

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:
$$\oint_{\delta\Omega} \left(\rho u \phi - \lambda \frac{d\phi}{dx} \right) dA = 0$$

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:

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

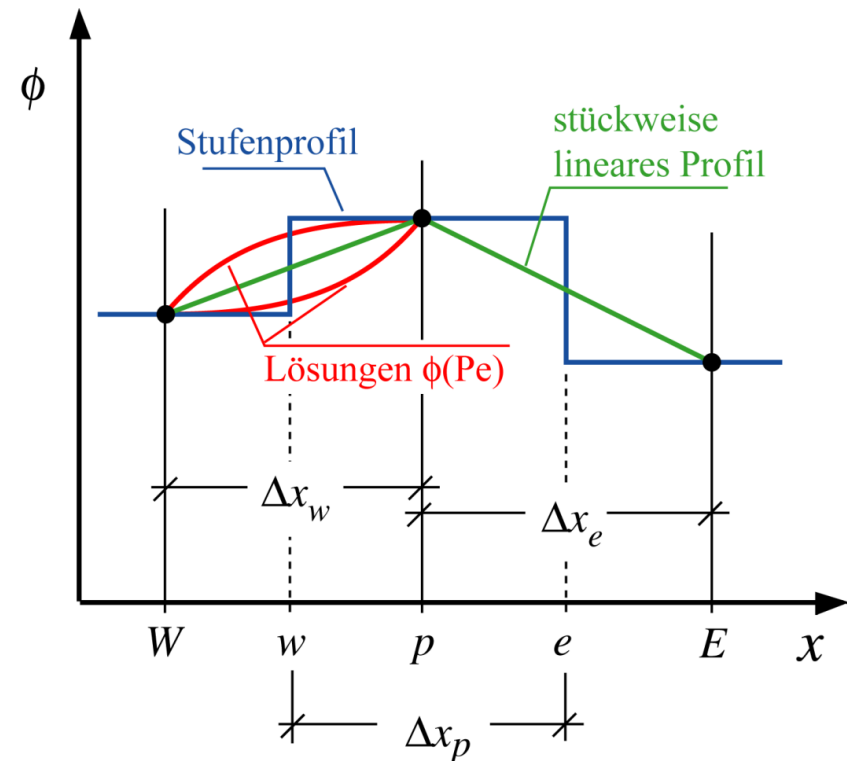
Ohne Berücksichtigung der
Strömungsrichtung:

- stückweise lineare Verteilung

Berücksichtigung der
Strömungsrichtung:

- Stufenprofil (1. Ordnung Upwind)

- Analytische Lösung



Auswertung der analytischen Lösung zur Bestimmung des numerischen Flusses

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

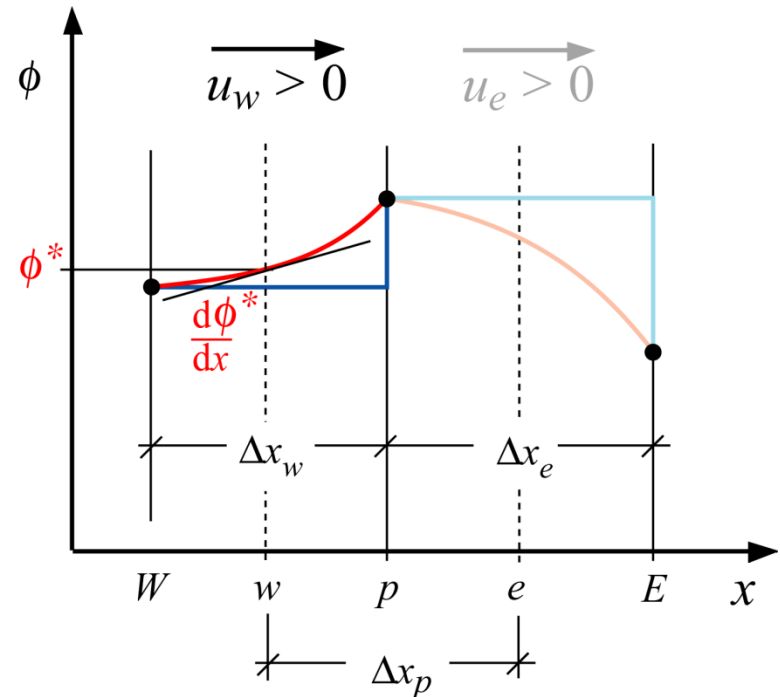
Beispiel:

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.)



Vereinheitlichte Programmierung für verschiedene Flussdarstellungen

Die Diskretisierung der stationären Konvektions-Diffusions-Gleichung mittels allen dargestellten Verfahren zur Formulierung des numerischen Flusses

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

führt für die Bilanz der Zelle p stets auf eine algebraische Gleichungen der Form:

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

Das heißt, der Wert der Zielgröße in der Zelle p ist als gewichtetes Mittel der Werte in den Nachbarzellen darstellbar.

⇒ Berechnung von a_W , a_E und a_p für die verschiedenen Verfahren nötig.

Übung:

Zeigen Sie, dass für die Konvektions-Diffusions-Gleichung

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

mit der verbesserten Flussberechnung nach der analytischen Beziehung

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_l - \phi_0} = \frac{\exp(\text{Pe } x/l) - 1}{\exp(\text{Pe}) - 1} \quad \text{mit} \quad \text{Pe} = \frac{\rho u l}{\lambda}$$

die Koeffizienten in der algebraischen Beziehung

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

durch

$$a_E = \left(\frac{f}{\exp(f/D) - 1} \right)_e, \quad a_W = \left(\frac{f \exp(f/D)}{\exp(f/D) - 1} \right)_w$$

$$a_p = a_E + a_W + (f_e - f_w)$$

mit

$$f = \rho u, \quad D = \frac{\lambda}{\Delta x}$$

gegeben sind.

Hybrides Diskretisierungsschema

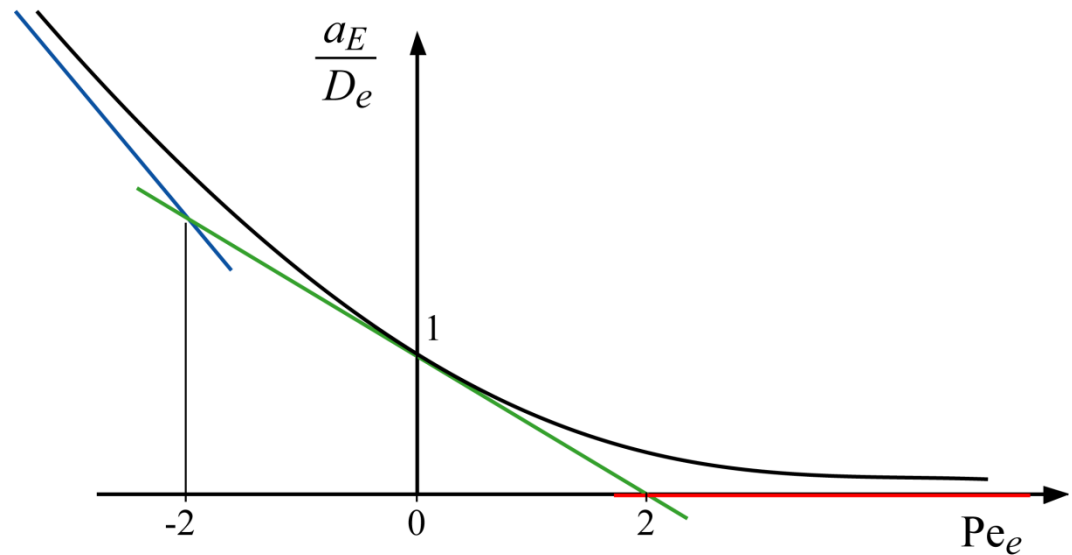
Die Anwendung des Verfahrens auf Basis der exakten Lösung ist teuer, da für die Auswertungen der Koeffizienten a_W und a_E sehr viele Auswertungen der Exponentialfunktion durchgeführt werden müssen.

Um diesen Nachteil zu beseitigen, sind hybride Schemata vorgeschlagen worden.

Dazu wird die Funktion

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{Pe}{\exp(Pe) - 1}$$

bereichsweise angenähert.



Hybrides Diskretisierungsschema (Forts.)

Bereichsweise Annäherung der Funktion $\frac{a_E}{D_e} = \frac{Pe}{\exp(Pe) - 1}$

1. $Pe_e > 0$ (der Knoten E ist stromab, kleiner Einfluss für wachsende Peclet-Zahl)

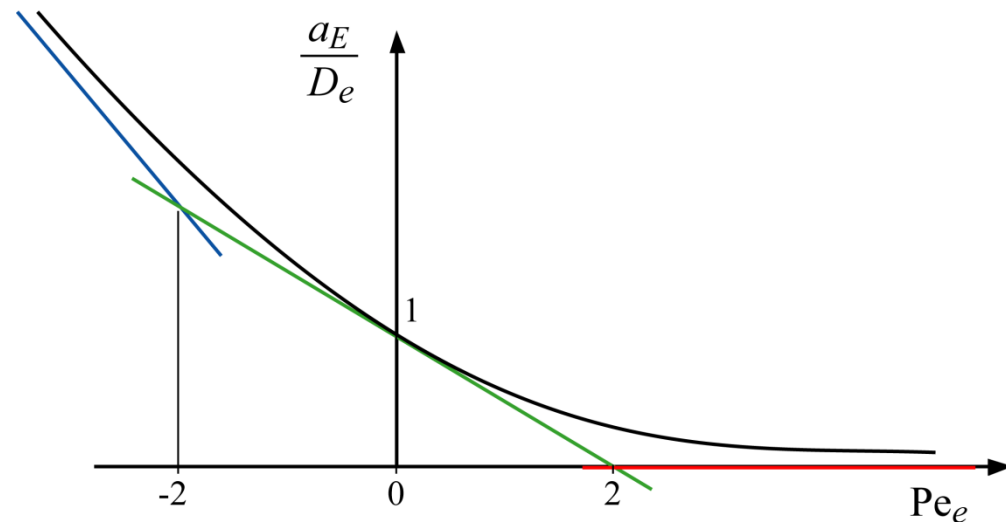
$$Pe_e \rightarrow \infty, \quad \frac{a_E}{D_e} \rightarrow 0 \quad \text{---}$$

2. $Pe_e < 0$ (der Knoten E ist stromauf, großer Einfluss dieses Nachbarn für abnehmende Peclet-Zahl.

$$Pe_e \rightarrow -\infty, \quad \frac{a_E}{D_e} \rightarrow -Pe_e \quad \text{---}$$

3. $Pe \approx 0$ (geringe Konvektion)

$$\frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{Pe_e}{2} \quad \text{---}$$



Hybrides Diskretisierungsschema (Forts.)

Bereichsweise Annäherung der Funktion

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{Pe}{\exp(Pe) - 1}$$

Es werden folgende Geraden genutzt:

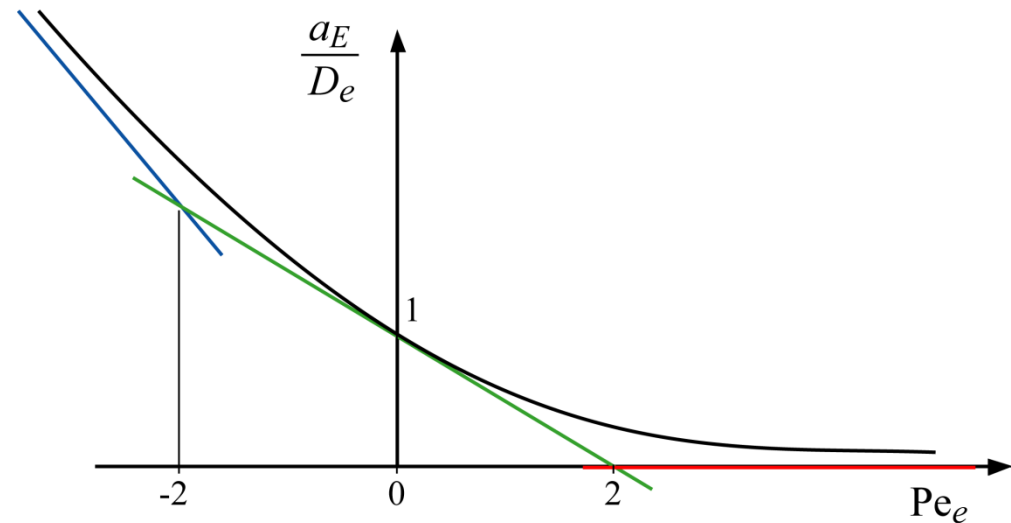
$$Pe_e < -2: \quad \frac{a_E}{D_e} = -Pe_e$$

$$-2 < Pe_e < 2: \quad \frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{Pe_e}{2}$$

$$Pe_e > 2: \quad \frac{a_E}{D_e} = 0$$

Oder:

$$\frac{a_E}{D_e} = \max(-Pe, 1 - \frac{Pe}{2}, 0)_e$$



Das hybride Verfahren ist eine Kombination aus zentralen Differenzen und Upwind-Differenzen, wobei die lokale Peclet-Zahl die Anteile steuert.

Hybrides Diskretisierungsschema (Forts.)

Weitere Verbesserung:

Große Abweichungen bei der Annäherung der exakten Funktion durch die Geradenstücke entstehen besonders für $|Pe| \approx 2$.

Abhilfe liefern folgende Potenz-Ansätze:

$$Pe < -10 : a_E/D_e = -Pe$$

$$-10 \leq Pe \leq 0 : a_E/D_e = (1 + 0,1 Pe)^5 - Pe$$

$$0 \leq Pe \leq 10 : a_E/D_e = (1 - 0,1 Pe)^5$$

$$Pe > 10 : a_E/D_e = 0$$

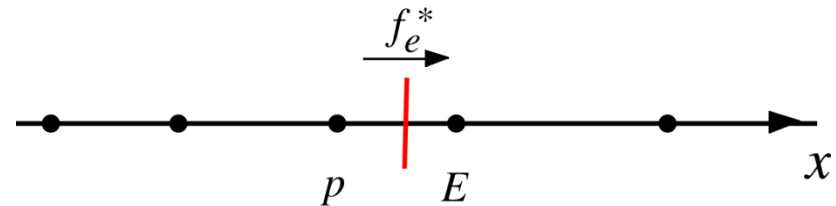
Im konvektiv-diffusiven Fluss $f = \rho u \phi - \lambda \frac{d\phi}{dx}$ die Pe-Zahl $Pe_l = \rho u l / \lambda$ ein:

$$f^* = \frac{f}{\lambda/l} = Pe_l \phi - \frac{d\phi}{dx/l}$$

Um den verbleibenden Koeffizienten a_W zu bestimmen, schauen wir uns noch den Fluss über die Bilanzgrenze bei e an.

Alle Verfahren gewichten 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 Ahead von der Bilanzfläche und B für Behind.

Eigenschaften der Koeffizienten A und B

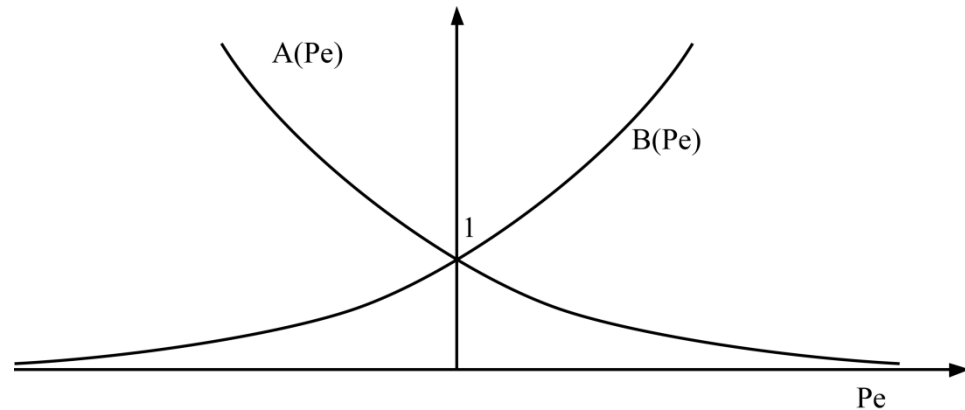
1. Die Koeffizienten A und B sind keine Funktion der skalaren Funktion $\phi(x)$

Falls die Funktion $\phi(x)$ konstant ist, ergibt sich:

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

2. Wird die Koordinatenachse gespiegelt, geht Pe in $-\text{Pe}$ über. A und B vertauschen ihre Rollen. Es gelten daher die Symmetrien:

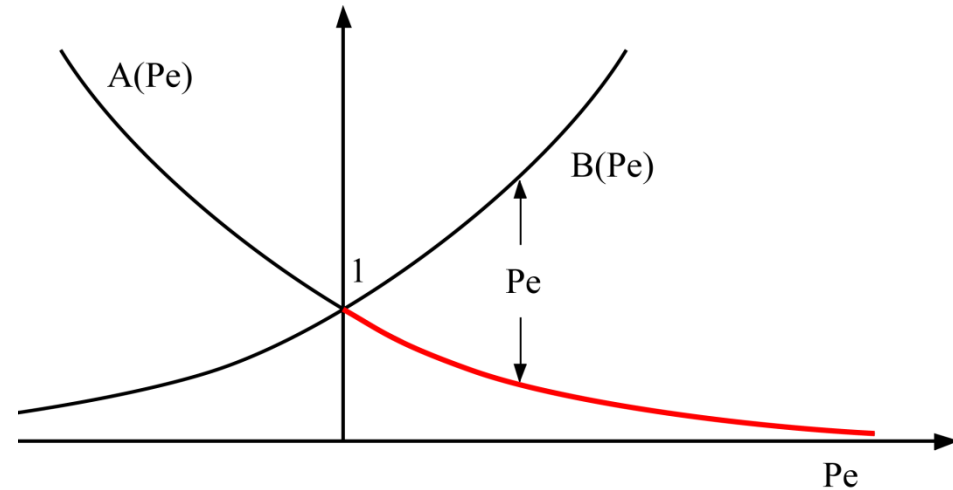
$$A(-\text{Pe}) = B(\text{Pe}), \quad B(-\text{Pe}) = A(\text{Pe})$$



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:

$$A(Pe) = A(|Pe|) - Pe$$

Für $Pe < 0$ und $Pe > 0$ folgt:

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

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

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

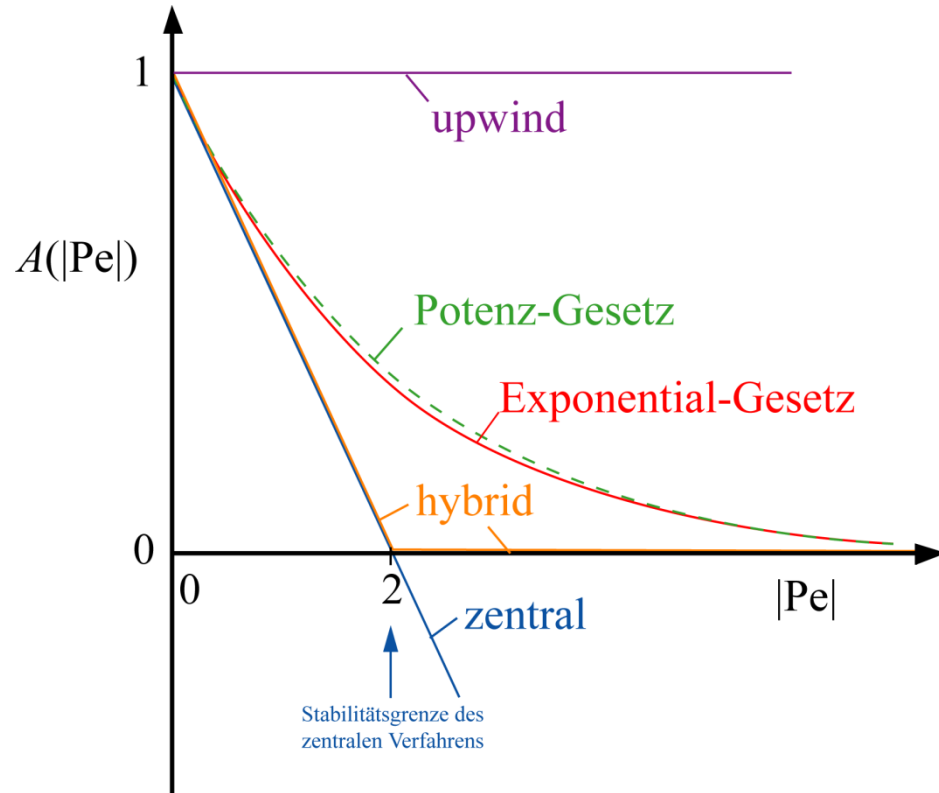
$$a_E = D_e A(|Pe_e|) + \max(-f_e, 0)$$

$$a_W = D_w A(|Pe_w|) + \max(f_w, 0)$$

$$a_p = a_E + a_W + (f_e - f_w)$$

Tabelle für die verschiedenen Schemata:

Schema	Formel für $A(Pe)$
Zentrale Differenzen	$1 - 0,5 Pe $
Upwind 1. Ordnung	1
Hybrid	$\max(0, 1 - 0,5 Pe)$
Potenzgesetz	$\max(0, (1 - 0,1 Pe)^5)$
Exponentialgesetz	$ Pe / (\exp(Pe) - 1)$



Stabile Verfahren gehen mit positivem Koeffizienten A einher.

Mehrdimensionales (2D), stationäres Problem auf nichtäquidistantem kartesischen Gitter

Modellgleichung:

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

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S$$

$$a_E = D_e \Delta y A(|\text{Pec}_e|) + \max(-f_e \Delta y, 0)$$

$$a_W = D_w \Delta y A(|\text{Pec}_w|) + \max(f_w \Delta y, 0)$$

$$a_N = D_n \Delta x A(|\text{Pec}_n|) + \max(-g_n \Delta x, 0)$$

$$a_S = D_s \Delta x A(|\text{Pec}_s|) + \max(g_s \Delta x, 0)$$

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

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

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

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

Wir hatten ferner:

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

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 $\phi = \text{const}$ (keine

Diffusion), dann gilt:

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

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

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:

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

Formulieren Sie die Finite-Volumen-Bilanz für die Differentialgleichung

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

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 $A(|\text{Pe}|)$ für die verschiedenen vorgestellten Diskretisierung des konvektiv-diffusiven Operators!

Berücksichtigen Sie bei der Bestimmung des Koeffizienten a_p auch die Aussage der Kontinuitätsgleichung.

- 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!

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 approximierter 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.

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.

Ergänzungen (Forts.)

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

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

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

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

impliziert die Kenntnis des Diffusionskoeffizienten 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:

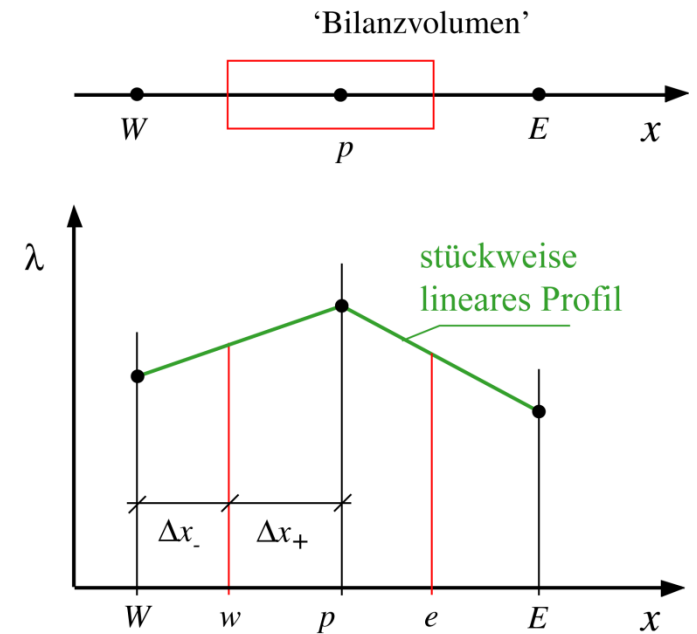
Nahe liegend ist die lineare Interpolation
(arithmetisches Mittel)

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

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“ ($\lambda \rightarrow \infty$) ist, richtig wiedergibt.