

Technische Universität Berlin

INSTITUT FÜR STRÖMUNGSMECHANIK
UND TECHNISCHE AKUSTIK

Finite–Volumen–Methode in der Numerischen Thermofluiddynamik

von

Wolfgang W. Baumann, Ulf Bunge
Octavian Frederich, Markus Schatz, Frank Thiele

Manuskript zur Vorlesung im Fachgebiet
Numerische Methoden der Thermofluiddynamik
Fakultät V
5. korrigierte und überarbeitete Auflage, 2006

Vorwort zur 5. Auflage

In dieser Version sind nur auffällige Fehler gegenüber der 4. Auflage von 2003 verbessert worden. Es ist geplant einige Themenkomplexe zu komprimieren und neue hinzuzufügen. Eine entgeltliche Version stellt diese Auflage daher auch nicht dar.

Für Hinweise auf Fehler sind wir immer noch dankbar.

Berlin, im Juni 2006

Octavian Frederich und Frank Thiele

Vorwort zur 4. Auflage

Bisher sind nur einige Korrekturen gegenüber der 3. Auflage von 1999 erfolgt, die Erstellung der neuen Auflage ist somit noch in Arbeit.

Für Hinweise auf Fehler sind wir dankbar.

Berlin, im April 2003

Ulf Bunge und Frank Thiele

Vorwort zur 3. Auflage

Die vorliegende dritte Ausgabe dieses Manuskripts ist gegenüber der zweiten Auflage (1993) in einigen Punkten ergänzt worden. Hinzugekommen sind Abschnitte zu modernen Konvektions-Diffusions-Diskretisierungen sowie zur Finite-Volumen-Methode auf nicht-versetzten Gittern und für krummlinige Koordinaten. Damit wird der ursprünglich einführende Charakter dieser Schrift erweitert auf State-Of-The-Art-Techniken, wie sie in allen modernen (auch kommerziellen) Finite-Volumen-Codes zum Einsatz kommen.

Zum Gelingen dieser Auflage haben dankenswerterweise beigetragen:

Redaktion: Lothar Jehring und Markus Schatz

Illustrationen: Evelyn Kulzer

Layout und Satz: Sabrina Nordt

Berlin, im November 1999

Wolfgang W. Baumann und Frank Thiele

Inhaltsverzeichnis

1	Allgemeines	1
2	Mathematischer Hintergrund	2
2.1	Bilanzgleichungen	2
2.1.1	Zeitliche Änderung materieller Integrale	2
2.1.2	Allgemeine Bilanzgleichung	3
2.1.3	Massenerhaltung	5
2.1.4	Spezieserhaltung	5
2.1.5	Impulserhaltung	6
2.1.6	Energieerhaltung	6
2.1.7	Vorteil einer allgemeinen Differentialgleichung	7
2.2	Koordinaten und abhängige Variable	8
3	Diskretisierungskonzept der Finite-Volumen-Methode	11
3.1	Diskretisierungsgleichungen	11
3.2	Methode der gewichteten Residuen	13
3.3	Kontroll-Volumen-Formulierung	14
3.4	Leitprinzipien	17
3.5	Quelltermbehandlung	18
3.6	Vier Grundregeln	19
4	Wärmeleitung	20
4.1	Stationäre eindimensionale Wärmeleitung	20
4.2	Variable (Wärme-) Leitfähigkeit	21
4.3	Nichtlinearität	23
4.4	Quellterm-Linearisierung	23
4.5	Randbedingungen	25
4.6	Instationäre eindimensionale Wärmeleitung	27
4.7	Zwei- und dreidimensionale Situationen	30
4.7.1	Diskretisierungsgleichung für drei Dimensionen	31
4.8	Lösung des algebraischen Gleichungssystems	32
4.8.1	Punkt-Gauß-Seidel-Methode	32
4.8.2	Linien-Gauß-Seidel-Methode	32
4.8.3	Über-Relaxation und Unter-Relaxation	33
4.9	Geometrie-Betrachtungen	34
4.10	Wärmeleitungsähnliche Probleme	36
5	Konvektion und Diffusion	38
5.1	Standardverfahren	38
5.1.1	Das Zentral-Differenzen-Schema (CDS)	39
5.1.2	Das Upwind-Schema (UDS)	40
5.1.3	Das Exponential-Schema (ES)	41
5.1.4	Das Hybrid-Schema (HS)	43
5.1.5	Das Power-Law-Schema (PS)	45
5.1.6	Flux-Blending	46
5.1.7	Eine verallgemeinerte Formulierung	46
5.1.8	Konsequenzen der verschiedenen Schemata	46

5.2	Diskretisierungsgleichung für zwei Dimensionen	47
5.3	Diskretisierungsgleichung für drei Dimensionen	50
5.4	Einseitig gerichtete Raumkoordinaten	51
5.5	Verfahren höherer Ordnung (HOC)	52
5.5.1	Das QUICK-Schema	53
5.5.2	Andere Schemata höherer Ordnung	54
5.6	Limitierte Differenzenschemata	55
5.6.1	Das MUSCL-Schema	57
5.7	UNO/ENO-Schemata	59
5.8	Anwendungsbeispiele	60
5.8.1	Eindimensionales Problem	60
5.8.2	Zweidimensionale Wirbelströmung	61
6	Berechnung des Strömungsfeldes	67
6.1	Notwendigkeit einer besonderen Vorgehensweise	67
6.2	Einige verwandte Schwierigkeiten	68
6.3	Ein Ausweg: Das gestaffelte Gitter	70
6.4	Die Impulsgleichungen	71
6.5	Die Druck- und Geschwindigkeitskorrekturen	72
6.6	Die Druckkorrekturgleichung	73
6.7	Der SIMPLE-Algorithmus	74
6.8	Ein modifizierter Algorithmus: SIMPLER	76
6.9	Kompressible Form der Druckkorrekturgleichung	78
6.10	Lösung der Navier-Stokes-Gleichung auf nichtversetzten Rechengittern	79
7	Komplexe Geometrien	85
7.1	Zonales Ausblenden	85
7.2	Krummlinige Koordinaten	87
8	Abschließende Feinheiten	92
8.1	Iteration und Konvergenz	92
8.2	Quellterm-Linearisierung	93
9	Literaturliste	95

1 Allgemeines

Die verschiedenen Methoden zur Lösung strömungsmechanischer Probleme konnten in den letzten 25 Jahren beträchtlich weiterentwickelt werden. Bei der experimentellen Strömungsmechanik ergaben sich Fortschritte vor allem auf Grund der verbesserten Meßtechnik. Auch die analytische Strömungsmechanik konnte in dieser Zeit neue Erkenntnisse gewinnen. Die Entwicklung auf dem Gebiet der numerischen Strömungsmechanik, deren Geburtsstunde in die 50er Jahre gelegt werden kann, sind eng verknüpft mit den enormen Kapazitätssteigerungen elektronischer Rechenanlagen. Diese Entwicklungen führten zu einer Verschiebung der Bedeutung der verschiedenen Methoden, so daß deren Vor- und Nachteile neu beurteilt werden müssen.

Ein unbestrittener Vorteil der analytischen Strömungsmechanik liegt darin, daß mit ihrer Hilfe schnell und preiswert Ergebnisse erhalten werden, die zumeist in geschlossener Form dargestellt werden können. Dafür ist aber häufig die Annahme starker Vereinfachungen, beispielsweise hinsichtlich der Geometrie oder der Linearisierung des Problems nötig.

Der Vorteil der experimentellen Strömungsmechanik besteht darin, daß alle Einflüsse unter realistischen oder wenigstens realitätsnahen Bedingungen erfaßt werden können. Weiterhin werden neue physikalische Phänomene hauptsächlich bei experimentellen Untersuchungen entdeckt. Diesen Vorteilen steht eine Reihe von Nachteilen gegenüber. Bei Laborversuchen ist es oft schwierig, die gewünschten Randbedingungen zu erzeugen. Das betrifft vor allem die Zuströmung (Turbulenzgrad) und den Einfluß der Wände. Außerdem treten oft Skalierungsprobleme auf, wenn die Strömung durch mehr als eine Kennzahl charakterisiert ist. Nicht zu unterschätzen sind Fragen der Meßgenauigkeit besonders bei komplexen Strömungen. Als Hauptnachteil experimenteller Untersuchungen sind sicherlich deren hohe Kosten zu nennen. Dabei fallen zum einen die Unterhaltskosten für die zum Teil sehr aufwendige apparative Ausstattung, die Herstellungskosten für Modelle und die Personalkosten ins Gewicht.

Der größte Vorteil der numerischen Strömungsberechnung liegt darin, daß relativ schnell und kostengünstig Ergebnisse erhalten werden können. Im Gegensatz zu analytischen Untersuchungen sind keine Beschränkungen auf lineare Probleme notwendig, und es können komplexe strömungsmechanische Probleme behandelt werden. Numerische Methoden lassen sich auch auf solche Strömungen anwenden, die beispielsweise wegen extremer Temperaturen oder Drücke keiner experimentellen Untersuchung zugänglich sind. Als Ergebnis liegen die vollständigen Strömungsfelder vor, d.h. Geschwindigkeiten, Druck, Temperatur und Turbulenzgrößen an allen Orten des untersuchten Gebiets. Es treten keine Skalierungsprobleme auf, und Parameterstudien lassen sich schnell durchführen. Die Kosten einer numerischen Lösung werden auf Grund der Entwicklungen bei den elektronischen Rechenanlagen immer niedriger, und die wachsenden Rechnerkapazitäten machen es immer weniger notwendig, Modellannahmen und Vereinfachungen zu verwenden. Die heute im allgemeinen noch notwendigen Modellannahmen (z.B. Turbulenzmodelle) sind einer der Hauptnachteile bei der Problemlösung mit Hilfe numerischer Verfahren. Meistens sind die Modellannahmen durch eingeschränkte Rechnerkapazität bedingt. Diese führt auch dazu, daß die Lösung auf einem relativ groben numerischen Gitter bestimmt werden muß und damit Diskretisierungsfehler auftreten. Für numerische Berechnungen müssen Anfangsbedingungen (bei zeitabhängigen Prozessen) sowie Randbedingungen am Ein- und Austritt vorgegeben werden, die im allgemeinen maßgeblichen Einfluß auf die Lösung haben. Diese Randbedingungen müssen entweder aus experimentellen Untersuchungen bekannt sein oder mit Hilfe analytischer Korrelationen approximiert werden.

Die meisten kommerziell verfügbaren Berechnungsprogramme für Strömungsprobleme basieren auf der Methode der Finiten-Volumen (FV). Im folgenden werden die grundlegenden Eigenschaften und Konzepte dieser Methode dargestellt. Der Inhalt der Vorlesung orientiert sich am Buch von Suhas V. Patankar [1].

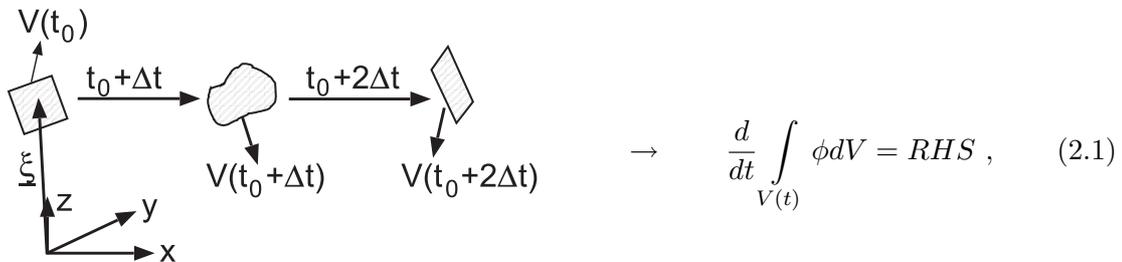
2 Mathematischer Hintergrund

2.1 Bilanzgleichungen

Die numerische Simulation laminarer und turbulenter Strömungsvorgänge wie auch Wärme- und Stoffübergang und chemischen Reaktionen basieren auf der Lösung der Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Alle diese Gleichungen sind von gleicher Form und drücken ein Erhaltungsprinzip aus. Die zu erhaltene Eigenschaft wird im folgenden ϕ genannt. Zunächst soll allgemein der Transportmechanismus diskutiert werden, um dann zu einem universellen Ansatz für eine numerische Lösung zu gelangen.

2.1.1 Zeitliche Änderung materieller Integrale

Es soll untersucht werden, in welcher Weise sich eine beliebige Eigenschaft ϕ (Impuls, Dichte, etc.) eines flüssigen "Körpers", also eines materiellen Volumens dV , ändert. Das Problem liegt hierbei in der Tatsache, daß ein solches Volumen zwar immer von denselben Teilchen gebildet wird, seine Gestalt und räumliche Lage sich jedoch fortlaufend ändern.



RHS ¹ symbolisiert hier eine allgemeine rechte Seite, die in der Regel aus sogenannten Quelltermen zur Erzeugung oder Vernichtung von ϕ besteht. Da das Volumen, d.h. die Integrationsgrenzen, ebenfalls von der Zeit abhängt, muß man die Leibnizsche Regel anwenden und notiert

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{x_1(t)}^{x_2(t)} \int_{y_1(t)}^{y_2(t)} \int_{z_1(t)}^{z_2(t)} \phi dV = & \int_{V(t_0)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \left[\int_{A_x(t_0)} \left(\phi \frac{\partial x}{\partial t} \right) dA_x \right]_{x_1(t_0)}^{x_2(t_0)} \\ & + \left[\int_{A_y(t_0)} \left(\phi \frac{\partial y}{\partial t} \right) dA_y \right]_{y_1(t_0)}^{y_2(t_0)} + \left[\int_{A_z(t_0)} \left(\phi \frac{\partial z}{\partial t} \right) dA_z \right]_{z_1(t_0)}^{z_2(t_0)}, \quad (2.2) \end{aligned}$$

und damit

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t_0)} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \oint_{A(t_0)} \phi \underline{u} \cdot d\underline{A}, \quad (2.3)$$

wobei \underline{u} die Geschwindigkeit² des Volumens bzw. der Teilchen, die dieses Volumen bilden, angibt und \underline{A} die Oberfläche des Volumens darstellt.

Es ergibt sich das Reynoldsche Transporttheorem

¹ $RHS =$ 'right hand side'

² $\underline{u} = u_i = u_1, u_2, u_3$ oder $= u, v, w$ Geschwindigkeitskomponenten

$$\frac{d}{dt} \int \phi dV = \int \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \oint \phi \underline{u} \cdot d\underline{A}. \quad (2.4)$$

Mit Hilfe des Gaußschen Satzes $\oint d\underline{A} \otimes \phi = \int (\underline{\nabla} \otimes \phi) dV$ erhält man die konservative Form der Erhaltungsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \int \phi dV = \int \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\phi \underline{u}) \right] dV = RHS. \quad (2.5)$$

Die Verwendung der substantiellen Ableitung³ führt auf eine kompakte Formulierung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \phi dV &= \int \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\phi \underline{u}) \right] dV \\ &= \int \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \underline{\nabla} \phi \cdot \underline{u} + \phi \underline{\nabla} \cdot \underline{u} \right] dV \\ &= \int \left[\frac{D\phi}{Dt} + \phi \underline{\nabla} \cdot \underline{u} \right] dV. \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.1.2 Allgemeine Bilanzgleichung

Betrachtet werden die Flüsse einer beliebigen Größe an den Grenzen eines Volumenelements:

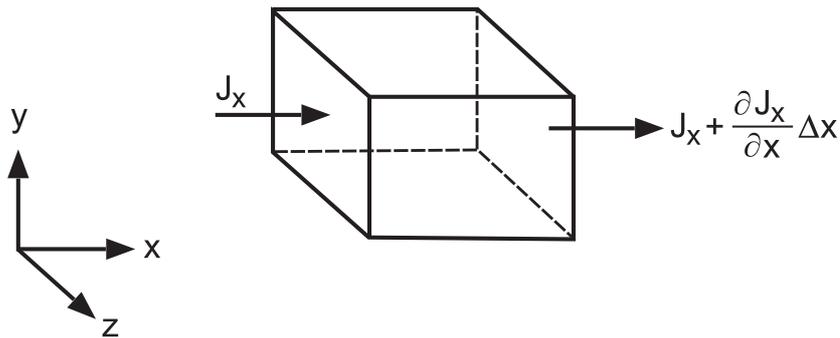


Abbildung 1: Flußbilanz in x -Richtung an einem Volumenelement

J_x : Fluß in x -Richtung = Strom der Größe pro Flächeneinheit.

$$\begin{aligned} \text{Netto-Fluß} &= \left(J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} \Delta x - J_x \right) \cdot \Delta y \Delta z \\ &= \frac{\partial J_x}{\partial x} \cdot \underbrace{\Delta x \Delta y \Delta z}_{\Delta V}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

³Definition der substantiellen Ableitung (zeitliche Änderung aus der Sicht eines mitbewegten Beobachters)

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} &:= \text{substantielle Änderung} \\ &= \partial_t + u \partial_x + v \partial_y + w \partial_z \\ &= \partial_t(\dots) + \underline{u} \cdot \underline{\nabla}(\dots) \end{aligned}$$

$$\text{Netto-Fluß pro Volumeneinheit} = \frac{\partial J_x}{\partial x}. \quad (2.8)$$

Bei Betrachtung aller drei Raumrichtungen x, y, z :

$$\begin{aligned} \text{Netto-Fluß pro Volumeneinheit} &= \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \\ &= \text{div} \underline{J} = \underline{\nabla} \cdot \underline{J}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Das Finite-Volumen-Verfahren basiert auf einer Bilanz über ein sogenanntes Kontrollvolumen. Die differentielle Form einer allgemeinen Bilanz lautet damit: ^{4 5}

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \underline{\nabla} \cdot \underline{J} = S_\phi, \quad (2.10)$$

bzw.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = S_\phi, \quad (2.11)$$

mit den Flüssen

$$J_i = \underbrace{(\rho u_i \phi)}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{\left(-\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i}\right)}_{\text{Diffusion}} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \underline{J} &= \underline{J}_{\text{Konvektion}} + \underline{J}_{\text{Diffusion}} \\ \underline{J}_{\text{Konvektion}} &= (\rho \underline{u}) \phi \\ \underline{J}_{\text{Diffusion}} &= -\Gamma_\phi \text{grad} \phi = -\Gamma_\phi \underline{\nabla} \phi \\ \Gamma_\phi &\text{ ein allgemeiner Diffusionskoeffizient (auch: Leitfähigkeit)} \\ S_\phi &\text{ Quellterm; Erzeugungsrate pro Volumeneinheit} \end{aligned}$$

Es folgt die allgemeine differentielle Form der Transportgleichung:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{(Instationär)}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi)}_{\text{(Konvektion)}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)}_{\text{(Diffusion)}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{(Quelle)}}$$

(2.13)

⁴Einschub: Kartesische Tensornotation

$$\begin{aligned} x_1, x_2, x_3 &\text{ Koordinaten} \\ \text{oder } x_i &\text{ } i = 1, 2, 3 \\ J_i &\longrightarrow J_1, J_2, J_3 \text{ Flüsse} \end{aligned}$$

⁵Einschub: Summationskonvention

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial J_1}{\partial x_1} + \frac{\partial J_2}{\partial x_2} + \frac{\partial J_3}{\partial x_3} = \text{div} \underline{J}; \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_3} \right). \end{aligned}$$

ϕ kann stehen für

- eine Geschwindigkeitskomponente
- spezifische Enthalpie oder Temperatur
- Konzentration einer chemischen Komponente (Massenbruch)
- eine Turbulenzgröße (z.B. turbulente kinetische Energie pro Masse, Wirbelviskosität)
- elektrisches oder magnetisches Potential
- Druck in porösen Medien
- ⋮

Die Bilanzgleichungen für unterschiedliche Größen lassen sich alle in beiden oben erwähnten Formen (2.5, 2.13) darstellen. Sie drücken ein Erhaltungsprinzip aus.

Im allgemeinen ist ϕ eine Größe pro Masseneinheit. Die Terme der Differentialgleichung sind Größen pro Volumen und pro Zeiteinheit.

Sei ϕ massenbezogene Größe
 ρ (Dichte) Masse der Mischung pro Volumeneinheit,
 dann $\rho\phi$ Größe pro Volumeneinheit
 $\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)$ Änderung pro Volumen- und Zeiteinheit.

Γ_ϕ und S_ϕ haben spezifische Bedeutung für jedes ϕ .

Die Anwendung des Transporttheorems (2.4) auf die Bilanzen für Impuls, Masse und Energie ergibt die entsprechenden Transport- bzw. Erhaltungsgleichungen.

2.1.3 Massenerhaltung

Aus

$$m = \text{const.} \quad \Rightarrow \quad \dot{m} = \frac{d}{dt}m = \frac{d}{dt} \int \rho dV = 0 ,$$

ergibt sich durch Koeffizientenvergleich in der konservativen Notation (2.5) für $\phi = \rho$, d.h. den Transport der Eigenschaft "Dichte", die Kontinuitätsgleichung in integraler Form:

$$\int \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) \right\} dV = 0 . \quad (2.14)$$

Aus der Betrachtung beliebig kleiner Kontrollvolumina gewinnt man die differentielle Form der Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 . \quad (2.15)$$

2.1.4 Spezieserhaltung

Bei der numerischen Simulation von Mehrphasenströmungen oder chemischen Reaktionen muß die Erhaltung der einzelnen Komponenten (Spezies) sichergestellt werden. In diesem Fall wird als transportierte Größe der Massenbruch, d.h. der relative Anteil einer bestimmten Komponente an der Gesamtmasse betrachtet:

$$\int \left\{ \frac{\partial(\rho Y_\ell)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_\ell \underline{u}) \right\} dV = - \int \nabla \cdot \underline{J}_\ell dV + \int R_\ell dV . \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned}
Y_\ell &= \text{Massenbruch der } \ell\text{-ten Komponente} \\
R_\ell &= \text{Produktionsrate} \\
\underline{J}_\ell &= \text{Diffusionsflu\ss (Fick'sches Diffusionsgesetz): } J_{i\ell} = -\Gamma \frac{\partial Y_\ell}{\partial x_i} .
\end{aligned}$$

In differentieller Form lautet die Erhaltungsgleichung f\u00fcr eine Komponente damit:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\ell) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_\ell) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial Y_\ell}{\partial x_i} \right) + R_\ell . \quad (2.17)$$

2.1.5 Impulserhaltung

Die \u00c4nderung des Fluidimpulses mu\u00df gerade die Summe aller auf das Fluid wirkenden Kr\u00e4fte sein. ϕ ist in diesem Fall der spezifische Impuls: $\phi = \rho \underline{u}$. Die Formel lautet:

$$\int \left\{ \frac{\partial(\rho \underline{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \underline{u}) \right\} dV = - \int \nabla p dV + \int \nabla \cdot \underline{\tau} dV + \int \underline{f} dV , \quad (2.18)$$

wobei p den statischen Druck und $\underline{\tau}$ den Schubspannungstensor bezeichnet. Im Vektor \underline{f} werden weitere Feldkr\u00e4fte wie beispielsweise die Gravitationskraft zusammengefa\u00dft.

Betrachtet man eine Komponente dieser Gleichung, so ergibt sich z.B. f\u00fcr die Geschwindigkeit u in x -Richtung unter Verwendung einer einfachen Modellierung des Spannungstensors folgende Gleichung in differentieller Form:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + f_x \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned}
u &= u_1 = u_x \\
\mu &= \text{dynamische Z\u00e4higkeit} \\
f_x &= \text{Feldkr\u00e4fte in x-Richtung}
\end{aligned}$$

2.1.6 Energieerhaltung

Zur Herleitung der Energiebilanz wird der Transport der spezifischen Enthalpie h unter Vernachl\u00e4ssigung von Mach-Zahl-Einfluss und Dissipation betrachtet:

$$\int \left\{ \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h \underline{u}) \right\} dV = - \int \nabla \cdot \underline{q} dV + \int S_h dV . \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned}
\underline{q} &= \text{W\u00e4rmestromdichte (Fourier'sches W\u00e4rmeleitungsgesetz): } q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \\
T &= \text{Temperatur} \\
k &= \text{W\u00e4rmeleitf\u00e4higkeit} \\
S_h &= \text{Volumetrische W\u00e4rmeerzeugungsrate}
\end{aligned}$$

Die differentielle Form der Energieerhaltungsgleichung lautet:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_h . \quad (2.21)$$

Für ideale Gase, Flüssigkeiten und Feststoffe bei geringen Druckänderungen gilt:

$$c \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\partial h}{\partial x_i} . \quad (2.22)$$

Dabei ist c die spezifische isobare Wärmekapazität. Ist c konstant, so kann die Gleichung wahlweise für Temperatur oder Enthalpie als unabhängige Variable angegeben werden ($h = cT$):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k}{c} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + S_h \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k}{c} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{S_h}{c} . \quad (2.24)$$

Die im weiteren verwendete Gleichung für stationäre Wärmeleitung lautet unter Vernachlässigung der Zeitabhängigkeit und des konvektiven Transports schließlich:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_h = 0 . \quad (2.25)$$

2.1.7 Vorteil einer allgemeinen Differentialgleichung

Durch die starke Analogie der unterschiedlichen zu lösenden Erhaltungsgleichungen besteht die Möglichkeit der Konzentration auf eine einzige numerische Methode im Sinne eines → "general purpose"-Computerprogramms.

Der Rahmen für ein solches Programm könnte in Fortran77-Notation so aussehen:

```
DO 100 N = 1,NMAX
```

```
Spezifikation von  $\Gamma$ ,  $S$ ,  $RB$  für aktuelles  $N$ 
```

```
Fortranbefehle für Lösung der allgemeinen Gleichung
```

```
100 CONTINUE
```

Die allgemeine Gleichung enthält viel Flexibilität bei der Anwendung auf unterschiedliche ϕ :

Keine Änderungen in LHS ⁶

Γ und S stehen in RHS

S als Sammelbecken für alles, was nicht in die anderen drei Terme paßt.

Oft gilt: $S = 0$ oder einfacher Term.

⁶ $LHS =$ 'left hand side'

2.2 Koordinaten und abhängige Variable

Unabhängige Variablen sind im allgemeinen Fall die Zeit t und die (kartesischen) Raumkoordinaten x, y, z .

Die Wahl geeigneter anderer Koordinaten kann wesentliche Vereinfachungen mit sich bringen (Reduktion der Anzahl unabhängiger Variabler \rightarrow Gitterpunkte).

Beispiele:

axialsymmetrische Rohrströmung

Strömung um bewegte Körper

Koordinatentransformation bei Grenzschichtströmungen

usw.

Auch die geeignete Wahl abhängiger Variablen kann eine Reduktion des Rechenaufwands bewirken.

Dimensionslose Variable

Beispiel: eindimensionale Wärmeleitung:

$$k \frac{d^2 T}{dx^2} + S = 0$$

Dimensionsbehaftete Variable: macht viele Lösungen erforderlich;

Dimensionslose Variable: ermöglicht die Reduktion der Parameteranzahl:

$$\text{Sei } X = \frac{x}{L}; \quad \Theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}; \quad \Omega = \frac{SL^2}{k(T_2 - T_1)}$$

dann

$$\frac{d^2 \Theta}{dX^2} + \Omega = 0;$$

$$X = 0 : \Theta = 0; \quad X = 1 : \Theta = 1.$$

Das Problem wird nur noch durch einen Parameter Ω beschrieben.

Für jeden Problemtyp ist ein unterschiedlicher Satz von Parametern notwendig. Die Parameter sind jedoch nicht universell definiert:

Eine Alternative zum obigen Beispiel:

$$\phi = \frac{T - T_1}{SL^2/k}; \quad X = \frac{x}{L}$$

$$\longrightarrow \frac{d^2 \phi}{dX^2} + 1 = 0.$$

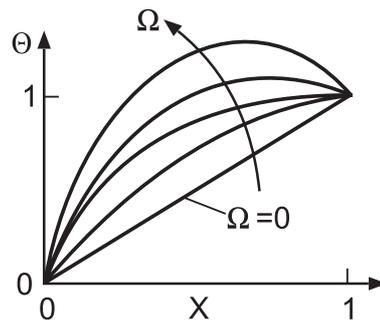


Abbildung 2:

Die Differentialgleichung enthält jetzt keinen Parameter mehr! Der Parameter steht jetzt in der Randbedingung:

$$\begin{aligned} X = 0 & : \phi = 0 \\ X = 1 & : \phi = \frac{T_2 - T_1}{SL^2/k} = \frac{1}{\Omega} . \end{aligned}$$

Wir werden im folgenden von den dimensionsbehafteten Gleichungen und Größen ausgehen. Die Terme der Differentialgleichungen haben dann eine anschauliche physikalische Bedeutung.

Einseitig und zweiseitig gerichtete Koordinaten

Zweiseitig gerichtete Koordinate:

die Bedingungen an einem Punkt werden beeinflusst durch Vorgänge auf beiden Seiten dieses Punktes.

Einseitig gerichtete Koordinate:

die Bedingungen an einem Punkt werden nur durch Vorgänge auf einer Seite dieses Punktes beeinflusst.

Die Zeit ist stets einseitig gerichtet.

Eine Raumkoordinate wird einseitig gerichtet, wenn in dieser Richtung starke Strömung herrscht:

In Strömungen konkurrieren zwei Prozesse:

Konvektion: einseitig gerichteter Prozeß

Diffusion: zweiseitig gerichteter Prozeß

Konvektionsdominierte Strömungen sind einseitig gerichtet.

Klassifizierung allgemeiner Differentialgleichungen:

parabolisch

elliptisch

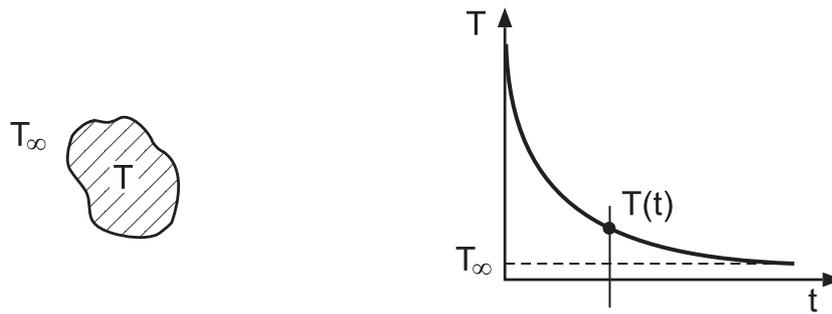
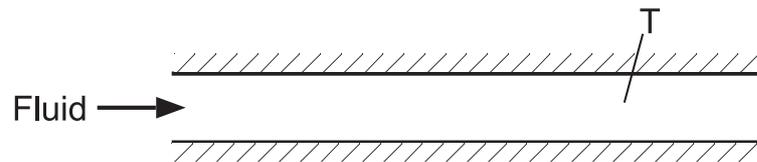


Abbildung 3: Abkühlung einer "Kartoffel"



hyperbolisch

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{parabolisch eindimensional instationär}$$

Beispiele: $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$ elliptisch zweidimensional stationär

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad \text{parabolisch zweidimensional instationär}$$

Die mathematische Klassifizierung von Differentialgleichungen nach **parabolisch** und **elliptisch** korrespondiert mit dem Konzept von einseitig und zweiseitig gerichteten Koordinaten:

parabolisch → einseitig gerichtetes Verhalten (wenigstens einer Koordinate)

elliptisch → zweiseitig gerichtetes Verhalten (in allen anderen Fällen).

Es wäre allerdings besser, wenn man Situationen als "in einer gegebenen Koordinate elliptisch oder parabolisch" bezeichnen würde. So sind beispielsweise Grenzschichten parabolisch in Hauptströmungsrichtung und elliptisch über den Strömungsquerschnitt.

Erkennen und Ausnutzen einer einseitig gerichteten Koordinate führt zu signifikanten Einsparungen von Rechenzeit und Speicherbedarf, schränkt andererseits das Verfahren hinsichtlich seiner Anwendbarkeit auf allgemeinere Aufgabenstellungen ein.

3 Diskretisierungskonzept der Finite–Volumen–Methode

In diesem Kapitel soll die Diskretisierung der im vorigen Kapitel vorgestellten Bilanzgleichungen mit Hilfe der Methode der Finiten–Volumen beschrieben werden. Diskretisierung bedeutet dabei die Anwendung der kontinuierlich formulierten Differentialgleichung auf die diskreten Orte eines Rechengitters (siehe Abb. 4) mit dem Ziel, ein lineares Gleichungssystem zu erhalten und dieses numerisch zu lösen. Die Ableitung erfolgt im Vergleich zu den beiden anderen üblichen Diskretisierungsverfahren: Finite–Differenzen (FD) und Finite–Elemente (FE).

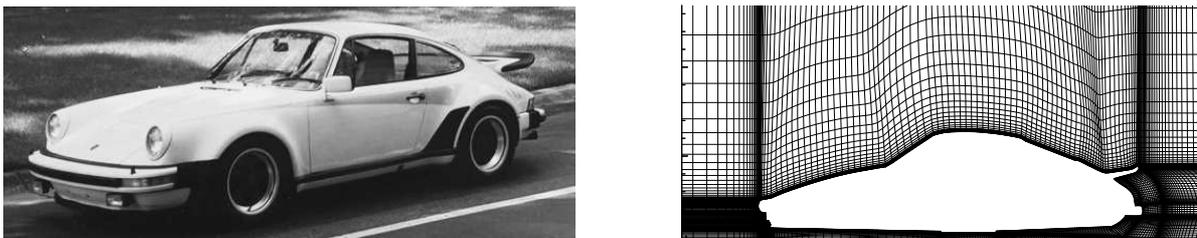


Abbildung 4: Beispiel der Umsetzung einer realen Geometrie in ein numerisches Rechengitter

3.1 Diskretisierungsgleichungen

Algebraische Gleichungen beinhalten die unbekanntenen Werte von ϕ an den gewählten Gitterpunkten. Die Herleitung einer Approximation erfordert Annahmen über den Verlauf von ϕ zwischen den Gitterpunkten. Das ϕ –"Profil" kann ein einziger algebraischer Ausdruck für das ganze Rechengebiet sein, z.B. eine Fourierreihe. Eine solche Lösung hat sich jedoch als unpraktisch erwiesen. Stattdessen werden wesentlich günstigere stückweise Profile (Segmente) verwendet. Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, daß der Wert von ϕ an einem Punkt nur die ϕ –Verteilung in seiner unmittelbaren Umgebung beeinflusst. Jedes Segment beschreibt die Variation von ϕ über ein kleines Gebiet in Abhängigkeit von benachbarten ϕ –Werten.

Alle Verfahren sollen zunächst auf eindimensionale Probleme beschränkt betrachtet werden:

$$\phi = \phi(x) .$$

Die Diskretisierungsgleichung ist eine algebraische Beziehung zur Verbindung der ϕ –Werte für eine Gruppe von Gitterpunkten. Für große Punktzahlen ist die Lösung der Diskretisierungsgleichung gleich der exakten Lösung der Differentialgleichung.

Die möglichen Diskretisierungsgleichungen sind nicht einzigartig, sondern es lassen sich sehr unterschiedliche Verfahren ableiten. Die Typenvielfalt resultiert aus Unterschieden in den Profilannahmen und in der Methode der Herleitung:

Im Prinzip sind sich die Methoden sehr ähnlich. Der Verlauf der Lösung zwischen den Gitterpunkten wird im allgemeinen auf dieselbe Weise durch bedarfsweise mehr oder weniger hochgradige Polynome angenähert. Die Amplituden (oder Stützwerte) f_0, f_1, f_2 für diesen Polynomansatz ergeben sich aus **Kollokation**:

- Bei der Finite–Differenzen–Methode bestimmen sich die Amplituden aus der Bedingung, daß der damit gewonnene Funktionsverlauf in den Gitterpunkten x_0, x_1, x_2, \dots die Differentialgleichung erfüllt. (→ **Punktkollokation**, siehe Abbildung 5 links).

- Bei der Finite-Volumen-Methode bestimmen sich die Amplituden aus der Bedingung, daß der damit gewonnene Funktionsverlauf in den durch die Gitterpunkte getrennten Gebieten (Finite-Volumen) $\delta V_1, \delta V_2$ im Mittel (d.h. global) die Differentialgleichung erfüllt (\rightarrow **Gebietskollokation**, siehe Abbildung 5 rechts).

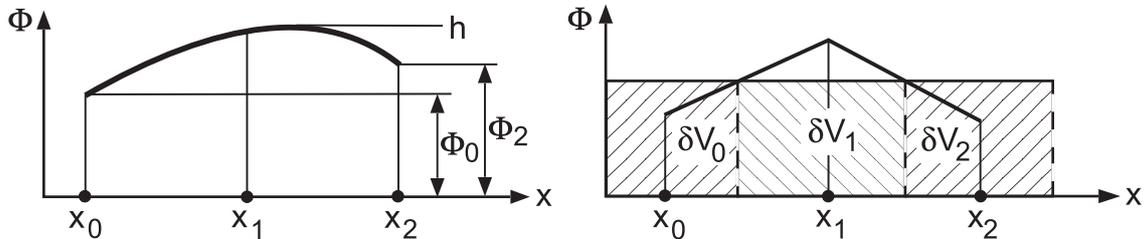


Abbildung 5: Typische Approximation des Funktionsverlaufs zwischen den Gitterpunkten bei FD-Methode (links) und innerhalb der Kontrollvolumen bei der FV-Methode (rechts)

Am Beispiel der Kontinuitätsgleichung (3.1) soll dieser Unterschied mathematisch beschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 . \quad (3.1)$$

Gesucht ist der Verlauf der Flüsse " ρu " und " ρv " als Funktion von x und y . (Hierzu ist selbstverständlich noch eine weitere Zwangsbedingung, z.B. die Impulsgleichung, erforderlich.)

Die (exakte) Lösung erfüllt die Differentialgleichung überall, so daß wir hierfür auch die "**Integro-Differentialgleichung**"

$$\int_{\delta V} [\partial x(\rho u) + \partial y(\rho v)] dx dy \underbrace{dz}_{=1} , \quad (3.2)$$

notieren können. Für die exakte Lösung ist die Integro-Differentialgleichung der Differentialgleichung äquivalent.

\rightarrow Die Lösungen der beiden Ausdrücke entsprechen sich auch für beliebige Unterteilungen

$$\delta V = \delta V_1 + \delta V_2 + \dots .$$

Eine weitere, sicherlich ebenso richtige Integro-Differentialgleichungsformulierung lautet:

$$\int_{\delta V} G(x, y) [\partial x(\rho u) + \partial y(\rho v)] dx dy = 0 . \quad (3.3)$$

Hierbei wird das Integral über die Differentialgleichung zusätzlich noch gewichtet. Diese Betrachtungen führen auf die Methoden der **gewichteten Residuen**.

3.2 Methode der gewichteten Residuen

Da wir den exakten Lösungsverlauf nicht kennen, sondern diesen über Polynomansätze annähern müssen, verbleibt bei der Auswertung der Differentialgleichung mit Hilfe der so berechneten Lösung an irgend einem Zwischenpunkt (\tilde{x}, \tilde{y}) meist ein Rest (Residuum):

$$[\partial x(\rho u) + \partial y(\rho v)]_{\tilde{x}, \tilde{y}} = R(\tilde{x}, \tilde{y}) . \tag{3.4}$$

Im Falle der Approximation ist die Lösung der Integro-Differentialgleichung auch nicht mehr unbedingt äquivalent zur Lösung der Differentialgleichung (*DGL*). (Dies wäre erst der Fall, wenn die allgemeine Integralgleichung für beliebige Partitionen und Gewichtsfunktionen "G" erfüllt ist.) Man unterscheidet die allgemeine Formulierung (3.3) nach der Wahl der Gewichtsfunktionen:

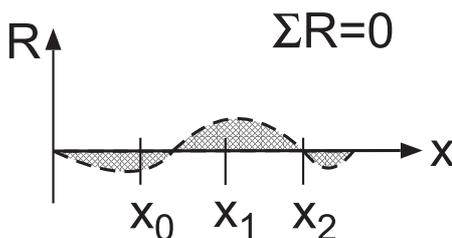
Finite-Volumen-Methode

Die Gewichtsfunktion lautet hier:

$$G(x, y) = 1$$

$$\rightarrow \int 1 \{DGL\} dx dy = 0 .$$

Die **Finite-Volumen-Methode** versucht somit, das Residuum im Mittel verschwinden zu lassen



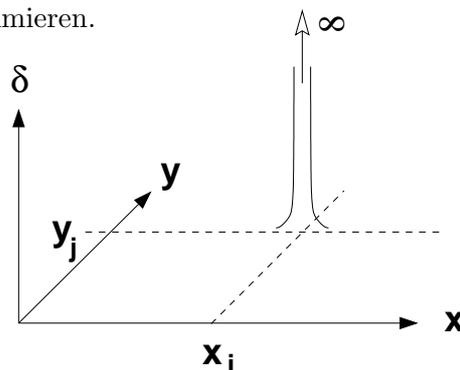
$$\int 1 \cdot \{DGL\} = \int 1[R(x, y)] = 0 .$$

An welcher Stelle die Lösung dabei die DGL erfüllt, ist nicht gesagt, jedoch können sich eventuelle Abweichungen nur so einstellen, daß sie sich zu null summieren.

Finite-Differenzen-Methode

Hier wird folgende Gewichtsfunktion verwendet:

$$G(x, y) = \delta_{ij} = \text{Delta-Dirac-Funktion}$$



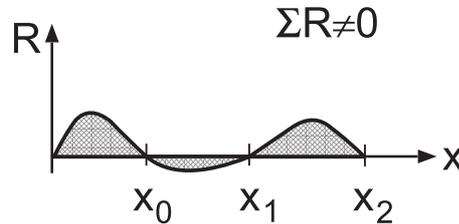
per Definition gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{ij} dx dy = 1 ,$$

und somit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{ij} \{DGL\} dx dy = DGL .$$

Die **Finite-Differenzen-Methode** versucht das Residuum an diskreten (endlich vielen) Stellen verschwinden zu lassen. Der Residuenverlauf zwischen den Kontrollpunkten bleibt unbeeinflusst, insbesondere können sich die Residuen zu einer von null verschiedenen Resultierenden aufsummieren, woraus erhebliche Kontinuitätsdefekte entstehen.



Finite-Elemente-Methode

Bei der Galerkin oder Finite-Elemente-Methode geht man von folgender Gewichtsfunktion aus:

$$G(x, y) = \text{gesuchte Lösung (z.B. } \rho u(x, y) = G(x, y))$$

$$\rightarrow \int f(x, y) \{DGL \text{ in } f(x, y)\} dx dy = 0 .$$

Die **Methode der Finiten-Elemente** versucht ebenfalls eine Residuenresultierende verschwinden zu lassen. Dabei gehen die einzelnen Residuen jedoch mit unterschiedlich starkem Gewicht ein. (Das Skalarprodukt zwischen der Lösungsfunktion f und dem Residuum muß verschwinden \rightarrow Orthogonalität von f und R !).

3.3 Kontroll-Volumen-Formulierung

Die Diskretisierung einer Differentialgleichung mit Hilfe der Finite-Volumen-Methode basiert auf einem sog. Kontrollvolumen (KV) und erfolgt nach diesem Schema:

- Zerlege das Rechengebiet in KV, so daß jeder Gitterpunkt von einem KV umgeben ist.
- Integriere die Differentialgleichung über jedes KV.
- Verwende stückweise Profile für ϕ zur Auswertung der Integrale.
- Ergebnis ist die Diskretisierungsgleichung, die ϕ -Werte für eine Gruppe von Punkten enthält.

Die so erhaltene Diskretisierungsgleichung drückt das Erhaltungsprinzip für ϕ im Kontrollvolumen aus. Daher ist für Erhaltungsgrößen wie Masse, Energie, etc. die integrale Bilanz in jedem (Teil-)Volumen erfüllt.

Illustratives Beispiel

Beobachten wir die KV-Formulierung an einem einfachen Beispiel. Die eindimensionale stationäre Wärmeleitung (vergleiche Kapitel 4.1) lautet:

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S = 0 . \quad (3.5)$$

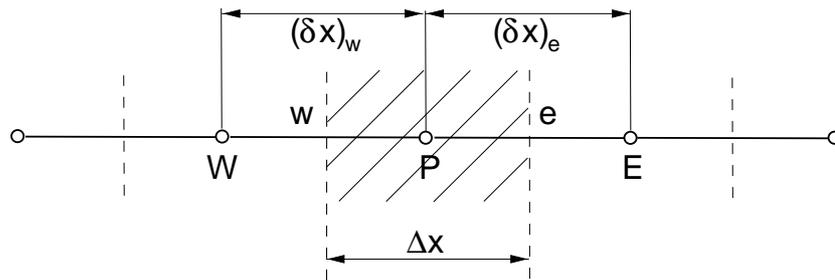


Abbildung 6: Allgemeines Gitter

- Festlegung eines Gitters:

Die Benennung benachbarter Punkte eines KV erfolgt nach der sog. Kompaßnotation:

P	— betrachteter (zentraler) Punkt
E	— Ost-Nachbarpunkt
W	— West-Nachbarpunkt
e	Ost-Kontrollvolumen-Wand
w	West-Kontrollvolumen-Wand
	Kontrollvolumen-Wand, nicht notwendigerweise in der Mitte zwischen zwei Punkten.

Zur Vereinfachung verwenden wir eine Einheitsdicke in y - und z -Richtung: $\Delta y = 1$, $\Delta z = 1$.

$$\rightarrow \text{Volumen } \Delta V = \Delta x \cdot 1 \cdot 1$$

- Integriere bezüglich x von w nach e :

$$\int_w^e \left[\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S \right] dx = 0, \quad (3.6)$$

$$\left(k \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(k \frac{dT}{dx} \right)_w + \int_w^e S dx = 0 \quad (3.7)$$

Bis hierher haben wir keinerlei Näherung verwendet!

- Profilannahme

An dieser Stelle muß eine Formel zur Beschreibung des T -Verlaufs zwischen den Gitterpunkten gewählt werden. Es soll die einfachste Profilannahme, die noch sinnvoll ist, verwendet werden. Naheliegend sind

Stufenprofil: Ein Stufenprofil ist nicht sinnvoll, da $\frac{dT}{dx}$ an den Kontrollvolumen-Wänden nicht definiert ist. (siehe Abbildung 7)

stückweise lineares Profil: Der Gradient ist an den Kontrollvolumen-Wänden kontinuierlich aber nicht definiert an den Gitterpunkten. Eine Berechnung dort ist aber auch nicht nötig. (siehe Abbildung 8)

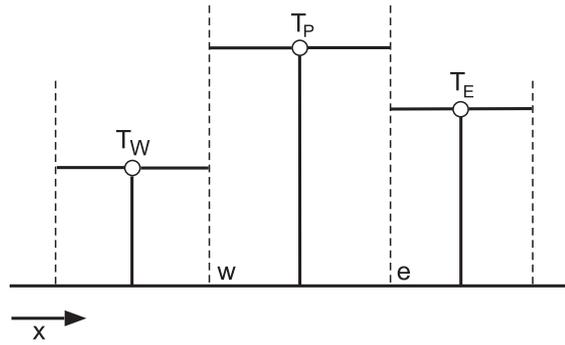


Abbildung 7: Stufenprofil

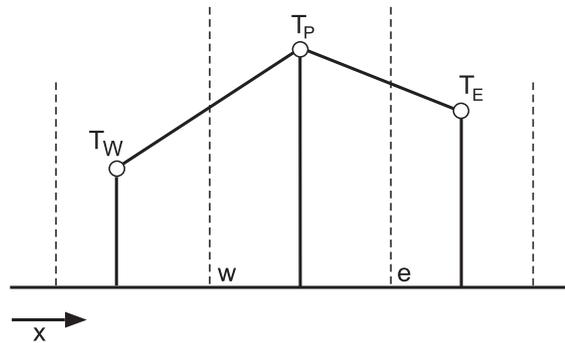


Abbildung 8: Stückweise lineares Profil

- Konstruktion der Diskretisierungsgleichung

$$\left(\frac{dT}{dx}\right)_e = \frac{T_E - T_P}{(\delta x)_e} ; \quad \left(\frac{dT}{dx}\right)_w = \frac{T_P - T_W}{(\delta x)_w} ; \quad (3.8)$$

$$\int_w^e S dx = \bar{S} \Delta x \quad (3.9)$$

\bar{S} - über Kontrollvolumen gemittelte Rate

führt auf:

$$k_e \frac{T_E - T_P}{(\delta x)_e} - k_w \frac{T_P - T_W}{(\delta x)_w} + \bar{S} \Delta x = 0 . \quad (3.10)$$

Allgemeine Form:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad (3.11)$$

mit

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e} ; \quad a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w} ; \\ a_P = a_E + a_W ; \quad b = \bar{S} \Delta x .$$

Die hier abgeleitete Form der Diskretisierungsgleichung kann als Satz von Koeffizienten für ein lineares Gleichungssystem (LGS) verstanden werden, das sich numerisch lösen läßt.

Bemerkungen:

- Gleichung (3.11) ist die Standardform der FV-Diskretisierungsgleichung mit dem (unbekannten) zentralen T_P -Term auf *LHS* sowie den Nachbarpunkten und einem konstanten Term auf *RHS*:

$$a_P T_P = \sum_{nb} a_{nb} T_{nb} + b \quad (3.12)$$

$$nb = \text{Nachbar} = E, W, S, N, T, B.$$

- Wir haben die einfachsten Profilannahmen für die Ableitung (3.8) und den Quellterm (3.9) verwendet; Andere Interpolationsfunktionen sind möglich.
- Nicht alle Terme müssen mit den gleichen Profilen ausgewertet werden. So muß z.B. \bar{S} nicht aus einer linearen S -Verteilung berechnet werden; ebensowenig k_e aus einer linearen k -Verteilung zwischen k_P und k_E .
- Selbst für eine Variable müssen nicht alle Terme der Gleichung mit derselben Profilannahme ausgewertet werden.

3.4 Leitprinzipien

Durch die Wahlfreiheit ist eine Vielfalt von Diskretisierungsformulierungen möglich. Für einen sinnvollen Einsatz sollen deshalb einige zusätzliche einschränkende Forderungen gestellt werden:

Eine Methode soll für jede Gitterpunktzahl

1. physikalisch sinnvolle Ergebnisse und
2. globale (integrale) Erhaltung liefern.

Beispiel

Globale Erhaltung in jedem (Teil-) Gebiet: d.h. in jedem Kontrollvolumen, in Gruppen von Kontrollvolumen, im ganzen Rechengebiet.

Forderung: Massen-, Wärme-, Impulsströme müssen mit entsprechenden Quellen/Senken perfekte Erhaltung ergeben; für jede Punktanzahl, nicht nur im Grenzfall für große Punktzahlen.

Die Kontrollvolumen-Formulierung ermöglicht diese Erhaltung. Jedoch ist Vorsicht geboten bei der Berechnung der Flüsse an den Wänden. Die Forderungen (physikalisch realistisch, globale Erhaltung) beeinflussen die Wahl der Profile und andere Praktiken.

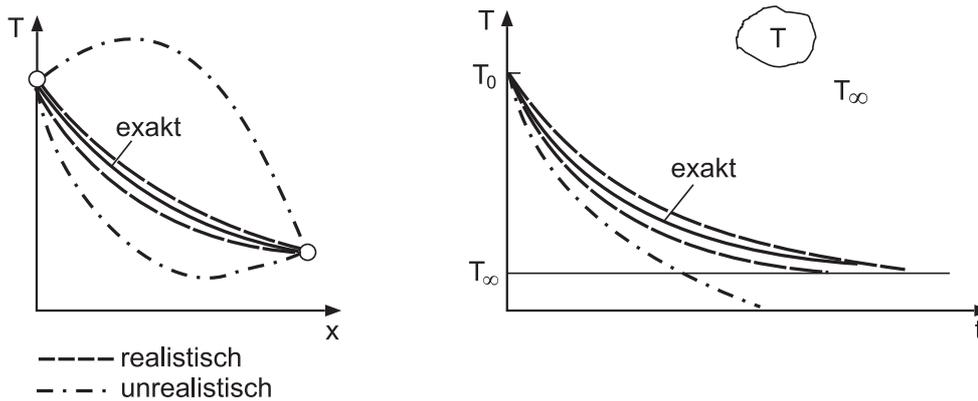


Abbildung 9: Realistische und physikalisch unsinnige Lösungen

3.5 Quelltermbehandlung

Oft gilt $S = S(T)$, wobei die Abhängigkeit des Quellterms von der lokalen Temperatur nichtlinear sein kann. Die Berücksichtigung der Abhängigkeit in der Diskretisierungsgleichung ist wünschenswert, formal ist aber nur eine lineare Abhängigkeit möglich (\rightarrow Quelltermlinearisierung; Kapitel 4.4).

$$\bar{S} = S_C + S_P T_P \quad (3.13)$$

S_C – konstanter Teil von \bar{S} ,

S_P – Koeffizient vor T_P (nicht: S ausgewertet für $T = T_P$!).

Gleichung (3.13) impliziert ein Stufenprofil für T im Kontrollvolumen, d.h. $T = T_P$ im gesamten Kontrollvolumen.

Die Quelltermlinearisierung verändert zwar die Form von (3.11) nicht, jedoch die Definition der Koeffizienten:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad (3.14)$$

mit

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e} \quad ; \quad a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w} \quad ; \quad (3.15)$$

$$a_P = a_E + a_W - S_P \Delta x \quad ; \quad b = S_C \Delta x .$$

3.6 Vier Grundregeln

Zur Sicherung von physikalisch realistischen Ergebnissen und globaler Erhaltung lassen sich vier wesentliche Grundforderungen formulieren:

Regel 1: Konsistenz an den Kontrollvolumen–Wänden.
 An einer Wand, die zu zwei benachbarten Kontrollvolumen gehört, muß der Fluß durch diese Wand durch den gleichen Ausdruck in den Diskretisierungsgleichungen für die beiden Kontrollvolumen dargestellt werden.
 Der Wärmefluß, der ein Kontrollvolumen verläßt, muß identisch sein mit dem Fluß, der in das nächste Kontrollvolumen durch die gleiche Wand eintritt. Sonst ist keine Erhaltung möglich.
 → Wandflüsse erfordern eigenständige Betrachtung.

Regel 2: Positive Koeffizienten.
 Alle Koeffizienten (a_P, a_{nb}) müssen immer positiv sein. Die Koeffizientendefinition (3.15) erfüllt Regel 2. Eine Verletzung der Regel führt i.a. auf physikalisch unrealistische Ergebnisse.

Regel 3: Quellterm-Linearisierung mit negativer Steigung.
 Wird der Quellterm durch

$$\bar{S} = S_C + S_P T_P$$

linearisiert, muß stets $S_P \leq 0$ sein. Dadurch wird die Diagonaldominanz der Matrix gesichert (verstärkt). Dies ist vor allem bei der Verwendung von Punktverfahren zur Lösung des Gleichungssystems wichtig.

Regel 4: Summe der Nachbarkoeffizienten ohne Anteile aus (beliebig behandeltem) Quellterm. Wir fordern

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb}$$

für Situationen, in denen die DGL weiter erfüllt bleibt, wenn man eine Konstante zur abhängigen Variablen addiert. Die DGL enthält oft nur Ableitungen der abhängigen Variablen T . Dann erfüllen sowohl T als auch $T + const.$ die DGL. Das muß durch die Diskretisierungsgleichung wiedergegeben werden.

Die vier Grundregeln gelten für alle (bisherigen und weiteren) Schritte. Sie sind anwendbar auf die allgemeine Variable ϕ . Sie finden ihre Begründung unter anderem in der Anwendung iterativer Lösungsverfahren (siehe Skript zu “Numerische Methoden der Thermo- und Fluidodynamik” und Kapitel 8). Der Konvektionsterm in der allgemeinen DGL (2.13) erfordert spezielle Formulierungen (→ Kapitel 5). Die anderen drei Terme werden im Rahmen der Wärmeleitung (Kapitel 4) behandelt.

4 Wärmeleitung

Probleme vom Wärmeleitungstyp sind ein bequemer Startpunkt für die Formulierung, denn die physikalischen Vorgänge sind einfach zu verstehen und mathematisch unkompliziert. Das Ziel dieses Kapitels geht jedoch weit über Wärmeleitungsprobleme hinaus. Auch andere physikalische Prozesse werden durch sehr ähnliche Gleichungen beschrieben: Potentialströmung, Diffusion, Strömung in porösen Medien, bestimmte vollausgebildete Kanalströmungen, Elektromagnetische Feldprobleme, Diffusionsmodelle für thermische Strahlung, Spaltströmungen (Schmierung),

4.1 Stationäre eindimensionale Wärmeleitung

Die Grundgleichungen

Das Beispiel in Kapitel 3 war ein Vehikel zur Erläuterung der vier Grundregeln, gleichzeitig wurde dort bereits alles abgeleitet. Deshalb hier nur eine kurze Zusammenfassung:

Die Grundgleichung

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S = 0 \quad (4.1)$$

führt auf die Diskretisierungsgleichung

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b, \quad (4.2)$$

worin

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{k_e}{(\delta x)_e} \quad ; \quad a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w} \quad ; \\ a_P &= a_E + a_W - S_P \Delta x \quad ; \quad b = S_C \Delta x . \end{aligned} \quad (4.3)$$

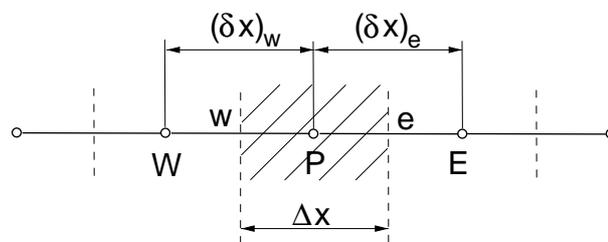


Abbildung 10: Kontrollvolumen

Die Kontrollvolumen-Wände (w, e) liegen zwischen den Gitterpunkten (W, P, E). Der genaue Ort ist willkürlich. Einige Praktiken werden später diskutiert. Der Ort wird hier einfach als bekannt vorausgesetzt. Die Größen S_C, S_P resultieren aus der Quellterm-Linearisierung:

$$\bar{S} = S_C + S_P T_P . \quad (4.4)$$

Die Profilannahmen waren ein stückweise lineares $T(x)$ -Profil für den Gradienten $\frac{dT}{dx}$ und ein stückweise konstantes Profil $T = T_P$ für den linearisierten Quellterm. Andere Profile sind möglich und erlaubt, solange die vier Grundregeln nicht verletzt werden.

Es folgen einige weitere wichtige Gesichtspunkte des eindimensionalen Wärmeleitungsproblems.

4.2 Variable (Wärme-) Leitfähigkeit

Bei variabler Leitfähigkeit ist i.a. der Wert von k nur an den Gitterpunkten W, P, E usw. bekannt. Benötigt wird eine Vorschrift zur Berechnung von z.B. k_e aus diesen Werten. Eine simple lineare Interpolation zwischen Gitterpunkten ist z.B.:

$$k_e = f_e k_P + (1 - f_e) k_E \quad (4.5)$$

mit

$$f_e = \frac{(\delta x)_{e+}}{(\delta x)_e}. \quad (4.6)$$

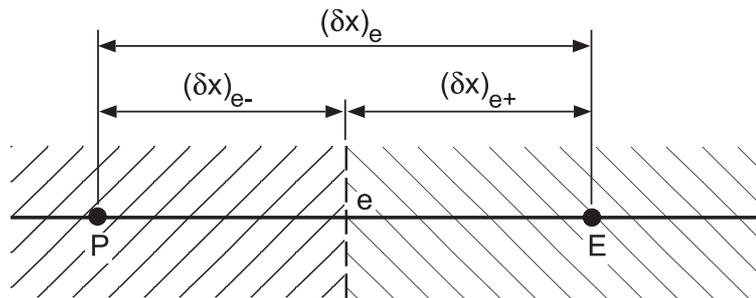


Abbildung 11: Interpolation auf die Kontrollvolumenränder

Für e in der Mitte zwischen P und E ist $f_e = 0.5$, und k_e ist das arithmetische Mittel aus k_P und k_E . Dies erweist sich in bestimmten Fällen als nachteilig, insbesondere bei abrupten Änderungen in inhomogenen Medien.

Eine bessere Alternative folgt aus der Überlegung, daß nicht der lokale Wert der Leitfähigkeit am Kontrollvolumen-Rand interessiert, sondern in erster Linie eine gute Darstellung des Wärmeflusses q_e am Rand gesucht ist:

$$q_e = \frac{k_e}{(\delta x)_e} (T_P - T_E). \quad (4.7)$$

Betrachtet man jedes KV als jeweils gefüllt mit einem Material konstanter Leitfähigkeit, dann ergibt sich aus einer lokalen Betrachtung:

$$q_e = \frac{T_P - T_E}{\frac{(\delta x)_{e-}}{k_P} + \frac{(\delta x)_{e+}}{k_E}}. \quad (4.8)$$

Damit ist

$$k_e = \left(\frac{1 - f_e}{k_P} + \frac{f_e}{k_E} \right)^{-1}. \quad (4.9)$$

Falls e wieder in der Mitte zwischen P und E liegt ($f_e = 0.5$), dann ist

$$k_e^{-1} = 0.5(k_P^{-1} + k_E^{-1}) \quad \longrightarrow \quad k_e = \frac{2k_P k_E}{k_P + k_E} \quad (4.10)$$

Das ist das harmonische Mittel.

Damit ergibt sich für den Koeffizienten a_E

$$a_E = \left[\frac{(\delta x)_{e-}}{k_P} + \frac{(\delta x)_{e+}}{k_E} \right]^{-1} \quad (4.11)$$

und somit ist $\frac{1}{a_E}$ die Summe der Wärmeleitungswiderstände für das Material zwischen P und E .

Diskussion der beiden Ausdrücke

Für kleine Änderungen sind beide gleich gut geeignet.
Behandlung der Grenzfälle:

- 1) $k_P \rightarrow 0$ harmonisch: $k_e \rightarrow 0$
 (arithmetisch: $k_e = \frac{1}{2}k_E$)

Der Wärmefluß am Rand eines Isolators wird beim harmonischen Mittel Null, wie es sein sollte. Das arithmetische Mittel ergibt $Fluß \neq 0$.

- 2) $k_P \gg k_E$ harmonisch: $k_e = 2k_E$
 (arithmetisch: $k_e = \frac{1}{2}k_P$)

Die Wandleitfähigkeit k_e ist nicht von k_P abhängig. Ein Material hoher Wärmeleitfähigkeit bietet keinen Widerstand im Vergleich zum Material E (das arithmetische Mittel würde nur den Effekt von k_P auf k_e widerspiegeln). Der Faktor 2 kommt aus der Verwendung eines nominellen Gradienten $\frac{\Delta T}{\Delta x}$ statt des wirklichen Gradienten:

$$q_e = \frac{k_E}{(\Delta x)_{e+}} (T_P - T_E) . \quad (4.12)$$

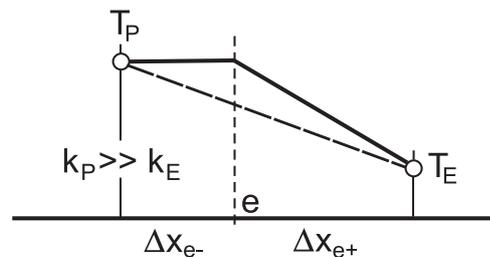


Abbildung 12: Interpolation bei extrem verschiedenen Wärmeleitfähigkeiten

Einen Temperaturabfall gibt es lediglich im Kontrollvolumen E ; das Kontrollvolumen P ist praktisch isotherm.

Fazit: Das harmonische Mittel gibt bessere Ergebnisse für stark veränderliches k . Die Formel hat einige weitere nützliche Eigenschaften, die später erläutert werden.

Die Verwendung des harmonischen Mittels führt zu geänderten Profilannahmen (Abbildung 13).

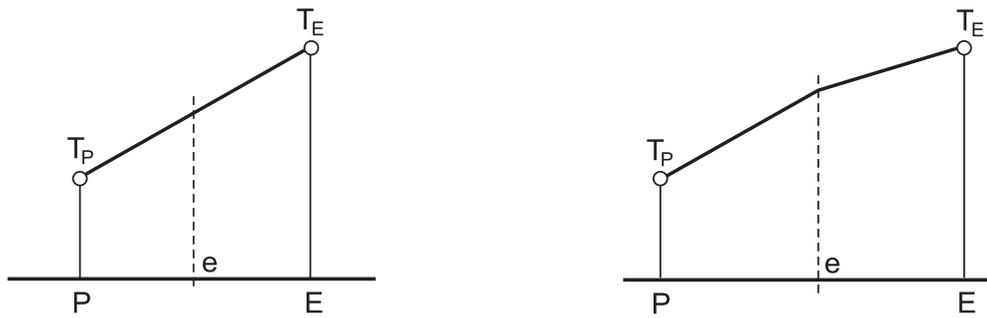


Abbildung 13: Veränderte Profilannahmen

4.3 Nichtlinearität

Nur lineare Gleichungen können bequem gelöst werden:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b. \quad (4.13)$$

Für lineare Gleichungen sind a_P , a_E , a_W , b konstant. Wenn $k = k(T)$ oder S eine nichtlineare Funktion von T ist, ist ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen, denn a_P , a_E , ... sind dann von T abhängig. Solche Situationen werden durch Iteration behandelt:

1. Schätze T für alle Gitterpunkte.
2. Berechne Koeffizienten a_P , a_E , ... mit diesen Temperaturen.
3. Löse das Gleichungssystem und erhalte T .
4. Nimm neues T als besseren Schätzwert und gehe nach 2. Wiederhole Prozeß bis sich T nicht mehr (signifikant) ändert.

Die schließlich konvergierte Lösung ist die Lösung des nichtlinearen Problems. Fehlschläge des Iterationsprozesses nennt man **Divergenz**, erkennbar z.B. durch stetiges oder oszillierendes Abdriften der Iteration. Die Beachtung der vier Grundregeln minimiert die Gefahr der Divergenz.

4.4 Quellterm–Linearisierung

Wenn S von T abhängt, schreiben wir den Quellterm

$$\bar{S} = S_C + S_P T_P, \quad (4.14)$$

denn erstens erlaubt unser nominell lineares Rahmenwerk nur formal lineare Abhängigkeit, und zweitens ist die Berücksichtigung linearer Abhängigkeit besser als die Annahme $S = const$. Falls S eine nichtlineare Funktion von T ist, müssen wir linearisieren, d.h. S_C und S_P angeben, die ihrerseits wieder von T abhängen können: \rightarrow dies erfordert iterative Neuberechnung. Die Linearisierung sollte die $S - T$ -Beziehung gut repräsentieren. Außerdem muß die Grundregel über nichtpositives S_P beachtet werden (Regel 3). Prinzipiell sind viele Arten der Aufspaltung von \bar{S} in S_C und S_P denkbar.

Beispiele für mögliche Quellterm-Linearisierungen:

1. $S = 400$ dann $S_C = 400, \quad S_P = 0$

2. $S = 3 - 5T$ dann $S_C = 3, \quad S_P = -5$

3. $S = 7 + 9T$ dann $S_C = 7 + 9T_P^*, \quad S_P = 0$

nicht empfehlenswert: $S_C = 7, \quad S_P = 9$

T_P^* ist der Startwert oder der Wert aus der vorangegangenen Iteration.

4. $S = 3 - 6T^5$ verschiedene Möglichkeiten:

4.1 $S_C = 3 - 6T_P^{*5}, \quad S_P = 0$

”lazy-person approach” für komplizierte Quellterme.

4.2 $S_C = 3, \quad S_P = -6T_P^{*4}$

nicht falsch, aber nicht die beste Darstellung von S

4.3 Empfehlung: Ausdrücken von $\bar{S} = S_C + S_P$

durch die Tangente (Taylorreihen-Entwicklung):

$$\bar{S} = \bar{S}^* + \left(\frac{d\bar{S}}{dT} \right)^* (T_P - T_P^*);$$

hier: $S = 3 - 6T^5$:

$$\bar{S} = 3 - 6T_P^{*5} - 30T_P^{*4}(T_P - T_P^*)$$

$$= 3 + 24T_P^{*5} + (-30T_P^{*4})T_P$$

$$S_C = 3 + 24T_P^{*5}, S_P = -30T_P^{*4}$$

4.4 Auch möglich:

$$S_C = 3 + 27T_P^{*5}, S_P = -33T_P^{*4}$$

→ alle Möglichkeiten sind prinzipiell zulässig, da alle bei Konvergenz denselben Quellterm darstellen. Sie beeinflussen aber das Konvergenzverhalten (Abbildung 14).

4.3 ergibt optimale Konvergenz; 4.1, 4.2 können divergieren; 4.4 konvergiert sehr langsam.

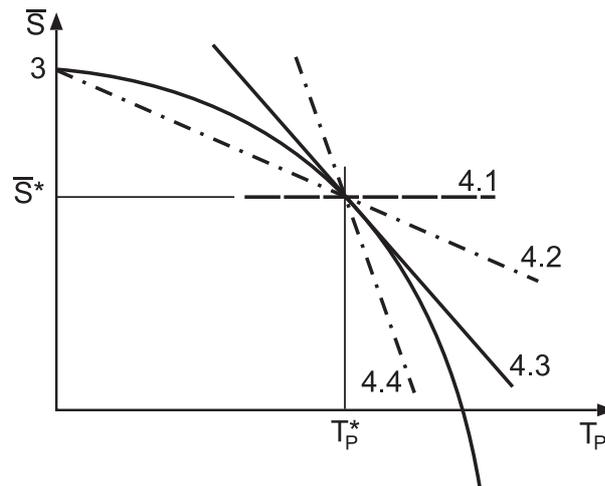


Abbildung 14: Quelltermlinearisierung und Konvergenzverhalten

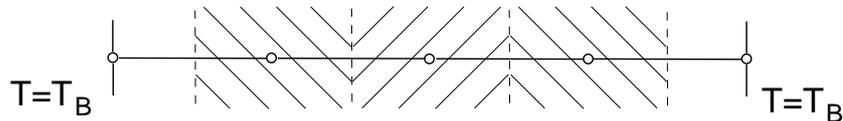


Abbildung 15: Innere Kontrollvolumen

4.5 Randbedingungen

Für jeden inneren Punkt haben wir eine Diskretisierungsgleichung für die Temperatur an diesem Punkt aus der Gleichung für das entsprechende Kontrollvolumen (siehe Abbildung 15). Wenn Randtemperaturen gegeben sind, werden keine zusätzlichen Gleichungen benötigt.

Typische Randbedingungen sind:

1. Randtemperatur T_B gegeben.
2. Randwärmefluß q_B gegeben.
3. Randwärmefluß als eine (lineare) Funktion von T_B gegeben.

Für 2. und 3. muß eine zusätzliche Gleichung konstruiert werden (Beispiel linker Rand, Abbildung 16):

Integration der Differentialgleichung über das "halbe" Kontrollvolumen am Rand ergibt die Halb-Kontrollvolumen-Gleichung:

$$q_B - q_i + (S_C + S_P T_B) \Delta x = 0 . \quad (4.15)$$

(Beachte: $q = -k \frac{dT}{dx}$). Der Wärmefluß q_i kann geschrieben werden als

$$q_i = k_i \frac{T_B - T_I}{(\delta x)_i} , \quad (4.16)$$

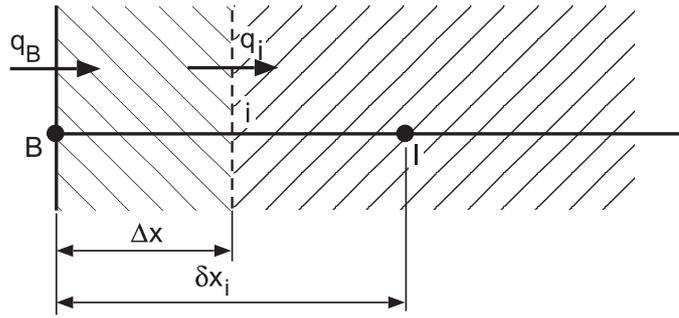


Abbildung 16: Linker Rand

womit sich ergibt:

$$q_B - \frac{k_i}{(\delta x)_i} (T_B - T_I) + (S_C + S_P T_B) \Delta x = 0 . \quad (4.17)$$

Das weitere Vorgehen hängt davon ab, wie der Randwärmefluß q_B gegeben ist. Falls q_B selbst gegeben ist, ergibt sich die Diskretisierungsgleichung zu:

$$a_B T_B = a_I T_I + b , \quad (4.18)$$

mit

$$a_I = \frac{k_i}{(\delta x)_i} \quad ; \quad b = S_C \Delta x + q_B ; \quad (4.19)$$

$$a_B = a_I - S_P \Delta x .$$

Falls q_B als lineare Funktion der Randtemperatur T_B gegeben ist:

$$q_B = f_C + f_P T_B , \quad (4.20)$$

wie z.B. bei konvektivem Wärmeübergang: $q_B = h(T_\infty - T_B)$, dann erhalten wir für (4.18) die Koeffizienten

$$a_I = \frac{k_i}{(\delta x)_i} \quad ; \quad b = S_C \Delta x + f_C \quad (4.21)$$

$$a_B = a_I - S_P \Delta x - f_P .$$

Für den linearen Wärmefluß fordern wir genau wie für den linearisierten Quellterm, daß $f_P \leq 0$ ist, damit f_P einen positiven Beitrag zum (Diagonalelement-) Koeffizienten a_B liefert.

Falls q_B eine nichtlineare Funktion von T_B ist, linearisieren wir q_B nach den gleichen Regeln wie für den Quellterm (Taylorreihen-Entwicklung):

$$q_B = q_B^* + \left(\frac{dq_B}{dT_B} \right)^* (T_B - T_B^*) ; \quad (4.22)$$

womit wir für (4.20) erhalten:

$$f_C = q_B^* - \left(\frac{dq_B}{dT_B} \right)^* T_B^* , \quad (4.23)$$

$$f_P = \left(\frac{dq_B}{dT_B} \right)^* .$$

Beispiel: Konvektiver und Strahlungs-Wärmeübergang:

$$q_B = 5(T_\infty - T_B) + 2(T_\infty^4 - T_B^4) \quad (4.24)$$

ergibt

$$f_C = 5T_\infty + 2T_\infty^4 + 6T_B^{*4}, \quad f_P = -(5 + 8T_B^{*3}) \quad (4.25)$$

Zusammenfassung

Bei gegebener Randtemperatur T_B verwenden wir den Wert direkt. Wenn der Wärmefluß q_B gegeben ist, entweder konstant oder als Funktion der Temperatur T_B , dann erzeugen wir aus der Halb-Kontrollvolumengleichung (4.15) eine zusätzliche Gleichung (4.18) für die Unbekannte T_B .

Die Halb-Kontrollvolumengleichung findet auch Verwendung, wenn die Randtemperatur T_B gegeben ist. Wir berechnen damit den unbekanntes Rand-Wärmefluß q_B :

$$q_B = \frac{k_i}{(\delta x)_i} (T_B - T_I) - (S_C + S_P T_B) \Delta x . \quad (4.26)$$

Beachte: Gradienten-Randbedingungen werden nicht über eine Approximation des Gradienten aus den Gitterpunktwerten dargestellt. Wir machen eine Wärmebilanz und verwenden den Gradienten direkt.

4.6 Instationäre eindimensionale Wärmeleitung

Die allgemeine Diskretisierungsgleichung

Zunächst konzentrieren wir uns auf den instationären Term und lassen den Quellterm weg:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (4.27)$$

mit $\rho c = \text{const.}$ als Voraussetzung, wobei diese mit im Diffusionskoeffizient k zusammengefasst ist.

Die Zeit ist eine einseitig gerichtete Koordinate, also ist ein Fortschritungsverfahren in Zeitrichtung möglich: Wir berechnen die Lösung ausgehend von der Anfangsverteilung der Temperatur. In einem typischen Zeitschritt: bei gegebenen Werten von T zur Zeit t sind T -Werte zur Zeit $t + \Delta t$ zu berechnen.

Es seien die alten Werte T_P^0 , T_E^0 , T_W^0 und die zur Zeit $(t + \Delta t)$ sind T_P^1 , T_E^1 , T_W^1 . Diskretisierungsgleichung aus Integration von (4.27) über ein Kontrollvolumen (z.B. Abbildung 10) und über ein Zeitintervall von t bis $t + \Delta t$ ist:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt . \quad (4.28)$$

Als Profilannahme für die Zeitableitung verwenden wir: der Wert von T gilt im ganzen Kontrollvolumen, d.h. $T(x) = \text{const}$:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \Delta x (T_P^1 - T_P^0) . \quad (4.29)$$

In Analogie zur stationären Wärmeleitung für $k \frac{\partial T}{\partial x}$ setzen wir:

$$\Delta x (T_P^1 - T_P^0) = \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{k_e (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} \right] dt . \quad (4.30)$$

Nun ist die Profilannahme für die zeitliche Veränderung von T_P , T_E , T_W von t bis $t + \Delta t$ gesucht. Allgemeine Darstellung einiger Möglichkeiten für $T(t) = \text{linear}$:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [f T_P^1 + (1-f) T_P^0] \Delta t \quad (4.31)$$

mit Wichtungsfaktor $0 \leq f \leq 1$. Analoges gilt für die T_E - und T_W -Integrale.

Man erhält:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x}{\Delta t} (T_P^1 - T_P^0) &= f \left[\frac{k_e (T_E^1 - T_P^1)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P^1 - T_W^1)}{(\delta x)_w} \right] \\ &+ (1-f) \left[\frac{k_e (T_E^0 - T_P^0)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P^0 - T_W^0)}{(\delta x)_w} \right] . \end{aligned} \quad (4.32)$$

Im folgenden wird der Index 1 weggelassen, d.h. T_P , T_W , T_E sind Werte zur Zeit $t + \Delta t$. Die Diskretisierungsgleichung lautet dann

$$\begin{aligned} a_P T_P &= a_E [f T_E + (1-f) T_E^0] + a_W [f T_W + (1-f) T_W^0] \\ &+ [a_P^0 - (1-f) a_E - (1-f) a_W] T_P^0 \end{aligned} \quad (4.33)$$

mit den Varianten Explizit, Crank–Nicolson und Voll Implizit:

$$f = \begin{cases} 0 & : \text{explizit} \\ 0.5 & : \text{Crank–Nicolson} \\ 1 & : \text{voll implizit} \end{cases} \quad (4.34)$$

Wir bevorzugen die voll implizite Variante.

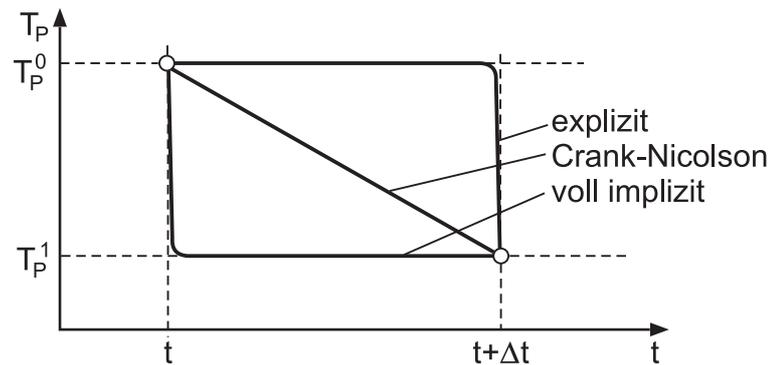


Abbildung 17: Veranschaulichung der Werte von f anhand der T - t -Verläufe

Explizit ($f = 0$) ergibt für (4.33):

$$a_P T_P = a_E T_E^0 + a_W T_W^0 + (a_P^0 - a_E - a_W) T_P^0. \quad (4.35)$$

Vor dem Hintergrund der 2. Grundregel ist zu beachten, daß der Koeffizient von T_P^0 in (4.35) negativ werden kann.

Für $k = \text{const}$ und $\Delta x = (\delta x)_e = (\delta x)_w$ muß gelten

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2k}, \quad (4.36)$$

sonst können physikalisch unsinnige Ergebnisse entstehen. (4.36) ist ein bekanntes Stabilitätskriterium für das explizite Schema. Wir haben es hier abgeleitet aus physikalischen Überlegungen auf der Basis der vier Grundregeln.

Crank–Nicolson ist bedingungslos stabil. Das bedeutet keineswegs, daß sich physikalisch realistische Ergebnisse für beliebige Zeit- und Ortsschrittweiten ergeben! Oft ergeben sich oszillierende Lösungen.

→ Ein augenscheinlich vernünftiges lineares Profil ist gut nur für kleine Zeitintervalle. Für größere Zeitschritte tendiert die im wesentlichen exponentielle Abnahme zu einem steilen Abfall am Anfang mit einem flachen Auslauf.

Das voll implizite Schema ist realitätsnäher als das Crank–Nicolson–Schema, besonders für große Δt .

Die Forderung nach stets positivem Koeffizienten von T_P^0 in (4.33) erzwingt $f = 1$. Ein voll implizites Schema ergibt immer ein physikalisch sinnvolles Verhalten.

Beachte: für kleine Δt ist Crank–Nicolson genauer.

Voll implizite Diskretisierungsgleichung

Unter Einschluß des Quellterms ergibt sich

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b, \quad (4.37)$$

mit

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e} ; \quad a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w} ; \quad a_P^0 = \frac{\Delta x}{\Delta t} .$$

$$\begin{aligned} b &= S_C \Delta x + a_P^0 T_p^0 , \\ a_P &= a_E + a_W + a_P^0 - S_P \Delta x . \end{aligned} \quad (4.38)$$

Für $\Delta t \rightarrow \infty$ ergibt sich die stationäre Diskretisierungsgleichung (4.2/4.3).

Wichtigstes Prinzip des voll impliziten Schemas ist die Gültigkeit des neuen Wertes von T_P über den ganzen Zeitschritt. Ist k_P temperaturabhängig, muß es iterativ aus T_P berechnet werden, genau wie im stationären Verfahren.

Andere Aspekte des stationären Verfahrens gelten genauso im instationären Fall: Randbedingungen, Quellterm-Linearisierung, TDMA.

Die Erweiterung auf 2 und 3 Dimensionen ist einfach, wie im folgenden Kapitel gezeigt wird.

4.7 Zwei- und dreidimensionale Situationen

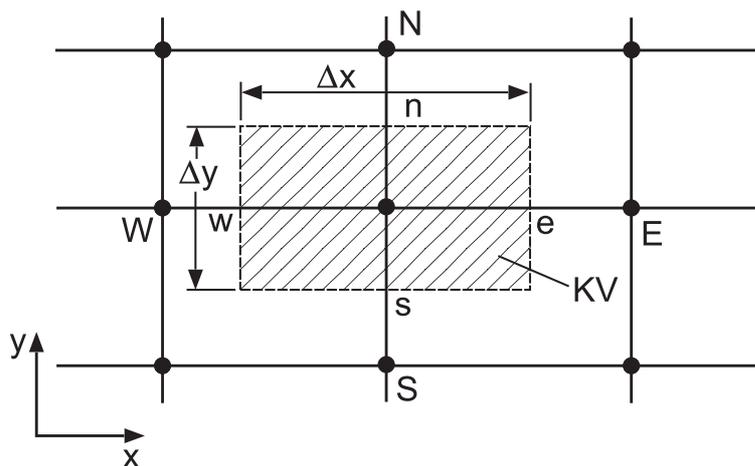


Abbildung 18: Zweidimensionaler Gitterausschnitt

Die Abbildung 18 zeigt einen Gitterausschnitt eines rechtwinkligen Gitters mit Gitterpunkt P , E und W als Nachbarn in x -Richtung, N , S (north, south) als Nachbarn in y -Richtung. Die Dicke in z -Richtung ist 1. Die Nomenklatur für Δx , $(\delta x)_e$ etc. ist analog zur eindimensionalen Situation. Der tatsächliche Ort der Kontrollvolumen-Wände ist noch offen. Die Berechnung des Wärmeflusses q_e über die Wand zwischen P und E erfolgt unter der Annahme, daß q_e konstant über der Fläche $\Delta y \times 1$ ist. Die anderen Wärmeströme werden entsprechend behandelt. Ferner werden die Gleichungen nur für rechteckige Gitter formuliert, es entstehen also keine sogenannten 'Kreuzdiffusionsterme' wie in Kapitel 7.2.

Damit wird die Differentialgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S \quad (4.39)$$

zur Diskretisierungsgleichung

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b \quad (4.40)$$

mit

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{k_e \Delta y}{(\delta x)_e} ; & a_W &= \frac{k_w \Delta y}{(\delta x)_w} ; \\ a_N &= \frac{k_n \Delta x}{(\delta y)_n} ; & a_S &= \frac{k_s \Delta x}{(\delta y)_s} ; \\ a_P^0 &= \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} ; & b &= S_C \Delta x \Delta y + a_P^0 T_P^0 ; \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y .$$

Dabei ist $\Delta x \cdot \Delta y \cdot 1$ die Größe des Kontrollvolumens.

4.7.1 Diskretisierungsgleichung für drei Dimensionen

Die Hinzunahme zweier weiterer Nachbarn B und T (bottom, top) ergibt die Diskretisierungsgleichung:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_T T_T + a_B T_B + b \quad (4.42)$$

mit

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{k_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} ; & a_W &= \frac{k_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} ; \\ a_N &= \frac{k_n \Delta x \Delta z}{(\delta y)_n} ; & a_S &= \frac{k_s \Delta x \Delta z}{(\delta y)_s} ; \\ a_T &= \frac{k_t \Delta x \Delta y}{(\delta z)_t} ; & a_B &= \frac{k_b \Delta x \Delta y}{(\delta z)_b} ; \\ a_P^0 &= \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} ; & b &= S_C \Delta x \Delta y \Delta z + a_P^0 T_P^0 ; \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y \Delta z .$$

Zur physikalischen Signifikanz der Koeffizienten:

Die Nachbarkoeffizienten können interpretiert werden als Leitfähigkeiten zwischen P und dem jeweiligen Nachbarknoten. $a_P^0 T_P^0$ ist die interne Energie (pro Δt) im Kontrollvolumen zur Zeit t . Der Term b enthält diese innere Energie und den Wärmeerzeugungsanteil aus S_C .

Der zentrale Koeffizient a_P ist die Summe aller Nachbarkoeffizienten (einschließlich des Zeitchbarkoeffizienten a_P^0) und des Beitrags des linearen Quellterms.

4.8 Lösung des algebraischen Gleichungssystems

Zur Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems

$$a_i T_i = b_i T_{i+1} + c_i T_{i-1} + d_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.44)$$

mit den Randkoeffizienten c_1 und $b_N = 0$ verwenden wir den Thomas-Algorithmus oder Tri-Diagonal-Matrix-Algorithmus TDMA.

Hier die Zusammenfassung:

1. Berechne $P_1 = \frac{b_1}{a_1}$, $Q_1 = \frac{d_1}{a_1}$

2. Berechne rekursiv

$$P_i = \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}}, \quad Q_i = \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i P_{i-1}}$$

für $i = 2, 3, \dots, N$.

3. Setze $T_N = Q_N$

4. Berechne rekursiv

$$T_i = P_i T_{i+1} + Q_i$$

für $i = N - 1, N - 2, \dots, 2, 1$.

Für die meisten Anwendungsfälle kann der TDMA-Löser jedoch nicht verwendet werden:

1. TDMA kann nicht auf einfache Weise auf zwei- und dreidimensionale Fälle erweitert werden.
2. Direkte Methoden für zwei- und dreidimensionale Fälle sind computerressourcen-intensiv.
3. Direkte Methoden besonders schlecht geeignet für nichtlineare Probleme. Iterative Methoden sind dafür besser geeignet.

4.8.1 Punkt-Gauß-Seidel-Methode

Die Konvergenz ist garantiert bei Erfüllung des Scarborough-Kriteriums

$$\frac{\sum |a_{nb}|}{|a_p|} \begin{cases} \leq 1 & \text{für alle Gleichungen} \\ < 1 & \text{für mindestens eine Gleichung} \end{cases} \quad (4.45)$$

4.8.2 Linien-Gauß-Seidel-Methode

Z.B.:

$$\underbrace{a_P T_P = a_N T_N + a_S T_S}_{\text{Tridiagonales Gleichungssystem}} + \underbrace{[a_E T_E^* + a_W T_W^*] + b}_{\text{Konstant bezüglich Lösung in S-N-Richtung}} \quad (4.46)$$

Diese Verallgemeinerung läßt sich einfach auf zwei- und dreidimensionale Situationen anwenden.

⇒ Damit ist dieses Verfahren unsere Wahl!

4.8.3 Über-Relaxation und Unter-Relaxation

Bei iterativer Lösung der algebraischen Gleichungen oder in iterativen Gesamtverfahren zur Behandlung der Nichtlinearität ist oft die Beschleunigung oder Dämpfung der Änderung der abhängigen Variablen erwünscht: Über- oder Unter-Relaxation. Über-Relaxation in Verbindung mit Punkt-Gauß-Seidel-Verfahren ist bekannt als SOR (Sukzessive Über-Relaxation). Über-Relaxation ist bei Linienverfahren wenig gebräuchlich. Unter-Relaxation ist nützlich für nichtlineare Probleme zur Vermeidung von Divergenz.

Wir gehen wieder aus von der allgemeinen Diskretisierungsgleichung

$$a_P T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b . \quad (4.47)$$

Verwendung eines Relaxationsfaktors

Aus (4.47):

$$T_P = \frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{a_P} \quad (4.48)$$

T_P^* sei der Wert von T_P aus vorangegangener Iteration.

Addition und Subtraktion von T_P^* auf der rechten Seite:

$$T_P = T_P^* + \left(\frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{a_P} - T_P^* \right) \quad (4.49)$$

Die Klammer stellt die Änderung von T_P in der Iteration dar. Modifikation durch einen Relaxationsfaktor α :

$$T_P = T_P^* + \alpha \left(\frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{a_P} - T_P^* \right) \quad (4.50)$$

oder

$$\frac{a_P}{\alpha} T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b + (1 - \alpha) \frac{a_P}{\alpha} T_P^* \quad (4.51)$$

Bei Konvergenz wird $T_P = T_P^*$, und das komplette Feld T genügt der Originalgleichung (4.47). Diese Eigenschaft muß jedes Relaxationsverfahren besitzen. Die konvergierte Lösung muß immer der Original-Diskretisierungsgleichung genügen. Für $0 < \alpha \leq 1$: Unter-Relaxation; α klein: Langsame Änderung von T_P . $\alpha > 1$: Über-Relaxation.

Relaxation durch Trägheit

$$(a_P + i) T_P = \sum a_{nb} T_{nb} + b + i T_P^* \quad (4.52)$$

Die Gleichung (4.52) läßt sich überführen in (4.51) für $i = \frac{1-\alpha}{\alpha} \sum a_{nb}$. Dabei ist i die sogenannte Trägheit:

$i > 0$: Unter-Relaxation,

$i < 0$: Über-Relaxation.

4.9 Geometrie-Betrachtungen

Lage der Kontrollvolumen-Wände

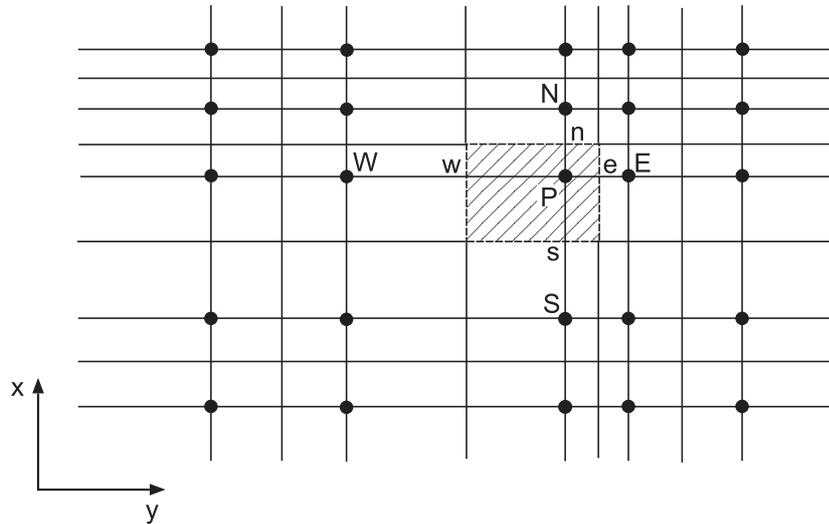


Abbildung 19: Praxis A: Wände in der Mitte zwischen den Gitterpunkten

Bei variablem Gitter liegt ein typischer Gitterpunkt P nicht im geometrischen Zentrum des Kontrollvolumens, welches ihn umgibt.

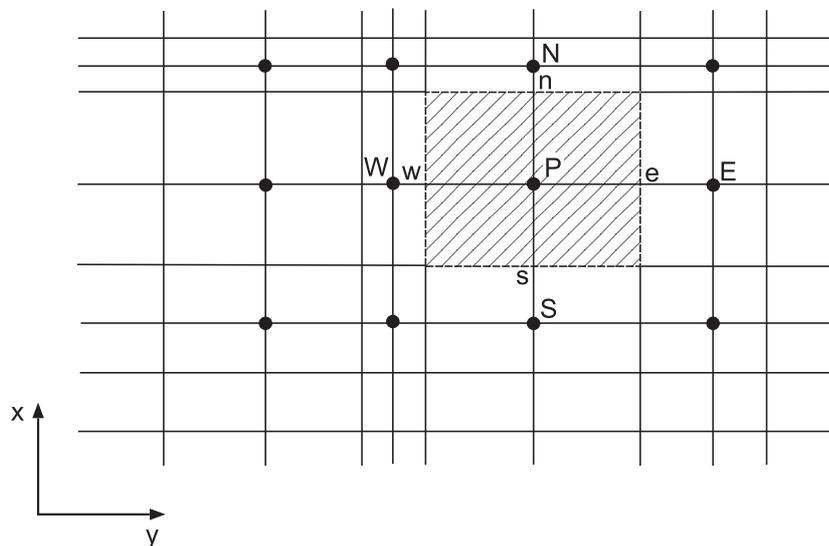


Abbildung 20: Praxis B: Gitterpunkte in der Mitte der Kontrollvolumen

Zuerst werden die Wände der Kontrollvolumina festgelegt, dann werden die Gitterpunkte in die Mitte der Kontrollvolumen gesetzt. In diesem Fall liegen bei variablem Gitter die Wände nicht in der Mitte zwischen den Gitterpunkten.

Wir verwenden Praxis B.

Bei Praxis A ergeben sich "halbe" Kontrollvolumina. Praxis B kennt nur ganze:

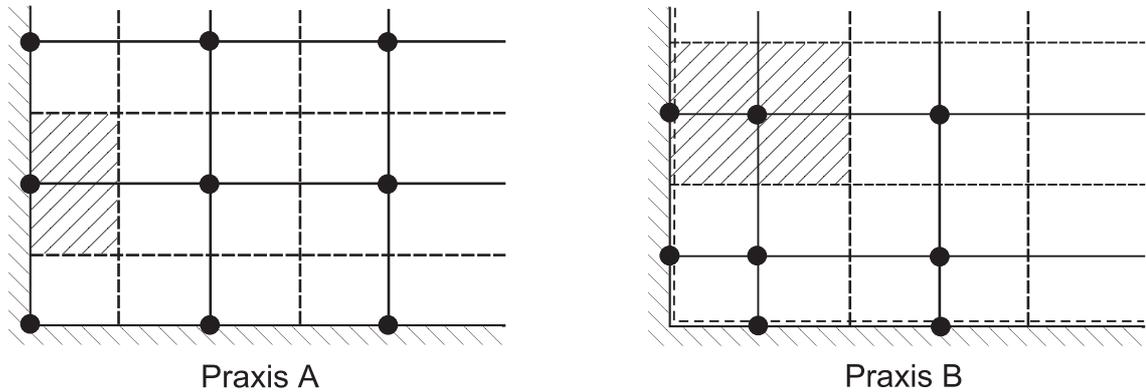


Abbildung 21: Randbereiche bei Praxis A und Praxis B

Für die Behandlung der Ränder (Randbedingungen) kann Praxis B interpretiert werden als Praxis A mit Δx bzw. $\Delta y = 0$ (Kapitel 4.5).

Andere Koordinatensysteme

Bis jetzt wurde ein kartesisches Koordinatensystem vorausgesetzt. Die Methode ist jedoch auf alle orthogonalen Koordinatensysteme, z.B. Polar–Koordinaten (r, θ) anwendbar. Das Gegenstück zu (4.39) ist hier:

$$c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{k}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + S \tag{4.53}$$

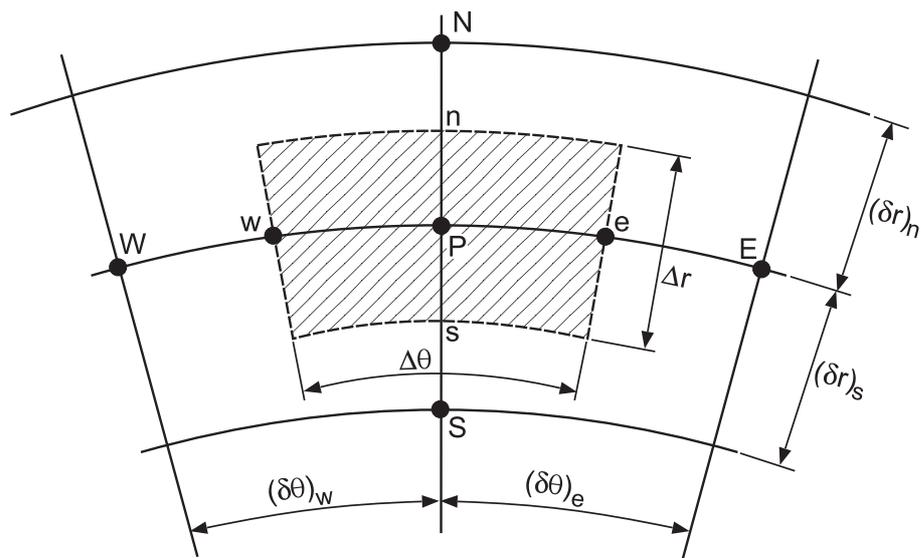


Abbildung 22: Gitter und Kontrollvolumen in (r, θ) -Koordinaten

Die z -Dicke ist 1. Die Diskretisierungsgleichung erhält man durch Multiplikation mit r und Integration über r und θ über das Kontrollvolumen (ergibt ein Volumenintegral, denn $rdrd\theta$ ergibt Volumenelemente mit Dicke 1). Mit dem Vorgehen von Kapitel 4.7 erhalten wir die Diskretisierungsgleichung:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b \quad (4.54)$$

mit

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{k_e \Delta r}{r_e (\delta\theta)_e} ; & a_W &= \frac{k_w \Delta r}{r_w (\delta\theta)_w} ; \\ a_N &= \frac{k_n r_n \Delta\theta}{(\delta r)_n} ; & a_S &= \frac{k_s r_s \Delta\theta}{(\delta r)_s} ; \\ a_P^0 &= \frac{c \Delta V}{\Delta t} ; & b &= S_C \Delta V + a_P^0 T_P^0 \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta V$$

ΔV ist das Volumen des Kontrollvolumens: $\Delta V = 0.5(r_n + r_s) \Delta\theta \Delta r$ (ΔV ist nicht notwendigerweise gleich $r_P \Delta\theta \Delta r$, außer wenn P in der Mitte zwischen n und s liegt; Praxis B).

4.10 Wärmeleitungsähnliche Probleme

Mit der bisher entwickelten Methode können nicht nur Wärmeleitungsprobleme gelöst werden, sondern auch

- Massendiffusion
- Elektromagnetische Felder
- Spezielle Strömungsprobleme, wie
 - Potentialströmung
 - Strömung in porösen Medien
 - Vollausbildete Kanalströmung

Z.B. Impulsgleichung in z -Richtung, stationär

$$\rho u \frac{\partial w}{\partial x} + \rho v \frac{\partial w}{\partial y} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{d\bar{p}}{dz} . \quad (4.56)$$

Einfache ($u = v = 0$) voll ausgebildete ($\partial w / \partial z = 0$) Strömungen führen auf:

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) - \frac{d\bar{p}}{dz} . \quad (4.57)$$

(4.57) ist eine Gleichung vom Wärmeleitungstyp, wenn $\phi = w$, $\Gamma = \mu$, $S = -\frac{d\bar{p}}{dz}$ gesetzt wird.

Z.B. Voll ausgebildeter Wärmeübergang

Energiegleichung für kleine Mach-Zahlen, stationär, ohne Dissipation:

$$\rho c_p \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) . \quad (4.58)$$

Unter den Annahmen $c_p = const$, Vernachlässigung der axialen Wärmeleitung, einfache Strömungen ($u = v = 0$), voll ausgebildete axiale Strömung erhält man:

$$\rho c_p w \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right). \quad (4.59)$$

Gleichung (4.59) ist vom Wärmeleitungstyp, wenn man setzt:

$$\phi = T, \quad \Gamma = k, \quad S = -\rho c_p w \frac{\partial T}{\partial z}.$$

Man kann daher einfache vollausbildete Strömungen mit vollausbildetem Wärmeübergang wie ein Wärmeleitungsproblem behandeln, wenn man die axiale Strömung formal als Quellterm in der Energiegleichung behandelt. Der Gradient $\partial T / \partial z$ muß bekannt oder berechenbar sein (möglich für bestimmte in z -Richtung ähnliche Temperaturprofile). Außerdem muß die w -Verteilung bekannt sein, z.B. als Lösung des voll ausgebildeten Strömungsproblems (4.57).

5 Konvektion und Diffusion

Bisher haben wir folgende Schritte durchgeführt: Überführung der allgemeinen Differentialgleichung mit dem instationären Term, dem Diffusionsterm und dem Quellterm in eine Diskretisierungsgleichung. Die bisherige Ableitung für Wärmeleitung mit Temperatur T und Wärmeleitfähigkeit k kann einfach umgeschrieben werden für eine allgemeine Variable ϕ und ihren Diffusionskoeffizienten Γ . Der bisher weggelassene Konvektionsterm wird hinzugenommen. Die Lösungsmethoden für algebraische Gleichungen können weiter verwendet werden, solange die Hinzunahme des Konvektionsterms die Form der Diskretisierungsgleichung nicht verändert.

Konvektion wird durch Strömung eines Fluids verursacht. In diesem Kapitel suchen wir eine Lösung für ϕ in einem gegebenen Strömungsfeld (d.h. gegebene Geschwindigkeiten und Dichte).

Obwohl Konvektion der einzige neue Term ist, ist seine Formulierung nicht trivial. Konvektion ist untrennbar mit Diffusion verbunden; beide Terme müssen daher zusammen behandelt werden. Diffusion ist hier im allgemeinen Sinn gemeint: der Diffusionsstrom der allgemeinen Variablen ϕ ist $-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$. Die allgemeine Transportgleichung enthält den Term $\frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$, der als Diffusionsterm bezeichnet wird (Beachte: Summation über j , daher Summe aus 3 Komponenten). Gleiches gilt für den Konvektionsterm $\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \phi)$.

Das Strömungsfeld muß die Kontinuitätsgleichung erfüllen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 . \quad (5.1)$$

Die allgemeine Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S \quad (5.2)$$

kann umgeschrieben werden zu

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S . \quad (5.3)$$

5.1 Standardverfahren

Betrachte eine stationäre, eindimensionale Situation mit ausschließlich Konvektion und Diffusion. Die Bilanzgleichung ist dann

$$\frac{d}{dx} (\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) , \quad (5.4)$$

mit u als Geschwindigkeit in x -Richtung. Die Kontinuitätsgleichung ist dann

$$\frac{d}{dx} (\rho u) = 0 \quad \text{oder} \quad \rho u = \text{const} . \quad (5.5)$$

Die Ableitung der Diskretisierungsgleichung erfolgt anhand der bekannten 3-Punkte-Anordnung. Der tatsächliche Ort der Kontrollvolumen-Wände ist unerheblich für die abschließende Formulierung. Aus Bequemlichkeit verwenden wir Praxis A (Kontrollvolumen-Wände in der Mitte).

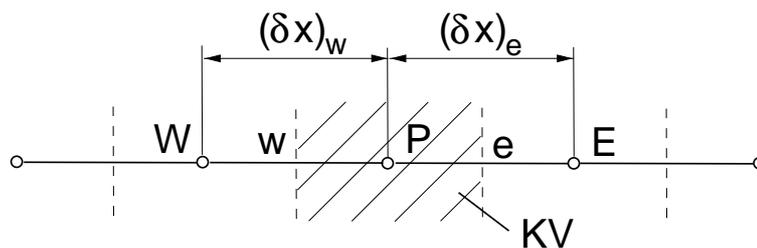


Abbildung 23: Kontrollvolumen

5.1.1 Das Zentral-Differenzen-Schema (CDS)

Integration von Gleichung (5.4) über das Kontrollvolumen ergibt

$$(\varrho u \phi)_e - (\varrho u \phi)_w = \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w . \quad (5.6)$$

Im letzten Kapitel wurde die Darstellung des Terms $\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}$ über ein stückweise lineares Profil für ϕ eingeführt. Das gleiche Vorgehen für den Konvektionsterm ist zunächst naheliegend. Man erhält

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) \quad \text{und} \quad \phi_w = \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_w) . \quad (5.7)$$

Damit ergibt sich aus Gleichung (5.6):

$$\frac{1}{2}(\varrho u)_e(\phi_E + \phi_P) - \frac{1}{2}(\varrho u)_w(\phi_P + \phi_W) = \frac{\Gamma_e}{(\delta x)_e}(\phi_E - \phi_P) - \frac{\Gamma_w}{(\delta x)_w}(\phi_P - \phi_W) , \quad (5.8)$$

wobei die Werte von Γ_e und Γ_w gemäß Kapitel 4.2 berechnet werden.

Wir definieren

$$F = \varrho u \quad \text{und} \quad D = \frac{\Gamma}{(\delta x)} . \quad (5.9)$$

Beachte: D ist stets positiv, F kann positiv oder negativ sein, abhängig von der Strömungsrichtung. Mit (5.9) erhalten wir eine kompaktere Formulierung

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (5.10)$$

mit

$$\begin{aligned} a_E &= D_e - \frac{F_e}{2} ; & a_W &= D_w + \frac{F_w}{2} ; \\ a_P &= D_e + \frac{F_e}{2} + D_w - \frac{F_w}{2} = a_E + a_W + (F_e - F_w) . \end{aligned} \quad (5.11)$$

Aus Kontinuitätsgründen ($F_e = F_w$, und vierte Grundregel) gilt $a_P = a_E + a_W$. Die Diskretisierungsgleichung (5.10) beinhaltet ein stückweise lineares Profil für ϕ . Dieses ist auch bekannt als Zentral-Differenzen-Schema (CDS) und ist von 2. Ordnung genau.

Einfaches, lehrreiches Beispiel

$$D_e = D_w = 1, \quad F_e = F_w = 4.$$

Wenn ϕ_E und ϕ_W gegeben sind, kann ϕ_P aus (5.10) berechnet werden:

$$\text{a) } \phi_E = 200 \quad \text{und} \quad \phi_W = 100 \quad \rightarrow \quad \phi_P = 50 !$$

$$\text{b) } \phi_E = 100 \quad \text{und} \quad \phi_W = 200 \quad \rightarrow \quad \phi_P = 250 !$$

Da ϕ_P nur innerhalb des durch die Nachbarn vorgegebenen Intervalls liegen kann, sind diese Ergebnisse unrealistisch.

Aus (5.11) ist erkennbar: Die Koeffizienten können negativ werden. Wenn $|F| > 2D$, dann kann a_E abhängig vom Vorzeichen von F negativ werden. Das verletzt Grundregel 2 (positive Koeffizienten). Negative Koeffizienten bedeuten ebenfalls, daß

$$a_P = \sum a_{nb} < \sum |a_{nb}|,$$

was das Scarborough-Kriterium verletzt. Damit kann eine Lösung durch Punktiteration divergieren.

Die vorläufige Formulierung führt auf eine unakzeptable Diskretisierungsgleichung. Eine bessere Formulierung ist gesucht!

5.1.2 Das Upwind-Schema (UDS)

Eine bekannte Umgehungsmöglichkeit ist das Upwind-Schema (aufstromgewichtete Differenzen, upwind differences, upstream differences, donor-cell method), bekannt seit 1952.

Der Schwachpunkt der vorläufigen Formulierung war die Annahme, daß die konvektiv transportierte Größe ϕ_e an der Kontrollvolumen-Wand das Mittel aus ϕ_E und ϕ_P ist. Das Upwind-Schema macht eine bessere Vorschrift: Der Diffusionsterm bleibt unverändert, der Konvektionsterm wird berechnet mit der Annahme: der Wert von ϕ an einer Zwischenstelle ist gleich dem Wert von ϕ am Gitterpunkt auf der Seite stromauf der Zwischenstelle.

Also

$$F_e > 0 \quad : \quad \phi_e = \phi_P \tag{5.12}$$

$$F_e < 0 \quad : \quad \phi_e = \phi_E$$

ϕ_w wird analog definiert.

Mit Verwendung des FORTRAN-Operators $\text{MAX}(A,B) = \llbracket A, B \rrbracket$ kann man kompakt schreiben

$$F_e \phi_e = \phi_P \llbracket F_e, 0 \rrbracket - \phi_E \llbracket -F_e, 0 \rrbracket. \tag{5.13}$$

Damit wird die Diskretisierungsgleichung zu

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \tag{5.14}$$

mit

$$\begin{aligned}
 a_E &= D_e + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket ; a_W = D_w + \llbracket F_w, 0 \rrbracket ; \\
 a_P &= D_e + \llbracket F_e, 0 \rrbracket + D_w + \llbracket -F_w, 0 \rrbracket \\
 &= a_E + a_W + (F_e - F_w) .
 \end{aligned}
 \tag{5.15}$$

Offensichtlich ergibt (5.15) keine negativen Koeffizienten. → Die Lösung ist stets physikalisch realistisch. Das Scarborough-Kriterium ist erfüllt, jedoch ergibt sich gegenüber dem CDS eine Reduktion der Fehlerordnung von 2. zu 1. Ordnung.

5.1.3 Das Exponential-Schema (ES)

Die Grundgleichung (5.4) kann analytisch gelöst werden, wenn $\Gamma = const$ (ρu ist bereits konstant wegen (5.5)). In einem Gebiet $0 \leq x \leq L$ mit den Randbedingungen

$$x = 0 \quad : \quad \phi = \phi_0 \tag{5.16}$$

$$x = L \quad : \quad \phi = \phi_L$$

ist die Lösung von (5.4):

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{\exp\left(\frac{Px}{L}\right) - 1}{\exp(P) - 1} \tag{5.17}$$

mit der Peclet-Zahl

$$P = \frac{\rho u L}{\Gamma} . \tag{5.18}$$

P ist das Verhältnis der Stärken von Konvektion und Diffusion. Die Natur der exakten Lösung wird klar anhand der graphischen Darstellung (Abbildung 24).

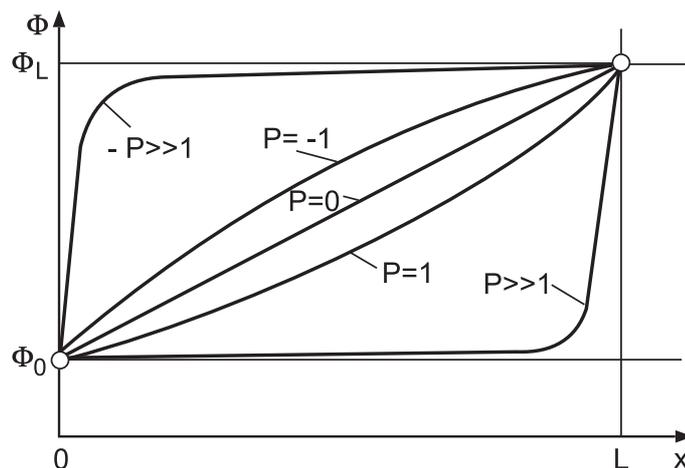


Abbildung 24: Exakte Lösung

- Grenzfall $P = 0$: reine Diffusion (oder Leitung), linearer ϕ - x -Verlauf.

- Strömung in positiver x -Richtung (d.h. $P > 0$): Der ϕ -Wert ist mehr beeinflusst durch den Wert ϕ_0 von stromauf.
- Große positive P -Werte: der ϕ -Wert im größten Teil des Gebiets liegt nahe beim Wert ϕ_0 von stromauf.
- Und umgekehrt für Strömung in negativer x -Richtung.

Die Konsequenzen für ein angemessenes $\phi(x)$ -Profil zwischen den Gitterpunkten, die sich aus der Betrachtung der exakten Lösung des Konvektions-Diffusions-Problems in Abbildung 24 ergeben, sind:

Die Annahmen aus der vorherigen Ableitung für UDS versagen, da das $\phi(x)$ -Profil in der Regel sowohl weit entfernt ist von einem linearen Verlauf (mit Ausnahme kleiner Werte von $|P|$), als auch weit entfernt ist von einem konstanten Wert (mit Ausnahme großer Werte von $|P|$). Für große $|P|$ ist $\phi(x = \frac{L}{2})$ ungefähr gleich dem ϕ -Wert stromauf. Dies ist zwar genau die Annahme des Upwind-Schemas für den konvektiven Term, das UDS verwendet jedoch diesen konstanten Verlauf für alle Werte von $|P|$, also nicht nur für große, so dass für kleine $|P|$ die Konvektion überbewertet wird. Für große $|P|$ ist $\frac{d\phi}{dx}(x = \frac{L}{2}) \approx 0$, d.h. es gibt fast keine Diffusion, trotzdem berechnet das UDS den Diffusionsterm stets vom linearen $\phi(x)$ -Profil ausgehend (siehe Gleichung 5.15) und überbewertet folglich die Diffusion für große $|P|$ -Werte. Man sagt daher im Allgemeinen, dass sich das UDS zu diffusiv verhält.

Eine Diskretisierungsgleichung, abgeleitet aus der exakten Lösung, hätte keine dieser Schwächen. Das zugehörige Schema heißt

Das Exponential-Schema (ES).

Betrachte den totalen Fluß J , der aus dem Konvektionsfluß $\rho u \phi$ und dem Diffusionsfluß $-\Gamma \frac{d\phi}{dx}$ besteht:

$$J = \rho u \phi - \Gamma \frac{d\phi}{dx} . \quad (5.19)$$

Damit wird Gleichung (5.4) zu

$$\frac{dJ}{dx} = 0 \quad (5.20)$$

und ergibt über das Kontrollvolumen integriert

$$J_e - J_w = 0 . \quad (5.21)$$

Verwendung der exakten Lösung (5.17) als Profil zwischen den Punkten P und E (Ersetzen von ϕ_0 und ϕ_L durch ϕ_P und ϕ_E sowie L durch $(\delta x)_e$) führt auf einen Ausdruck für J_e

$$J_e = F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_e) - 1} \right) , \quad (5.22)$$

wobei

$$P_e = \frac{(\rho u)_e (\delta x)_e}{\Gamma_e} = \frac{F_e}{D_e} \quad (5.23)$$

mit F_e und D_e nach Gleichung (5.9).

J_e ist unabhängig vom Ort der Zwischenstelle (Kontrollvolumen–Wand). Einsetzen von (5.22) und einem ähnlichen Ausdruck für J_w in (5.21) führt auf

$$F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_e) - 1} \right) - F_w \left(\phi_W + \frac{\phi_W - \phi_P}{\exp(P_w) - 1} \right) = 0 . \quad (5.24)$$

In der Standardform

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (5.25)$$

hat man die Koeffizienten des Exponentialschemas

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{F_e}{\exp\left(\frac{F_e}{D_e}\right) - 1} ; \\ a_W &= \frac{F_w \exp\left(\frac{F_w}{D_w}\right)}{\exp\left(\frac{F_w}{D_w}\right) - 1} ; \\ a_P &= a_E + a_W + (F_e - F_w) . \end{aligned} \quad (5.26)$$

Für stationäre, eindimensionale Probleme ergibt dieses Schema die exakte Lösung für alle Peclet-Zahlen und beliebige Gitterpunkt-Zahlen.

Trotz dieser starken Vorzüge findet es nur wenig Verwendung:

- Die Exponentialfunktion \exp ist numerisch aufwendig.
- Das Schema ist nicht exakt für zwei und drei Dimensionen $S \neq 0$, usw.; daher ist der numerische Aufwand für Exponentiale nicht gerechtfertigt.

Benötigt wird ein leicht rechenbares Schema mit gleichen qualitativen Eigenschaften wie das Exponentialschema.

5.1.4 Das Hybrid-Schema (HS)

Zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen ES und HS erfolgt das Auftragen von a_E bzw. seiner dimensionslosen Form $\frac{a_E}{D_e}$ als Funktion der Peclet-Zahl P_e . Aus (5.26) folgt

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{P_e}{\exp(P_e) - 1} \quad (5.27)$$

Dieser Verlauf ist in Abbildung 25 dargestellt.

Für positives P_e ist der Gitterpunkt E der stromab–Nachbar und sein Einfluß verschwindet mit zunehmendem P_e . Für negatives P_e ist E der stromauf–Nachbar und hat großen Einfluß.

Einige Eigenschaften des exakten Verlaufs (durchgezogene Linie) sind:

$$\begin{aligned} P_e \rightarrow \infty : & \quad \frac{a_E}{D_e} \rightarrow 0 \\ P_e \rightarrow -\infty : & \quad \frac{a_E}{D_e} \rightarrow -P_e \\ P_e = 0, \text{ Tangente ist :} & \quad \frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{P_e}{2} \end{aligned} \quad (5.28)$$

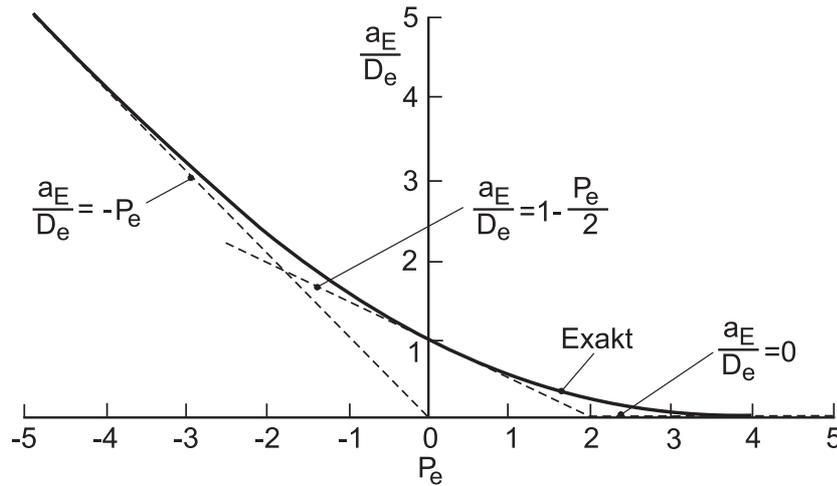


Abbildung 25: Hybrid-Schema: Verlauf des Koeffizienten $\frac{a_E}{D_e}$ über der Peclet-Zahl

Diese drei Grenzfälle sind ebenfalls im Bild dargestellt (gestrichelt). Sie formen eine Einhüllende und stellen eine vernünftige Approximation der exakten Kurve dar. Das Hybrid-Schema besteht aus diesen drei Geraden, so daß sich ergibt:

$$\begin{aligned}
 P_e < -2 : & \quad \frac{a_E}{D_e} = -P_e \\
 -2 \leq P_e \leq 2 : & \quad \frac{a_E}{D_e} = 1 - \frac{P_e}{2} \\
 P_e > 2 : & \quad \frac{a_E}{D_e} = 0
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

oder in Kompaktform:

$$a_E = D_e \left[-P_e, 1 - \frac{P_e}{2}, 0 \right] \quad \text{bzw.} \quad a_E = \left[-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0 \right] \tag{5.30}$$

Signifikanz des HS:

Es ist identisch mit dem CDS für $-2 \leq P_e \leq 2$, und außerhalb reduziert es sich auf das UDS mit Diffusion = 0.

Die Konvektions-Diffusions-Diskretisierungsgleichung für das HS ist also

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \tag{5.31}$$

mit

$$\begin{aligned}
 a_E &= \left[-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0 \right] \\
 a_W &= \left[+F_w, D_w + \frac{F_w}{2}, 0 \right] \\
 a_P &= a_E + a_W + (F_e - F_w)
 \end{aligned} \tag{5.32}$$

Diese Formulierung gilt für jede beliebige Lage der Kontrollvolumen-Wände.

5.1.5 Das Power-Law-Schema (PS)

Aus dem Bild in Kapitel 5.1.4 folgt, daß die Abweichung des HS von der exakten Kurve recht groß ist für $P_e = \pm 2$. Außerdem ist das Nullsetzen der Diffusion für $|P_e| > 2$ recht voreilig. Eine bessere Approximation gibt das Power-Law Schema. Die Power-Law-Ausdrücke für a_E sind

$$\begin{aligned}
 P_e \leq -10 : \quad & \frac{a_E}{D_e} = -P_e \\
 -10 < P_e < 0 : \quad & \frac{a_E}{D_e} = (1 + 0.1P_e)^5 - P_e \\
 0 < P_e < 10 : \quad & \frac{a_E}{D_e} = (1 - 0.1P_e)^5 \\
 P_e > 10 : \quad & \frac{a_E}{D_e} = 0
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

Für $|P_e| > 10$ ist PS identisch mit HS. Die Kompaktdarstellung lautet:

$$a_E = D_e \left[\left[0, \left(1 - \frac{0.1|F_e|}{D_e} \right)^5 \right] + [0, -F_e] \right] . \tag{5.34}$$

Die Übereinstimmung des PS mit dem ES ist zu gut für eine graphische Darstellung:

Vergleich der Koeffizientenwerte
für das Power-Law-Schema und das Exponential-Schema.

P_e	Werte von $\frac{a_E}{D_e}$	
	Power-Law-Schema	Exponential-Schema
-20	20.00	20.00
-10	10.00	10.00
-5.5	5.031	5.034
-4	4.078	4.075
-3	3.168	3.157
-2	2.328	2.313
-1	1.590	1.582
-0.5	1.274	1.271
0	1	1
0.5	0.7738	0.7707
1	0.5905	0.5820
2	0.3277	0.3130
3	0.1681	0.1572
4	0.07776	0.07463
5	0.03125	0.03392
10	0	0.00045
20	0	4.1×10^{-8}

Das PS wäre somit das bevorzugte von den auf nur zwei Punkten basierenden Schemata für so einfache eindimensionale Konvektions-Diffusions-Probleme, obwohl das HS in vielen Situationen ebenso gute Dienste leistet.

5.1.6 Flux-Blending

Das Flux-Blending-Approximierungsschema kombiniert die Zentraldifferenzen-Methode mit dem Standard-Upwind-Schema. Beide Verfahren werden mit Hilfe eines Parameters β gegeneinander gewichtet.

$$\phi_f = \beta\phi_{f,CDS} + (1 - \beta)\phi_{f,Upwind} \quad (5.35)$$

Die Approximation nach der Flux-Blending-Methode bringt bei mäßigen Pe-Zahlen sehr gute Ergebnisse. Wegen der sehr einfachen Implementierung ist dieses Verfahren in vielen CFD-Programmen von vornherein vorgesehen. Ein weiterer Vorteil ist die Möglichkeit, durch Variation des Parameters β das Differenzenschema an aktuelle Probleme anzupassen, so kann eine divergente Rechnung durch Vermindern von β zur Konvergenz gebracht werden.

Wird der Parameter β nicht permanent gesetzt, sondern den aktuellen bzw. lokalen Strömungsverhältnissen angepaßt, ergibt sich das Verfahren, das als Hybridmethode bekannt ist. Hier wird ständig die P-Zahl kontrolliert und bei $|P| > 2$ von CDS auf UDS umgeschaltet.

5.1.7 Eine verallgemeinerte Formulierung

Die bisher gezeigten Schemata können einheitlich dargestellt werden. Die allgemeine Konvektions-Diffusions-Formulierung ist

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W \quad (5.36)$$

mit

$$\begin{aligned} a_E &= D_e A(|P_e|) + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket \\ a_W &= D_w A(|P_w|) + \llbracket F_w, 0 \rrbracket \\ a_P &= a_E + a_W + (F_e - F_w) \end{aligned} \quad (5.37)$$

Die verschiedenen Schemata unterscheiden sich nur in der Wahl von $A(|P|)$. Die Ausdrücke für $A(|P|)$ sind in der Tabelle und graphisch (Abbildung 26) dargestellt.

Schema	Formel für $A(P)$
Zentrale Differenzen (CDS)	$1 - 0.5 P $
Upwind (UDS)	1
Hybrid (HS)	$\llbracket 0, 1 - 0.5 P \rrbracket$
Power Law (PS)	$\llbracket 0, (1 - 0.1 P)^5 \rrbracket$
Exponential (exakt) (ES)	$ P / [\exp(P) - 1]$

5.1.8 Konsequenzen der verschiedenen Schemata

Wir untersuchen die ϕ_P -Werte, die für ϕ_E und ϕ_W aus den verschiedenen Schemata folgen. Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit: $\phi_E = 1$ und $\phi_W = 0$, $(\delta x)_e = (\delta x)_w$. Dann ist ϕ_P eine Funktion von $P = \rho u(\delta x)/\Gamma$. Die Verläufe von ϕ_P sind in Abbildung 27 dargestellt. (Die Ergebnisse für PS und ES sind für die graphische Darstellung nicht unterscheidbar). Alle Schemata mit Ausnahme des CDS ergeben physikalisch realistische Lösungen. Das CDS ergibt teilweise Werte außerhalb des durch die Randwerte vorgegebenen $[0, 1]$ -Intervalls.

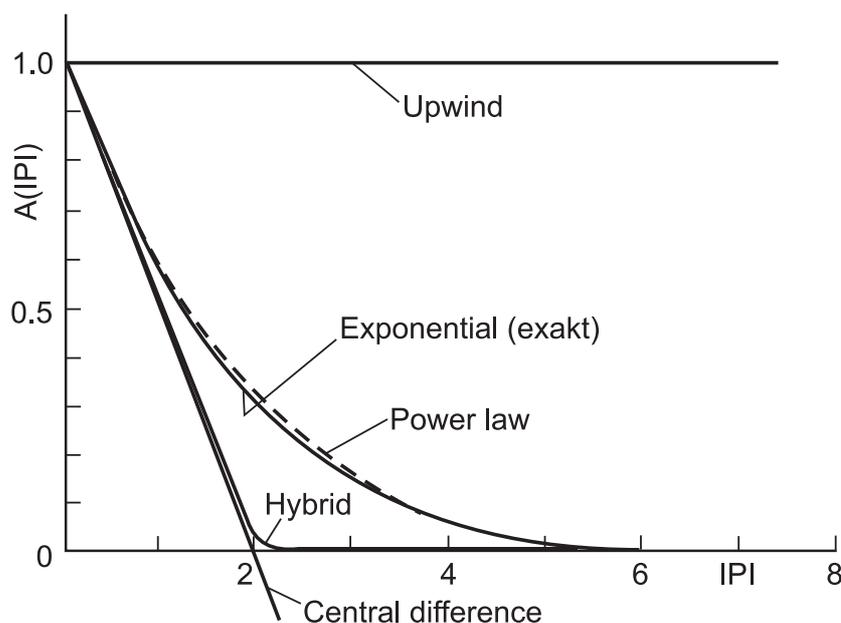


Abbildung 26: Die Funktion $A(|P|)$ für verschiedene Diskretisierungsschemata

Da die Gitter-Peclet-Zahl das Verhalten des numerischen Schemas bestimmt, ist es prinzipiell möglich, das Gitter so zu verfeinern (kleineres δx), bis P klein genug (< 2) ist, damit das CDS vernünftige Lösungen ergibt. Für die meisten praktischen Probleme bedeutet das: extrem feine Gitter \rightarrow unökonomisch. Wir können solche Einschränkungen nicht akzeptieren, wenn wir ein Verfahren suchen, das selbst für grobe Gitter physikalisch realistische Ergebnisse produziert. Eine weiter verbesserte Genauigkeit läßt sich durch die im Kapitel 5.5 beschriebenen HOC-Verfahren erreichen.

5.2 Diskretisierungsgleichung für zwei Dimensionen

Man betrachte das Kontrollvolumen im Abbildung 28.

Wir nehmen an, daß der gesamte Fluß, z.B. J_e über der Kontrollvolumen-Wand, z.B. e , konstant ist.

Ein Detail: Selbst im eindimensionalen Fall ergab sich $a_P = a_E + a_W$ nur, wenn die Kontinuitätsgleichung erfüllt war. Damit kann die Grundregel 4 (Summe der Nachbarkoeffizienten) nur erfüllt werden, wenn wir die Kontinuitätsgleichung in die Ableitung einbeziehen.

Die zweidimensionale Form von Gleichung (5.2) kann geschrieben werden als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho\phi) + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = S \quad (5.38)$$

mit J_x , J_y als den gesamten (Konvektion + Diffusion) Flüssen:

$$\begin{aligned} J_x &= \varrho u\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}, \\ J_y &= \varrho v\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}, \end{aligned} \quad (5.39)$$

wobei u und v die Geschwindigkeitskomponenten in x -Richtung und y -Richtung sind.

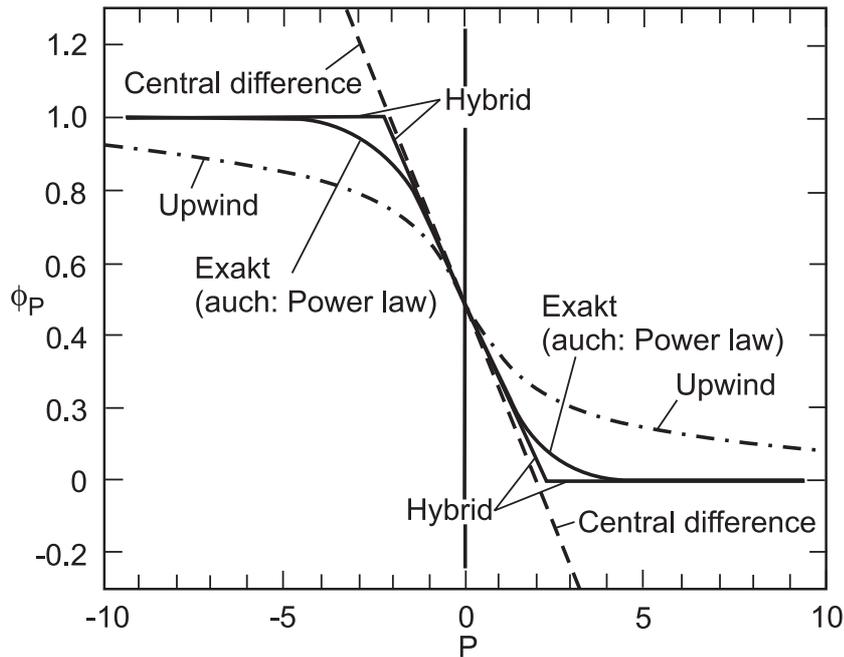


Abbildung 27: Darstellung der ϕ_P -Werte für einen Bereich der Peclet-Zahl bei Verwendung verschiedener Diskretisierungsschemata

Integration von (5.38) über das Kontrollvolumen ergibt:

$$\frac{(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) \Delta x \Delta y}{\Delta t} + J_e - J_w + J_n - J_s = (S_C + S_P \phi_P) \Delta x \Delta y, \quad (5.40)$$

wobei der Quellterm wie üblich linearisiert wurde und für den instationären Term ρ_P und ϕ_P als konstant über das Kontrollvolumen angenommen wurden. Die "alten" Werte (Beginn des Zeitschritts) sind ρ_P^0 und ϕ_P^0 . Genau wie bei der voll impliziten Praxis sind die anderen Größen ohne Index die "neuen". J_e, J_w, J_n, J_s sind die über die Kontrollvolumen-Wände integrierten Gesamtflüsse, d.h. J_e steht für $\int_e J_x dy$ usw. In ähnlicher Weise integrieren wir die Kontinuitätsgleichung (5.1) über das Kontrollvolumen:

$$\frac{(\rho_P - \rho_P^0) \Delta x \Delta y}{\Delta t} + F_e - F_w + F_n - F_s = 0, \quad (5.41)$$

wobei F_e, F_w, F_n, F_s die Massenflüsse durch die Kontrollvolumenwände sind. Wir nehmen an, daß ρu am Punkt e konstant über die ganze Wand e ist:

$$F_e = (\rho u)_e \Delta y$$

und analog

$$\begin{aligned} F_w &= (\rho u)_w \Delta y, \\ F_n &= (\rho v)_n \Delta x, \\ F_s &= (\rho v)_s \Delta x. \end{aligned} \quad (5.42)$$

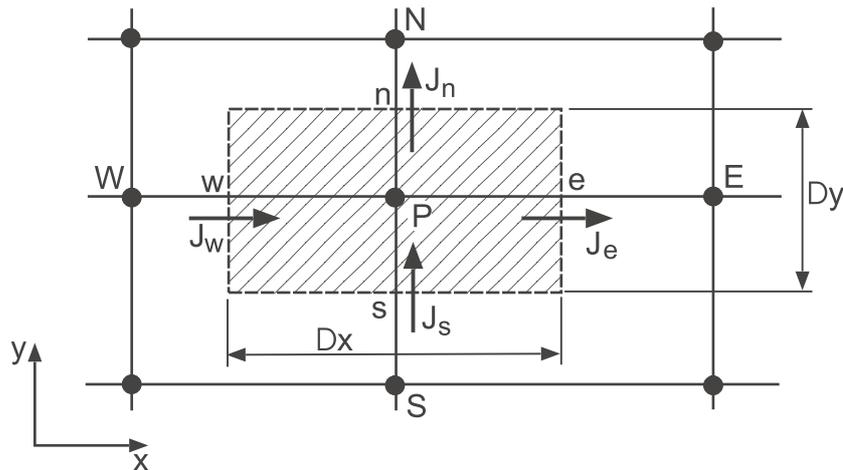


Abbildung 28: Diskretisierung in zwei Dimensionen

Multiplikation von Gleichung (5.41) mit ϕ_P und Abziehen von (5.40) ergibt:

$$\begin{aligned} & (\phi_P - \phi_P^0) \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} + (J_e - F_e \phi_P) - (J_w - F_w \phi_P) + (J_n - F_n \phi_P) - (J_s - F_s \phi_P) \\ &= (S_C + S_P \phi_P) \Delta x \Delta y . \end{aligned} \quad (5.43)$$

Die Annahme der Konstanz der Flüsse auf den Kontrollvolumen-Wänden ermöglicht die Anwendung der eindimensionalen Praxis für zweidimensionale Fälle. So lassen sich Terme wie $(J_e - F_e \phi_P)$ und $(J_w - F_w \phi_P)$ ausdrücken:

$$\begin{aligned} J_e - F_e \phi_P &= a_E (\phi_P - \phi_E) , \\ J_w - F_w \phi_P &= a_W (\phi_W - \phi_P) , \end{aligned} \quad (5.44)$$

wobei

$$\begin{aligned} a_E &= D_e A(|P_e|) + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket , \\ a_W &= D_w A(|P_w|) + \llbracket +F_w, 0 \rrbracket . \end{aligned} \quad (5.45)$$

D_e und D_w und ihre Gegenstücke F_e und F_w enthalten die Flächen $\Delta y \cdot 1$ der Wände e und w . Mit ähnlichen Ausdrücken für $(J_n - F_n \phi_P)$ und $(J_s - F_s \phi_P)$ können wir die endgültige Diskretisierungsgleichung schreiben. (Die Grundregel über die Summe der Nachbarkoeffizienten ist erfüllt, auch wenn das Strömungsfeld nicht die Kontinuitätsgleichung erfüllt.)

Die zweidimensionale Diskretisierungsgleichung ist dann

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b , \quad (5.46)$$

wobei

$$\begin{aligned}
a_E &= D_e A(|P_e|) + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket \\
a_W &= D_w A(|P_w|) + \llbracket +F_w, 0 \rrbracket \\
a_N &= D_n A(|P_n|) + \llbracket -F_n, 0 \rrbracket \\
a_S &= D_s A(|P_s|) + \llbracket +F_s, 0 \rrbracket \\
a_P^0 &= \frac{\varrho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} \\
b &= S_C \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0 \\
a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y .
\end{aligned} \tag{5.47}$$

ϕ_P^0 und ϱ_P^0 sind bekannte Werte zur Zeit t , alle anderen Größen (ϕ_P , ϕ_E , ϕ_W usw.) sind die Unbekannten zur Zeit $t + \Delta t$. Die Flüsse F_e , F_w , F_n , F_s sind in (5.43) definiert. Die entsprechenden Leitfähigkeiten sind

$$\begin{aligned}
D_e &= \frac{\Gamma_e \Delta y}{(\delta x)_e} ; & D_w &= \frac{\Gamma_w \Delta y}{(\delta x)_w} ; \\
D_n &= \frac{\Gamma_n \Delta x}{(\delta y)_n} ; & D_s &= \frac{\Gamma_s \Delta x}{(\delta y)_s}
\end{aligned} \tag{5.48}$$

und die Peclet-Zahlen sind

$$P_e = \frac{F_e}{D_e} ; \quad P_w = \frac{F_w}{D_w} ; \quad P_n = \frac{F_n}{D_n} ; \quad P_s = \frac{F_s}{D_s} . \tag{5.49}$$

Die Funktion $A(|P|)$ kann für das gewünschte Schema der Tabelle in Kapitel 5.1.7 entnommen werden. Das empfohlene Power-Law-Schema ist

$$A(|P|) = \llbracket 0, (1 - 0.1|P|)^5 \rrbracket . \tag{5.50}$$

5.3 Diskretisierungsgleichung für drei Dimensionen

Die Diskretisierungsgleichung für die allgemeine Differentialgleichung (5.2) in drei Dimensionen (mit T und B als 'top'- und 'bottom'-Nachbarn in z -Richtung) ist:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b , \tag{5.51}$$

wobei

$$\begin{aligned}
a_E &= D_e A(|P_e|) + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket \\
a_W &= D_w A(|P_w|) + \llbracket +F_w, 0 \rrbracket \\
a_N &= D_n A(|P_n|) + \llbracket -F_n, 0 \rrbracket \\
a_S &= D_s A(|P_s|) + \llbracket +F_s, 0 \rrbracket \\
a_T &= D_t A(|P_t|) + \llbracket -F_t, 0 \rrbracket \\
a_B &= D_b A(|P_b|) + \llbracket +F_b, 0 \rrbracket \\
a_P^0 &= \frac{\varrho_P^0 \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \\
b &= S_C \Delta x \Delta y \Delta z + a_P^0 \phi_P^0 \\
a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_B + a_T + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y \Delta z
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Die Flüsse und Leitfähigkeiten sind

$$\begin{aligned}
 F_e &= (\rho u)_e \Delta y \Delta z ; & D_e &= \frac{\Gamma_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} \\
 F_w &= (\rho u)_w \Delta y \Delta z ; & D_w &= \frac{\Gamma_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} \\
 F_n &= (\rho v)_n \Delta z \Delta x ; & D_n &= \frac{\Gamma_n \Delta z \Delta x}{(\delta y)_n} \\
 F_s &= (\rho v)_s \Delta z \Delta x ; & D_s &= \frac{\Gamma_s \Delta z \Delta x}{(\delta y)_s} \\
 F_t &= (\rho w)_t \Delta x \Delta y ; & D_t &= \frac{\Gamma_t \Delta x \Delta y}{(\delta z)_t} \\
 F_b &= (\rho w)_b \Delta x \Delta y ; & D_b &= \frac{\Gamma_b \Delta x \Delta y}{(\delta z)_b}
 \end{aligned} \tag{5.53}$$

Die Peclet-Zahl P ist das Verhältnis von F und D , also $P_e = \frac{F_e}{D_e}$ usw. $A(|P|)$ ist in der Tabelle in Kapitel 5.1.7 aufgeführt.

5.4 Einseitig gerichtete Raumkoordinaten

Die in Kapitel 2.2 kurz angesprochenen einseitig gerichteten Koordinaten bringen Rechenvereinfachungen mit sich. Für die Zeit kann man Fortschrittsverfahren verwenden. Konvektions-Diffusionsprobleme können Raumkoordinaten zu einseitig gerichteten Koordinaten machen (Grenzschichten!).

In Abbildung 25 sieht man, daß der Koeffizient eines stromab-Nachbarn klein wird für große Peclet-Zahlen. (PS setzt $a_E = 0$ für $P > 10$, HS für $P > 2$). Für einen hohen Durchfluß in dem Fall in Abbildung 29 wird für alle Gitterpunkte P auf einer y -Linie in Inflow- oder Outflow-Nähe der Koeffizient $a_E = 0$. D.h. ϕ_P hängt nur von ϕ_W , ϕ_N und ϕ_S ab, nicht von ϕ_E . Daher wird die x -Koordinate eine einseitig gerichtete Koordinate, da der ϕ -Wert unbeeinflusst vom stromab liegenden Wert ist. Dies ermöglicht die Verwendung eines Fortschrittsverfahrens (z.B. in Kanalströmungen).

Auch lokal einseitig gerichtetes Verhalten ist nützlich, z.B. bei Randbedingungen. In Kapitel 4 wurden Randbedingungen behandelt. Man könnte annehmen, daß die Behandlung auch für kombinierte Konvektions-Diffusionsprobleme gilt. Am Ausströmrand (outflow) kennt man jedoch im allgemeinen weder den Wert von ϕ noch seinen Fluß.

Ausweg?

Es wird keine Randbedingung benötigt, wenn man am Ausströmrand lokal einseitig gerichtetes Verhalten annimmt. Dann wird der Randwert, der mit a_E multipliziert wird, bedeutungslos, d.h. $a_E = 0$. Eine gewisse Ungenauigkeit muß unter Umständen in Kauf genommen werden. Der Fehler kann gering gehalten werden, wenn der Ausströmrand geeignet gewählt wird (siehe Bild 29). Eine schlechte Wahl liegt vor, wenn z.B. lokale Einströmung herrscht (Bild Mitte).

Randbehandlung für Konvektions-Diffusionsprobleme zusammengefaßt:

- keine Strömung über den Rand: \rightarrow reine Diffusion, Behandlung gemäß Kapitel 4.5.
- Einströmung ins Rechengebiet: \rightarrow ϕ -Wert ist im allgemeinen bekannt
- Ausströmung: \rightarrow siehe oben.

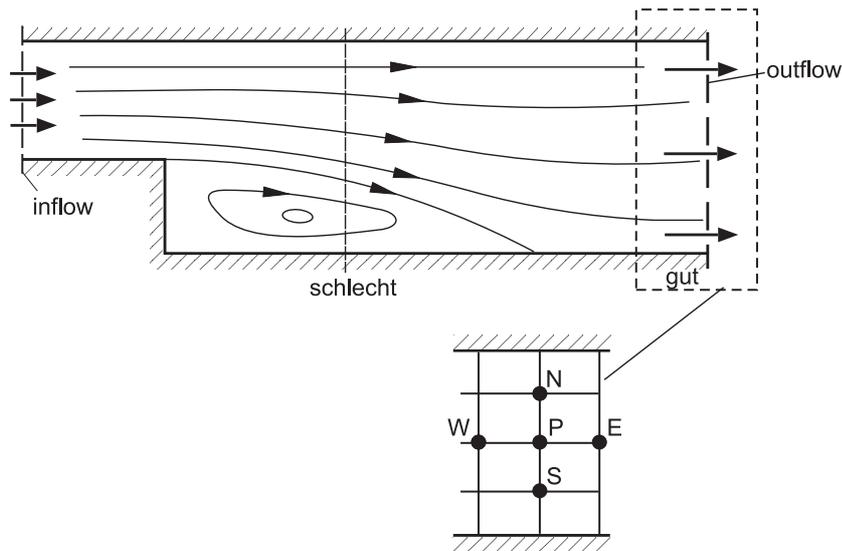
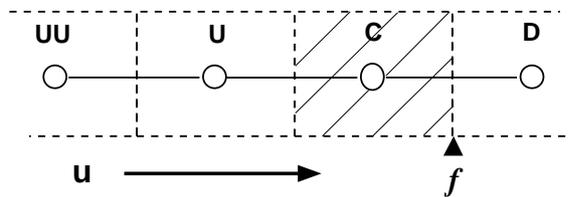


Abbildung 29: Stromlinienbild einer Stufenströmung

5.5 Verfahren höherer Ordnung (HOC)

Bei den bisher beschriebenen Standardverfahren basiert die Konvektionsbehandlung auf der Interpolation der Variable ϕ von den beiden direkten Nachbarpunkten auf die Kontrollvolumengrenze f . Um zu einer Notation in Abhängigkeit von der Strömungsrichtung zu gelangen, werden die Nachbarzellen mit folgende Indizes bezeichnet: Die stromauf liegende Zelle mit U (upstream), die zentrale Zelle mit C (central) und die stromab liegende mit D (downstream).



In dieser Notation ergibt sich bei allen Standardverfahren der Variablenwert auf der Zellgrenzfläche f für beliebige Anströmrichtungen, d.h. unabhängig von F_e bzw. F_w zu:

$$\phi_f = f(\phi_C, \phi_D) \tag{5.54}$$

- UDS, 1.Ordnung : $\phi_f = \phi_C$ (diffusiver Abbruchfehler \rightarrow numerische Diffusion)
- CDS, 2.Ordnung : $\phi_f = \frac{1}{2}(\phi_C + \phi_D)$
- HS, PS, ES : $\phi_f = f(\phi_C, \phi_D)$

Eine im Vergleich zu den bisher beschriebenen Verfahren bessere Genauigkeit läßt sich mit Approximationsverfahren höherer Ordnung, sog. HOC-Verfahren (High Order Convection), erzielen, die sich nicht nur auf die direkten Nachbarpunkte des gesuchten Kontrollvolumenrandes stützen sondern noch weitere Punkte verwenden. Die Vorteile der höheren Approximationsordnung machen sich vor allem bei sehr großen Peclet-Zahlen bemerkbar, wo die durch den Approximationsfehler induzierte numerische Diffusion größer werden kann als die physikalische Diffusion.

Im Prinzip basieren solche Verfahren auf dem Schema

$$\phi_f = \phi_{f,Upwind} + \phi_{f,Diffusionskorrektur}. \quad (5.55)$$

Dadurch, daß die Implementierung im Kern auf dem UDS–Schema beruht und der Korrekturanteil im Quellterm berücksichtigt wird, kann die hohe Stabilität dieses Verfahrens auch bei den Verfahren höherer Ordnung weitgehend erhalten werden. Die Bearbeitung unterschiedlicher Schemata ist durch die Aufteilung in Upwindanteil und Diffusions-Korrekturanteil sehr einfach.

5.5.1 Das QUICK–Schema

Das Schema QUICK (Quadratic Interpolation for Convective Kinematics) stützt sich bei der Interpolation für die Zellgrenzwerte auf drei Punkte, wobei stets zwei Punkte stromauf und ein Punkt stromab liegt, so daß QUICK insgesamt von Genauigkeit dritter Ordnung ist. Ähnlich wie bei Upwind wird auch hier der Punktestern der Strömungsrichtung angepaßt.

Wie in Abbildung 30 zu erkennen ist, stützt sich die Interpolation für ϕ_e bei Anströmung von links ($u > 0$) auf die Punkte W , P und E , während sie bei Anströmung von rechts auf den Punkten P , E und EE basiert.

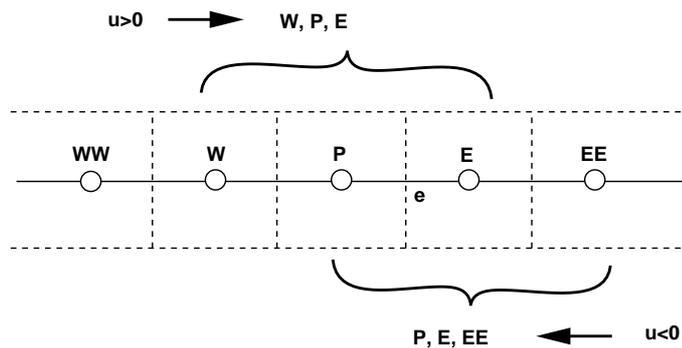


Abbildung 30: QUICK stützt sich auf je 3 der 5 Punkte

Die Diskretisierungsgleichung für QUICK läßt sich unter der Annahme äquidistanter Schrittweiten direkt aus Taylorreihenentwicklungen für P , E und EE bzw. W um den Punkt e herleiten. In der strömungsrichtungsunabhängigen Notation ergibt sich der Variablenwert auf der Zellgrenzfläche f zu:

$$\phi_f = \underbrace{\phi_C}_{Upwind} + \underbrace{\frac{3}{8}\phi_D - \frac{2}{8}\phi_C - \frac{1}{8}\phi_U}_{Diffusionskorrektur}. \quad (5.56)$$

Das Differenzschema QUICK zeichnet sich durch seine hohe Genauigkeit aus, wodurch es sich nicht nur von den einfachen Verfahren niedriger Ordnung wie CDS und UDS abhebt, sondern auch vom relativ rechenaufwendigen Power-Law-Schema.

5.5.2 Andere Schemata höherer Ordnung

Neben QUICK gibt es noch einige ähnliche Verfahren, die sich in einem einheitlichen Schema zusammenfassen lassen:

$$\phi_f = \phi_C + \frac{1}{4} [(1 + \kappa)(\phi_D - \phi_C) + (1 - \kappa)(\phi_C - \phi_U)] \quad (5.57)$$

$$\phi_f = \phi_C + \phi_{f,korr}. \quad (5.58)$$

Dabei ist $\phi_{f,korr}$ die Veränderung von ϕ_f aufgrund der Erweiterung des Konvektionsschemas von Upwind auf ein Verfahren höherer Ordnung.

Mit Hilfe des Parameters κ kann zwischen unterschiedlichen Verfahren höherer Ordnung gewählt werden. QUICK ergibt sich für $\kappa = \frac{1}{2}$, während sich bei $\kappa = 1$ gerade das CDS-Schema ergibt. Auch das Linear Upwind Difference Scheme (LUDS) und das Cubic Upwind Interpolation Scheme (CUI) lassen sich darstellen. In der Tabelle sind die unterschiedlichen Varianten und die Peclet-Zahl angegeben, für die sie ohne Probleme verwendet werden können .

Schema	κ	Diffusionskorrektur	kritische P -Zahl
CDS	1	$\frac{1}{2}\phi_D - \frac{1}{2}\phi_C$	2
LUDS	-1	$\frac{1}{2}\phi_C - \frac{1}{2}\phi_U$	∞
QUICK	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{8}\phi_D - \frac{2}{8}\phi_C - \frac{1}{8}\phi_U$	$\frac{8}{3}$
CUI	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}\phi_D - \frac{1}{6}\phi_C - \frac{1}{6}\phi_U$	3

Implementierung

Der Quellterm $S_{\phi,korr}$ ergibt sich nach

$$S_{\phi,korr} = \sum_{f=e,w} F_f \phi_{f,korr} + \sum_{f=n,s} F_f \phi_{f,korr}. \quad (5.59)$$

Durch Einsetzen von (5.57) in diese Gleichung ergibt sich unter Berücksichtigung der Richtungsabhängigkeit der Terme ϕ_U , ϕ_C und ϕ_D eine Form, in der das Schema implementiert werden kann:

$$\begin{aligned} S_{\phi,korr} = & - 0.25(F_e) [c_e^+(\kappa^+ \Delta\phi_e + \kappa^- \Delta\phi_w) - c_e^-(\kappa^+ \Delta\phi_e + \kappa^- \Delta\phi_{ee})] \\ & + 0.25(F_w) [c_w^+(\kappa^+ \Delta\phi_w + \kappa^- \Delta\phi_{ww}) - c_w^-(\kappa^+ \Delta\phi_w + \kappa^- \Delta\phi_e)] \\ & + 0.25(F_s) [c_s^+(\kappa^+ \Delta\phi_s + \kappa^- \Delta\phi_{ss}) - c_s^-(\kappa^+ \Delta\phi_s + \kappa^- \Delta\phi_n)] \\ & - 0.25(F_n) [c_n^+(\kappa^+ \Delta\phi_n + \kappa^- \Delta\phi_s) - c_n^-(\kappa^+ \Delta\phi_n + \kappa^- \Delta\phi_{nn})]. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Die Parameter in (5.60) sind

$$\kappa^+ = 1 + \kappa ; \quad \kappa^- = 1 - \kappa ; \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} c_e^\pm &= \frac{1 \pm \operatorname{sgn}(F_e)}{2} ; & c_w^\pm &= \frac{1 \pm \operatorname{sgn}(F_w)}{2} ; \\ c_n^\pm &= \frac{1 \pm \operatorname{sgn}(F_n)}{2} ; & c_s^\pm &= \frac{1 \pm \operatorname{sgn}(F_s)}{2} ; \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \Delta\phi_{ee} &= \phi_{EE} - \phi_E ; & \Delta\phi_e &= \phi_E - \phi_P ; \\ \Delta\phi_{ww} &= \phi_{WW} - \phi_W ; & \Delta\phi_w &= \phi_P - \phi_W ; \\ \Delta\phi_{nn} &= \phi_{NN} - \phi_N ; & \Delta\phi_n &= \phi_N - \phi_P ; \\ \Delta\phi_{ss} &= \phi_{SS} - \phi_S ; & \Delta\phi_s &= \phi_P - \phi_S . \end{aligned} \quad (5.62)$$

Auf diese Weise können sämtliche Schemata in ein Programm implementiert werden, d.h. nur der Upwind-Teil wird voll implizit gelöst und die Korrekturterme, die u.U. auf andere Kontrollvolumina zurückgreifen, gehen nur auf der rechten Seite in den Quellterm ein. Ein solches Verfahren vermeidet, daß durch die Einführung von größeren Differenzenmolekülen Koeffizientenmatrizen mit übermäßig großer Bandbreite entstehen, die dann erheblich ungünstiger zu lösen sind. Der implizite Teil führt auch bei den Verfahren höherer Ordnung stets auf Matrizen gleicher Bandbreite wie bei den Verfahren niederer Ordnung. Die Verfahren höherer Ordnung zeigen eine ähnliche numerische Stabilität wie das Upwind-Schema und sind dabei erheblich genauer.

Für die Randbereiche ist es problematisch dieses Schema zu implementieren, da hier keine Punkte EE bzw. WW vorhanden sind. Dieses Problem tritt mit der Vergrößerung der Ordnung eines Verfahrens immer mehr in den Vordergrund. Es müssen spezielle Annahmen für die Behandlung des Randes vorgesehen werden, wobei zumeist die Ordnung durch Setzen von

$$\phi_U = \phi_C$$

am Rand vermindert wird, so daß bis in die Randbereiche hinein gerechnet werden kann.

5.6 Limitierte Differenzenschemata

Approximierungsverfahren höherer Ordnung basieren auf der Interpolation durch Polynome höherer Ordnung. Derartige Kurven weisen eine proportional zur Ordnung steigende Anzahl von lokalen Extremwerten auf. Die Extremwerte wirken sich auf das Ergebnis eines numerischen Lösungsverfahrens derart aus, daß in den Profilen Schwankungen auftreten. So treten auch bei QUICK Oszillationen in der Lösung auf, die durch lokale Extremwerte der Näherungsparabel induziert werden. Dieser Effekt tritt besonders bei steilen Gradienten auf und ist ausschlaggebend dafür, daß der Gitterabstand bei den nichtlimitierten Verfahren höherer Ordnung nicht zu groß gewählt werden darf.

Die Idee der limitierten Differenzenschemata besteht darin, die Oszillationen begünstigenden Extremwerte durch vorgegebene Limits quasi abzuschneiden. In Abbildung 31 ist gezeigt, wie auftretende Schwingungen durch lokale Verminderung der Ordnung gedämpft werden können. Auf diese Weise sollen Verfahren höherer Ordnung wie beispielsweise QUICK zu stabilen Ergebnissen gezwungen werden. Da sich eine solche Limitierung nicht a priori einstellen läßt, sondern an jeder Stelle

immer von der aktuellen Lösung bestimmt ist, sind limitierte Differenzenschemata grundsätzlich nichtlinear. Die Vermeidung von Oszillationen wird letztlich durch das Inkaufnehmen von lokalen Verminderungen der Approximationsordnung und ein nichtlineares Verfahren erreicht.

Harten beschrieb 1983 Anforderungen an limitierte Schemata. Verfahren, die den Zweck verfolgen, Oszillationen zu vermeiden und somit zwischen den Stützwerten monoton zu verlaufen, müssen zwei Bedingungen erfüllen:

- es dürfen keine neuen Extremwerte entstehen,
- existierende Extremstellen dürfen nicht verstärkt werden.

Formal können diese Forderungen durch die Beschränkung der "Totalen Variation" über einem Intervall eingehalten werden. Deshalb heißt die Gruppe der limitierten Differenzenverfahren auch TVD-Verfahren (Total Variation Diminishing). Kontrolliert wird dabei die Monotonieeigenschaft der zweiten Ableitung.

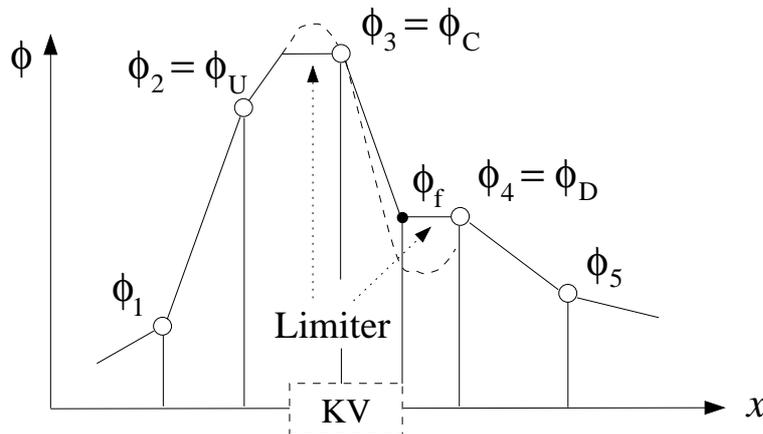


Abbildung 31: Beispielhafte Darstellung der Limitierung

Die Totale Variation von ϕ über ein Intervall ist definiert als

$$TV(\phi) := \sum_{i=-\infty}^{\infty} |\Delta_{i+1/2}\phi|. \quad (5.63)$$

$\Delta_{i+1/2}\phi$ ist eine Kurzschreibweise für den Ausdruck $\phi_{i+1} - \phi_i$. Betrachtet wird zunächst die allgemeine Formulierung der totalen Variation:

$$TV(\phi) = |\phi_2 - \phi_1| + |\phi_3 - \phi_2| + |\phi_4 - \phi_3| + |\phi_5 - \phi_4|. \quad (5.64)$$

Bezogen auf eine eindimensionale skalare Erhaltungsgleichung für ϕ vom Typ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad u > 0, \quad (5.65)$$

bedeutet die Forderung nach Monotonie gleichzeitig die Verminderung der totalen Variation. Um Oszillationen zu vermeiden, muß die Bedingung

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n) \quad (5.66)$$

eingehalten werden. Erfüllt ein Schema diese Forderung, so wird es als TVNI (Total Variation nonincreasing) bezeichnet. Die oberen Indizes markieren die Zeitebene; $n + 1$ ist die neue Lösung, die aus n gebildet wurde. Hier kann die zeitliche Fortschreibung exemplarisch anstelle einer Abfolge von Iterationen betrachtet werden. Wenn ein Verfahren in der Lage ist, Oszillationen von einem Zeitschritt zum nächsten zu vermeiden, so gelingt es auch beim Schritt von einer Iteration zur nächsten.

5.6.1 Das MUSCL-Schema

Formal an das nichtlimitierte Schema (5.57) angelehnt, läßt sich ein allgemeines TVD-Schema für die Interpolation der zellzentralen Variablen auf die Zellgrenzflächen formulieren: das MUSCL-Schema (Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws, *van Leer*, 1979). Dabei werden zusätzlich zwei Terme quasi als Dämpfungsterme (Limiter) eingefügt.

$$\phi_f = \phi_C + \frac{1}{4} \left((1 + \kappa) \underbrace{\varphi(r)}_{\text{Limiter}} (\phi_D - \phi_C) + (1 - \kappa) \underbrace{\varphi\left(\frac{1}{r}\right)}_{\text{Limiter}} (\phi_C - \phi_U) \right). \quad (5.67)$$

Die Limitierung wird durch den funktionalen Zusammenhang von φ und r bestimmt. Um die oben erwähnte Forderung nach Begrenzung der *Totalen Variation* erfüllen zu können, muß die Limitierungsfunktion $\varphi(r)$ innerhalb des schraffierten Bereichs in Abbildung 32 liegen.

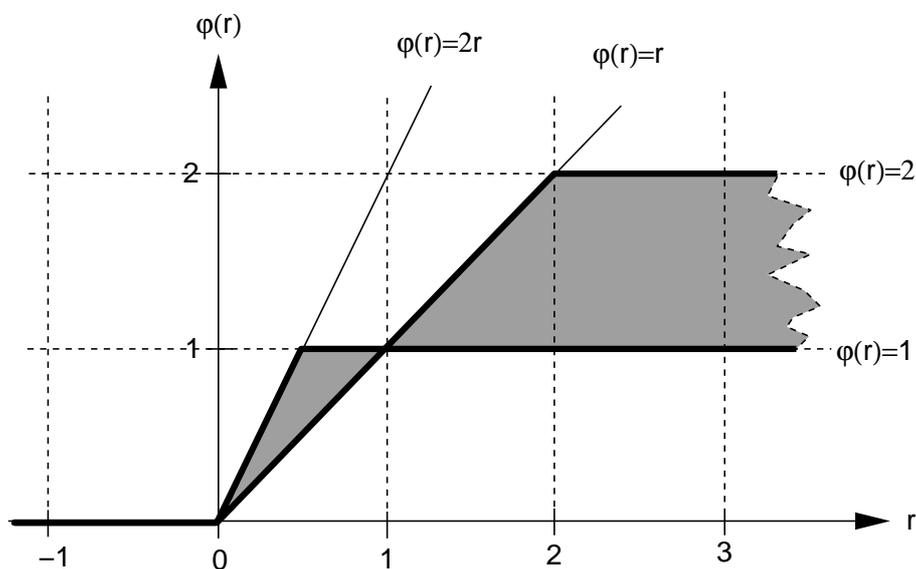


Abbildung 32: Bereiche von r und φ , für die ein Schema die TVD-Bedingung erfüllt.

Die Einführung der dimensionslosen Variablen $\tilde{\phi}$ und r

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}; \quad r = \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_C} \quad (5.68)$$

ergibt für dieses Schema:

$$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C + \frac{1}{4}\tilde{\phi}_C \left[(1 + \kappa)\frac{1}{r}\varphi(r) + (1 - \kappa)\varphi\left(\frac{1}{r}\right) \right].$$

An dieser Stelle sollen symmetrische Limitierungsschemata betrachtet werden, die der Gleichung

$$\varphi(r) = r\varphi\left(\frac{1}{r}\right), \quad (5.69)$$

genügen und somit die Gradienten auf beiden Seiten in gleicher Weise behandeln. Unter dieser Annahme vereinfacht sich das Schema erheblich und der Rechenaufwand bei der Anwendung symmetrischer Verfahren ist erheblich geringer. Der Parameter κ aus Gleichung (5.67) fällt weg und es bleibt schließlich die Gleichung für ein sehr einfaches Schema, das nur durch unterschiedliche Funktionen $\varphi(r)$ variiert wird:

$$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C + \frac{\varphi(r)}{2}(1 - \tilde{\phi}_C). \quad (5.70)$$

In dieser Form, die als symmetrisches MUSCL-Schema bekannt ist, lassen sich viele verschiedene symmetrische Verfahren zusammenfassen. Auch QUICK läßt sich beispielsweise durch geeignete Wahl von $\varphi(r)$ im MUSCL-Schema darstellen.

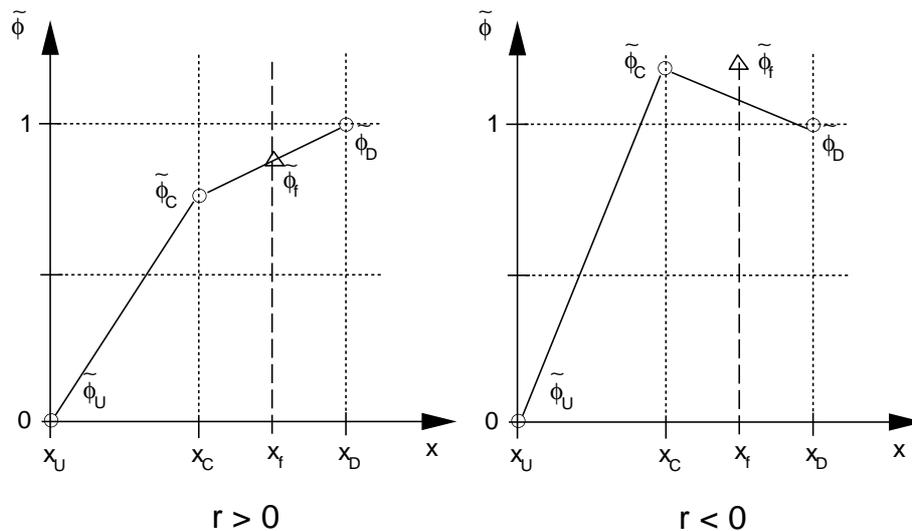


Abbildung 33: Verlauf der dimensionslosen Variable bei unterschiedlichem r

Aufgrund der Normierung ergeben sich einige anschauliche Zwangsbedingungen für die Monotonie des Verfahrens, die äquivalent zu den mathematisch geforderten Bedingungen sind. Zur Verdeutlichung sind in Abbildung 33 die Verteilungen der normierten Größen $\tilde{\phi}$ für einen monotonen Verlauf (links, $r > 0$) und das Auftreten einer Extremstelle (rechts, $r < 0$) dargestellt. Im Fall einer aufgetretenen Extremstelle muß gelten:

$$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C \quad \text{bei} \quad \tilde{\phi}_C \leq 0 \quad \text{bzw.} \quad \tilde{\phi}_C \geq 1, \quad (5.71)$$

was quasi ein "Abschneiden" der Extremwerte durch Herabsetzung der Approximationsordnung bedeutet, und bei monotonem Verlauf

$$\tilde{\phi}_f \leq 1, \quad \tilde{\phi}_f \leq 2\tilde{\phi}_C, \quad \tilde{\phi}_f \geq \tilde{\phi}_C, \quad \text{bei } 0 < \tilde{\phi}_C < 1 \quad (5.72)$$

zur Verhinderung der Bildung neuer Extremstellen. Hier muß bei einem beschränkten Differenzenschema sichergestellt sein, daß der Wert auf der Zellgrenze immer zwischen den Variablenwerten in den Zellzentren liegt. Bezogen auf die Funktion $\varphi(r)$ ergibt sich daraus die Beschränkung, daß $\varphi(r)$ immer im schraffierten Bereich von Abbildung 32 liegen muß.

Unter der Beachtung aller Forderungen an $\varphi(r)$ aus Abbildung 32 und aus Gleichung (5.69) ergibt sich die allgemeine Formulierung für das MUSCL-Schema:

$$\varphi(r) = \max(0, \min(2r, \gamma_1 + \gamma_2 r, \gamma_2 + \gamma_1 r, 2)) \quad (5.73)$$

mit

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1. \quad (5.74)$$

Es bleibt letztlich nur ein frei wählbarer Parameter γ , der unterschiedliche Varianten von MUSCL unterscheidet:

$$\gamma_1 = \gamma \quad \gamma_2 = 1 - \gamma. \quad (5.75)$$

Bei der Umsetzung des MUSCL-Verfahrens wird diese Beziehung in die dimensionsbehaftete Variante von Gleichung (5.70) eingesetzt.

5.7 UNO/ENO-Schemata

Alle TVD-Verfahren weisen den entscheidenden Nachteil auf, daß sie, wenn die Limitierung wirksam wird, z.B. in den Bereichen steiler Gradienten, von einem Ansatz höherer Ordnung auf konstante Profilannahmen wechseln. Die hohe Genauigkeit geht damit oft an den interessantesten Bereichen eines Rechengebiets verloren. Insbesondere bei der numerischen Wiedergabe von Verdichtungsstößen oder der Beschreibung von turbulenten Strömungen in kompressiblen Fluiden haben sich TVD-Verfahren als nicht optimal erwiesen. Es wäre wünschenswert, im gesamten Rechengebiet mit konstanter Ordnung rechnen zu können.

Dies war die Motivation zur Entwicklung alternativer Ansätze wie des sog. UNO/ENO (Uniformly accurate/ essentially Non-Oscillatory)-Approximierungsverfahren, bei dem die Ordnung der Approximation in jedem Fall für alle Bereiche des Rechengebiets beibehalten wird. Wird ein UNO-Verfahren mit der Idee der Begrenzung der totalen Variation verbunden, ergeben sich die ENO-Verfahren (Essentially Non-oscillatory Schemes). Da sowohl Verfahren vom Typ UNO als auch ENO inzwischen zusammenfassend als ENO-Verfahren bezeichnet werden, soll auch hier nur dieser Begriff verwendet werden.

Ähnlich wie bei den nichtlimitierten Verfahren höherer Ordnung werden auch bei Approximationen nach der ENO-Methode nur Polynome zur Approximierung der unbekanntes Größe verwendet, die im Gegensatz zu den TVD-Verfahren in keinem Fall in ihrer Ordnung herabgesetzt werden. Im Gegensatz zu den Upwind-Verfahren richtet sich die Lage der Stützpunkte jedoch nicht nach der Strömungsrichtung, sondern nur danach, in welcher Richtung die Approximation glatter verläuft. Die Forderung nach glatter Interpolation bedeutet gleichzeitig, daß sich durch diese Wahl des Differenzensterns die geringsten Oszillationen ergeben. Auf diese Weise kann für beliebige Ordnungen ein ähnlicher Effekt erzielt werden wie durch eine Limitierung.

Das ENO-Differenzschema besteht aus zwei Teilen: zum einen wird auf der Basis der benachbarten Kontrollvolumen mit Newtons Methode der dividierten Differenzen der optimale Differenzenstern gesucht, und zum anderen für diesen Stern von Stützpunkten die Rekonstruktion auf die Kontrollvolumengrenzfläche durchgeführt.

Die Anzahl der möglichen Differenzensterne richtet sich nach der geforderten Ordnung des ENO-Verfahrens. Bei einer Approximation vierter Ordnung sind vier unterschiedliche Differenzensterne möglich, die verglichen werden müssen. Da die Ermittlung des vollständigen Schemas der dividierten Differenzen für jede Variante sehr aufwendig ist, wird bei der Suche nach der optimalen Variante sukzessive vorgegangen: Ausgehend von einem Intervall zwischen zwei Stützstellen, wird das Schema der dividierten Differenzen jeweils nur um einen Punkt in beide Richtungen erweitert, dann getestet, welche Richtung die günstigere ist und schließlich das Verfahren in die Richtung erweitert, die sich als besser herausgestellt hat. Mehrere solcher Teilschritte werden ausgeführt, bis die gewünschte Ordnung erreicht ist. Unterschiedliche Varianten ergeben sich dadurch, daß der Differenzenstern im ersten Schritt beispielsweise immer in Upwind-Richtung geschoben wird. Ist der optimale Differenzenstern gefunden, wird der Variablenwert ϕ_f auf der Kontrollvolumengrenze durch Rekonstruktion ermittelt.

5.8 Anwendungsbeispiele

5.8.1 Eindimensionales Problem

Das prinzipielle Problem, das bei der Approximation des Konvektionsterms im Falle großer Peclet-Zahlen auftritt, kann bereits an einem sehr einfachen Testfall beobachtet werden. Auch für eine Gegenüberstellung der unterschiedlichen Approximierungsschemata ist es weitgehend ausreichend, die eindimensionale Konvektions-Diffusions-Differentialgleichung zu betrachten und die Resultate zu vergleichen.

Betrachtet werden soll eine Finite-Volumen-Approximation der Differentialgleichung

$$- \rho u \frac{d\phi}{dx} + \Gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0 \quad (5.76)$$

mit den Randbedingungen

$$\phi(x=0) = 0 \quad \phi(x=1) = 1. \quad (5.77)$$

Für die Kontrollvolumen wird ein nichtäquidistantes Gitter verwendet, das in positiver x-Richtung verdichtet ist. Im entscheidenden Bereich bei $x \approx 0.9$ beträgt der Gitterabstand $\Delta x = 0.03$. Es werden jeweils die Ergebnisse bei zwei unterschiedlichen P-Zahlen betrachtet: $P = \frac{\rho u \Delta x}{\Gamma}$; $P = 0.3$ und $P = 30$.

Die Problematik der nichtlimitierten Differenzenschemata ist in Abbildung 34 zu erkennen. Die Abbildungen auf der linken Seite zeigen Lösungen bei $P = 0.3$, also bei einer kleinen Peclet-Zahl, in den Abbildungen rechts beträgt die Peclet-Zahl $P = 30$. Während sich bei der kleinen P-Zahl mit höherer Ordnung für die Zentralfdifferenzenapproximation und QUICK immer bessere Ergebnisse zeigen, ist bei der hohen P-Zahl von 30 zu erkennen, daß die nichtlimitierten Verfahren hier zu starken Oszillationen in der Lösung neigen. Dies gilt für QUICK, CUI, Flux-Blending und insbesondere für das CDS-Verfahren.

Wie zu erwarten war, verhindern TVD-Verfahren Oszillationen, die bei nichtlimitierten Schemata zu beobachten sind. Es ergibt sich sowohl bei der großen als auch bei der kleinen Peclet-Zahl eine Lösung, die der exakten sehr nahe kommt, wie in Abbildung 35 zu erkennen ist.

Während bei $P = 0.3$ kaum ein Unterschied zwischen den einzelnen Verfahren zu beobachten ist, werden die Unterschiede bei $P = 30$ deutlich. Hier zeigt sich im oberen Bild, daß der Parameter γ

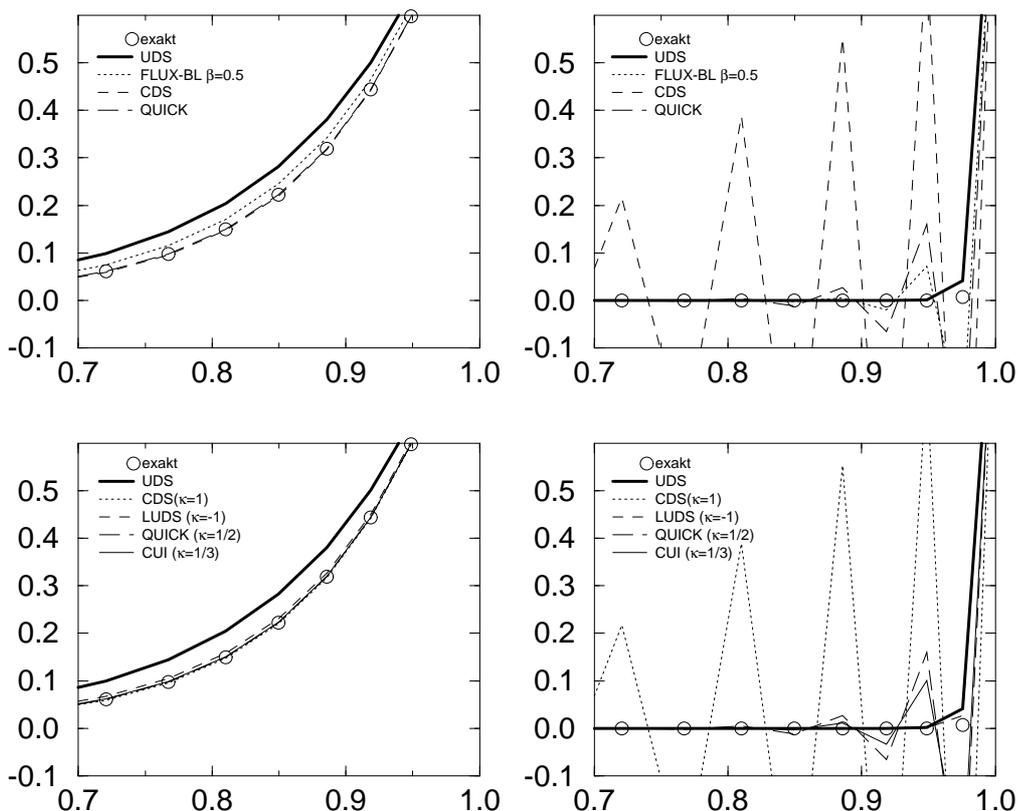


Abbildung 34: Nichtlimitierte Verfahren bei $P=0.3$ und $P=30$

im MUSCL-Schema offenbar kaum eine Rolle spielt – alle Kurven für unterschiedliche Varianten fallen zusammen.

In Abbildung 36 sind die Ergebnisse der eindimensionalen skalaren Transportgleichung mit Hilfe einer ENO-Lösung unterschiedlicher Ordnung dargestellt. Bei der geringen Peclet-Zahl zeigen sich die Vorteile der hohen Ordnung, ENO-Verfahren treffen die exakte Lösung sogar noch besser als beispielsweise das MUSCL-Verfahren. Bei der hohen Peclet-Zahl sind die Verhältnisse anders. Speziell dieser Fall ist für ein ENO-Verfahren problematisch, da wegen des Charakters der exakten Lösung stets ein Differenzenstern verwendet wird, der sich nach links ausrichtet. Dadurch ist dem Verfahren die Möglichkeit genommen, durch Variation der Stützpunkte Oszillationen zu vermeiden.

5.8.2 Zweidimensionale Wirbelströmung

Die Erweiterung der eindimensional definierten Differenzenschemata auf mehrdimensionale Anwendungen ist nicht trivial. Insbesondere in Bereichen, in denen Stromlinien die Gitterlinien unter ungünstigen Winkeln schneiden, treten sowohl numerische Diffusion als auch numerische Oszillationen in verstärktem Maße auf.

Zum Vergleich der unterschiedlichen Schemata wird auf einen Testfall zurückgegriffen, der Gegenstand eines 1982 von Smith und Hutton organisierten Workshops über Konvektionsschemata war.

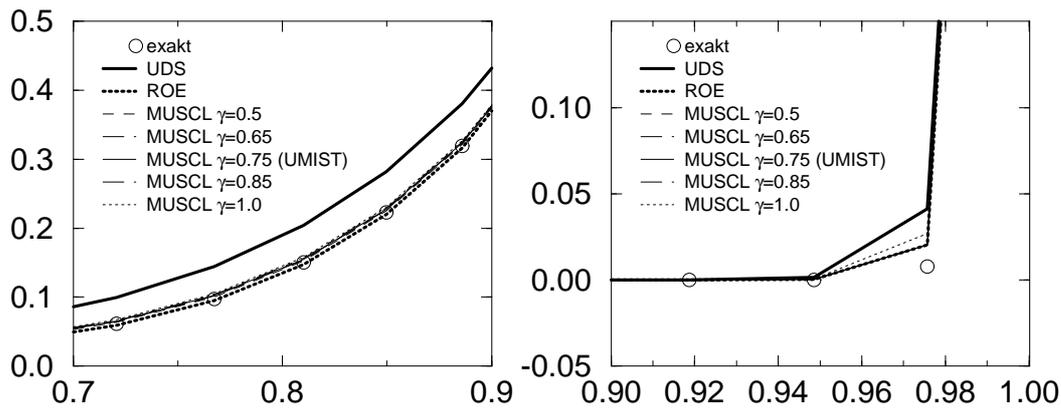


Abbildung 35: Limitierte Schemata bei P=0.3 und P=30

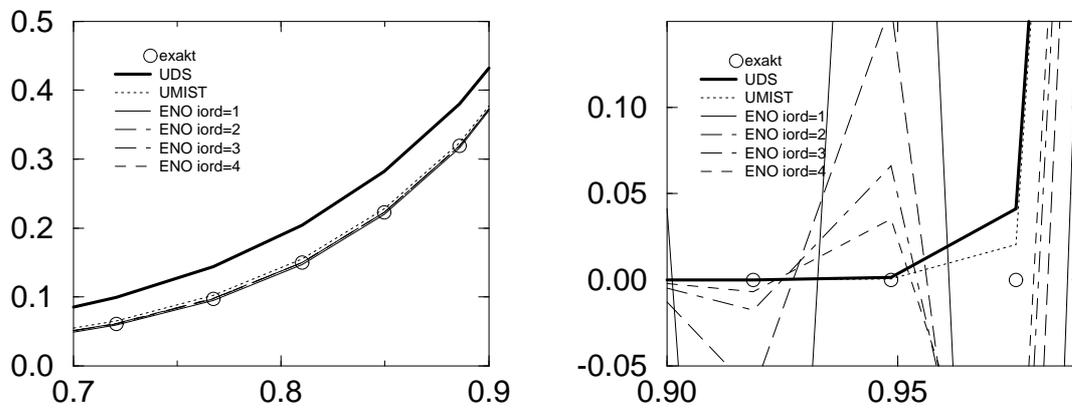


Abbildung 36: ENO-Verfahren unterschiedlicher Ordnung bei P=0.3 und P=30

Hier galt es, in einem Rechengebiet mit vollständig vorgegebenem Geschwindigkeitsfeld eine Transportgleichung mit Konvektions- und Diffusionsanteil zu lösen. Sowohl das Geschwindigkeitsfeld als auch die Randbedingungen für die Transportgleichung sind so gewählt, daß sie hohe Anforderungen an das Konvektionsschema stellen und Bereiche mit unterschiedlichen Winkeln zwischen Stromlinien und Gitterlinien auftreten. Gelöst werden sollte die Gleichung

$$\frac{\partial u\phi}{\partial x} + \frac{\partial v\phi}{\partial y} = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad \text{für} \quad -1 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (5.78)$$

Das Geschwindigkeitsfeld ist gegeben. In Abbildung 37a oben sind die Geschwindigkeitsvektoren als Pfeile dargestellt, es ist

$$u = 2y(1 - x^2), \quad v = -2x(1 - y^2). \quad (5.79)$$

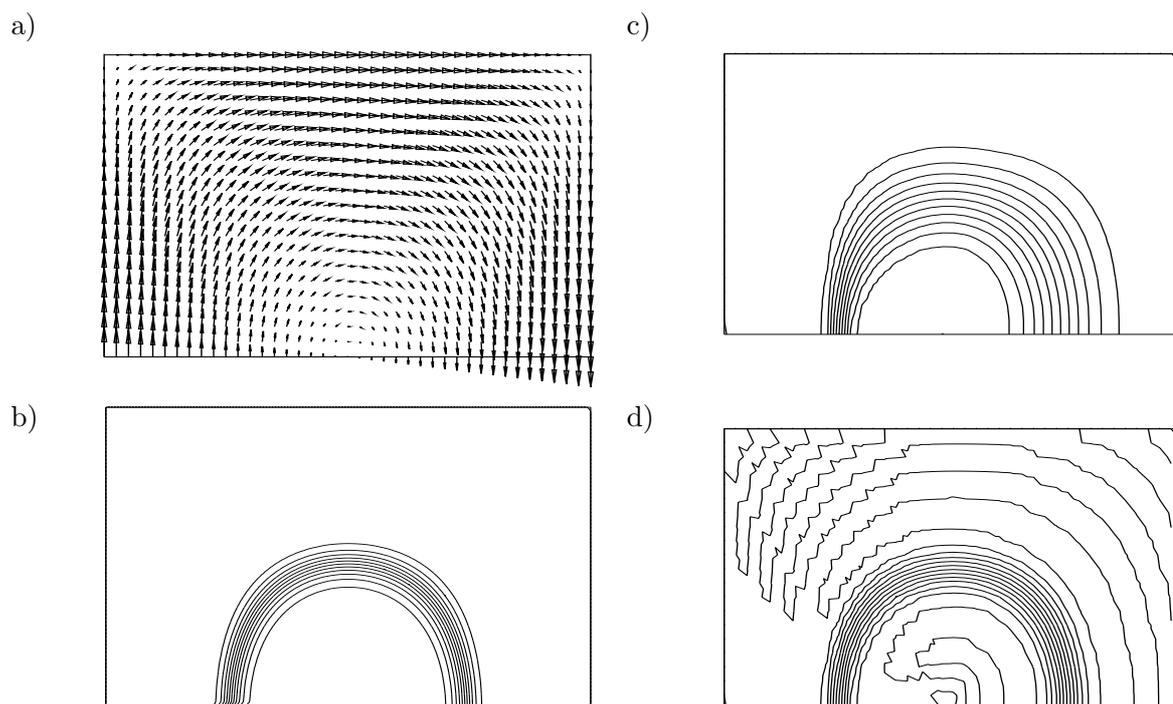


Abbildung 37: a): Vorgegebenes Geschwindigkeitsfeld; b): exakte Lösung nach Smith und Hutton; c): Isolinien der Lösung mit UDS; d): Isolinien der Lösung mit QUICK

Die Randbedingungen für ϕ lauten:

$$\begin{aligned} \text{oben, links und rechts:} & \quad \phi = 0, \\ \text{unten:} & \quad \phi = 1 + \tanh[10(2x + 1)], \quad \text{für } -1 \leq x \leq 0 \\ & \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \quad \text{für } 0 \leq x \leq 1 \end{aligned}$$

Dieses Problem sollte auf einem äquidistanten Gitter mit 40×20 Kontrollvolumen gelöst werden. Es gibt zwei Fälle, wobei diese sich durch globale Peclet-Zahl $P = 500$ und $P = 10^6$ unterscheiden. Die Zell-Peclet-Zahl beträgt dann $P_{\delta x} = 50$ bzw. $P_{\delta x} = 10000$. Ein Isolinienbild mit der exakten Lösung ist in Abbildung 37b dargestellt.

Im allgemeinen wird das Profil am Ausgang des Rechengebiets für den Vergleich verschiedener Differenzenverfahren anhand dieses Testfalls herangezogen. Bei der vorgegebenen hohen Geschwindigkeit und der geringen Diffusion kann insbesondere bei $P = 10^6$ die Fähigkeit unterschiedlicher Verfahren getestet werden, Strömungen zu beschreiben, die fast ausschließlich durch Konvektion gekennzeichnet sind. Zu erwarten ist am Ausgang ein Profil, das mit steigender Peclet-Zahl identisch dem Eingangsprofil wird.

In den Abbildungen 38/39 sind die Verläufe der Transportgröße ϕ am Austrittsquerschnitt für die beiden untersuchten Peclet-Zahlen aufgetragen. Hier wird wiederum deutlich, worin der große Nachteil des Upwind-Schemas liegt. Durch die Überbewertung der Diffusion ergibt sich ein viel zu flacher Übergang von großen zu kleinen Werten von ϕ . Alle Verfahren höherer Ordnung erweisen sich hier als wesentlich leistungsfähiger.

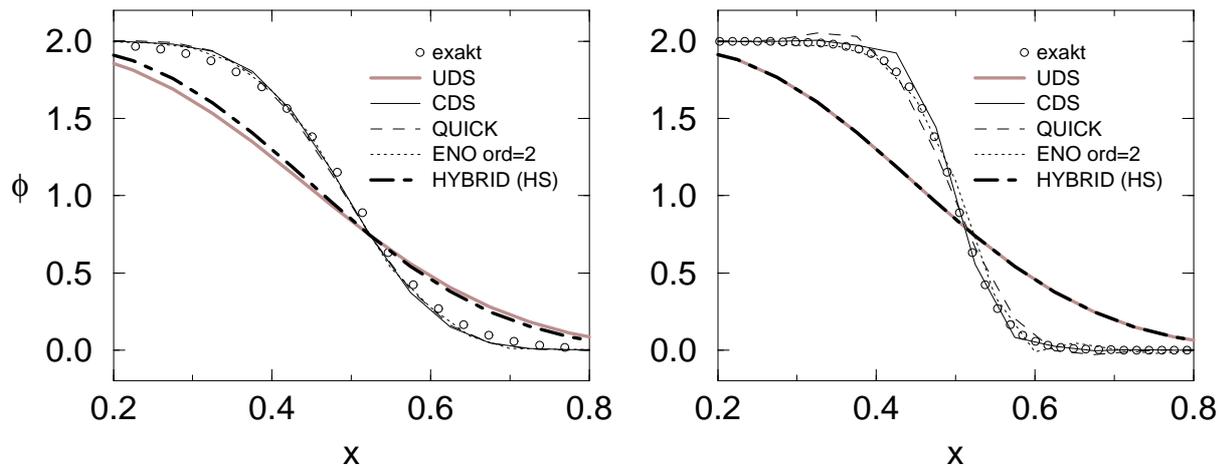


Abbildung 38: Profil am unteren Ausfluß mit $P=500$ (links) und $P = 10^6$ (rechts)

Für die kleinere Peclet-Zahl von $P = 500$ im linken Bild sind keine nennenswerten Unterschiede zwischen den einzelnen Schemata zu beobachten. Bemerkenswert ist dabei vor allem das Verhalten des QUICK-Schemas. Bei der vorliegenden Zell-Peclet-Zahl von $P_{\delta x} = 50$, die weit über der Stabilitätsgrenze dieses Verfahrens von $P_{\delta x} = \frac{8}{3}$ liegt, sind trotzdem keine Anzeichen von Instabilitäten zu erkennen. Die semi-implizite Implementierung ermöglicht es, daß QUICK auch bei weit größeren Zell-Peclet-Zahlen gute Ergebnisse liefert. Ähnliches gilt auch für die Approximation mit Zentralfdifferenzen. Im rechten Bild dagegen bei $P = 10^6$ und $P_{\delta x} = 10000$ zeichnen sich die Charakteristiken der einzelnen Verfahren ab: Die Approximation mit QUICK weist leichte Überschinger in den Übergangsbereichen auf, die Genauigkeit des Verfahrens ist jedoch bei der gewählten Implementierung nach wie vor sehr gut.

Die beste Genauigkeit bringt wie erwartet das ENO-Verfahren. Für beide Peclet-Zahlen liegen die Ergebnisse praktisch auf der exakten Lösung. Für das Smith-and-Hutton-Problem erwies es sich nicht als notwendig, eine höhere Approximationsordnung zu wählen.

Das Hybrid Schema (HS) zeigt für diesen Testfall keine befriedigende Lösung. Da es sich für große Peclet-Zahlen immer mehr dem Upwind-Schema nähert, ergeben sich für $P = 500$, vor allem aber für $P = 10^6$ kaum Unterschiede zum UDS.

In Abbildung 39 werden zwei unterschiedliche Varianten von MUSCL untersucht: zunächst eine symmetrische Variante mit $\gamma = 0.25$ und zum Vergleich eine nicht symmetrische Variante, d.h. ein Schema, bei dem auf die Verwendung der Symmetriebedingung (5.69) verzichtet wurde. Beide Schemata vermeiden Schwingungen, unterscheiden sich aber bei der Genauigkeit der Wiedergabe. Das nichtsymmetrische Schema folgt der exakten Lösung bemerkenswert gut, während das symmetrische dazu neigt, die Diffusion etwas zu groß einzuschätzen und deshalb den Anstieg zu flach annimmt.

Das ROE-Schema zeigt die geringste numerische Diffusion. Da die Kurve jedoch steiler steigt als die exakte Lösung, muß man hier von einem leichten Überschwingen sprechen.

Anhand des Smith-and-Hutton-Problems kann außerdem die Implementierung der Verfahren hinsichtlich der Anwendung auf zweidimensionale Strömungen untersucht werden. Durch die einfache Erweiterung der eindimensionalen Approximation auf die zweite Raumrichtung ist insbesondere in den Bereichen, wo sich Stromlinien und Gitterlinien unter 45° schneiden, mit numerischen Feh-

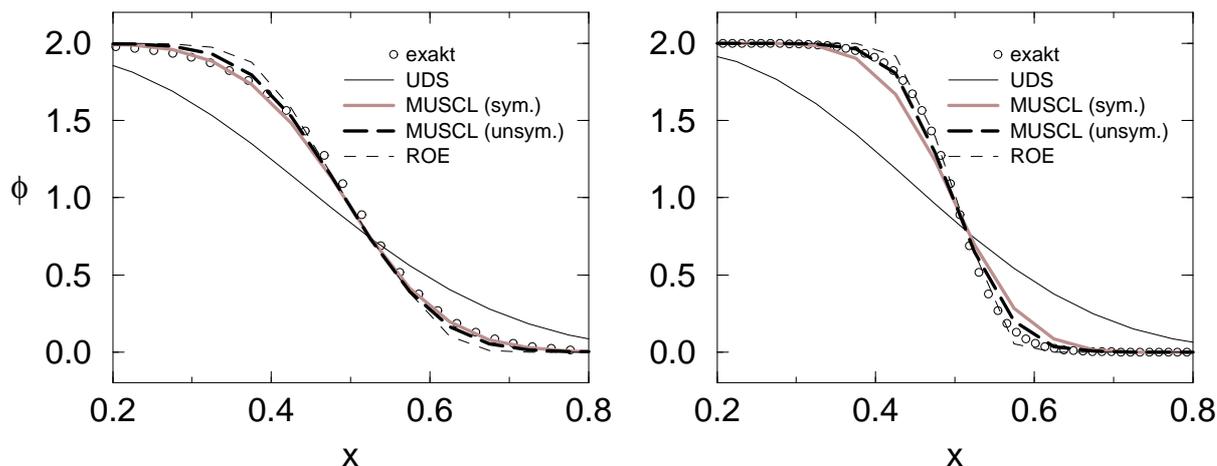


Abbildung 39: Profil am unteren Ausfluß mit $P=500$ (links) und $P = 10^6$ (rechts) für TVD-Verfahren

lern zu rechnen. Hier können in verstärktem Maße Oszillationen auftreten. Zur Beobachtung dieses Effektes sind hier Isolinien Darstellungen für ϕ unter Berücksichtigung verschiedener Differenzenverfahren dargestellt.

Abbildung 37c zeigt die Lösung mit dem Upwind-Schema. Es ist deutlich zu erkennen, daß sich der am Eingang schmale Übergangsbereich stromab aufgrund der überschätzten Diffusion immer stärker verbreitert. Aufgrund der vollkommenen Monotonie des Upwind-Schemas treten an keiner Stelle des Rechengebiets Oszillationen auf.

Das Bild darunter zeigt die Lösung mit QUICK. Hier ist das Profil auch am Ausgang noch schmal, was auf hohe Genauigkeit hindeutet. Im Außenbereich kommt es zu Oszillationen. Hier wird deutlich, daß das hier verwendete Verfahren zur Erweiterung von einer auf zwei Dimensionen insbesondere bei höheren Ordnungen und unter Winkeln von 45° kritisch wird.

Die Isolinienbilder, die auf der Basis von Lösungen mit MUSCL ermittelt wurden, weisen, wie in Abbildung 40a zu erkennen ist, keine Oszillationen auf. Die Genauigkeit ist beim nichtsymmetrischen MUSCL ein wenig besser als beim symmetrischen.

Die Ergebnisse des ENO-Schemas in Abbildung 40c und 40d weisen bei beiden Ordnungen leichte Oszillationen auf, die insbesondere in den Randbereichen auftreten. Offenbar ist gerade dieses Verfahren wegen der Verminderung der Ordnung am Rand anfällig gegenüber leichten Fehlern aufgrund von Oszillationen. Dieser Effekt ist bei der höheren Ordnung weniger stark zu beobachten. Insgesamt sind die Oszillationen hier jedoch deutlich geringer als bei dem simplen QUICK-Schema mit festem Differenzenstern.

Abschließend kann man sagen, daß es kein optimales Konvektionsschema gibt. Für die meisten turbulenten Strömungen lassen sich mit MUSCL-Schemata relativ zuverlässig gute Lösungen erzielen. In Ausnahmefällen kann man von der guten Genauigkeit eines ROE oder ENO-Schemas profitieren, wobei bei letzterem vor allem bei hoher Ordnung ein erheblich vergrößerter Rechenaufwand anfällt. Sind die Strömungen instationär, erweist sich die TVD-Limitierung teilweise als Nachteil und das QUICK-Schema führt zu besseren Resultaten.

Da die Stabilität (Konvergenz) der Verfahren höherer Ordnung generell nicht so gut ist wie beim UDS werden Rechnungen oft mit UDS begonnen und die Diffusionskorrektur erst nach einigen Iterationen eingeschaltet.

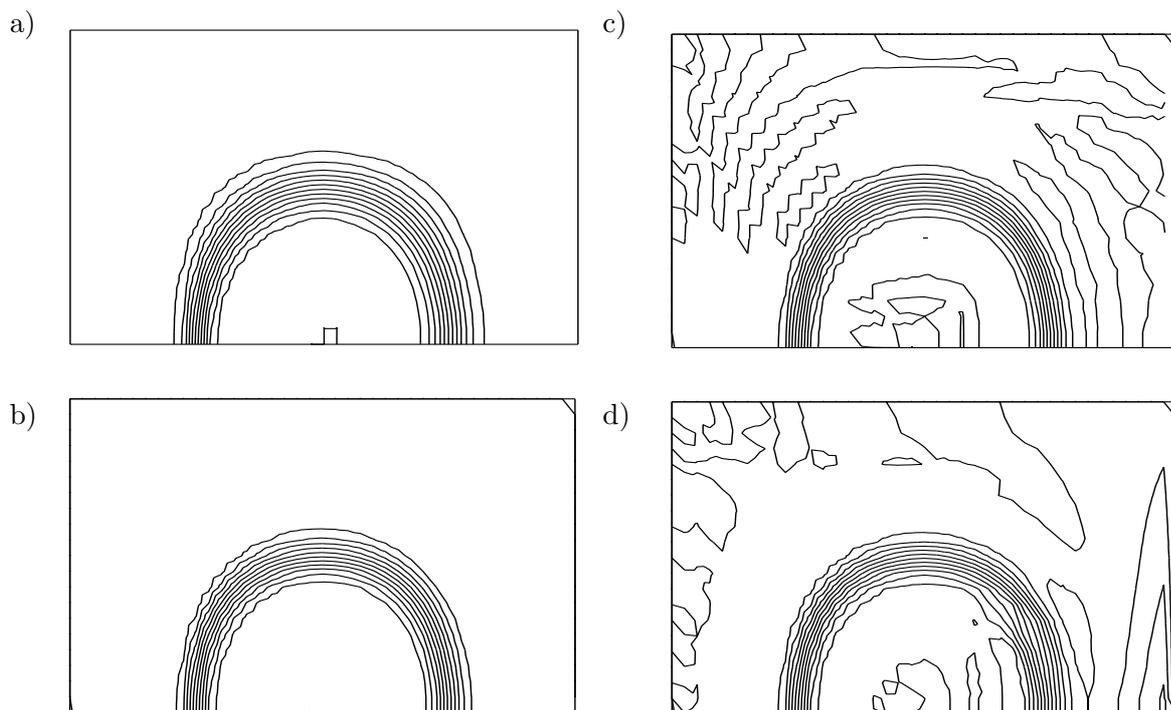


Abbildung 40: Isoliniendarstellung des errechneten ϕ -Feldes a) mit symmetrischem MUSCL; b) mit nichtsymmetrischem MUSCL-Schema; c) mit ENO zweiter Ordnung; d) mit ENO sechster Ordnung

6 Berechnung des Strömungsfeldes

6.1 Notwendigkeit einer besonderen Vorgehensweise

Die Hauptschwierigkeit

In Kapitel 5 haben wir das Verfahren zur Lösung der allgemeinen Differentialgleichung für ϕ in Gegenwart eines gegebenen Strömungsfeldes formuliert. Normalerweise muß das Strömungsfeld (Geschwindigkeiten) und das Druckfeld jedoch aus den entsprechenden Bilanzgleichungen berechnet werden. Die Geschwindigkeitskomponenten ergeben sich aus den Impulsgleichungen, die spezielle Fälle der allgemeinen Differentialgleichung für ϕ darstellen (mit $\phi = u$, $\Gamma = \mu$ usw.). Das Gleichungssystem für die Berechnung eines Strömungsfeldes in diesen sogenannten primitiven Variablen lautet (siehe dazu die Abschnitte 2.1.3 und 2.1.5):

Impuls:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} + S_{u_i} \quad i = 1 \dots 3 \quad (6.1)$$

Kontinuität:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0. \quad (6.2)$$

Die Schwierigkeit bei der Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes liegt im unbekanntem Druckfeld. Der Druckgradient ist Teil des Quellterms für eine Impulsgleichung. Es gibt jedoch keine naheliegende Gleichung für den Druck; die Kontinuitätsgleichung enthält den Druck nicht. Das Druckfeld ist indirekt gegeben durch die Kontinuitätsgleichung. Wenn das korrekte Druckfeld in die Impulsgleichungen eingesetzt wird, erfüllt das resultierende Geschwindigkeitsfeld die Kontinuitätsgleichung. Diese indirekte Beschreibung ist für unsere Zwecke ungeeignet; es sei denn, wir würden den resultierenden Satz von Differenzgleichungen für Impuls und Kontinuität simultan lösen wollen. Zur Berechnung von konsistenten Druck- und Geschwindigkeitsfeldern sind derzeit zwei prinzipiell unterschiedliche Vorgehensweisen üblich.

In der einen Methode wird die Kontinuitätsgleichung zur Bestimmung der lokalen **Dichte** benutzt. Aus der Dichte wiederum kann dann mit einer Zustandsgleichung (z.B. der Zustandsgleichung für ideale Gase) der Druck bestimmt werden, der dann in die Impulsgleichungen (6.1) einzusetzen ist. Diese Vorgehensweise ist von Vorteil, wenn kompressible Strömungen zu berechnen sind und ist daher die Basis für viele erfolgreiche Techniken zur Berechnung kompressibler Strömungen (z.B. MacCormack, 1982; Baldwin u.a., 1975; Steger und Warming, 1981). Die auf die Dichte bezogene Methode kann aber nur unter der Voraussetzung genutzt werden, daß tatsächlich eine eindeutige Beziehung zwischen Druck und Dichte vorhanden ist. Bei inkompressiblen Strömungen kann diese Methode daher nur mit Maßnahmen, die eine künstliche Verbindung zwischen Druck und Dichte schaffen, benutzt werden. Ein Beispiel dafür ist die sogenannte Methode der künstlichen Kompressibilität, bei der zwischen Druck und Dichte willkürlich eine schwache Kopplung angesetzt wird.

In der anderen Methode zur Ermittlung des Geschwindigkeits- und Druckfeldes wird ein auf den **Druck** bezogenes Verfahren eingesetzt. Hier wird zum Abgleich von Impulsbilanz und Kontinuität der Druck aus einer Gleichung bestimmt, die aus der Impulsbilanz und der Kontinuitätsgleichung resultiert. Eine solche Vorgehensweise hat gegenüber den auf die Dichte bezogenen Verfahren den

Vorteil, grundsätzlich sowohl für inkompressible als auch für kompressible Strömungen anwendbar zu sein (Karki und Patankar, 1988). Bei diesen auf den Druck bezogenen Verfahren sind gegenwärtig unterschiedliche Lösungsstrategien für die numerische Simulation bekannt. Eines dieser Verfahren, das sogenannte **Druckkorrekturverfahren** wird im folgenden näher beschrieben.

An dieser Stelle sei noch kurz auf Möglichkeiten zur Vermeidung der mit der Druckbestimmung verbundenen Schwierigkeiten durch Wirbelstärke- und reine Stromfunktionsverfahren verwiesen.

Unsere Aufgabe ist die Umsetzung der indirekten Information in der Kontinuitätsgleichung in einem direkten Algorithmus für die Druckberechnung. Für dieses Vorhaben müssen jedoch einige Schwierigkeiten überwunden werden.

6.2 Einige verwandte Schwierigkeiten

Darstellung des Druckgradiententerms

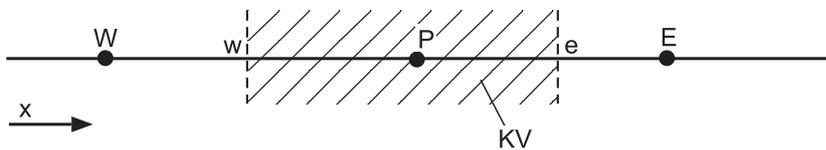


Abbildung 41: Eindimensionale Darstellung Druckgradiententerm

Wir beschränken uns zunächst auf inkompressible Strömungen. Für die eindimensionale Situation (Abbildung 41) ergibt sich bei der Konstruktion der diskretisierten Impulsgleichung lediglich eine neue Besonderheit: die Darstellung des über das Kontrollvolumen integrierten Terms $-\frac{dp}{dx}$. Der resultierende Beitrag zur Diskretisierungsgleichung ist die Druckdifferenz $p_w - p_e$. Sie ist die auf das Kontrollvolumen mit Querschnitt eins ($\Delta y \cdot \Delta z = 1 \cdot 1$) ausgeübte Druckkraft. Um $p_w - p_e$ auszudrücken in den Gitterpunktwerten des Drucks können wir ein stückweise lineares Profil für den Druck annehmen. Aus Gründen algebraischer Einfachheit nehmen wir die Kontrollvolumenwände e und w in der Mitte zwischen den entsprechenden Gitterpunkten an und erhalten

$$p_w - p_e = \frac{p_W + p_P}{2} - \frac{p_P + p_E}{2} = \frac{p_W - p_E}{2}. \quad (6.3)$$

Die Impulsgleichung enthält damit Druckdifferenzen zwischen zwei alternierenden Gitterpunkten und nicht zwischen benachbarten. Der Druck wird damit effektiv von einem größeren Gitter berechnet, mit entsprechend geringerer Genauigkeit. Ein weit schwerwiegenderes Problem ist im Abbildung 42 dargestellt.



Abbildung 42: Zick-Zack-Druckfeld (eindimensional)

Ein solches Zick-Zack-Druckfeld ist unrealistisch, ergibt jedoch für jeden Gitterpunkt P ein entsprechendes $p_W - p_E = 0$. Die Impulsgleichung fühlt ein solches Druckfeld wie ein konstantes. Dramatischer ist eine entsprechende Situation in zwei Dimensionen:

	10	5	10	5	10
	3	18	3	18	3
	10	5	10	5	10
	3	18	3	18	3

Abbildung 43: Schachbrettartiges Druckfeld (zweidimensional)

Ein solches Schachbrett–Druckfeld ergibt keine Druckkraft in x - oder y -Richtung, und somit würde ein stark ungleichförmiges Druckfeld wie ein konstantes Druckfeld wirken. Ein solches Druckfeld könnte während der Iteration entstehen und würde auch bei Konvergenz nicht verschwunden sein. Ergibt sich ein glattes Druckfeld als Lösung, könnte durch Überlagerung mit einem Schachbrett–Druckfeld eine beliebige andere Lösung erzeugt werden, und die Impulsgleichung würde nicht beeinflusst werden.

Darstellung der Kontinuitätsgleichung

Ähnliche Probleme ergeben sich bei der Konstruktion der diskretisierten Kontinuitätsgleichung. Im stationären, eindimensionalen Fall mit $\rho = const$ ist die Kontinuitätsgleichung einfach

$$\frac{du}{dx} = 0 . \quad (6.4)$$

Integration über das oben dargestellte Kontrollvolumen ergibt

$$u_e - u_w = 0 . \quad (6.5)$$

Stückweise lineares u -Profil und Kontrollvolumen–Wände in der Mitte führen auf

$$\frac{u_P + u_E}{2} - \frac{u_W + u_P}{2} = 0 \quad (6.6)$$

oder

$$u_E - u_W = 0 . \quad (6.7)$$

Es ergibt sich das gleiche Problem wie beim Druck. Die diskretisierte Kontinuitätsgleichung fordert Gleichheit der Geschwindigkeiten an alternierenden Gitterpunkten und nicht an benachbarten. Die Folge ist, daß völlig unrealistische Geschwindigkeitsfelder wie in Abbildung 44 die diskretisierte Kontinuitätsgleichung (6.7) erfüllen. Ähnliches gilt für zwei- und dreidimensionale Fälle. Diese Schwierigkeiten müssen beseitigt werden, bevor ein numerisches Verfahren unter Einbeziehung von Druck und Geschwindigkeiten formuliert werden kann.



Abbildung 44: Alternierendes Geschwindigkeitsfeld

6.3 Ein Ausweg: Das gestaffelte Gitter

Die Schwierigkeiten lassen sich folgendermaßen umgehen. Wir müssen nicht alle Variablen für die selben Gitterpunkte berechnen. Im Fall der Geschwindigkeiten ergeben sich beträchtliche Vorteile, wenn sie auf einem Gitter angeordnet werden, das sich von dem der anderen Variablen unterscheidet. Die Schwierigkeiten verschwinden damit.

Ein versetztes oder gestaffeltes Gitter (staggered grid) wurde erstmals von Harlow & Welch (1965) in ihrer MAC (marker and cell) Methode verwendet. Es bildet u.a. auch die Grundlage für den SIMPLE-Algorithmus (Patankar & Spalding, 1972). Die Geschwindigkeiten werden dabei an Punkten gespeichert, die auf den Kontrollvolumen-Wänden liegen. Jede Geschwindigkeitskomponente liegt auf der zu ihr senkrechten Kontrollvolumen-Wand (siehe Abbildung 45), unabhängig davon, wo die Kontrollvolumen-Wand liegt (insbesondere nicht notwendig in der Mitte).

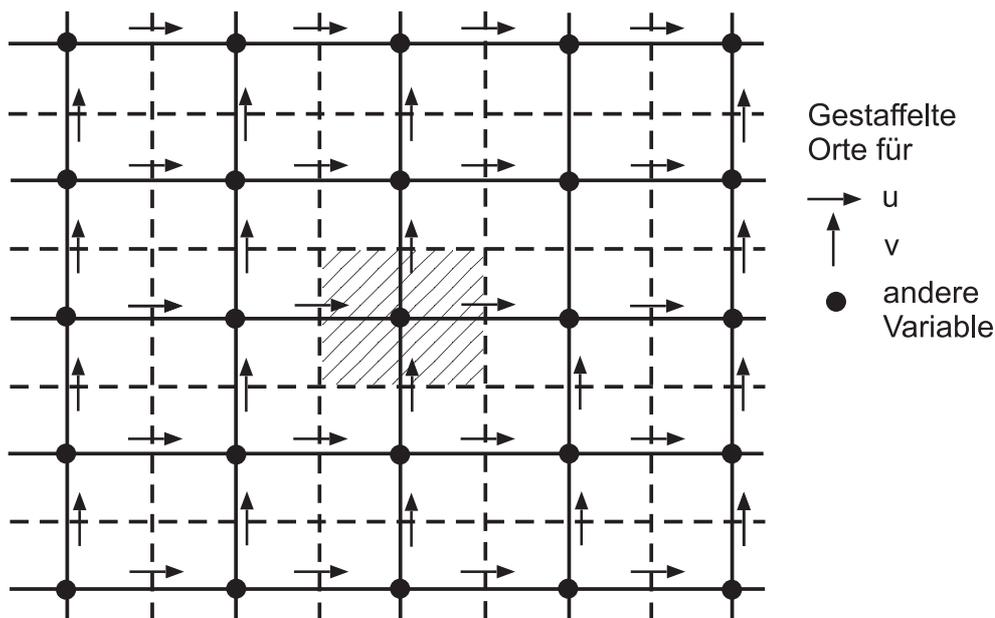


Abbildung 45: Gestaffeltes Gitter

Eine unmittelbare Konsequenz des gestaffelten Gitters ist, daß die Massenflüsse durch die Kontrollvolumen-Wände (F in Kapitel 5) ohne Interpolation der entsprechenden Geschwindigkeitskomponenten berechnet werden können.

Es gibt zwei wichtige Vorteile:

Für ein typisches Haupt-Kontrollvolumen (im Bild schraffiert) enthält die diskretisierte Kontinuitätsgleichung Differenzen benachbarter Geschwindigkeitskomponenten. Damit wird die Kontinuitätsgleichung durch schachbrettartiger Geschwindigkeitsfelder nicht mehr erfüllt, sondern nur noch durch 'vernünftige'.

Der zweite Vorteil liegt darin, daß die Druckdifferenz zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten

jetzt die natürliche treibende Kraft für die dazwischenliegende Geschwindigkeit wird. Schachbrett-Druckfelder würden damit nicht mehr als gleichförmig empfunden werden und könnten sich nicht als mögliche Lösungen ergeben. Die Elimination der eingangs erwähnten Schwierigkeit hat ihren Preis. Ein Programm basierend auf gestaffeltem Gitter muß die ganze Index- und Geometrie-Information über die Geschwindigkeiten führen und muß ziemlich ermüdende Interpolationen durchführen. Die Vorteile sind jedoch die Mühe wert.

6.4 Die Impulsgleichungen

Für gegebenes Druckfeld gibt es keine Schwierigkeiten, die Impulsgleichungen für u, v, w zu lösen. Es gibt einige kleine Unterschiede im Vergleich zur allgemeinen ϕ -Gleichung wegen des gestaffelten Gitters. Die gestaffelten Kontrollvolumen für die x - und y -Impulsgleichungen sind in Abbildung 46 dargestellt.

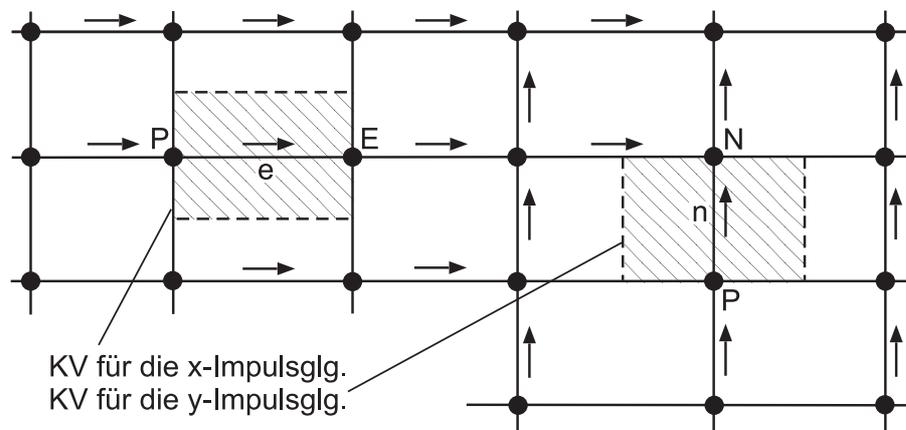


Abbildung 46: Gestaffelte Kontroll-Volumina

Z.B. für u liegen die Wände des Kontrollvolumens zwischen dem Punkte e und den entsprechenden Orten für die Nachbar- u -Geschwindigkeiten. Es ist damit versetzt in Bezug auf das normale Kontrollvolumen um den Hauptgitterpunkt P , und zwar nur in x -Richtung, so daß die Wände senkrecht zur x -Richtung durch die Hauptgitterpunkte P und E gehen. Damit kann die Druckdifferenz $p_P - p_E$ zur Berechnung der auf das u -Kontrollvolumen wirkenden Druckkräfte verwendet werden. Die Berechnung der Diffusionskoeffizienten und der Massenflüsse an den Wänden des u -Kontrollvolumens erfordern passende Interpolationen: im wesentlichen kann die in Kapitel 5 beschriebene Formulierung verwendet werden.

Die resultierende Diskretisierungsgleichung für den x -Impuls ist

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + b + (p_P - p_E) A_e . \quad (6.8)$$

Die Nachbarkoeffizienten a_{nb} berücksichtigen den kombinierten Konvektions-/Diffusionsfluß an den Kontrollvolumen-Wänden. Der Term b ist wie in Gleichung (5.47) oder (5.52) definiert, aber der Druckgradient ist nicht in den Quelltermgrößen \underline{S}_c und \underline{S}_p enthalten. Der Druckgradient führt auf den letzten Term in (6.8), $(p_P - p_E) A_e$. Er ist die auf das u -Kontrollvolumen wirkende Druckkraft, wobei A_e die Fläche ist, auf die der Druck wirkt. Im dreidimensionalen Fall ist $A_e = \Delta y \cdot \Delta z$. Analoges gilt für das Kontrollvolumen für den y -Impuls, welches in y -Richtung versetzt ist. Die Diskretisierungsgleichung für v_n ist

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + b + (p_P - p_N) A_n , \quad (6.9)$$

wobei $(p_P - p_N) A_n$ die entsprechende Druckkraft ist. Für die w -Geschwindigkeit kann leicht eine analoge Gleichung abgeleitet werden.

Die Impulsgleichungen können nur gelöst werden, wenn das Druckfeld gegeben oder irgendwie geschätzt wird. Wenn nicht das richtige Druckfeld verwendet wird, wird das resultierende Geschwindigkeitsfeld nicht die Kontinuitätsgleichung erfüllen. Ein solches Geschwindigkeitsfeld, basierend auf einem nicht perfekten Druckfeld p^* , sei mit u^* , v^* , w^* bezeichnet. Dieses "gesternte" Geschwindigkeitsfeld ergibt sich aus der Lösung der Diskretisierungsgleichungen

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b + (p_P^* - p_E^*) A_e , \quad (6.10)$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + b + (p_P^* - p_N^*) A_n , \quad (6.11)$$

$$a_t w_t^* = \sum a_{nb} w_{nb}^* + b + (p_P^* - p_T^*) A_t . \quad (6.12)$$

6.5 Die Druck- und Geschwindigkeitskorrekturen

Unser Ziel ist Verbesserung des geschätzten Drucks p^* so, daß das gesternte Geschwindigkeitsfeld besser die Kontinuitätsgleichung erfüllt. Angenommen, wir erhalten den korrekten Druck p aus

$$p = p^* + p' . \quad (6.13)$$

Wir nennen p' die Druckkorrektur. Nun müssen wir herausfinden, wie die Geschwindigkeitskomponenten auf diese Druckänderung reagieren. Die entsprechenden Geschwindigkeitskorrekturen u' , v' , w' werden analog eingeführt:

$$u = u^* + u' ; \quad v = v^* + v' ; \quad w = w^* + w' . \quad (6.14)$$

Subtrahieren von (6.10) und (6.8) führt auf

$$a_e u_e' = \sum a_{nb} u_{nb}' + (p_P' - p_E') A_e . \quad (6.15)$$

Wir vernachlässigen den Term $\sum a_{nb} u_{nb}'$ (Diskussion später) und erhalten

$$a_e u_e' = (p_P' - p_E') A_e \quad (6.16)$$

oder

$$u_e' = d_e (p_P' - p_E') \quad (6.17)$$

mit

$$d_e = \frac{A_e}{a_e} . \quad (6.18)$$

Gleichung (6.17) heißt Geschwindigkeitskorrekturformel und kann auch geschrieben werden als

$$u_e = u_e^* + d_e (p_P' - p_E') . \quad (6.19)$$

Die gesternte Geschwindigkeit u_e^* wird also korrigiert aufgrund der Druckkorrekturen, wodurch sich u_e ergibt. Entsprechendes gilt für die anderen Geschwindigkeitskomponenten.

$$v_n = v_n^* + d_n(p'_P - p'_N) , \quad (6.20)$$

$$w_t = w_t^* + d_t(p'_P - p'_T) . \quad (6.21)$$

Damit haben wir alles Notwendige für eine Diskretisierungsgleichung für p' .

6.6 Die Druckkorrekturgleichung

Aus der Kontinuitätsgleichung leiten wir eine Gleichung für die Druckkorrektur ab. Wir nehmen an, daß die Dichte nicht direkt vom Druck abhängt (Diskussion später). Für einen dreidimensionalen Fall ist die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{\partial(\varrho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\varrho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\varrho w)}{\partial z} = 0 . \quad (6.22)$$

Integration über das Kontrollvolumen im Abbildung 47 (entspricht dem Haupt-Kontrollvolumen für allgemeine Variable ϕ).

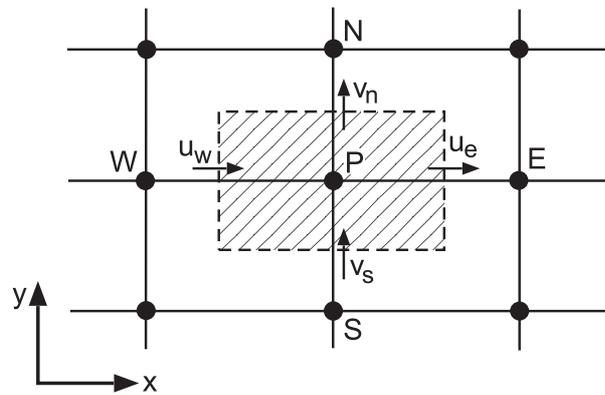


Abbildung 47: Haupt-Kontrollvolumen

Für die Integration von $\frac{\partial \varrho}{\partial t}$ sei die Dichte konstant im Kontrollvolumen. Geschwindigkeiten wie u_e an einer Kontrollvolumen-Wand beschreiben den Massenfluß für die gesamte Wand. Voll implizite Zeitdiskretisierung führt schließlich auf die integrierte Form von (6.22)

$$\frac{(\varrho_P - \varrho_P^0) \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} + [(\varrho u)_e - (\varrho u)_w] \Delta y \Delta z + [(\varrho v)_n - (\varrho v)_s] \Delta z \Delta x + [(\varrho w)_t - (\varrho w)_b] \Delta x \Delta y = 0 . \quad (6.23)$$

Ersetzen der Geschwindigkeiten durch die Geschwindigkeitskorrekturformel (6.19) - (6.21) ergibt die Diskretisierungsgleichung für p'

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + a_T p'_T + a_B p'_B + b \quad (6.24)$$

mit

$$\begin{aligned} a_E &= \varrho_e d_e \Delta y \Delta z & ; & & a_W &= \varrho_w d_w \Delta y \Delta z \\ a_N &= \varrho_n d_n \Delta z \Delta x & ; & & a_S &= \varrho_s d_s \Delta z \Delta x \\ a_T &= \varrho_t d_t \Delta x \Delta y & ; & & a_B &= \varrho_b d_b \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (6.25)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B$$

$$b = \frac{(\varrho_P - \varrho_P^0)\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + [(\varrho u^*)_w - (\varrho u^*)_e]\Delta y\Delta z + [(\varrho v^*)_s - (\varrho v^*)_n]\Delta z\Delta x + [(\varrho w^*)_b - (\varrho w^*)_t]\Delta x\Delta y. \quad (6.26)$$

Die Dichte liegt normalerweise nur an den Gitterpunkten vor, so daß die Wand-Dichten wie ϱ_e geeignet interpoliert werden müssen. Dabei muß der Wert von ϱ_e konsistent für die beiden Kontrollvolumen berechnet werden, zu denen die Wand gehört (Grundregel 1).

Aus (6.25) ist ersichtlich, daß der Term b in der Druckkorrekturgleichung im wesentlichen die linke Seite der diskretisierten Kontinuitätsgleichung (6.23) darstellt, ausgewertet für die gesternten Geschwindigkeiten. $b = 0$ bedeutet, daß die gesternten Geschwindigkeiten die Kontinuitätsgleichung erfüllen und keine Druckkorrektur notwendig ist. Der Term b stellt daher eine 'Massenquelle' dar, die die Druckkorrekturen (vermittels ihrer abgeleiteten Geschwindigkeitskorrekturen) auslöschen müssen.

Mit der Formulierung aller notwendigen Gleichungen für die Berechnung der Geschwindigkeitskomponenten und des Drucks können wir das Gesamtverfahren darstellen.

6.7 Der SIMPLE-Algorithmus

Die entwickelte Prozedur heißt in der Literatur SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, Patankar, 1972).

Reihenfolge der Operationen des Gesamtverfahrens

1. Schätze ein Druckfeld p^* .
2. Löse Impulsgleichungen für u^* , v^* , w^* .
3. Löse Druckkorrekturgleichung für p' .
4. Korrigiere Druck und Geschwindigkeiten $p = p^* + p'$, $u_e = u_e^* + u_e'$...; setze $p^* = p$.
5. Löse Gleichungen für andere Variable wie Temperatur, Konzentration, Turbulenzgrößen etc. sofern sie das Strömungsfeld beeinflussen.
6. Gehe nach 2. und iteriere bis zur Konvergenz.

Diskussion der Druckkorrekturgleichung

In Kapitel 6.5 wurde der Term $\sum a_{nb}u'_{nb}$ vernachlässigt auf dem Weg zur Geschwindigkeitskorrekturformel (6.19).

1. Berücksichtigung des Terms würde alle Nachbarpunkte involvieren, und voll implizite Lösung wäre notwendig. Vernachlässigung führt auf die gleiche Form wie die allgemeine ϕ -Gleichung und macht das Verfahren nicht mehr voll-, sondern nur noch partiell implizit (semi-implizit).
2. Die Vernachlässigung verursacht keinen Fehler in der konvergierten Lösung, da das 'gestern-te' Geschwindigkeitsfeld bereits die Kontinuität erfüllt. Die Herleitung der p' -Gleichung spielt dann keine Rolle mehr.

3. Die Massenquelle b ist ein guter Konvergenzindikator.
4. Die Druckkorrektur ist lediglich ein vorübergehender Algorithmus, der das konvergierte Druckfeld nicht beeinflußt. Die Formulierung beeinflußt aber die Konvergenzgeschwindigkeit.
5. Die Druckkorrekturgleichung (Kapitel 6.6) ist divergenzempfindlich, wenn nicht unterrelaxiert wird. Unterrelaxation von u^* , v^* , w^* bei Lösungen der Impulsgleichung bezogen auf vorangegangene Iterationswerte u , v , w mit $\alpha \approx 0.5$ (Gleichung 4.51). Außerdem addieren wir nur einen Bruchteil von p' zu p^* :

$$p = p^* + \alpha_p p' \quad (6.27)$$

mit $\alpha_p = 0.8$.

6. In der nächsten Iteration wird p zu p^* . ($\alpha = 0.5$ und $\alpha_p = 0.8$ sind gute Anhaltswerte). Unterrelaxation ist notwendig, da durch Fortlassen von $\sum a_{nb} u'_{nb}$ die Druckkorrektur zu groß berechnet wird.
7. In jeder Iteration erfüllen die korrigierten Geschwindigkeiten die Kontinuitätsgleichung, was sich vorteilhaft auswirkt. Die Geschwindigkeitskorrektur sollte nicht unterrelaxiert werden.
8. Kompressible Strömungen erfordern die kompressible Form der Druckkorrekturgleichung (Kapitel 6.9).

Randbedingungen für die Druckkorrekturgleichung

Normalerweise hat man zwei Arten von Randbedingungen. Entweder ist der Druck am Rand gegeben (und Geschwindigkeit ist unbekannt) oder die Normalengeschwindigkeit ist gegeben.

Gegebener Randdruck

Wird das geschätzte Druckfeld p^* so angeordnet, daß am Rand $p^* = P_{\text{gegeben}}$ ist, dann ist dort $p' = 0$. Das entspricht der Randbedingung *gegebene Temperatur* bei Wärmeleitungsproblemen.

Gegebene Normalengeschwindigkeit

Der Rand falle mit einem Kontrollvolumen-Rand zusammen (Abbildung 48) und die Geschwindigkeit u_e sei gegeben. In der Ableitung der p' -Gleichung für das Kontrollvolumen muß der Fluß über die Wand am Rand nicht durch u_e^* und eine entsprechende Korrektur vorgegeben werden, sondern durch u_e selbst ausgedrückt werden. Damit ist $a_E = 0$ in der p' -Gleichung und es wird keine Information über p'_E benötigt.

Der Druck als relative Größe

Betrachte eine stationäre Situation mit $\rho = \text{const}$, in der die Normalengeschwindigkeit an allen Rändern gegeben ist. Da kein Randdruck vorgegeben wird, und alle Randkoeffizienten wie $a_E = 0$ sind, hat die p' -Gleichung keine Möglichkeit, den absoluten Wert von p' festzulegen. Die Koeffizienten der p' -Gleichung sind so, daß $a_P = \sum a_{nb}$ (6.25), wodurch sowohl p' als auch $p' + \text{const}$ die p' -Gleichung erfüllt. In solchen Situationen ist der Absolutwert des Drucks irrelevant, da nur Druckdifferenzen sinnvoll sind, und diese nicht durch beliebige additive Konstanten geändert werden. Der Druck ist dann eine relative Größe, keine absolute.

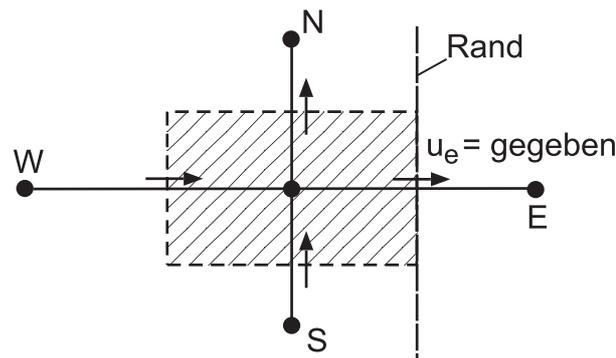


Abbildung 48: Kontrollvolumen am Ostrand

Iterative Methoden konvergieren gegen eine Lösung, die durch die Anfangsschätzung entschieden wird. Direkte Methoden führen auf singuläre Matrizen. Man fixiert p' dann in einem Punkt und löst die p' -Gleichung für die restlichen Volumen. Die Kontinuitätsgleichungen für die Volumen sind nicht linear unabhängig. In einem sauber gestellten Problem erfüllen die gegebenen Randgeschwindigkeiten die Gesamt-Kontinuität. Die Kontinuitätsgleichung für das letzte Volumen enthält damit keine Information, die nicht schon in den Kontinuitätsgleichungen für alle anderen Kontrollvolumen enthalten ist. Daher wird das korrigierte Geschwindigkeitsfeld die Kontinuität für alle Kontrollvolumen erfüllen, auch wenn eine der Kontrollvolumengleichungen weggelassen und der p' -Wert dort vorgeschrieben wird.

In vielen Problemen ist der Absolutwert des Drucks viel größer als lokale Druckdifferenzen. Verwendung der Absolutwerte für p führt zu Rundungsfehlern bei der Differenzenberechnung, z.B. $p_P - p_E$. Daher sollte $p = 0$ als Referenzwert an einem passendem Punkt gesetzt und alle anderen Werte als relative Werte bezogen auf diesen Referenzwert berechnet werden. Analog sollten vor der Lösung der p' -Gleichung in jeder Iteration $p' = 0$ als Schätzwert für alle Punkte angenommen werden, damit die Lösung keine großen Absolutwerte produziert. Wird der Druck am Rand vorgegeben oder wenn die Dichte vom Druck abhängig ist (kompressibel), dann ist das Druckniveau nicht unbestimmt.

6.8 Ein modifizierter Algorithmus: SIMPLER

Zur Verbesserung der Konvergenzrate hat Patankar 1979 einen modifizierten SIMPLE-Algorithmus veröffentlicht: SIMPLER (SIMPLE Revised).

Motivation

In der Ableitung der p' -Gleichung führt die Vernachlässigung des Terms $\sum a_{nb} u'_{nb}$ auf recht übertriebene Druckkorrekturen, wodurch Unterrelaxation notwendig wird. Da der Einfluß der Geschwindigkeitskorrekturen an den Nachbarnpunkten vernachlässigt wird, muß die Druckkorrektur die ganze Last der Korrektur der Geschwindigkeiten tragen. Es ist vernünftig, anzunehmen, daß die Druckkorrekturgleichung die Geschwindigkeiten recht gut zu verbessern vermag, aber bei der Verbesserung des Drucks schlechte Dienste leistet. Einen effizienteren Algorithmus erhalten wir, wenn wir die Druckkorrekturgleichung nur zur Verbesserung der Geschwindigkeiten verwenden, und ein verbessertes Druckfeld mit anderen Mitteln zu erhalten versuchen. Das ist der Kern von SIMPLER.

Die Druckgleichung

Eine Gleichung für das Druckfeld erhalten wir wie folgt. Die Impulsgleichung (6.8) wird geschrieben als

$$u_e = \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b}{a_e} + d_e(p_P - p_E) \quad (6.28)$$

mit d_e nach (6.18). Wir definieren eine Pseudo-Geschwindigkeit \hat{u}_e :

$$\hat{u}_e = \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b}{a_e} . \quad (6.29)$$

\hat{u}_e setzt sich aus den Nachbargeschwindigkeiten u_{nb} zusammen und enthält keinen Druck. Gleichung (6.28) wird jetzt

$$u_e = \hat{u}_e + d_e(p_P - p_E) \quad (6.30)$$

und analog

$$v_n = \hat{v}_n + d_n(p_P - p_N) \quad (6.31)$$

$$w_t = \hat{w}_t + d_t(p_P - p_T) \quad (6.32)$$

Die Analogie zwischen diesen Gleichungen und den Gleichungen (6.19 - 6.21) ist leicht zu sehen. Statt u^* , v^* , w^* haben wir hier \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} und der Druck p selbst tritt an die Stelle von p' . Aus der Herleitung in Kapitel 6.6 folgt dann bei Verwendung dieser neuen Geschwindigkeits-Druck-Beziehung eine Gleichung für den Druck:

$$a_{PPP} = a_{EPE} + a_{WPW} + a_{NPN} + a_{SPS} + a_{TPT} + a_{BPB} + b \quad (6.33)$$

mit a_E , a_W usw. nach (6.25); die Konstante b ist gegeben durch:

$$b = \frac{(\varrho_P^0 - \varrho_P)\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + [(\varrho\hat{u})_w - (\varrho\hat{u})_e]\Delta y\Delta z + [(\varrho\hat{v})_s - (\varrho\hat{v})_n]\Delta z\Delta x + [(\varrho\hat{w})_b - (\varrho\hat{w})_t]\Delta x\Delta y. \quad (6.34)$$

Dieser Ausdruck für b ist der einzige Unterschied zwischen der Druckgleichung (6.33) und der Druckkorrekturgleichung (6.24). Der Ausdruck (6.34) für b verwendet die Pseudogeschwindigkeiten \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} , während b für die p' -Gleichung mit den gesternten Geschwindigkeiten berechnet wurde. Obwohl die Druckgleichung und die Druckkorrekturgleichung fast identisch sind, besteht ein wesentlicher Unterschied: In der Herleitung der Druckgleichung wurden keine Näherungen gemacht. Verwendet man ein korrektes Geschwindigkeitsfeld zur Berechnung der Pseudo-Geschwindigkeiten, dann ergibt die Druckgleichung sofort den korrekten Druck.

Der SIMPLER-Algorithmus

Der modifizierte Algorithmus besteht aus der Lösung der Druckgleichung für das Druckfeld und der Lösung der Druckkorrekturgleichung nur zur Verbesserung der Geschwindigkeiten. Die Folge der Operationen ist

1. Schätze ein Geschwindigkeitsfeld
2. Berechne Koeffizienten für die Impulsgleichungen und berechne Pseudogeswindigkeiten \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} aus Gleichungen wie (6.29) durch Einsetzen der momentanen Schätzungen für die Nachbargeschwindigkeiten u_{nb} . (Speichere Koeffizienten ab!)
3. Berechne Koeffizienten für die Druckgleichung (6.33) und löse für das Druckfeld.
4. Mit diesem Druckfeld als p^* : Löse die Impulsgleichung für u^* , v^* , w^* .
5. Berechne Massenquelle $b[(6.25)]$ und verwende die Koeffizienten aus 2. zur Lösung der Druckkorrekturgleichung.
6. Korrigiere Geschwindigkeitsfeld mit (6.19–6.21), aber korrigiere nicht das Druckfeld. Das korrigierte Geschwindigkeitsfeld erfüllt die Kontinuitätsgleichung exakt.
7. Löse Diskretisierungsgleichung für andere ϕ 's falls notwendig.
8. Gehe nach 2. und wiederhole bis zur Konvergenz.

Diskussion

1. Da die Druckkorrekturgleichung vernünftige Geschwindigkeitsfelder produziert und gleichzeitig die direkte Konsequenz eines gegebenen Geschwindigkeitsfeldes ohne Näherung ausarbeitet, sollte Konvergenz viel schneller erreicht werden.
2. Während SIMPLE von einer guten Druckschätzung profitiert, ist für SIMPLER eine gute Geschwindigkeitsschätzung von Vorteil. (Im allgemeinen ist es einfacher, das Geschwindigkeitsfeld zu schätzen).
3. Wegen der starken Ähnlichkeit zwischen der Druckgleichung und der Druckkorrekturgleichung gelten die für die p' -Gleichung gemachten Bemerkungen über Randbedingungen auch für die Druckgleichung. Die Bemerkungen zum Druck als relative Größe treffen auch für die Druckgleichung zu.
4. SIMPLER konvergiert im allgemeinen schneller als SIMPLE. Eine SIMPLER-Iteration ist jedoch numerisch aufwendiger. Die Druckgleichung muß zusätzlich gelöst werden, und zusätzlich müssen die Pseudogeswindigkeiten \hat{u} , \hat{v} , \hat{w} berechnet werden. Da SIMPLER jedoch weniger Iterationen bis zur Konvergenz benötigt, wird dieser Zusatzaufwand weit mehr als kompensiert.

6.9 Kompressible Form der Druckkorrekturgleichung

Betrachtet man die integrierte Kontinuitätsgleichung, so hat man, neben dem instationären, Terme wie den Fluß $(\varrho Au)_e$. Führt man analog zu den Größen Geschwindigkeit und Druck eine Dichtekorrektur ϱ' ein, die zusammen mit der geschätzten Dichte ϱ^* die korrekte Dichte ϱ ergibt:

$$\varrho = \varrho^* + \varrho' \quad (6.35)$$

so erhält man für den obigen Fluß

$$(\varrho Au)_e = [(\varrho^* + \varrho')A(u^* + u')]_e \quad (6.36)$$

$$(\varrho Au)_e = (\varrho^* Au^*)_e + (\varrho^* Au')_e + (\varrho' Au^*)_e + (\varrho' Au')_e. \quad (6.37)$$

Vernachlässigt man den letzten Summanden als von 2. Ordnung klein, so ergibt sich unter Einsetzen der Geschwindigkeitskorrektur u'_e und der Zustandsgleichung $P = \varrho \mathcal{R}T \rightarrow \varrho' = K \cdot p'$:

$$(\varrho Au)_e = (\varrho^* Au^*)_e + \varrho_e^* A_e d_e (p'_P - p'_E) + K A_e u_e^* p'_e. \quad (6.38)$$

Im letzten Term wird p'_e durch p'_E und p'_P ausgedrückt, wobei man eine Upwind-Formulierung verwendet:

$$p'_e = \begin{cases} p'_P & \text{für } u_e > 0 \\ p'_E & \text{für } u_e < 0. \end{cases} \quad (6.39)$$

Diese verhindert, daß der durch die Kompressibilität neu hinzugekommene Term in (6.38), der von seiner Natur her ein Konvektionsterm ist, negativ wird. Die zu (6.25) analogen Koeffizienten enthalten damit einen kombinierten Konvektions-/Diffusionseinfluß, und die kompressible Druckkorrekturgleichung besitzt den für kompressible Strömungen zu erwartenden einseitig gerichteten Charakter. Die genaue Form der 'kompressiblen' Koeffizienten sei dem Interessierten als Übungsaufgabe gestellt.

6.10 Lösung der Navier-Stokes-Gleichung auf nichtversetzten Rechengittern

Die in Kapitel 6.3 erläuterte Gitteranordnung mit **versetzten (gestaffelten)** Kontrollvolumen für die Berechnung der Geschwindigkeitskomponenten war nach ihrer Einführung in den 60er Jahren für lange Zeit der einzig bekannte Weg zur gekoppelten Berechnung von Geschwindigkeits- und Druckfeldern in inkompressiblen Strömungen. Mit versetzten Rechengittern muß jedoch ein vergrößerter Aufwand hinsichtlich des Speicherbedarfs (mehr geometrische Größen) sowie des Rechenzeitbedarfs (zusätzliche Metrikberechnungen und Interpolationen) in Kauf genommen werden. Zusätzlich steigt durch die unterschiedlichen Rechengitter auch der Programmieraufwand und die Komplexität des Rechenprogramms. Bei der Diskretisierung der Transportgleichungen in krummlinigen Koordinaten in Verbindung mit der Formulierung der Impulsgleichung in kartesischen Geschwindigkeitskomponenten können zudem Situationen auftreten, die trotz versetzter Gitter eine Entkopplung von Geschwindigkeit und Druck zur Folge haben.

Insgesamt ist festzustellen, daß viele Argumente gegen die Verwendung versetzter Rechengitter aufgezählt werden können. Eine Rechentechnik, die das Problem der Entkopplung ohne nennenswerten Mehraufwand bei Programmierung und Programmablauf sicherstellt, wurde von Rhie und Chow (1983) eingeführt. Hierauf aufbauend wurden in der Vergangenheit mehrere, im Detail unterschiedliche Wege zur Kopplung von Druck und Geschwindigkeit auf nichtversetzten (zusammenfallenden = *collocated*) Rechengittern vorgeschlagen. Speziell Rechenverfahren für krummlinige Koordinaten basieren seit den 80er Jahren fast ausschließlich auf nichtversetzten Gittern. Dabei wird folgende Vorgehensweise beschrieben:

Zur Approximation des Druckgradiententerms in den Impulsgleichungen muß der Druck und zur Aufstellung der Massenbilanz die Geschwindigkeiten an den Kontrollvolumengrenzen ermittelt werden. Wenn Druck und Geschwindigkeit dabei linear interpoliert werden, entsteht die Gefahr, daß oszillierende Druckfelder weder in den diskretisierten Impulsgleichungen noch in der diskretisierten Kontinuitätsgleichung bemerkt werden. Bei versetzten Rechengittern wird dieses Problem dadurch umgangen, daß Geschwindigkeit und Druck an den Stellen berechnet werden, wo sie später benötigt werden. Eine Interpolation ist deshalb nicht mehr notwendig.

Eine Methode, die für nichtversetzte Gitter geeignet sein soll, muß entweder bei der Interpolation des Drucks oder bei der der Geschwindigkeit auf die Kontrollvolumengrenzen eine Kopplung

zwischen Druck und Geschwindigkeit schaffen. Rhie konzentrierte sich auf die Interpolation der Geschwindigkeiten an den Kontrollvolumengrenzen, die zur Aufstellung der Massenbilanz benötigt werden.

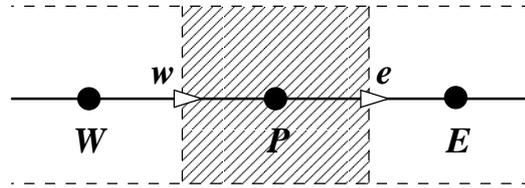


Abbildung 49: Kontrollvolumengrenzen in der Mitte zwischen zwei benachbarten Knoten

Die diskretisierte Impulsgleichung für das in Abbildung 49 skizzierte Kontrollvolumen lautet:

$$a_P u_P^* = \sum_{nb} (a_{nb} u_{nb}^*) + b + A_P \cdot (p_w^* - p_e^*) , \quad (6.40)$$

$$u_P^* = \frac{\sum_{nb} (a_{nb} u_{nb}^*) + b}{a_P} + \frac{A_P}{a_P} \cdot (p_w^* - p_e^*) ,$$

$$\text{mit } A_P = \frac{V_P}{\Delta x} .$$

Mit den hochgestellten Indizes $*$ werden wieder die Geschwindigkeiten gekennzeichnet, die die Impulsbilanz erfüllen. p_W^* und p_E^* sind wie beim Druckkorrekturalgorithmus für gestaffelte Gitter die Drücke, die in einer Iteration als Schätz- oder Zwischenwerte zur Verfügung stehen (vgl. SIMPLE). Zur Konstruktion der Interpolation werden die beiden diskretisierten Impulsgleichungen der Punkte P und E zu einer Bestimmungsgleichung für die Geschwindigkeit u_e^* an der Kontrollvolumenfläche kombiniert. Die Koeffizienten, Flächen, rechten Seiten und Druckgradienten werden dabei unter der Annahme linear interpoliert, daß sich die Kontrollvolumengrenze in der Mitte zwischen den Knotenpunkten befindet.

$$\begin{aligned} u_e^* &= \frac{1}{2} \left\{ \underbrace{\frac{\sum_{nb} (a_{nb} u_{nb}^*) + b}{a_P} \Big|_P}_{\hat{u}_P^*} + \underbrace{\frac{\sum_{nb} (a_{nb} u_{nb}^*) + b}{a_P} \Big|_E}_{\hat{u}_E^*} \right\} + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\frac{A_P}{a_P} \Big|_P + \frac{A_P}{a_P} \Big|_E \right]}_{d_e} \cdot (p_P^* - p_E^*) \\ &= \left\{ \frac{\sum_{nb} (a_{nb} u_{nb}^*) + b_u}{a_P} \right\}_e + \left\{ \frac{A_P}{a_P} \right\}_e \cdot (p_P^* - p_E^*) . \end{aligned} \quad (6.41)$$

Der Druck wird im Ergebnis also nicht mehr in einer Weise interpoliert, daß sich eine Entkopplung ergeben kann, sondern es geht vielmehr direkt der Druck an der Stelle P mit in die Gleichung ein. Die obige Interpolationsvorschrift kann folgendermaßen interpretiert werden: auf der Kontrollvolumengrenzfläche wird die Geschwindigkeit u_e^* nicht als Mittelwert der benachbarten Geschwindig-

keiten u_P und u_E gebildet. Vielmehr werden zunächst die beiden 'Pseudogeschwindigkeiten'

$$\begin{aligned}\hat{u}_P^* &= \left\{ \frac{\sum_{nb}(a_{nb}u_{nb}^*) + b}{a_P} \right\}_P, \\ \hat{u}_E^* &= \left\{ \frac{\sum_{nb}(a_{nb}u_{nb}^*) + b}{a_P} \right\}_E.\end{aligned}\tag{6.42}$$

gemittelt. An dieser Stelle sei daran erinnert, daß die Pseudogeschwindigkeiten eine Art Impulsbilanz, die ohne Einfluß des Drucks gebildet wird, erfüllen. Zusammen mit

$$d_e = \frac{1}{2} \left[\left\{ \frac{A_P}{a_P} \right\}_P + \left\{ \frac{A_P}{a_P} \right\}_E \right],\tag{6.43}$$

folgt so die Interpolationsvorschrift (6.41) zu

$$u_e^* = \frac{1}{2}(\hat{u}_P^* + \hat{u}_E^*) + d_e(p_P^* - p_E^*).\tag{6.44}$$

Das bedeutet, daß bei dem Vorschlag von Rhie die Pseudogeschwindigkeiten \hat{u}^* anstatt der Geschwindigkeiten u^* linear interpoliert werden und erst aus den interpolierten Pseudogeschwindigkeiten die für die Massenbilanz maßgeblichen Geschwindigkeiten an den Kontrollvolumengrenzen gebildet werden. Dabei wird der Druckeinfluß wie bei SIMPLER für versetzte Gitter überlagert. Wie bei den versetzten Rechengittern wird nun gefordert, daß durch ein entsprechendes Druckfeld die Geschwindigkeiten an den Kontrollvolumengrenzen so ermittelt werden, daß sie der Kontinuitätsgleichung genügen:

$$u_e = \frac{1}{2}(\hat{u}_P^* + \hat{u}_E^*) + d_e(p_P - p_E).\tag{6.45}$$

Im Gegensatz zu den versetzten Gittern soll jetzt allerdings die Impulsbilanz mit den Geschwindigkeiten erfüllt werden, die an den gleichen Stellen wie der Druck berechnet werden. Zum Erreichen dieser Zielsetzung kann in Anlehnung an das weiter vorne vorgestellte Druckkorrekturverfahren vorgegangen werden. Hierzu wird wieder davon ausgegangen, daß die im Laufe der iterativen Lösung gerade vorliegenden Geschwindigkeiten auf den Kontrollvolumengrenzen u^* und der zugehörige Druck p^* so zu korrigieren sind, daß damit die Massenbilanz erfüllt wird. Die Korrekturformeln lauten:

$$p_P = p_P^* + p'_P \quad \text{und} \quad p_E = p_E^* + p'_E.\tag{6.46}$$

$$u'_e = d_e(p'_P - p'_E) \quad \Rightarrow \quad u_e = u_e^* + u'_e.\tag{6.47}$$

Werden nun die analog zu Gleichung (6.47) ermittelten Geschwindigkeitskorrekturen wieder in der diskretisierten Kontinuitätsgleichung eingesetzt, folgt eine Gleichung zur Bestimmung der Druckkorrekturen. Diese Gleichung ist von der gleichen Form wie die für versetzte Rechengitter. Zu beachten ist lediglich die veränderte Berechnung der Faktoren d_e, d_w, d_n, d_s gemäß Gleichung (6.43) und die Bestimmung des Massenfehlerterms b mit den Geschwindigkeiten, die wie in Gleichung (6.44) für alle Kontrollvolumengrenzflächen zu gewinnen sind.

Ausgehend von Gleichung (6.40) kann mit den Druckkorrekturen auch eine Korrekturvorschrift für die Geschwindigkeiten u^* gefunden werden. Diese Korrektur ist jedoch nicht so wesentlich für die Konvergenz des Druckkorrekturverfahrens wie die Korrektur der Geschwindigkeiten an den Kontrollvolumengrenzen, aus denen die neuen konvektiven Flüsse und damit die neuen Koeffizienten der diskretisierten Impulsgleichungen errechnet werden. Damit und mit den korrigierten Drücken

folgen in der erneuten Lösung der Impulsgleichungen bereits die zugehörigen neuen Geschwindigkeitswerte u_i^* an allen Kontrollvolumenzentren i . Eine zusätzliche Korrektur der Geschwindigkeiten u_i^* unterstützt so allenfalls eine iterative Prozedur zur Lösung der Impulsgleichungen, indem hierbei verbesserte Startwerte für das Geschwindigkeitsfeld generiert werden.

Zusammenfassend ergibt sich für die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen auf nichtversetzten zweidimensionalen Gittern folgende Vorgehensweise:

1. Abschätzen eines Druckfeldes p^*
2. Lösung der Impulsgleichungen [vgl. (6.40)] $\Rightarrow u^*, v^*$
3. Ermittlung der Pseudogeschwindigkeiten nach (6.42) oder einfacher mit der Beziehung:

$$\hat{u}_P^* = u_P^* - \frac{1}{2} \cdot \frac{A_P}{a_P} \cdot (p_W - p_E) \quad (6.48)$$

$$\Rightarrow \hat{u}^*, \hat{v}^*$$

4. Ermittlung der Geschwindigkeiten auf den Kontrollvolumenflächen (6.44) $\Rightarrow u_e^*, v_n^*, \dots$
5. Lösung der Druckkorrekturgleichung $\Rightarrow p'$
6. Korrektur des Druckfeldes (6.46) $\Rightarrow p$
7. Korrektur der Geschwindigkeiten an den Kontrollvolumengrenzflächen (6.47) $\Rightarrow u, v$
8. Lösung der Gleichungen für andere Variablen, die das Geschwindigkeitsfeld beeinflussen, z.B. Turbulenz, Temperatur, etc.
9. Gehe nach 2. und iteriere, bis Konvergenz erreicht ist $p^* = p$

Anschauliche Interpretation

Da der hier vorgestellte Formelapparat wenig anschaulich ist, soll im folgenden die Vorgehensweise noch einmal von einer anderen Seite betrachtet und damit einsichtiger dargestellt werden: Bei inkompressiblen Strömungen erfüllt der Druck die Funktion einer zusätzlichen Zwangsbedingung, die die Kontinuität des aus den Impulsgleichungen bestimmten Geschwindigkeitsfeldes sicherstellen muß. Die absolute Größe des Drucks ist dabei gleichgültig, weil in den Gleichungen nur Druckgradienten auftreten. Eine Glättung zur Vermeidung von Oszillationen des Drucks ist deshalb zulässig. Betrachten wir zur Veranschaulichung eine Poissongleichung für den Druck, wie sie sich durch Ableitung der Impulsgleichungen herleiten läßt:

$$\underbrace{\frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\text{Druckgradient}} = \underbrace{H_i}_{\text{Konv. + Diff.}}, \quad (6.49)$$

H_i steht dabei für Konvektions- und Diffusionsterm der Impulsgleichung.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial H_i}{\partial x_i}. \quad (6.50)$$

Die Finite-Differenzen Approximation für die zweidimensionale Form dieser Gleichung liefert:

$$\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_e - \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_w}{\Delta x} + \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)_n - \left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)_s}{\Delta y} = \frac{H_{x,e} - H_{x,w}}{\Delta x} + \frac{H_{y,n} - H_{y,s}}{\Delta y}. \quad (6.51)$$

Zur Approximation der Druckgradienten gibt es zwei naheliegende Ansätze:

1. Ansatz: Interpolation des Druckgradienten auf der Kontrollvolumengrenzfläche auf Basis der Gradienten an benachbarten Kontrollvolumenzentren:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_e \approx \frac{1}{2} \left(\frac{p_E - p_W}{2\Delta x} + \frac{p_{EE} - p_{PP}}{2\Delta x} \right). \quad (6.52)$$

Dies ist einer Approximation von gleicher Ordnung, wie sie in der Impulsgleichung verwendet wird. Das Einsetzen in Gleichung (6.51) ergibt:

$$\begin{aligned} & \frac{p_E - p_W + p_{EE} - p_{PP} - (p_P - p_{WW} + p_E - p_W)}{4\Delta x^2} \\ & + \frac{p_N - p_S + p_{NN} - p_{PP} - (p_P - p_{SS} + p_N - p_S)}{4\Delta y^2} = RHS \\ \Rightarrow & \frac{p_{EE} - 2p_P + p_{WW}}{4\Delta x^2} + \frac{p_{NN} - 2p_P + p_{SS}}{4\Delta y^2} = RHS. \end{aligned} \quad (6.53)$$

Diese Gleichung ist zwar von hoher Genauigkeit, weist aber das typische Entkopplungsproblem auf (nur Druckwerte an jeweils versetzten Kontrollvolumen tauchen auf).

2. Ansatz: Approximation des Druckgradienten an der Kontrollvolumengrenzfläche aus den direkt angrenzenden Kontrollvolumenzentren:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_e \approx \frac{p_E - p_P}{\Delta x}. \quad (6.54)$$

Wird diese Gleichung für die Approximation benutzt, ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \frac{p_E - p_P - (p_P - p_W)}{\Delta x^2} + \frac{p_N - p_P - (p_P - p_S)}{\Delta y^2} = RHS \\ \Rightarrow & \frac{p_E - 2p_P + p_W}{\Delta x^2} + \frac{p_N - 2p_P + p_S}{\Delta y^2} = RHS. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Dieser Ansatz ist zwar aufgrund der schwächeren Approximation des Druckgradienten von geringerer Ordnung, vermeidet aber das Problem der Entkopplung von Druck und Geschwindigkeit.

Betrachten wir nun den Unterschied zwischen beiden Ansätzen in der resultierenden Differenzengleichung:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{e, \text{Ansatz2}} - \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{e, \text{Ansatz1}} &= \frac{p_E - 2p_P + p_W}{\Delta x^2} - \frac{p_{EE} - 2p_P + p_{WW}}{4\Delta x^2} \\ &= \frac{-p_{EE} + 4p_E - 6p_P + 4p_W - p_{WW}}{4\Delta x^2} \end{aligned} \quad (6.56)$$

$$\approx -\frac{(\Delta x^2)}{4} \left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4}\right)_P \quad (6.57)$$

Die erforderliche Korrektur der Approximation, um von einer entkoppelten Form ausreichender Ordnung zu einer gekoppelten zu gelangen, entspricht somit genau einer Glättung, die proportional zur 4. Ableitung des Drucks ist. In einer solchen Formel treten bei oszillierenden Druckwerten große Korrekturen auf, während sie bei glattem Druckverlauf gegen null geht. Ein gleichartiger Ansatz verbirgt sich auch hinter dem in den Gleichungen (6.41) bis (6.45) beschriebenen Korrekturmechanismus für die Geschwindigkeiten auf den Kontrollvolumengrenzen.

Abschlußbemerkung

Mit diesem Kapitel haben wir alle Bausteine der numerischen Methode dargestellt. Einige wichtige Kleinigkeiten bleiben noch zu diskutieren, was den jetzt vorhandenen Überblick über das gesamte Verfahren abrundet.

7 Komplexe Geometrien

Die bisher diskutierten Diskretisierungsgleichungen wurden nur für sehr einfache "reguläre"⁷ kartesische Gitter abgeleitet. Das schränkt die Anwendbarkeit der darauf basierenden Lösungsverfahren auf wenige akademische Strömungsfälle ein. In der Realität treten meistens wesentlich kompliziertere Geometrien auf, die sich nicht ohne weiteres mit solchen Gittern darstellen lassen.

7.1 Zonales Ausblenden

Manchmal kann ein Computerprogramm, das für ein reguläres Gitter geschrieben ist, auch zur Behandlung irregulär geformter Rechengebiete eingesetzt werden. Dies geschieht durch Inaktivieren (oder Verblocken, Ausblenden) von bestimmten Gebieten des regulären Gebiets, so daß die verbleibenden aktiven Kontrollvolumen das gewünschte Gebiet formen (siehe Abbildung 50).

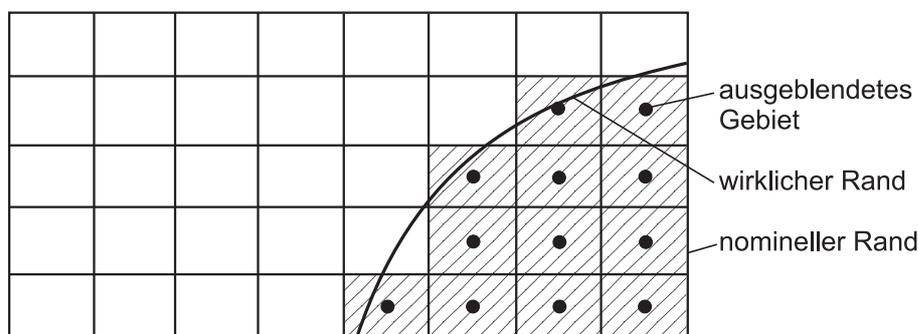


Abbildung 50: Ausblenden von Teilen des Gitters

Das Ausblenden geschieht durch Setzen bekannter Werte der entsprechenden ϕ 's in den inaktiven Kontrollvolumen. Ist z.B. das inaktive Gebiet eine feste Wand, müssen dort die Geschwindigkeiten zu Null gesetzt werden.

Gewöhnlich kann ein Wert für ϕ nur am Rand vorgeschrieben werden. Jeder gewünschte Wert jedoch auch an einem inneren Gitterpunkt festgeschrieben werden, wenn man setzt

$$S_C = M \cdot \phi_{P, \text{gewünscht}} \quad \text{und} \quad S_P = -M \quad (7.1)$$

wobei M eine große Zahl wie $M = 10^{30}$ (64 bit REAL; 32 bit REAL : $M = 20^{20}$) bedeutet. Damit sind die anderen Terme in der Diskretisierungsgleichung vernachlässigbar. Man erhält

$$\phi_P = -\frac{S_C}{S_P} = \phi_{P, \text{gewünscht}} \quad (7.2)$$

Damit kann man interne Hindernisse oder Inseln im Rechengebiet durch Einführen "innerer" Randbedingung darstellen.

Ist der Bereich isotherm, wird dort die bekannte Temperatur vorgegeben. Dies geschieht durch

- a) große S_C , S_P , wie gerade beschrieben oder/und

⁷"regulär" bedeutet in diesem Zusammenhang, daß das Gitter topologisch ein Rechteck ist, bei dem in i -Richtung von $i = 1$ bis $i = NI$ und in j -Richtung von $j = 1$ bis $j = NJ$ gezählt wird

b) entsprechende Γ 's ($\Gamma = M2$).

Für ein Strömungsproblem wird ein großes Γ Nullgeschwindigkeiten produzieren und damit einen Festkörper simulieren. Möglich ist dies durch unsere Praxis, die Leitfähigkeiten an der Kontrollvolumenwand über das harmonische Mittel zu berechnen, womit große Sprünge in Γ handhabbar werden.

Hinweis: Setzen von Werten über den Quellterm (Methode a)) fixiert nur den Wert im Gitterpunkt (siehe Abbildung 51).

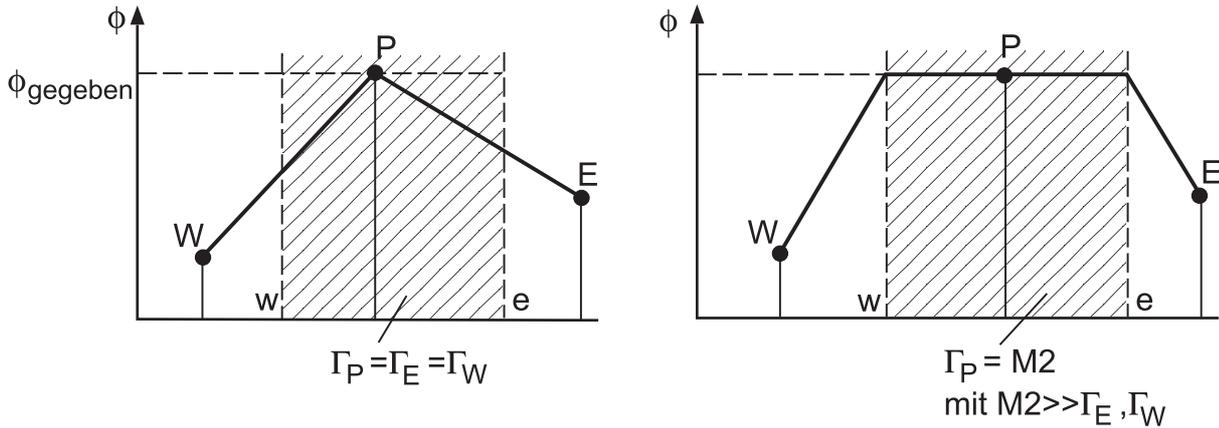


Abbildung 51: Setzen eines gegebenen Wertes ϕ im Gebietsinneren

Um den Wert für das gesamte Kontrollvolumen bis zum Rand zu fixieren, ist dort zusätzlich ein großer Wert für Γ zu setzen. Dabei ist zu beachten, daß gelten muß: $M \gg M2$ mit z.B. $M = 10^{20}$ und $M2 = 10^{15}$ (für 32 bit REAL; 64 bit REAL : $M = 10^{30}$, $M2 = 10^{20}$).

Es ist klar, daß durch diese Stufenapproximation krummliniger Ränder nur einfache Randbedingungen behandelt werden können, und daß die Approximation der Geometrie unter Umständen recht grob ist. Dennoch sind die Ergebnisse meist erstaunlich gut. Überdies bedeutet Ausblenden eine gewisse Verschwendung von Computerressourcen, da triviale Rechnungen durchgeführt und diese Ergebnisse gespeichert werden müssen. Ein Vorteil der Vorgehensweise in Verbindung mit der Berechnung der Γ 's über das harmonischen Mittel ist die Möglichkeit, konjugierte Wärmeübertragungsprobleme zu berechnen.

Beispiel: Konjugierte Wärmeübertragung

Ein konjugiertes Wärmeübertragungsproblem ist im Abbildung 52 dargestellt. Das Fluid durchströmt einen Kanal mit einer inneren Rippe. Die Kanalwand und die Rippe haben endliche Dicke und mäßige Wärmeleitfähigkeit. Die thermische Randbedingung ist bekannt am Außenrand des Kanals, z.B. vorgegebene Temperatur. Bei diesem konjugierten Problem muß das Temperaturfeld in beiden Bereichen berechnet werden. In der Wand/Rippe liegt reine Wärmeleitung vor, im Fluid zusätzliche Konvektion. Das Rechengebiet umfaßt beide Bereiche, wobei die Kanalwand mit einem Rand des Rechengebiets zusammenfällt. Bei der Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes setzt man Γ im Bereich der Strömung gleich der Viskosität des Fluids, wogegen in

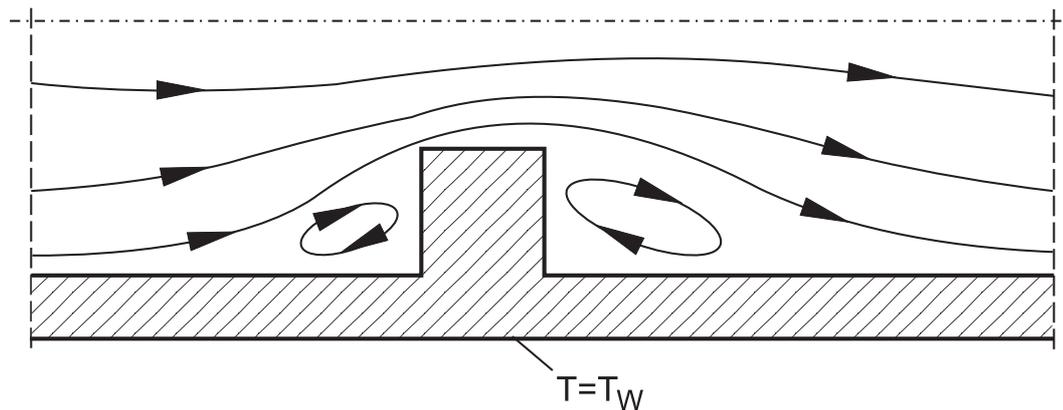


Abbildung 52: Konjugiertes Wärmeübertragungsproblem

der Wand ein sehr großes Γ angenommen wird. Dies sichert, daß die Nullgeschwindigkeiten, die am äußeren Rand vorgegeben werden, sich auf den ganzen Wand-/Rippenbereich ausdehnen, womit das Fluid die korrekte Randbedingung erfährt. Für die Energiegleichung setzen wir die tatsächlichen Leitfähigkeiten von Fluid und festem Material in den entsprechenden Gebieten. Das Problem wird als Konvektions-/Diffusionsproblem im gesamten Bereich gelöst. Da aber in der Wand/Rippe die Geschwindigkeiten Null sind, wird dort über $P_e = 0$ effektiv ein reines Leitungsproblem gelöst.

7.2 Krummlinige Koordinaten

Eine andere Möglichkeit, numerische Lösungsverfahren auf irreguläre Geometrien anwenden zu können, ist die Konstruktion eines natürlichen, an die Körperkontur angepaßten, krummlinigen Koordinatensystems. Wegen des daraus resultierenden wesentlich universeller anwendbaren Verfahrens ist diese Vorgehensweise heute Stand der Technik und wird von nahezu allen eingesetzten numerischen Strömungslösern benutzt.

Alle bisher beschriebenen Methoden können auch in diesem Koordinatensystem direkt verwendet werden, jedoch ist die Berechnung der Längen, Flächen und Volumen wegen der zusätzlich erforderlichen Koordinatentransformation komplizierter. Ferner ist die Konstruktion eines guten Gitters schon für sich genommen eine schwierige Aufgabe und kann speziell bei umfangreichen dreidimensionalen Fällen mehrere Monate dauern. Einen Überblick über moderne Methoden zur Generierung blockstrukturierter und unstrukturierter Netze gibt das Vorlesungsskript zur Lehrveranstaltung "Grundlagen der Numerischen Thermofluidodynamik" [33].

Koordinatensysteme

Betrachten wir ein allgemeines, krummliniges Koordinatensystem mit den Koordinatenlinien $\xi^k = (\xi^1, \xi^2, \xi^3) = (\xi, \eta, \zeta)$, das sich an den lokalen Gitterlinien ausrichtet. Im Zusammenhang mit der numerischen Behandlung der Bilanzgleichungen sind nun eine Reihe von Transformationen notwendig. Zum Verständnis der Transformationsbeziehungen soll zuerst auf die Eigenschaften des Koordinatensystems eingegangen werden.

Der Basisvektor

$$\underline{g}_k = \frac{\partial x_i}{\partial \xi^k} \underline{e}_i,$$

weist an jedem Punkt des Raums in Richtung der Koordinatenlinie ξ^k . Üblicherweise definiert man krummlinige Koordinaten auf der Grundlage zweier komplementärer Basissysteme (i.Allg. holonome Basen):

$$\underline{g}^k = \frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} e_i ,$$

mit

$$e_i = \frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \underline{g}_k = \frac{\partial x_i}{\partial \xi^k} \underline{g}^k \quad \text{und} \quad \frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi^j} = \delta_j^k = \delta_{kj} . \quad (7.3)$$

Der Transformationszusammenhang zwischen x_i und ξ^k wird durch mehrere unterschiedliche *Metrikterme* beschrieben. Von Bedeutung ist vor allem die Transformationsmatrix \underline{J} (Jakobi-Matrix) und die Funktionaldeterminante J der Transformation des kartesischen Koordinatensystems in das lokale System des Rechengitters. \underline{J} bildet dabei die Matrix der kovarianten Metrikoeffizienten:

$$J = \det(\underline{J}) \quad \text{mit} \quad \underline{J} = \frac{\partial(x_1, x_2, x_3)}{\partial(\xi^1, \xi^2, \xi^3)} = \begin{bmatrix} x_{,\xi} & x_{,\eta} & x_{,\zeta} \\ y_{,\xi} & y_{,\eta} & y_{,\zeta} \\ z_{,\xi} & z_{,\eta} & z_{,\zeta} \end{bmatrix} , \quad (7.4)$$

oder im zweidimensionalen Fall:

$$J = \det(\underline{J}) = \det \begin{bmatrix} x_{,\xi} & x_{,\eta} \\ y_{,\xi} & y_{,\eta} \end{bmatrix} = x_{,\xi} y_{,\eta} - x_{,\eta} y_{,\xi} . \quad (7.5)$$

Im folgenden soll die Herleitung wegen der besseren Übersichtlichkeit komplett auf zweidimensionale Fälle beschränkt bleiben. Mit (7.3) und Inversion ergeben sich die erforderlichen Transformationsbeziehungen für die Metrikterme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi^1}{\partial x_1} = \xi_{,x} = \frac{1}{J} y_{,\eta} \quad ; \quad \frac{\partial \xi^1}{\partial x_2} = \xi_{,y} = -\frac{1}{J} x_{,\eta} ; \\ \frac{\partial \xi^2}{\partial x_2} = \eta_{,y} = \frac{1}{J} x_{,\xi} \quad ; \quad \frac{\partial \xi^2}{\partial x_1} = \eta_{,x} = -\frac{1}{J} y_{,\xi} . \end{aligned} \quad (7.6)$$

Die Geometrie wird im Allgemeinen in Form der Koordinaten x und y der Kontrollvolumenzentren und der Gitterknotenpunkte bzw. Kontrollvolumenecken gespeichert (siehe Abbildung 53).

Üblicherweise wird der frei wählbare Skalierungsfaktor des natürlichen Koordinatensystems so gewählt, daß die Längen über ein Kontrollvolumen gerade "1" ergeben. Die Metrikterme können dann am "east" Rand über

$$x_{,\xi} = (x_E - x_P) \quad ; \quad y_{,\xi} = (y_E - y_P) \quad (7.7)$$

$$x_{,\eta} = (x_{ne} - x_{se}) \quad ; \quad y_{,\eta} = (y_{ne} - y_{se}) .$$

berechnet werden.

Ausgehend von einer beliebigen, zweidimensionalen Transportgleichung (5.38) soll nun die Diskretisierung in einem allgemeinen, krummlinigen Koordinatensystem abgeleitet werden. Die Integration der Differentialgleichung

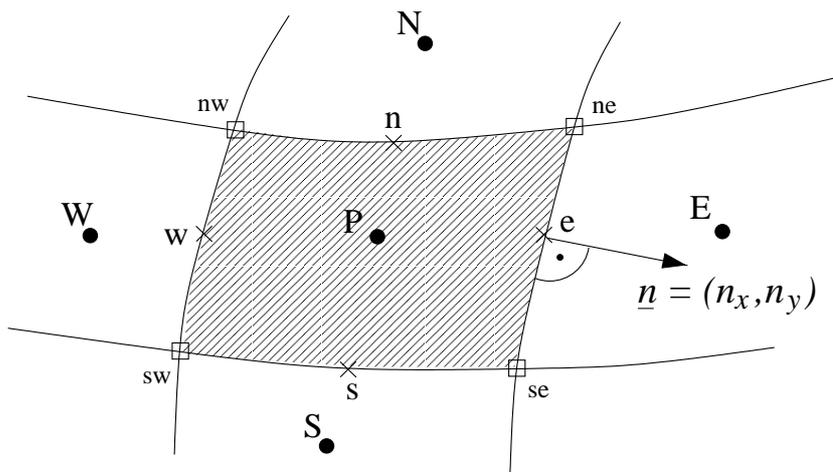


Abbildung 53: Benennung der Kontrollvolumenzentren, Grenzflächen und Eckpunkte

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \oint_A (\rho u_i \phi) dA_i - \oint_A \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} dA_i = \int_V S dV, \quad (7.8)$$

über ein Kontrollvolumen V bzw. die Kontrollvolumenoberflächen A führt dann im krummlinigen System auf

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \Delta V \Big|_P + [\rho u_i n_i \Delta A \phi]_w^e + [\rho u_i n_i \Delta A \phi]_s^n \\ & - \left[\Gamma \frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \Delta A \right]_w^e - \left[\Gamma \frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \Delta A \right]_s^n = S \Delta V, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{(\rho\phi)^1 - (\rho\phi)^0}{\Delta t} \Delta V \Big|_P + F_e \phi_e - F_w \phi_w + F_n \phi_n - F_s \phi_s \\ & - \Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \right]_e + \Gamma_w \Delta A_w \left[\frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \right]_w \\ & - \Gamma_n \Delta A_n \left[\frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \right]_n + \Gamma_s \Delta A_s \left[\frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \right]_s = S \Delta V. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Dabei sind n_i die Komponenten des normierten Flächennormalenvektors einer Kontrollvolumenoberfläche und ΔA die Größe dieser Fläche. Wie aus Abbildung 53 zu entnehmen ist, ergibt sich der hierbei auftauchende Ausdruck $\Delta A_e \underline{n}_e$ bzw. die analog an den übrigen Kontrollvolumenseiten auftretenden Terme zu:

$$\Delta A_e \underline{n}_e = \begin{pmatrix} y, \eta \\ -x, \eta \end{pmatrix}_e; \quad \Delta A_n \underline{n}_n = \begin{pmatrix} y, \xi \\ -x, \xi \end{pmatrix}_n \quad \text{usw. .} \quad (7.10)$$

Konvektion

Bei der Behandlung der Konvektion in krummlinigen Koordinaten treten gegenüber kartesischen Gittern [vergleiche (5.9)] Unterschiede in der Berechnung des Massenflusses auf. Am Ostrand des Kontrollvolumens ergibt sich der Massenfluß F_e dann zu:

$$\begin{aligned} F_e &= [\rho u_i n_i \Delta A]_e, = \rho_e [u y_{,\eta} - v x_{,\eta}]_e \\ F_e &= \rho_e u_e (y_{ne} - y_{se}) - \rho_e v_e (x_{ne} - x_{se}) . \end{aligned} \quad (7.11)$$

Diffusion

Größere Unterschiede zu der Behandlung in kartesischen Gittern treten beim Diffusionsterm auf. Die Diskretisierung (z.B. am "east" Rand des Kontrollvolumens) in krummlinigen Koordinaten erfolgt analog zur Vorgehensweise in (5.8) in leicht veränderter Form.

Der Diffusionsterm wird in einen impliziten und einen expliziten Anteil aufgeteilt. Der implizite Anteil repräsentiert dabei am "east"-Rand den Fluß in ξ -Richtung, d.h. senkrecht zur Kontrollvolumenoberfläche, während der explizite Anteil den Fluß in η -Richtung wiedergibt:

$$\begin{aligned} \left[\Gamma \Delta A \frac{\partial \xi^k}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_i \right]_e &= \Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \xi^k}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_x + \frac{\partial \xi^k}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^k} n_y \right]_e \\ &= \underbrace{\Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} n_x + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} n_y \right]_e}_{\text{implizit}} + \underbrace{\Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} n_x + \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} n_y \right]_e}_{\text{explizit}} . \end{aligned} \quad (7.12)$$

Impliziter Anteil

$$\begin{aligned} \Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} n_x + \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} n_y \right]_e &= \Gamma_e \Delta A_e [(\phi_E - \phi_P) \xi_{,x} n_x + (\phi_E - \phi_P) \xi_{,y} n_y] \\ &= \frac{\Gamma_e}{J} (\phi_E - \phi_P) [(y_{ne} - y_{se})^2 + (x_{ne} - x_{se})^2] . \end{aligned} \quad (7.13)$$

Expliziter Anteil

$$\begin{aligned} \Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} n_x + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} n_y \right]_e &= \Gamma_e \Delta A_e (\phi_{ne} - \phi_{se}) [\eta_{,x} n_x + \eta_{,y} n_y]_e \\ &= -\frac{\Gamma_e}{J} (\phi_{ne} - \phi_{se}) [(y_E - y_P)(y_{ne} - y_{se}) + (x_E - x_P)(x_{ne} - x_{se})] . \end{aligned} \quad (7.14)$$

Diese Aufteilung ist nötig, weil für die implizite Lösung in einem Gleichungssystem mit vertretbarem Aufwand nur auf die Variablenwerte an den Kontrollvolumenzentren zugegriffen werden kann, die als Unbekannte zur Verfügung stehen, nicht aber auf Werte an den Kontrollvolumenecken. Hier werden die interpolierten Werte der letzten Iteration verwendet (explizite Behandlung). Der explizite Anteil wird auch als Kreuzdiffusion bezeichnet. Das Auftauchen der Kreuzdiffusion geschieht analog zum Auftreten einer gemischten Ableitung $\frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta}$ bei der Approximation des Diffusionsterms mit Finiten-Differenzen (siehe [33]).

Bei der numerischen Lösung gehen die expliziten Anteile in den Quellterm ein:

$$S_{\phi, \text{Kreuzdiffusion}} = -\frac{\Gamma_e}{J}(\phi_{ne} - \phi_{se}) [(x_E - x_P)(x_{ne} - x_{se}) + (y_E - y_P)(y_{ne} - y_{se})] . \quad (7.15)$$

Da wir den Diffusionsfluß über eine Kontrollvolumenwand durch ϕ -Werte an zwei Gitterpunkten ausdrücken, ist es wichtig, daß diese Wand senkrecht zur Verbindungslinie der beiden Gitterpunkte liegt. Ist das Gitter überall orthogonal, d.h. stehen die ξ - und η -Linien aufeinander senkrecht, so verschwinden die Kreuzdiffusionsanteile

$$\text{Kreuzdiffusion} = \Gamma_e \Delta A_e \left[\frac{\partial \eta}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} n_i \right]_e , \quad \text{bzw.} \quad = \Gamma_n \Delta A_n \left[\frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} n_i \right]_n . \quad (7.16)$$

Bei Orthogonalität gilt:

$$\underline{\nabla \xi} \cdot \underline{\nabla \eta} = |\underline{\nabla \xi}| |\underline{\nabla \eta}| \cos \varphi_{\xi, \eta} = 0 ,$$

$$\xi_{,x} \eta_{,x} + \xi_{,y} \eta_{,y} = 0 , \quad (7.17)$$

und unter Verwendung von (7.10) und (7.8) für die Kreuzdiffusion:

$$\Rightarrow \left[\frac{\partial \eta}{\partial x} n_x + \frac{\partial \eta}{\partial y} n_y \right]_e = 0 , \quad (7.18)$$

$$\Rightarrow \left[\frac{\partial \xi}{\partial x} n_x + \frac{\partial \xi}{\partial y} n_y \right]_n = 0 . \quad (7.19)$$

Aus der (lokalen) Orthogonalitätsbedingung ($\cos \varphi_{\xi, \eta} = 0$) folgt somit direkt das Verschwinden der Kreuzdiffusionsterme.

Die Aufteilung der Diffusion in einen expliziten und einen impliziten Anteil verlangsamt im Vergleich zu einer komplett impliziten Methode zwar die Konvergenz, im konvergierten Zustand ist das Gleichungssystem jedoch genauso erfüllt.

Quellterm und instationärer Term

Bei der Integration des instationären Terms und des Quellterms muß bei krummlinigen Koordinaten darauf geachtet werden, daß vor der Diskretisierung eine Integration über das Kontrollvolumen stattfindet. Dabei geht einmal die Größe des Volumens in den Term ein. Die Größe eines Kontrollvolumens berechnet sich nach

$$dV = x_{,\xi} y_{,\eta} - x_{,\eta} y_{,\xi} = J . \quad (7.20)$$

Die Definition der Metrikterme muß bei der Quelltermbehandlung nicht wie bei der Behandlung der konvektiven und diffusiven Flüsse an den Kontrollvolumengrenzen sondern am Kontrollvolumenzentrum erfolgen. Sie basieren dann auf den Koordinaten an den Ecken des Volumens:

$$\begin{aligned} x_{,\xi} &= \frac{1}{2}(x_{ne} - x_{nw} + x_{se} - x_{sw}) & ; & & y_{,\xi} &= \frac{1}{2}(y_{ne} - y_{nw} + y_{se} - y_{sw}) ; \\ x_{,\eta} &= \frac{1}{2}(x_{ne} - x_{se} + x_{nw} - x_{sw}) & ; & & y_{,\eta} &= \frac{1}{2}(y_{ne} - y_{se} + y_{nw} - y_{sw}) . \end{aligned} \quad (7.21)$$

8 Abschließende Feinheiten

8.1 Iteration und Konvergenz

Die Iterationen haben zwei Aufgaben:

1. Die Gleichungen sind im allgemeinen nichtlinear und gekoppelt. Wir behandeln sie als nominell linear und entkoppelt. Nichtlinearität und Kopplung behandeln wir durch iteratives Neuberechnen der Koeffizienten und Wiederholung bis zur Konvergenz.
2. Die nominell linearen Gleichungen werden durch eine iterative Methode (z.B. Linienmethode) anstatt durch eine direkte Methode gelöst.

Die iterative Lösung der Gleichungen muß nicht bis zur Konvergenz getrieben werden, da wir zwischendurch nur mit vorübergehenden Koeffizienten arbeiten. Nach einer gewissen Anzahl von Iterationen für eine Diskretisierungsgleichung müssen die Koeffizienten neu berechnet werden. Dabei muß auf ein gewisses Maß an Verhältnismäßigkeit geachtet werden. Hierfür gibt es jedoch leider keine allgemeingültigen Regeln. Lösungsreihenfolge: Zuerst Geschwindigkeiten, dann andere Variable. Die konvektiven Terme beinhalten Geschwindigkeiten, die Geschwindigkeitsgleichungen müssen aber nicht unbedingt von irgend einem anderen ϕ abhängen.

Striktes Einhalten der vier Grundregeln führt auf Diskretisierungsgleichungen, die für konstante Koeffizienten die Konvergenz von Punkt- und Linien-Gauss-Seidel sichern. Wenn sich die Koeffizienten nur langsam ändern, kann immer noch Konvergenz erwartet werden. Koeffizienten ändern sich durch Änderung der ϕ -Werte. Daher verlangsamt angemessene Unterrelaxation der abhängigen Variablen die Änderung in diesen Variablen und damit in den Koeffizienten.

Man kann sinnvollerweise relaxieren:

1. Abhängige Variable (ϕ 's): siehe Kapitel 4.8.3.
2. Stoff- und Transportgrößen (ϱ , μ , λ , ...)

$$\varrho = \alpha \cdot \varrho_{neu} + (1 - \alpha)\varrho_{alt} \quad (8.1)$$

3. Quellterm (S_C , S_P):

$$S_C = \alpha S_{C,neu} + (1 - \alpha)S_{C,alt} \quad (8.2)$$

4. Randbedingungen

$$\phi_B = \alpha \cdot \phi_{B,gegeben} + (1 - \alpha)\phi_{B,alt} \quad (8.3)$$

Man sollte dabei die Verbindung/Abhängigkeit zwischen einzelnen Parametern beachten; z.B. turbulente Strömungen $k, \varepsilon \rightarrow \nu_t \rightarrow$ andere Gleichung.

Konvergenzkriterien

Wir beenden den iterativen Prozeß, wenn ein willkürliches Konvergenzkriterium erfüllt ist.

1. Untersuchung der signifikanten Größen der Lösung, z.B. Maximum-Geschwindigkeit, Widerstandskraft, Druckabfall, Gesamtwärme fluß etc. und Iteration bis die relative Änderung dieser Größen zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationen kleiner als eine kleine Zahl ε ist.

2. Die relative Änderung der Gitterwerte aller Variablen wird oft als Konvergenzkriterium verwendet. Das ist manchmal irreführend, wenn stark unterrelaxiert wird.
3. Eine sinnvollere Methode zur Konvergenzüberwachung ist, zu untersuchen, wie gut die Diskretisierungsgleichung von den momentanen Werten der abhängigen Variablen erfüllt werden. Für jeden Punkt kann ein Residuum \mathcal{R} errechnet werden:

$$\mathcal{R} = \sum a_{nb}\phi_{nb} + b - a_P\phi_P \quad (8.4)$$

Nur wenn die Diskretisierungsgleichung erfüllt ist, wird $\mathcal{R} = 0$ sein. Ein gutes Kriterium ist die Forderung, daß der größte Wert von $|\mathcal{R}| < \varepsilon$ ist. Wie schon in Kapitel 6.6 erwähnt, kann die Größe b , das Residuum der Kontinuitätsgleichung, als Konvergenzindikator verwendet werden.

8.2 Quellterm–Linearisierung

In Kapitel 4.4 war das Konzept der Quellterm–Linearisierung eingeführt worden. Grundregel 3 fordert, daß bei Linearisierung des Quellterms als

$$\bar{S} = S_C + S_P\phi_P \quad (8.5)$$

die Größe S_P negativ sein muß. Divergenz wird oft durch Quellterme verursacht, eine saubere Linearisierung ist daher oft essentiell für Konvergenz.

Diskussion

1. Grundregel 3 wird oft unabsichtlich verletzt. In Zylinderkoordinaten (r, Θ, z) enthält die Impulsgleichung für v_Θ den Quellterm $-\varrho V_r V_\Theta / r$. Man ist versucht, dies durch $S_C = 0$ und $S_P = -\varrho V_r / r$ auszudrücken. Wenn jedoch V_r negativ wird, erhält man $S_P > 0$. Eine saubere Formulierung ist

$$S_C = \left[\left[\frac{-\varrho V_r}{r}, 0 \right], V_\Theta \right] \quad \text{und} \quad S_P = - \left[\left[\frac{\varrho V_r}{r}, 0 \right] \right]. \quad (8.6)$$

2. Es ist immer möglich, $S_P = 0$ und $S_C = S$ zu setzen, was jedoch nicht wünschenswert ist. Der Effekt von stark negativem S_P ist fast wie Unterrelaxation, was die Konvergenz verzögert. Besser ist es, die Linie $S = S_C + S_P\phi_P$ zur Tangente an die wirkliche $S(\phi)$ -Kurve zu machen.
3. Da Quellterme oft groß sind, ist es nützlich, den Extremfall zu betrachten, wo der Quellterm alleine die Diskretisierungsgleichung dominiert. In diesem Fall schreiben wir

$$S_C + S_P\phi_P \approx 0 \quad (8.7)$$

mit der Lösung

$$\tilde{\phi}_P = -\frac{S_C}{S_P} \quad (8.8)$$

$\tilde{\phi}_P$ bezeichnet den Grenzwert von ϕ_P im quellendominierten Fall.

Quellterm–Linearisierung für stets–positive Variable

Um physikalisch sinnvoll zu sein, müssen einige abhängige Variable immer positiv sein: Massenbrüche chemischer Spezies, turbulente kinetische Energie, turbulentes Längenmaß, usw. Solche Größen haben gewöhnlich sowohl positive wie auch negative Quellen (d.h. Erzeugung und Vernichtung), so daß die Netto–Quelle oft negativ wird. Negative ϕ –Werte lassen sich vermeiden, wenn man neben $S_P \leq 0$ zusätzlich noch $S_C \geq 0$ fordert. Z.B. wenn

$$S = S_1 - S_2 ; \quad S_1 > 0 , \quad S_2 > 0 \quad (8.9)$$

dann gilt

$$S = S_1 - \frac{S_2}{\phi_P} \phi_P \quad (8.10)$$

und wir setzen

$$S_C = S_1 \quad \text{und} \quad S_P = -\frac{S_2}{\phi_P^*} \quad (8.11)$$

wobei ϕ_P^* der momentane Wert von ϕ_P ist.

9 Literaturliste

Leider ist die deutschsprachige Literatur auf dem Gebiet der numerischen Strömungsberechnung nicht sehr zahlreich. Das Vorlesungsskript lehnt sich in weiten Teilen an das Buch von Suhas V. Patankar [1] an. Dieses liefert einen Überblick über die Methode der Finiten–Volumen und ist unseres Erachtens nach das am besten geeignete Buch zum Einstieg in die Materie. Für die Vertiefung im Bereich der Finite–Volumen–Verfahren sind [2, 3] und vor allem [4] zu empfehlen.

Wer sich für andere Methoden der numerischen Strömungsberechnung interessiert, sei auf die allgemeineren Lehrbücher [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] verwiesen. Im Hinblick auf einzelne Fachgebiete bietet spezielle Literatur, auch für den Anfänger, in der Regel den besseren Einstieg. Folgende Beispiele seien hier angeführt für Partielle Differentialgleichungen [12], Strömungsmechanik und Turbulenz (allgemein) [13, 14, 15, 16, 17, 18], Tensorrechnung [19], Mehrgitter-Verfahren [20], Gittergenerierung [21], Turbulenzmodellierung [22, 23, 24].

Ferner stehen am Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik verschiedene Skripte zum betreffenden Themenbereich zur Verfügung [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32]. Allen, die sich weiterhin mit numerischer Strömungsberechnung beschäftigen wollen, sei in diesem Zusammenhang vor allem das Vorlesungsskript zur Lehrveranstaltung "Grundlagen der Numerischen Thermofluidodynamik" [33] ans Herz gelegt.

Literatur

- [1] Suhas V. Patankar; *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill 1980 (ISBN 0 07 48740 5)
- [2] B.E. Schönung; *Numerische Strömungsmechanik*, Springer 1990 (ISBN 3 540 53137 8)
- [3] B. Noll; *Numerische Strömungsmechanik*, Springer 1993
- [4] J.M. Ferziger, M. Perić; *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer 1996 (ISBN 3 540 59434 5)
- [5] K.A. Hoffmann; *Computational Fluid Dynamics for Engineers, Engineering Education System*, Austin, TX 78713-8148, USA, 1998, (ISBN 0-9623731-4-1)
- [6] C. Hirsch; *Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol. 1 & 2*, John Wiley & Sons, 1989, (ISBN 0 471 92385 0, 0 471 92452 0)
- [7] C.A.J. Fletcher; *Computational Techniques for Fluid Dynamics, Vol. 1 & 2*, Springer 1988 (ISBN 3 540 19466 5)
- [8] D.A. Anderson, J.C. Tannehill, R.H. Pletcher; *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, McGraw Hill 1984 (ISBN 0 07 050328 1)
- [9] R. Peyret, T.D. Taylor; *Computational Methods for Fluid Flow*, Springer 1983 (ISBN 3 540 13852 X)
- [10] T. Cebeci, P. Bradshaw; *Physical and Computational Aspects of Convective Heat Transfer*, Springer 1984
- [11] M. Schäfer; *Numerik im Maschinenbau*, Springer 1999

- [12] G.D. Smith; *Numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen*, Vieweg 1970 (ISBN 3 582 08296 8)
- [13] J.O. Hinze; *Turbulence - An Introduction to Its Mechanism and Theory* McGraw-Hill 1959
- [14] H. Tennekes, J.L. Lumley; *A First Course in Turbulence* MIT-Press, Cambridge (Mass.), USA 1972
- [15] J.C. Rotta; *Turbulente Strömungen*, Teubner 1972
- [16] J. Spurk; *Strömungsmechanik*, Springer 1991
- [17] M. Jischa; *Konvektiver Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch*, Vieweg 1982
- [18] H. Schade, E. Kunz; *Strömungslehre*, de Gruyter 1989
- [19] H. Schade; *Tensoranalysis*, de Gruyter 1997
- [20] W. Hackbusch; *Multi-Grid Methods and Applications*, Springer 1985 (ISBN 3 540 127615)
- [21] J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C. Wayne Mastin; *Numerical Grid Generation*, Elsevier 1985 (ISBN 0 444 00985 X)
- [22] W. Rodi; *Turbulence Models and Their Application in Hydraulics*, Elsevier 1984
- [23] B.E. Launder, D.B. Spalding; *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press 1972
- [24] D.C. Wilcox; *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries Inc., La Cañada 1993
- [25] R. Wille; *Strömungslehre*, Vorlesungsskript, HFI
- [26] H.H. Fernholz; *Grenzschichttheorie I und II*, Vorlesungsskript, HFI
- [27] H.E. Fiedler; *Turbulente Strömungen I und II*, Vorlesungsskript, HFI
- [28] A. Michalke; *Gasdynamik*, Vorlesungsskript, HFI
- [29] H. Schade; *Kontinuumsphysik*, Vorlesungsskript, HFI
- [30] H. Schade; *Dimensionsanalyse*, Vorlesungsskript, HFI
- [31] W.W. Baumann, R. Reinelt, F. Thiele; *Einführung in die Informationstechnik für Ingenieure*, Vorlesungsskript, HFI
- [32] M. Stoewer, K. Grunert, S. Schmidt, W.W. Baumann; *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure*, Vorlesungsskript, HFI
- [33] T. Rung, L. Xue, F. Thiele *Numerische Methoden der Thermofluiddynamik*, Vorlesungsskript, HFI