum genau.

Es gibt verbesserte Upwind-Verfahren wie QUICK, welches statt des Stufenprofils eine quadratische Approximation der räumlichen Verteilung der abhängigen Variable auf drei stromauf versetzten Gitterpunkten ansetzt und daher auf äquidistanten Gittern eine Genauigkeit zweiter Ordnung erreicht.

Verbesserung der Approximationsordnung (2)

Ableitung der exakten Lösung der Modellgleichung

Zur Untersuchung der Bedeutung der Upwind-Diskretisierung soll die exakte Lösung der Differentialgleichung

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

im Intervall $0 \leq x \leq l$ angegeben und untersucht werden.

Es sollen folgenden Randbedingungen gelten:

$$\begin{aligned} x = 0\ &: \qquad \phi = \phi_0 \\ x = l\ &: \qquad \phi = \phi_l \end{aligned}$$

Die Lösung für diese Randbedingungen lautet dann:

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_l - \phi_0} = \frac{\exp\left(\mathrm{Pe}\,x/l\right) - 1}{\exp\left(\mathrm{Pe}\right) - 1}$$

mit der Peclet-Zahl $\mathrm{Pe} = \dfrac{\rho u l}{\lambda}$

Die das Verhältnis von Konvektion/Diffusion repräsentiert.

Verbesserung der Approximationsordnung (2, kont.)

Lösung des Problems $\dfrac{\mathrm{d}(\rho u\,\phi)}{\mathrm{d}x} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\lambda\,\dfrac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right)$ im Intervall $0 \leq x \leq l$

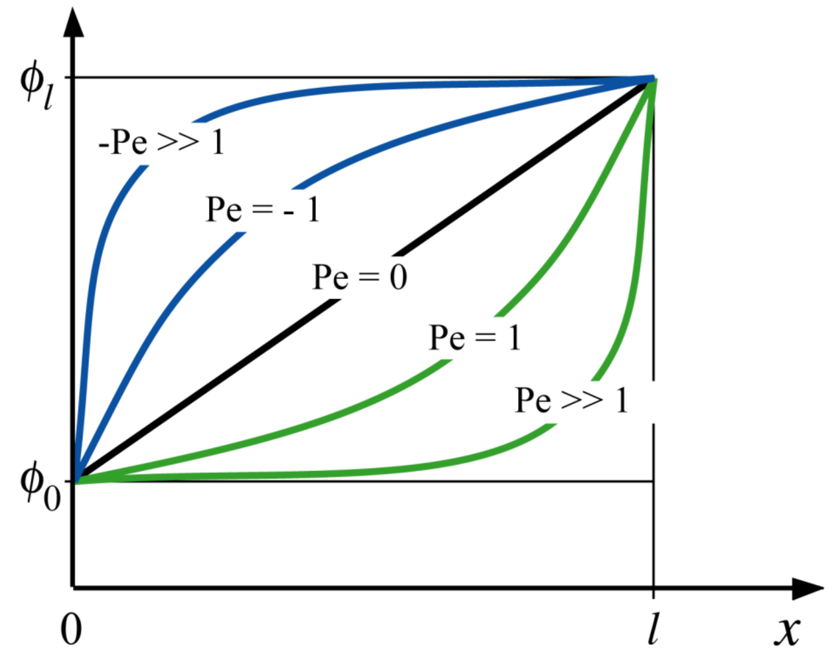
mit $x = 0 \;:\quad \phi = \phi_0$

$x = l \;:\quad \phi = \phi_l$

lautet:

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_l - \phi_0} = \frac{\exp(\mathrm{Pe}\,x/l) - 1}{\exp(\mathrm{Pe}) - 1}$$

mit der Peclet-Zahl: $\mathrm{Pe} = \dfrac{\rho u l}{\lambda}$



Zusammenfassende Darstellung der verschiedenen Upwind-Formulierungen

Die Diskretisierung der stationären eindimensionalen Konvektions-Diffusions Gleichung

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

bzw. mit Gaußschem Integralsatz:

$$\int_{\delta\Omega}\left(\rho u\,\phi \;-\; (\lambda\,\frac{d\phi}{dx})\right)\mathrm{d}A = 0$$

Flussfunktion (analytisch) :

$$f(\phi) \;=\; \rho u\,\phi - \lambda\,\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}$$

Numerische Flussfunktion:

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

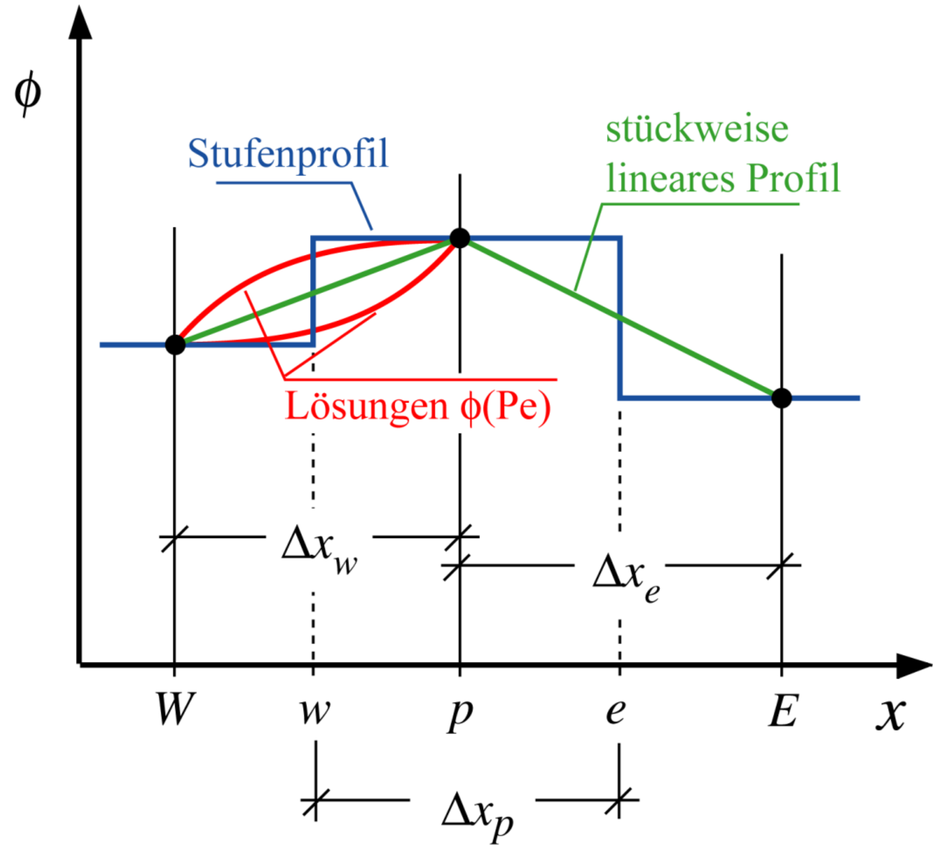
Berechnung/Approximationen des numerischen Flusses: $f^*(\phi^*) = \rho u\,\phi^* - \lambda \dfrac{\Delta\phi^*}{\Delta x}$

Ohne Berücksichtigung der Strömungsrichtung:

- stückweise lineare Verteilung

Berücksichtigung der Strömungsrichtung:

- Stufenprofil (1. Ordnung Upwind)
- Analytische Lösung



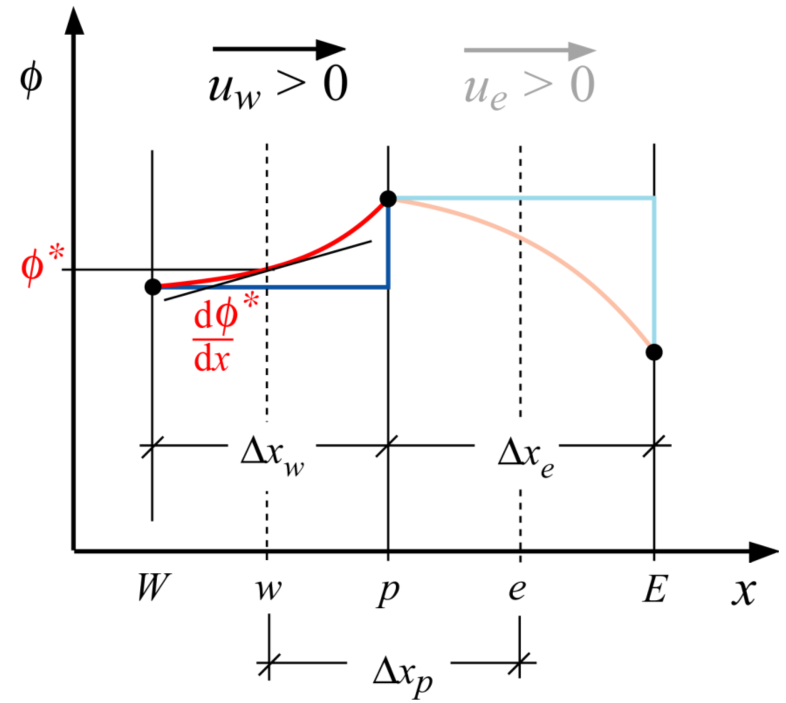
Auswertung der analytischen Lösung zur Bestimmung des numerischen Flusses

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

Beispiel:

Strömung in positive x-Richtung:

$$u_w \, , \, u_e > 0$$



Bestimmung des Wertes ϕ^* und der Ableitung $d\phi^*/dx$ an der Zellgrenze w (bei e analog).

(Als Vergleich sind die Stufenprofile zur Bestimmung von ϕ^* in $\rho u \phi^*$ bei der Upwind-Formulierung des Konvektionsterms in blau eingetragen.)

Übung:

Formulieren Sie ein verbessertes Diskretisierungs-Schema für die instationäre Konvektions-Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\,\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + s$$

unter Ausnutzung der exakten Lösung $\dfrac{\phi-\phi_0}{\phi_l-\phi_0} = \dfrac{\exp(\mathrm{Pe}\,x/l)-1}{\exp(\mathrm{Pe})-1}$.

- Formulieren Sie Diskretisierungen für die inkompressible, zweidimensionale und instationäre Konvektions-Diffusionsgleichung

$$\int_\Omega \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}\,\mathrm{d}V + \int_\Omega \left(\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi - \lambda\frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi - \lambda\frac{\partial\phi}{\partial y})\right)\mathrm{d}V = 0$$

auf kartesischem Gitter, bei denen Sie für die konvektiven Flüsse wahlweise die zentrale Formulierung oder die einfache Upwind-Formulierung und für die diffusiven Flüsse grundsätzlich die zentrale Approximationen vorsehen. Dabei sei ein vorgegebenes Geschwindigkeitsfeld angenommen, das die Kontinuitätsgleichung

$$\int_\Omega (\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y})\,\mathrm{d}V = 0$$

erfüllt!

2. Schreiben Sie einen Code, für die numerische Integration der Konvektions-Diffusionsgleichung!

3. Testen Sie ihren Code gegen die analytische Lösung auf einem vorgegebenen Intervall für positive und negative Konvektionsgeschwindigkeiten! Welches Verhalten zeigt die Lösungen mit ausschließlich zentraler Diskretisierung bei wachsendem Einfluss der Konvektion?