

NUMERISCHE METHODEN IN DER ANGEWANDTEN THERMODYNAMIK

Vortragender: Ao. Univ.-Prof. Dr. Raimund A. Almbauer

LV-Nr.: 313.146

März 2015



Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik
Vorstand: Univ.-Prof. DI Dr. Helmut Eichlseder



Vorwort

Aktuelle Entwicklungen auf dem Gebiet der numerischen Methoden im Maschinenbau stehen im engen Zusammenhang mit den hohen Anforderungen an die Produktqualität. Die stetig steigenden Computerressourcen und die besser werdende Qualität der Software und der Arbeitsabläufe in der Simulation erweitern kontinuierlich die Anwendungsgebiete im Entwicklungsprozess. Die Berechnung von physikalischen und chemischen Prozessen, wie sie in und um Fahrzeuge und speziell in Motoren vorkommen, sind dabei wichtige Anwendungsfälle für diese Methoden an unserem Institut. Der große Vorteil gegenüber der messtechnischen Erfassung der Phänomene liegt dabei darin, dass vergleichsweise schnell und kostengünstig Ergebnisse erhalten werden können und dadurch viel zusätzliche Information über die dreidimensionalen und instationären Vorgänge vorliegt. Dies gilt mittlerweile auch für reale Geometrien und realitätsnahe Prozesse mit wenigen Vereinfachungen. Für den Einsatz im Entwicklungsprozess ist es darüber hinaus wichtig, dass die Ergebnisse zeitgerecht geliefert werden können. Die Simulationen müssen daher stabil laufen und auch Kompromisse zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit erlauben. Ein Teil der für den Maschinenbau wichtigen Vorgänge sind von Strömungsvorgängen bestimmt. Beispiele für Projekte an unserem Institut sind die Strömungsvorgänge im Motor, in den Ansaug- und Auspuffleitungen aber auch Strömungen durch die Kühler, unter der Motorhaube und im Fahrgastraum. Weitere wichtige Anwendungsgebiete numerischer Methoden an unserem Institut sind die Schadstoffausbreitung, die Tunnellüftung aber auch thermodynamische Untersuchungen an Kompressoren etc.

Analytische Lösungen der Strömungsgleichungen haben praktisch kaum noch Bedeutung in ingenieurmäßigen Anwendung. Numerische Methoden lassen sich hingegen auf die oben angeführten Problemstellungen anwenden, für die z.B. im Motor wegen extremer Temperaturen oder Drücke oder wegen der kurzen Zeitdauer der Phänomene kaum oder keine experimentelle Untersuchung möglich ist. Als Ergebnis liegen die vollständigen dreidimensionalen und zeitabhängigen Strömungsfelder vor, d.h. Geschwindigkeiten, Druck, Temperatur, Turbulenzgrößen, Stoffgrößen, etc. an allen Orten des untersuchten Gebiets. Es treten dabei keine Skalierungsprobleme auf und es können auch Parameterstudien durchgeführt werden. Die notwendigen Vereinfachungen (z.B. Turbulenzmodelle, Verbrennungsmodelle) sind einer der wichtigsten Nachteile bei der Simulation 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 sowie Randbedingungen an Ein- und Austrittsflächen vorgegeben werden, die einen entscheidenden Einfluss auf die Lösung haben. Diese Randbedingungen müssen entweder aus experimentellen Untersuchungen bekannt sein oder mit Hilfe analytischer Beziehungen angenähert werden. Die meisten kommerziell verfügbaren Berechnungsprogramme für Vorgänge in denen Strömungen einen entscheidenden Einfluss haben, basieren auf der Methode der Finiten-Volumen (FVM). Diese Methode ist darüber hinaus eine Umsetzung eines thermodynamischen Prinzips, nämlich die

Bilanz für eine Erhaltungsgröße für ein endlich großes System anzusetzen.

Im Folgenden werden zuerst die grundlegenden Gleichungen für die Berechnung von Strömungen und Energieflüssen (Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie) und deren Anforderung an die numerische Methode dargestellt. Danach folgen die Grundlagen der Finiten Volumen Methode mit ihren Eigenschaften und Konzepten.

Der Inhalt dieses Skriptums soll auch helfen, das in den Grundlagenvorlesungen erlangte Wissen über Strömungsvorgänge aufzufrischen und den Wissensstand im Bereich der numerischen Methoden zu erweitern.

Ich möchte mich an dieser Stelle bei meinem Kollegen Ao. Univ.-Prof. Dr. Peter Sturm für die umfangreichen Vorarbeiten in Rahmen der Vorlesung und auch für die Unterstützung bei der Erstellung des Skriptums bedanken.

März 2015

Raimund Almbauer

Inhalt

VORWORT	2
FORMELZEICHEN, INDIZES UND ABKÜRZUNGEN	6
1 MATHEMATISCHE FORMULIERUNG VON ERHALTUNGSGLEICHUNGEN	8
1.1 BESCHREIBUNG UND HERLEITUNG DER ERHALTUNGSGLEICHUNGEN FÜR ENERGIE, IMPULS, MASSE (SPEZIES) UND ALLGEMEINE WEITERE SPEZIFISCHE ERHALTUNGSGRÖßEN	8
1.2 PRINZIP DER ERHALTUNG EINER PHYSIKALISCHEN GRÖßE	8
1.2.1 <i>Allgemeine Bilanzgleichung</i>	9
1.3 KONTINUITÄTSGLEICHUNG (ERHALTUNG DER MASSE) BEI 2-DIMENSIONALER BETRACHTUNG	10
1.4 STRÖMUNGSGLEICHUNGEN (ERHALTUNG VON IMPULS)	12
1.4.1 <i>Stokes'sches Gesetz für Newton'sche Fluide</i>	13
1.5 ERHALTUNGSGLEICHUNG FÜR EINE SKALARE GRÖßE	15
1.6 ENERGIEERHALTUNG	16
1.7 VORTEIL EINER ALLGEMEINEN DIFFERENTIALGLEICHUNG	19
2 GLEICHUNGSSYSTEM FÜR STRÖMUNGSBERECHNUNG	19
2.1 STATISTISCHE BEHANDLUNG DER TURBULENZ	19
2.2 ZEITGEMITTELTE KONTINUITÄTSGLEICHUNG	20
2.3 IMPULSGLEICHUNGEN	21
2.3.1 <i>Modellierung der turbulenten Schwankungsbewegungen</i>	21
2.3.2 <i>Turbulenzmodelle für den Wirbelviskositätsansatz</i>	24
2.4 SCHLIEßUNG DES GLEICHUNGSSYSTEMS	26
2.5 ALLGEMEINE FORM EINER ERHALTUNGSGLEICHUNG	26
3 NUMERISCHE VERFAHREN ZUR LÖSUNG PARTIELLER DIFFERENTIALGLEICHUNGEN	27
3.1 EINLEITUNG (SIEHE TEIL DR. OFFNER)	27
3.2 DISKRETISIERUNG	27
3.3 KONTROLL-VOLUMEN-FORMULIERUNG	28
3.3.1 <i>KV-Formulierung am Beispiel der eindimensionalen stationären Wärmeleitung</i>	28
3.3.2 <i>Profilannahme</i>	29
3.4 LEITPRINZIPIEN	31
3.5 QUELLTERMBEHANDLUNG	32
3.6 GRUNDREGELN BEI DER NUMERISCHEN BEHANDLUNG	33
3.6.1 <i>Konsistenz an den Flächen der Kontrollvolumina (Grundregel 1)</i>	33
3.6.2 <i>Positive Koeffizienten (Grundregel 2)</i>	33
3.6.3 <i>Linearisierung des Quelltermes (Grundregel 3)</i>	33
3.6.4 <i>Summe der Nachbarkoeffizienten (Grundregel 4)</i>	35
3.7 ANFANGS- UND RANDBEDINGUNGEN	35
3.7.1 <i>Anfangsbedingungen</i>	35
3.7.2 <i>Randbedingungen</i>	35
3.8 ZEITABHÄNGIGKEIT AM BEISPIEL DER INSTATIONÄREN EINDIMENSIONALEN WÄRMELEITUNG	37
3.8.1 <i>Explizites Zeitintegrationsschema</i>	39
3.8.2 <i>Implizite Schemata</i>	39
3.8.3 <i>Voll implizites Schema</i>	39
3.9 MEHRDIMENSIONALE LÖSUNGEN	39
3.10 WÄRMELEITUNGSÄHNLICHE PROBLEME	41
4 KONVEKTION UND DIFFUSION	41
4.1 EIGENSCHAFTEN DES STRÖMUNGSFELDES	41
4.2 EINDIMENSIONALE, STATIONÄRE KONVEKTION UND DIFFUSION	41
4.3 EXAKTE LÖSUNG DES EINDIMENSIONALEN KONVEKTIONS-DIFFUSIONSPROBLEMS	44
4.4 1 ST ORDER UPWIND-SCHEMA	45
4.4.1 <i>Hybrid Schema</i>	46
4.5 EIGENSCHAFTEN VON KONVEKTIONSSCHEMATA	47
4.5.1 <i>Beschränktheit</i>	48
4.5.2 <i>Genauigkeit</i>	48
4.5.3 <i>Transportivität</i>	48
4.5.4 <i>Erhaltung der Größe ϕ</i>	48
4.5.5 <i>Stabilität</i>	48
4.6 NUMERISCHE DIFFUSION	49

4.7	LIMITIERTE KONVEKTIONSSCHEMATA	52
4.7.1	<i>TVD Eigenschaft</i>	52
4.7.2	<i>2nd Order Upwind Schema</i>	53
4.7.3	<i>2nd Order Upwind TVD Schema</i>	54
4.7.4	<i>Convective Bounded Schemes</i>	56
5	LÖSUNG DES GLEICHUNGSSYSTEMS ZUR BERECHNUNG DER STRÖMUNG	57
5.1	SIMPLE ALGORITHMUS (SEMI IMPLICIT METHOD FOR PRESSURE LINKED EQUATIONS).....	59
5.2	LÖSUNGSWEG DER IMPULSGLEICHUNGEN	61
	LITERATUR	62
	PRÜFUNGSFRAGEN	62

Formelzeichen, Indizes und Abkürzungen

Lateinische Formelzeichen

$a = \lambda/(\rho \cdot c_p)$	m^2/s	Temperaturleitfähigkeit
A	m^2	Fläche, Oberfläche, Querschnittsfläche
$c = dq_{\text{rev}}/dT$	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$	spezifische Wärmekapazität
$c_p; c_v$	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$	spezifische isobare; isochore Wärmekapazität
C	div	Konstante
d	M	Durchmesser
D	m^2/s	Diffusionskoeffizient
e	J/kg	spezifische innere Energie
E	J/kg	spezifische Energie
E_a	J	äußere Energie
F	N	Kraft
G	m/s^2	örtliche Fallbeschleunigung
$g_n = 9,80665$	m/s^2	Normfallbeschleunigung
h	J/kg	spezifische Enthalpie
H	J	Enthalpie
J	$-(\text{m}^2/\text{s})$	flächenspezifischer Fluss einer Größe
k	m^2/s^2	turbulente kinetische Energie
K	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$	Wärmedurchgangskoeffizient
l	M	Länge
m	kg	Masse
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
M	g/mol	molare Masse
n	$(\text{k})\text{mol}$	Stoffmenge, Molzahl
N	–	Laufvariable
p	bar, Pa	Druck
P	$(\text{k})\text{W}$	Leistung
q	J/kg	spezifische Wärme(menge)
Q	J	Wärme
R	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$	spezifische Gaskonstante
S	$1/\text{s}$	Quellterm (sink, source)
t	$^\circ\text{C}$	Celsius-Temperatur
T	K	thermodynamische Temperatur
u	J/kg	spezifische innere Energie
U	J	innere Energie
v	m^3/kg	spezifisches Volumen
V	m^3	Volumen
w	J/kg	spezifische Arbeit
W	J	Arbeit
x, y, z	m	Koordinaten (kartesische)
u, v, w	m/s	Geschwindigkeiten in die drei Koordinatenrichtungen

Griechische Formelzeichen

α	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$	Wärmeübergangskoeffizient
δ_{ij}	–	Kronecker Delta
ε	m^2/s^3	Dissipation
ϕ	$-\text{kg}$	allg. spez. transportierte Größe

η	$\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$	(dynamische) Viskosität
λ	$\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$	Wärmeleitfähigkeit
$\nu = \eta/\rho$	m^2/s	kinematische Zähigkeit, Viskosität
ρ	kg/m^3	Dichte
τ	N/m^2	Schubspannung
Γ	m^2/s	Diffusionskoeffizient
σ	-	Prandtl-, Schmidtzahl

Operatoren und Bezeichnungen

d	vollständiges Differential
δ	unvollständiges Differential
∂	partiell Differential
Σ	Summe
Δ	Differenz zweier Größen; Laplace-Operator

Weitere Indices und Abkürzungen

1	Zustand (im Querschnitt, am Punkt) 1
2	Zustand (im Querschnitt, am Punkt) 2
1D	eindimensional
3D	dreidimensional
a	aus, außen, äußere
CFD	Computational Fluid Dynamics
D	Diffusion
DNS	direkte numerische Simulation
e	ein, (Behälter-) Eintritt; eingebracht
g	gasförmig
ges	Gesamt
grad	Gradient (1. räumliche Ableitung eines Skalarfelds)
i, j, k	Laufvariablen (in die drei Koordinatenrichtungen x, y und z)
kin	kinetisch
konst	konstant
KO	Kompressor
max	maximal
min	Minimal
$\text{Nu} = \alpha l/\lambda$	Nußelt-Zahl, Nu
o	obere
$\text{Pr} = \nu/a$	Prandtl-Zahl
$\text{Re} = w l/\nu$	Reynolds-Zahl
S	System
sog	sogenannt
t	turbulent
u, v, w	Geschwindigkeiten in die drei kartesischen Richtungen x, y und z
vol	volumetrisch
zu	zugeführt(e) (Wärme)

1 Mathematische Formulierung von Erhaltungsgleichungen

1.1 Beschreibung und Herleitung der Erhaltungsgleichungen für Energie, Impuls, Masse (Spezies) und allgemeine weitere spezifische Erhaltungsgrößen

Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik lässt sich meist nur in geometrisch einfachen Systemen und mit mehreren Annahmen geschlossen lösen. Zu diesen Annahmen zählt z.B., dass in einem geschlossenen System überall der gleiche thermodynamische Zustand vorliegt. Diese und weitere Annahmen halten der Realität der physikalischen und chemischen Vorgänge in Maschinen nicht Stand. Der zeitliche Verlauf und die räumliche Verteilung der physikalischen Größen stehen in Interaktion mit der Geometrie der Maschinen und bestimmen damit deren Leistungsfähigkeit und Effizienz. In Festkörpern ist der Energietransport in den hier betrachteten Anwendungen meist nur auf den Wärmetransport beschränkt. In Gasen und Flüssigkeiten beeinflusst jedoch die Strömung zusätzlich den Energietransport und hängt meist selbst wieder von der Verteilung der Energie ab. Um nun die Information über die zeitliche und räumliche Verteilung der physikalischen Größen in Maschinen und Anlagen zu erhalten, müssen die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und Massenbruch zeitlich und räumlich aufgelöst berechnet werden. Alle diese Gleichungen sind prinzipiell von gleicher Form und drücken ein Erhaltungsprinzip aus. Die zu erhaltende spezifische (auf die Masse bezogene) Größe (Variable) wird im Folgenden ϕ genannt. Zunächst sollen allgemein die Transportmechanismen diskutiert werden, um dann zu einem universellen Ansatz für eine numerische Lösung zu gelangen.

1.2 Prinzip der Erhaltung einer physikalischen Größe

In Abb. 1 ist der Stoff- und Molekulartransport in und aus einem Kontrollvolumen dargestellt. Dieses Kontrollvolumen entspricht dabei einem thermodynamischen System, mit einer definierten, geometrisch geschlossenen Oberfläche. Die Änderungsrate der Größe ϕ im Kontrollvolumen entspricht dem Netto-Strömungstransport (ein minus aus), dem Netto-Molekulartransport (ein minus aus) und den Eintrag durch Quellen (bzw. Senken).

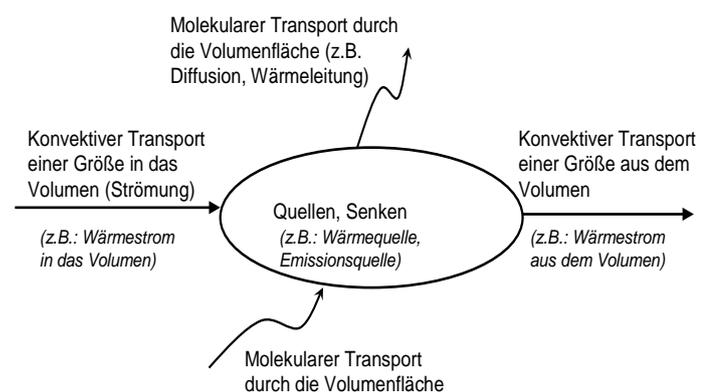


Abb. 1: Erhaltung einer Größe im Kontrollvolumen

1.2.1 Allgemeine Bilanzgleichung

Um nun das Erhaltungsprinzip in eine mathematische Gleichung überzuführen, kann wie folgt vorgegangen werden: Betrachtet werden die Flüsse J in der Richtung x (J_x) einer beliebigen spezifischen Erhaltungsgröße ϕ an den Grenzen eines kartesischen Volumenelements (Δx , Δy , Δz) mit Hilfe des ersten Terms des Taylorreihenansatzes:

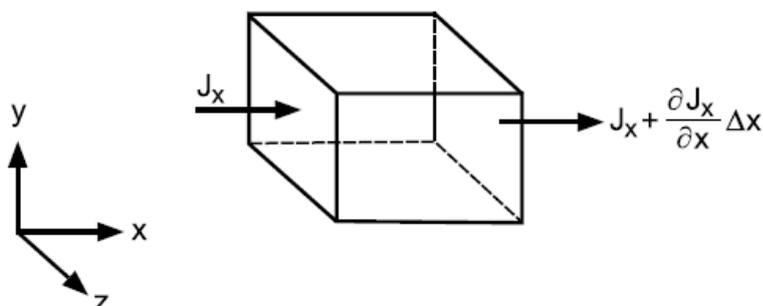


Abbildung 2: Flussbilanz in x-Richtung an einem Volumenelement

Darin ist J_x der Fluss in x-Richtung (Strom der Größe pro Flächeneinheit). Wenn dieser mit der Fläche multipliziert wird, ergibt sich der Strom der physikalischen Größe über die Fläche. Bilanziert man für die beiden Flächen des Volumens, die normal auf die x-Richtung stehen, ergibt sich folgende Netto-Änderung der physikalischen Größe im Volumen:

$$(J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} dx - J_x) dy dz = \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dy dz = \frac{\partial J_x}{\partial x} dV \quad \text{Gl. 1}$$

Bei dieser Schreibweise wurde von einem endlich großen Volumen ΔV mit Δx , Δy , und Δz auf ein infinitesimal kleines Volumen dV mit dx , dy und dz übergegangen.

Der Netto-Strom pro Volumeneinheit ist damit: $\frac{\partial J_x}{\partial x}$

Anmerkung: Der Fluss aus dem Kontrollvolumen wird hier positiv angesetzt! Dies widerspricht der Vorgangsweise der Thermodynamik, die die Flüsse in das Kontrollvolumen positiv ansetzt. Diese Vorgangsweise wird bei der Ableitung der Erhaltungsgleichungen üblicherweise eingehalten und wird daher auch hier übernommen.

Bei Betrachtung aller drei Raumrichtungen x , y , z ergibt sich (in Vektor-Schreibweise) die Netto-Änderung der physikalischen Größe bezogen auf das Volumenelement dV mit:

$$\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = \text{div } J = \nabla J \quad \text{Gl. 2}$$

Die differentielle Form einer allgemeinen Bilanz für die physikalische Größe ϕ lautet damit (unter Verwendung der Tensorschreibweise und der Einstein'schen Summenkonvention):

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = S_\phi \quad \text{Gl. 3}$$

mit: $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} = \text{zeitliche Änderungsrate}$

In einem Fluid setzt sich der Fluss J_i aus einem konvektiven und einem diffusiven Anteil zusammen.

$$\begin{aligned}
 \text{mit: } J &= J_{\text{Konvektion}} + J_{\text{Diffusion}} \\
 J_{\text{Konvektion}} &= \rho u \phi \\
 J_{\text{Diffusion}} &= -\Gamma_{\phi} \text{grad} \phi = -\Gamma_{\phi} \nabla \phi \\
 \Gamma_{\phi} &= \text{allgemeiner Diffusionskoeff.} \\
 S_{\phi} &= \text{Quellterm}
 \end{aligned} \tag{Gl. 4}$$

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

Daraus folgt die allgemeine differentielle Form der Transportgleichung (in Tensorschreibweise):

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}}_{\text{Instationärterm}} + \underbrace{\frac{\partial \rho u_i \phi}{\partial x_i}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{S_{\phi}}_{\text{Quellterm}} \tag{Gl. 5}$$

ϕ kann stehen für:

- eine Geschwindigkeitskomponente ($u, v, w =$ spezifischer Impuls)
- spezifische Energie (in vereinfachten Fällen des 1.HS auch spezifische Enthalpie)
- Konzentration einer chemischen Komponente (Massenanteil)
- eine Turbulenzgröße (z.B. turbulente kinetische Energie k , Dissipationsrate ϵ)

Die Bilanzgleichungen für unterschiedliche Größen drücken ein Erhaltungsprinzip aus. Im Allgemeinen ist ϕ eine spezifische Größe (bezogen auf die Masse). Die Terme der Differentialgleichung sind Größen pro Volumen- und pro Zeiteinheit.

Die Anwendung auf die Bilanzen von Masse, Impuls und Energie ergibt die entsprechenden Transport- bzw. Erhaltungsgleichungen.

1.3 Kontinuitätsgleichung (Erhaltung der Masse) bei 2-dimensionaler Betrachtung

Abbildung 3 zeigt die Massenflüsse im zweidimensionalen Fall für ein kartesisches Gitter. Die zeitliche Änderungsrate der Masse im Volumen $\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy$ ergibt sich aus der Summe der Massenflüsse:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy = \rho u dy + \rho v dx - \left[\left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx \right) dy + \left(\rho v + \frac{\partial \rho v}{\partial y} dy \right) dx \right] \tag{Gl. 6}$$

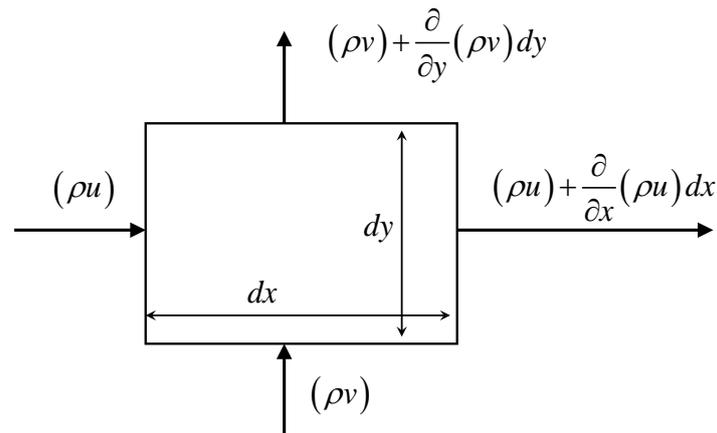


Abbildung 3: Erhaltung der Masse im zweidimensionalen kartesischen Gitter

Zusammengefasst ergibt sich damit im zweidimensionalen Fall (Vektor-Schreibweise):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad \text{Gl. 7}$$

bzw. im dreidimensionalen Fall:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \quad \text{Gl. 8}$$

Auf direktem Weg kommt man zur selben Gleichung durch Einsetzen von $\phi = 1$ in Gleichung 5. Es ergibt sich damit die Kontinuitätsgleichung in differentieller Form in Tensor-Schreibweise:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad \text{Gl. 9}$$

mit: $j = 1, 2, 3$

Dabei gilt für die Darstellung des Geschwindigkeitsvektors in Tensor- bzw. Vektorschreibweise:

$$u_i = \{u_1, u_2, u_3\} = \{u, v, w\} \quad \text{Gl. 10}$$

Für das Produkt von zwei Geschwindigkeitsvektoren ergibt sich in Tensor-Schreibweise folgende 3×3 Matrix bzw. sind auch die anderen beiden Schreibweisen möglich:

$$\underline{u}_{ij} = \begin{Bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{Bmatrix} = \vec{u}_i \vec{u}_j = \vec{u} \vec{v} \quad \text{Gl. 11}$$

1.4 Strömungsgleichungen (Erhaltung von Impuls)

Der Impuls ist eine vektorielle Größe, d. h. es sind drei Gleichungen für die drei kartesischen Anteile zur vollständigen Darstellung notwendig. Die zeitliche Änderungsrate des Impulses im Volumen ergibt sich aus der Summe der Kräfte auf das Fluidelement.

Unterscheidung von zwei Typen von Kräften:

Oberflächenkräfte:

Druckkräfte

viskose Kräfte

....

Körperkräfte:

Gravitation

Zentrifugalkraft

Corioliskraft

elektromagnetische Kräfte

.....

In Abbildung 4 sind die Impulsflüsse über die Oberflächen und die Kräfte auf ein Fluidelement für den Impuls in x-Richtung (für die Geschwindigkeitskomponente u) dargestellt.

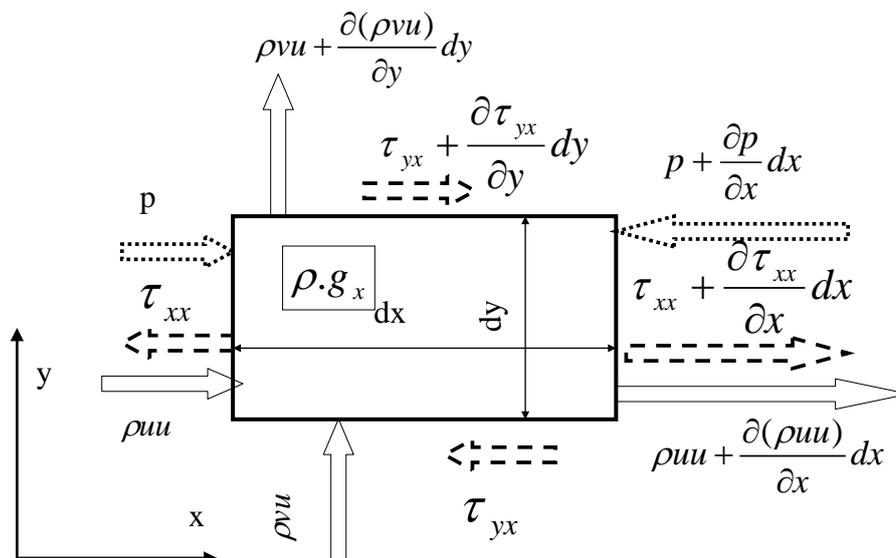


Abbildung 4: Bilanz für den Impuls in x-Richtung (u) im zweidimensionalen, kartesischen Gitter

Die einfließenden Impulsströme ergeben sich damit zu:

$$(\rho u)u dy + (\rho v)u dx \quad \text{Gl. 12a}$$

und die ausfließenden Impulsströme mit:

$$\left[(\rho u)u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u)u dx \right] dy + \left[(\rho v)u + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v)u dy \right] dx \quad \text{Gl. 13b}$$

Die Summe der viskosen Kräfte (Molekulartransport des Impulses) ergibt sich zu:

$$\left(-\tau_{xx} + \tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial x}\tau_{xx} dx \right) dy + \left(-\tau_{yx} + \tau_{yx} + \frac{\partial}{\partial y}\tau_{yx} dy \right) dx = \frac{\partial}{\partial x}\tau_{xx} dx dy + \frac{\partial}{\partial y}\tau_{yx} dy dx \quad \text{Gl. 14}$$

Die Summe der Druckkräfte ergibt:

$$\left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dy = -\frac{\partial p}{\partial x} dx dy \quad \text{Gl. 15}$$

Als Quellterm ist hier als Beispiel die Erdanziehungskraft dargestellt. Es wird angenommen, dass die x-Koordinatenrichtung mit dem Anteil der Erdbeschleunigungsrichtung g_x übereinstimmt:

$$\rho g_x dx dy$$

Damit ergibt sich für die zeitliche Änderungsrate des Impulses (zweidimensional):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u dx dy = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)u dx dy - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v)u dx dy + \frac{\partial}{\partial x}\tau_{xx} dx dy + \frac{\partial}{\partial y}\tau_{yx} dx dy - \frac{\partial p}{\partial x} dx dy + \rho g_x dx dy \quad \text{Gl. 16}$$

bzw. auf ein Volumen (2-dimensional: $dx * dy * 1$) bezogen in Vektorschreibweise:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \rho g_x \quad \text{Gl. 17}$$

Auf direktem Weg kommt man zur selben Gleichung durch Einsetzen von $\phi = u$ in Gleichung 5 (wobei eine gesonderte Betrachtung des Quellterms notwendig ist). Es ergibt sich damit die Impulserhaltungsgleichung in differentieller Form in Tensor-Schreibweise:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad \text{Gl. 18}$$

Viskose Spannungen = molekularer Impulstransport

Diese Gleichung gilt so auch für den 3-dimensionalen Fall.

1.4.1 Stokes'sches Gesetz für Newton'sche Fluide

In Analogie zum Hooke'schen Gesetz bei elastischen Körpern (Kraft ist proportional zur Auslenkung) kann die Schubspannung in einem Newton'schen Fluid proportional zur Größe der Formänderungsgeschwindigkeit angesetzt werden. Im eindimensionalen Fall (Abbildung 5) ergibt sich damit:

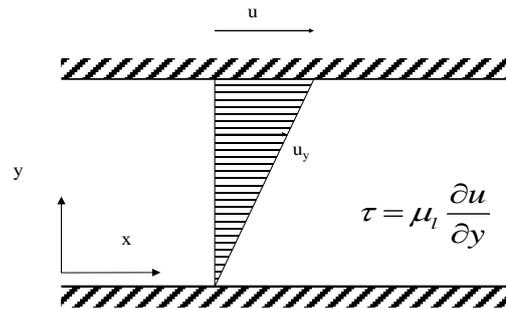


Abbildung 5: Schubspannung eindimensional: Schubspannung und damit Kraft ist proportional zum Geschwindigkeitsgradienten

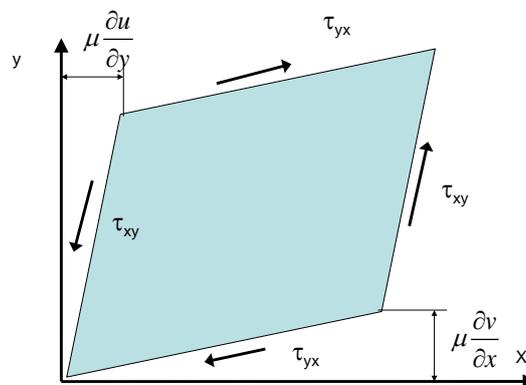


Abbildung 6: Schubspannungen im zweidimensionalen Fall an einem Fluidelement

Da die Summe aller Momente durch die Schubspannungen gleich null sein muss, gilt:

$$\begin{aligned} F_{yx} dx - F_{xy} dy &= 0 \\ \tau_{yx} dy dz dx - \tau_{xy} dx dy dz &= 0 \end{aligned} \quad \text{Gl. 19}$$

Daraus folgt:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} \quad \text{mit:} \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad \text{Gl. 20}$$

Die Normalspannungen lassen sich analog zu den Schubspannungen, wie folgt anschreiben (siehe Abbildung 7):

$$\tau_{xx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad \text{Gl. 21}$$

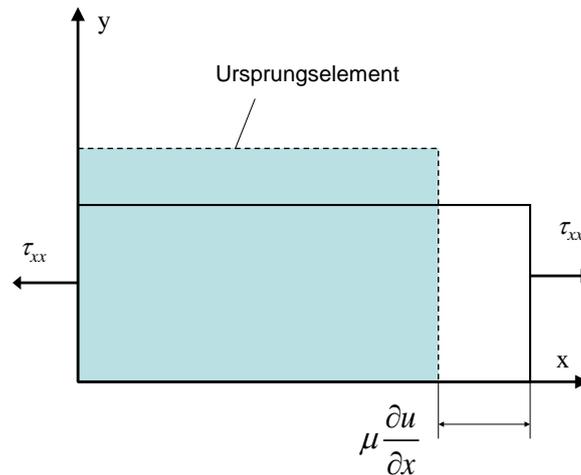


Abbildung 7: Normalspannungen in x-Richtung

Für den mehrdimensionalen Fall ergibt sich damit in Tensorschreibweise:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad \text{Gl. 22}$$

Eingesetzt in die Erhaltungsgleichung für den Impuls in Tensor-Schreibweise ergeben sich damit die Navier-Stokes'schen Gleichungen

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \rho g_i \quad \text{Gl. 23}$$

1.5 Erhaltungsgleichung für eine skalare Größe

In Abbildung 8 werden wieder für den zweidimensionalen Fall die Flüsse einer skalaren Größe über die Oberflächen des Kontrollvolumens dargestellt. Die skalare Größe kann dabei für Energie, Temperatur, turbulente kinetische Energie, Konzentration usw. stehen.

Die Differenz aus einfließenden und ausfließenden Strömen (= konvektiver Transport) der skalaren Größe ergibt sich damit zu:

$$-\frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \phi \, dx \, dy - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \phi \, dy \, dx \quad \text{Gl. 24}$$

Die Differenz aus einfließenden und ausfließenden molekularen Transport ergibt:

$$-\frac{\partial}{\partial x} J_{\phi x} \, dx \, dy - \frac{\partial}{\partial y} J_{\phi y} \, dy \, dx \quad \text{Gl. 25}$$

mit dem Quellterm: $\rho S_\phi \, dx \, dy$

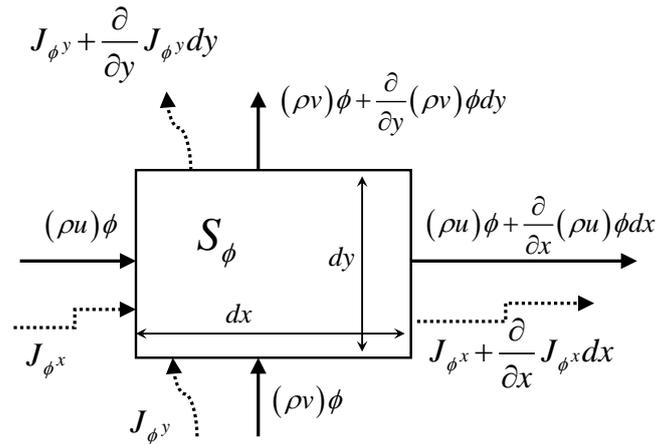


Abbildung 8: Erhaltung einer skalaren Größe im zweidimensionalen Fall

Damit ergibt sich die vollständige zweidimensionale Erhaltungsgleichung in (über die Fläche) integrierter Form:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi dx dy = -\frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \phi dx dy - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \phi dx dy - \frac{\partial}{\partial x} J_{\phi_x} dx dy - \frac{\partial}{\partial y} J_{\phi_y} dx dy + \rho S_{\phi} dx dy \quad \text{Gl. 26}$$

bzw. in Tensorschreibweise bezogen auf das Volumen ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) \phi = -\frac{\partial}{\partial x_j} J_{\phi_j} + \rho S_{\phi} \quad \text{Gl. 27}$$

Für die Berechnung des molekularen Transports wird das Fick'sche Gesetz verwendet. Der molekulare Diffusionsfluss ist dabei negativ proportional zum Gradienten der skalaren Größe:

$$J_{\phi_x} = -\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad \text{in x-Richtung} \quad \text{Gl. 28}$$

$$J_{\phi_j} = -\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad \text{in Tensorschreibweise allgemein} \quad \text{Gl. 29}$$

Damit ergibt sich die Erhaltungsgleichung in Tensorschreibweise bezogen auf ein Volumen:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + \rho S_{\phi} \quad \text{Gl. 29}$$

1.6 Energieerhaltung

Zur Herleitung der Energiebilanz wird der Transport der spezifischen Enthalpie h unter Vernachlässigung des Mach-Zahl-Einfluss und der Dissipation betrachtet. Die differentielle Form der Energieerhaltungsgleichung lautet:

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

Gl. 30

mit: T Temperatur
 k Wärmeleitfähigkeit
 S_h Wärmequelle (bezogen auf das Volumen)

Für ideale Gase bei geringen Druckänderungen gilt:

$$c_p \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\partial h}{\partial x_i}$$

Gl. 31

Anmerkung: Bei Flüssigkeiten und Feststoffen wird c_p durch c ersetzt

Dabei ist c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck. Ist c_p konstant, so kann die Gleichung wahlweise für Temperatur oder Enthalpie als unabhängige Variable angegeben werden ($dh = c_p dT$).

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{S_h}{c_p}$$

Gl. 32

Die im Weiteren verwendete Gleichung für stationäre Wärmeleitung ergibt sich durch Wegfall der Zeitabhängigkeit und des konvektiven Transports:

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

Gl. 33

Erster Hauptsatz der Thermodynamik

Im folgenden Absatz wird die mathematische Umformung des 1.HS der Thd auf eine allgemeine Erhaltungsgleichung, wie sie oben abgeleitet wurde, gezeigt. Der 1. HS der Thd lautet

$$\delta Q_a + \delta W_t + (h + e_a)_i dm_i = dU + dE_a$$

Gl. 34

In der allgemeinen Erhaltungsgleichung wird nun an Stelle der allgemeinen spezifischen Größe ϕ die spezifische Energie E eingesetzt. Diese setzt sich aus der spezifischen inneren Energie e (vgl. in der Thd: spez. innere Energie = u) und der spezifischen kinetischen und potentiellen Energien zusammen:

$$E = e + \frac{u_k u_k}{2} + g_k x_k$$

Gl. 35

Damit ergibt sich folgende Gleichung, deren Anteile weiter unten erklärt werden:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j E}{\partial x_j} = - \frac{\partial u_j p}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + S_E$$

Gl. 36

In Vektorschreibweise ergeben sich damit auf der linken Seite der Gleichung neben dem Instationärterm die konvektiven Transporte der Energie in die drei Koordinatenrichtungen.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u E}{\partial x} + \frac{\partial \rho v E}{\partial y} + \frac{\partial \rho w E}{\partial z} = & - \frac{\partial u p}{\partial x} - \frac{\partial v p}{\partial y} - \frac{\partial w p}{\partial z} + \frac{\partial u \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial u \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial u \tau_{xz}}{\partial z} + \\ & \frac{\partial v \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial v \tau_{yz}}{\partial z} + \frac{\partial w \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial w \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial w \tau_{zz}}{\partial z} + \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial q}{\partial z} + S_E \end{aligned} \quad \text{Gl. 37}$$

Inst.term Konvektionsterme Einschiebearbeit Zähigkeitsterme

Zähigkeitsterme Wärmestrom Quellterm

Die Druckterme auf der rechten Seite stellen die Bilanzen der Einschiebearbeiten in die drei Koordinatenrichtungen dar, danach folgen die Arbeiten, die gegen die Zähigkeit des Mediums verrichtet werden. Hier wirken neun Kräfte der Bewegung des Fluids entgegen. Schließlich folgt der Nettowärmestrom in die drei Koordinatenrichtungen und ein Quell- bzw. Senkenterm.

Vergleicht man nun den 1. HS der Thd (Gl. 34) mit der allgemeinen Energieerhaltungsgleichung (Gl. 36 bzw. 37), muss der 1.HS der Thd nach der Zeit abgeleitet werden, um die beiden Formen ineinander überzuführen. Der Instationärterm entspricht dabei der zeitlichen Änderung der inneren und der äußeren Energien im Kontrollvolumen (System). Die konvektiven Terme entsprechen dem Transport von spezifischen inneren und äußeren Energien mit der Masse über die Systemgrenzen in alle drei Koordinatenrichtungen. Um zu den spezifischen Enthalpien zu kommen, müssen die Terme der Einschiebearbeit auf die linke Seite der Erhaltungsgleichung gebracht werden und dort zu den spezifischen inneren Energien addiert werden:

$$h = e + p/\rho \quad \text{Gl. 38}$$

Die Zähigkeitsterme entsprechen technischen Arbeiten über die Systemgrenzen und die Wärmeströme sind selbsterklärend. Quellterme sind im 1.HS der Thd nicht vorgesehen, könnten jedoch jederzeit eingeführt werden.

Umformung in die Enthalpieerhaltungsgleichung

Unter Verwendung der Kettenregel für das vollständige (totale) Differential des Drucks nach der Zeit ergibt sich:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial u p}{\partial x} + \frac{\partial v p}{\partial y} + \frac{\partial w p}{\partial z} \quad \text{Gl. 39}$$

Durch Addition des totalen Differentials auf beiden Seiten der Gl. 37 und unter der Voraussetzung, dass die kinetische und die potentielle Energie vernachlässigbar sind, ergibt sich:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u h}{\partial x} + \frac{\partial \rho v h}{\partial y} + \frac{\partial \rho w h}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{\partial q}{\partial y} - \frac{\partial q}{\partial z} + S_h \quad \text{Gl. 40}$$

Wird der Wärmestrom q mit Hilfe des Fourier-Ansatzes beschrieben, ergibt sich damit die Erhaltungsgleichung für Enthalpie (Gl. 30) mit Ausnahme der partiellen Ableitung des Drucks nach der Zeit. Für Strömungen mit geringen zeitlichen Änderungen des Drucks in der Zeit gilt also Gleichung 30.

1.7 Vorteil einer allgemeinen Differentialgleichung

Durch die Analogie der unterschiedlichen Erhaltungsgleichungen besteht die Möglichkeit eine gemeinsame numerische Methode zu verwenden. Die allgemeine Gleichung enthält bei der Anwendung auf unterschiedliche ϕ immer dieselbe linke Seite (Instationärterm und konvektiver Transport). Auf der rechten Seite sind die molekularen Diffusionsflüsse (Wärmeleitung, Impulsaustausch durch molekulare Viskosität) ähnlich.

2 Gleichungssystem für Strömungsberechnung

Setzt man nun für die allgemeine Variable ϕ die drei kartesischen Geschwindigkeitskomponenten u , v und w ein, so erhält man die Navier-Stokes Gleichungen. In diesen Gleichungen treten folgende unbekannte Größen auf: u , v , w , der Druck p und die Dichte ρ . Es sind somit weitere Gleichungen notwendig, um ein Gesamtsystem an Gleichungen zur Beschreibung eines Geschwindigkeitsfelds zu erhalten. Es sind dies die Kontinuitätsgleichung, die Energieerhaltungsgleichung und die Zustandsgleichung für das Medium. Wenn die Temperatur als konstant angenommen werden kann, muss die Energieerhaltungsgleichung (oder Temperaturerhaltungsgleichung) nicht gelöst werden. Damit ergibt sich ein System von gekoppelten, nicht-linearen, partiellen Differentialgleichungen 2. Ordnung. Die Lösung dieses Gleichungssystems ist (außer in stark vereinfachten Fällen) nur mit Hilfe numerischer Methoden möglich.

Die Navier-Stokes'sche Gleichungen gelten für laminare Strömungen. Sie gelten auch für turbulente Strömungen, wenn alle Bewegungen der Strömung mit Hilfe einer numerischen Berechnung aufgelöst werden können, wird dies als direkte numerische Simulation bezeichnet.

Laminare Strömungen:

- Impulsaustausch über laminare Viskosität

Turbulente Strömungen:

- turbulenter Impuls- und Stoffaustausch
- direkte Simulation (nur bis Reynoldszahlen von ca. 10^5 möglich)
(kleinste Wirbelgrößen: Kolmogorov-Scale)
- statistische Betrachtung der Turbulenz notwendig

2.1 Statistische Behandlung der Turbulenz

Die zur Zeit technisch wichtigste Behandlung der Turbulenz erfolgt über eine Zeitmittelung der turbulent schwankenden Größen einer Strömung. Diese Zeitmittelung wird oft als Reynolds-Zeitmittelung bezeichnet. Die turbulente Größe wird dabei in einen zeitlichen Mittelwert \bar{u} und in eine Schwankungsbewegung u' aufgespalten.

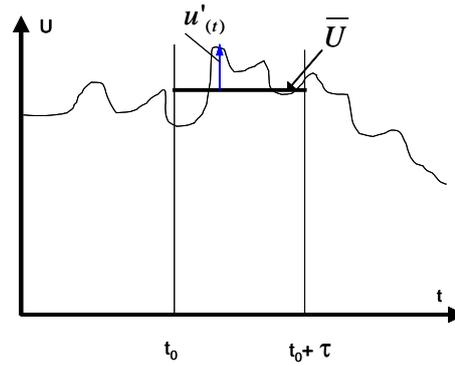


Abbildung 9: Mittelwert und turbulenter Schwankungswert

Diese Zeitmittelung wird auf alle Variablen eines Geschwindigkeitsvorganges angewandt; z.B.:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad p = \bar{p} + p' \quad \phi = \bar{\phi} + \phi' \quad \text{Gl. 41}$$

Die Mittelungszeit τ ist dabei so gewählt, dass sie klein ist im Vergleich mit der Entwicklung der Hauptströmung, aber groß im Vergleich mit dem Zeitmaß der turbulenten Schwankungsbewegungen. Die Mittelwerte sind wie folgt definiert:

$$\bar{u} = \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} u_{(t)} dt; \quad \bar{\phi} = \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \phi_{(t)} dt \quad \text{Gl. 42}$$

Für die Mittelwerte der Schwankungsgrößen ergibt sich damit per Definition:

$$\int_{t_0}^{t_0+\tau} u'_{i(t)} dt = 0; \quad \int_{t_0}^{t_0+\tau} \rho'_{(t)} dt = 0 \quad \text{Gl. 43}$$

d.h. der Mittelwert einer Schwankungsbewegung ist null. Für die Multiplikation von zwei instationären Komponenten (z.B. u und ϕ) ergibt sich:

$$\overline{u\phi} = \overline{(\bar{u} + u')(\bar{\phi} + \phi')} = \overline{\bar{u}\bar{\phi}} + \overline{\bar{u}\phi'} + \overline{u'\bar{\phi}} + \overline{u'\phi'} = \bar{u}\bar{\phi} + \overline{u'\phi'} \quad \text{Gl. 44}$$

Durch Einführung der Zeitmittelung erhält man bei der Multiplikation von zwei Größen eine neue unbekannte Größe, nämlich den zeitlichen Mittelwert der Korrelation der turbulenten Schwankungsanteile $\overline{u'\phi'}$. Dieser Term ist nicht vernachlässigbar.

2.2 Zeitgemittelte Kontinuitätsgleichung

Wenn man nun die Zeitmittelung auf die Kontinuitätsgleichung anwendet, erhält man:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho (\bar{u}_j + u'_j)}{\partial x_j} = 0 \quad \text{Gl. 45}$$

$$\text{Daraus folgt: } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad \text{da } \frac{\partial \rho u'_j}{\partial x_j} = 0$$

Für kompressible Strömungen muss auch ρ durch $\rho = \bar{\rho} + \rho'$ ersetzt werden. Dadurch ergeben sich wiederum neue unbekannte Korrelationen.

2.3 Impulsgleichungen

Die Reynolds-Zeitmittelung angewandt auf die Impulserhaltungsgleichungen

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} + \rho g_i \quad \text{Gl. 46}$$

ergibt:

$$\frac{\partial \rho \left(\overline{u_i + u_i'} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho \left(\overline{u_i + u_i'} \right) \left(\overline{u_j + u_j'} \right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \left(\overline{p + p'} \right)}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad \text{Gl. 47}$$

Für die Schubspannungen ergibt sich für ein Newton'sches Fluid nach der Aufteilung in Mittelwert und Schwankungswert folgende Gleichung:

$$\overline{\tau_{ij}} = +\mu \left(\frac{\partial \left(\overline{u_i + u_i'} \right)}{\partial x_j} + \frac{\partial \left(\overline{u_j + u_j'} \right)}{\partial x_i} \right) = +\mu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) \quad \text{Gl. 48}$$

Nach dem Streichen der Terme, die den Wert null ergeben, bleibt für die Impulserhaltungsgleichungen:

$$\frac{\partial \rho \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \left(\overline{u_i u_j} + \overline{u_i' u_j'} \right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) \right] + \rho g_i \quad \text{Gl. 49}$$

Darin treten nun die Korrelationen der Schwankungswerte der Geschwindigkeiten auf. Werden diese nun auf die rechte Seite der Gleichungen gestellt, ergeben sich formal dieselben Erhaltungsgleichungen wie in Gl. 22, jedoch nun mit zeitgemittelten (Geschwindigkeiten) Variablen. Die durch die Zeitmittelung entstandenen zusätzlichen Korrelationsterme werden als Reynoldsspannungen bezeichnet.

$$\frac{\partial \rho \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \left(\overline{u_i u_j} \right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\tau_{ij}} - \rho \overline{u_i' u_j'} \right] + \rho g_i \quad (= \text{Reynoldsgleichungen}) \quad \text{Gl. 50}$$

↑

Reynoldsspannungen

Die Reynoldsspannungen entstehen also durch die turbulente Zusatzbewegung des Fluids. Durch diese Schwankungsbewegungen kommt es zu einem erhöhten Austausch aller transportierten Größen. In den Impulserhaltungsgleichungen wirken sie im Allgemeinen wie eine erhöhte Zähigkeit. Für alle skalaren Größen wirkt die Turbulenz wie ein erhöhter Diffusionskoeffizient (vgl. Wärmeleitkoeffizient).

2.3.1 Modellierung der turbulenten Schwankungsbewegungen

Die turbulenten Schwankungsbewegungen sorgen für zusätzlichen Impulsaustausch sowie Wärme- und Stoffaustausch. In der Impulserhaltungsgleichung bewirken die Reynoldsspannungen $\overline{\rho u_i u_j}$ einen Impulsausgleich zwischen Gebieten mit hohem und niedrigem Impuls (Geschwindigkeiten). Dies ist ähnlich dem Effekt durch viskose

Spannungen τ_{ij} , die einen molekularen Impulsausgleich bewirken. Ein Ansatz zur Berücksichtigung der Reynoldsspannungen in den zeitgemittelten Impulserhaltungsgleichungen gleicht daher einer Zähigkeitserhöhung.

Die Reynoldsspannungen $\overline{\rho u_i' u_j'}$ sind die einzigen Terme, die die Navier-Stokes Gleichungen von den Reynoldsgleichungen (turbulent) unterscheiden.

Durch die zeitliche Mittelung von Erhaltungsgleichungen für skalare Größen ϕ erhält man noch die Korrelationen $\overline{\rho u_i' \phi'}$.

Diese Korrelationsterme stellen nun neue Unbekannte dar, die für die Lösung des gesamten Gleichungssystems bekannt sein müssen. Auch der Weg weitere Bestimmungsgleichungen dafür aufzustellen, führt nicht daran vorbei, dass nun zusätzliche Information eingebracht werden muss. Es sind dies empirische Ansätze, die aus Experimenten abgeleitet werden (Turbulenzmodellierung).

- Erhaltungsgleichungen + Turbulenzmodellierung \rightarrow geschlossenes, lösbares Gleichungssystem

Die Reynoldsspannungen bilden im dreidimensionalen Fall eine Matrix von 9 Korrelationstermen, die über die Hauptdiagonale symmetrisch sind. Es sind daher 6 unbekannte Korrelationsterme vorhanden: $\overline{u_1' u_1'}$, $\overline{u_2' u_2'}$, $\overline{u_3' u_3'}$, $\overline{u_1' u_2'}$, $\overline{u_1' u_3'}$ und $\overline{u_2' u_3'}$. Diese können nun wieder jeweils als skalare Größen mit Hilfe einer Erhaltungsgleichung gelöst werden. Dieser Ansatz wird Reynoldsschubspannungsmodell genannt (Turbulenzschließung 2. Ordnung). Bei der Modellierung dieser Erhaltungsgleichungen treten jedoch Mehrfachkorrelationen auf, die zusätzliche empirische Informationen benötigen. Durch die hohe Anzahl der Erhaltungsgleichungen, die zusätzlich gelöst werden müssen, wird jedoch auch bis heute noch oft eine weitere Vereinfachung verwendet und der Einfluss der Turbulenz über nur eine Größe berücksichtigt (Turbulenzschließung 1. Ordnung). Es ist dies der Ansatz der Wirbelviskositätsmodelle.

ACHTUNG: Im Weiteren wird der Überstrich für die Darstellung der zeitlichen Mittelwerte weggelassen!

2.3.1.1 Wirbelviskositätsmodelle

Wirbelviskositätsmodelle sind jene Turbulenzansätze, die für technische Anwendungen bis heute am häufigsten benutzt werden. Sie verwenden den Ansatz, die Reynoldsspannungen wie eine erhöhte laminare Viskosität zu behandeln. Analog zum Ansatz zur Berechnung der viskosen Spannungen für ein Newton'sches Fluid werden die sogenannten „turbulenten“ Spannungen berechnet. Darin ist μ_t die turbulente Viskosität, die keine Stoffgröße darstellt, sondern vom Strömungszustand (Turbulenzgrad) abhängt.

$$\text{Viskose Spannung } \tau_{ij} = \mu \frac{du}{dy} = \tau_{l(\text{aminar})} \quad \text{Gl. 51}$$

- Turbulente Spannung, Ansatz nach Boussinesq (Wirbelviskositäts – Ansatz)

$$\tau_i = -\rho u_i' u_j' = \mu_t \frac{du}{dy} \quad \text{Gl. 52}$$

μ_l laminare Viskosität (Stoffgröße)

μ_t keine Stoffgröße; abhängig von der Turbulenzstruktur des Fluids

Im dreidimensionalen Fall ergeben sich für die Berechnung der turbulenten Spannungen folgende Terme (in Tensorschreibweise):

$$\tau_i = -\rho \overline{u_i' u_j'} = -\rho u_i u_j = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad \text{Gl. 53}$$

Damit verschiebt man das Problem auf die Bestimmung der μ_t -Verteilung (Verteilung der turbulenten Zähigkeit).

Da nun dieselbe Formulierung für die Berücksichtigung der laminaren und der turbulenten Viskosität verwendet wird, können beide Werte zur sogenannten „effektiven“ Viskosität addiert werden.

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_l + \mu_t \quad \text{Gl. 54}$$

Die Reynoldsgleichungen mit dem Wirbelviskositätsansatz ergeben somit folgende Gleichungen:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right] + \rho g_i \quad \text{Gl. 55}$$

Darin ist k die kinetische Energie der turbulenten Schwankungsbewegungen. Sie ist definiert als 1/2 mal die Summe der drei Eigen-Korrelationsterme der Schwankungsgeschwindigkeiten in die kartesischen Richtungen:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} \quad \text{Gl. 56}$$

Im Term $\frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}$ bedeutet δ_{ij} das Kronecker Delta. Der Wert für diese Funktion ist 1, wenn der Index i gleich j ist, der Wert ist 0, wenn i ungleich j ist. Der Term mit 2/3 ist notwendig, da sonst die Summe der Normalspannungen 0 wird. Dies geschieht, da $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$

ist (Kontinuitätsgleichung).

Aus Dimensionsgründen kann die turbulente Viskosität als Multiplikation einer Geschwindigkeit mit einer Länge verstanden werden [m^2/s] ($\mu_t \approx uL$). Dieser Ansatz zur Bestimmung von μ_t wird auch tatsächlich verwendet.

Der Boussinesq-Ansatz (Wirbelviskositätsmodell) hat wenig physikalische Rechtfertigung, hat sich jedoch in zahlreichen Anwendungen bewährt.

2.3.1.2 Wirbeldiffusivitätsmodell

Analog zum Wirbelviskositätsmodell kann der Korrelationsterm bei skalaren Größen ϕ behandelt werden.

$$-\overline{\rho u'_i \phi'} = \Gamma_t \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad \text{Gl. 57}$$

Darin ist Γ_t die Wirbeldiffusivität. Diese kann aus der turbulenten Viskosität über einen (meist) konstanten Faktor errechnet werden: $\Gamma_t = \frac{\mu_t}{\sigma_t}$. Darin ist σ_t die turbulente Prandtl-Zahl (für die Energieerhaltungsgleichung) bzw. turbulente Schmid-Zahl für Stoffaustausch. Beide sind empirische Werte.

2.3.2 Turbulenzmodelle für den Wirbelviskositätsansatz

Ziel jedes der nachfolgenden Turbulenzmodelle ist die Beschreibung der „turbulenten Zähigkeit“ μ_t .

2.3.2.1 Modelle ohne Transportgleichung

Diese Gruppe von Turbulenzmodellen geht von einem lokalen Gleichgewicht von Produktion und Dissipation von Turbulenz aus. Der Turbulenzgrad kann z.B. über die Scherung der Strömung angenähert werden. Ein Vertreter eines solchen Modells ohne Transportgleichung ist der Prandtl'sche Mischungswegansatz für die Grenzschichtströmung.

Der Großteil der kinetischen Energie einer turbulenten Strömung ist in so-geannten „large eddies“ enthalten. L_m ist der charakteristische turbulente Längenmaßstab für die Wirbel, die in Interaktion mit der Hauptströmung stehen.

$$\mu_t = \rho L_m u \quad \text{Gl. 58}$$

L_m wird darin als Mischungsweg bezeichnet. Er hat die Größenordnung der Grenzschichtdicke. Der turbulente Geschwindigkeitsmaßstab u wird über den Geschwindigkeitsgradienten in der Grenzschicht multipliziert mit L_m berechnet.

$$u = L_m \frac{du}{dy} \quad \text{Gl. 59}$$

Daraus ergibt sich folgende Gleichung für die turbulente Viskosität:

$$\mu_t = \rho L_m^2 \left/ \frac{du}{dy} \right/ \quad \text{Gl. 60}$$

Natürlich kann mit einer derart einfachen Modellierung nicht die turbulente Strömung überall beschrieben werden. Ein Problem tritt auf, wenn der Gradient der Geschwindigkeit $\frac{du}{dy} = 0$

wird, da dann auch die turbulente Viskosität $\mu_t = 0$ wird. Im nachfolgenden Beispiel der Strömung in einem Rohr werden damit die turbulenten Austauschterme in der Mitte des Rohres unterschätzt. Dieses Modell ist bei einfachen Scherströmungen gut anwendbar. Bei komplexen Strömungen ist kein lokales Gleichgewicht von Produktion und Dissipation von Turbulenz zu erwarten.

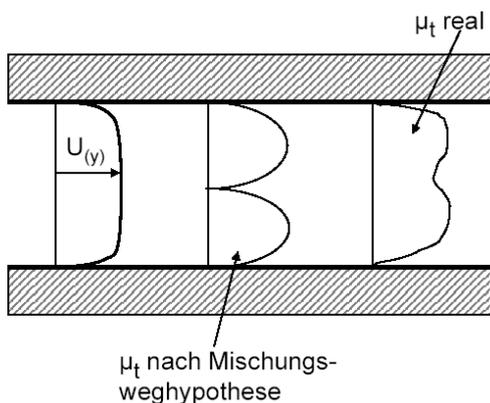


Abbildung 10: Geschwindigkeits- und μ_t -Verteilung in einer ausgebildeten Rohrströmung

2.3.2.2 Modelle mit einer Erhaltungsgleichung

Es gibt nun eine Klasse von Turbulenzmodellen, die die Erhaltungsgleichung für eine Turbulenzgröße lösen. Diese Turbulenzgröße ist in den meisten Fällen die turbulente kinetische Energie k .

Damit wird praktisch der turbulente Geschwindigkeitsmaßstab berechnet. Im Ansatz für die Berechnung der turbulenten Viskosität wird das turbulente Geschwindigkeitsmaß über die Wurzel aus k multipliziert mit der empirischen Konstanten c_μ berechnet. Ansatz von Prandtl – Kolmogorov:

$$\mu_t = c_\mu \rho \sqrt{k} L_m \tag{Gl. 61}$$

c_μ empirische Konstante

L_m Mischungsweg

Die Werte für den Mischungsweg L_m sind aus Experimenten bestimmt und über algebraische Gleichungen gegeben.

2.3.2.3 Modelle mit zwei Erhaltungsgleichungen

In dieser Klasse werden zur Bestimmung der turbulenten Viskosität Transportgleichungen für den turbulenten Geschwindigkeitsmaßstab und den Mischungsweg gelöst. Diese beiden Variablen können dabei auch Kombinationen dieser beiden Größen sein. Der bekannteste Ansatz für ein Zweigleichungsmodell ist dabei das $k-\varepsilon$ Modell. Darin ist ε die Dissipationsrate für die turbulente kinetische Energie k .

Der Modellansatz für die turbulente Viskosität lautet dabei:

$$\mu_t = c_D c_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{Gl. 62}$$

Da gleich wie oben das turbulente Geschwindigkeitsmaß über die Wurzel aus k multipliziert mit der empirischen Konstanten c_μ berechnet wird, ergibt sich für den Mischungsweg:

$$L_m = c_D \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \tag{Gl. 63}$$

Darin sind c_μ und c_D empirische Konstanten.

Die Erhaltungsgleichung für die Turbulenzenergie $k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}$ lautet:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + P_k - \rho \varepsilon \tag{Gl. 64}$$

Darin ist P_k die Produktion von k , wie folgt modelliert:

$$P_k = \frac{\mu_t}{\rho} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad \text{Gl. 65}$$

Der turbulente Diffusionskoeffizient für die turbulente kinetische Energie wird mit einer turbulenten Schmidt-Zahl berechnet $\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$.

Die Dissipationsrate ε von k wird ebenfalls über eine Erhaltungsgleichung berechnet:

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + c_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - c_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} c_{\mu} \rho \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - c_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad \text{Gl. 66}$$

Darin ist P_ε die Produktion und E_ε die Senke für die Dissipationsrate ε .

Der turbulente Diffusionskoeffizient für die Dissipationsrate wird wieder mit einer turbulenten Schmidzahl berechnet: $\Gamma_\varepsilon = \rho \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}$.

2.4 Schließung des Gleichungssystems

Es sind nun nach der Reynolds-Zeitmittelung folgende (Erhaltungs-) Gleichungen für die Berechnung der Strömung zu lösen:

- Kontinuitätsgleichung
- Impulsgleichungen
- Transportgleichung für skalare Größen
- Turbulenzmodell z. B. $k - \varepsilon$
 - k - Gleichung
 - ε - Gleichung

2.5 Allgemeine Form einer Erhaltungsgleichung

Um die Erhaltungsgleichungen einer numerischen Lösung zuführen zu können, ist es sinnvoll diese auf eine allgemeine Form zurückzuführen. Somit ist es später dann möglich einen einheitlichen Gleichungslöser anzuwenden.

$$\frac{\partial \phi \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \phi}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad \text{Gl. 5}$$

$\phi = 1$	$\Gamma = 0$	$S = 0$	Kontinuitätsgleichung
$\phi = u_i$	$\Gamma = \mu_{eff}$	$S = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right) + \rho g_i$	Impulsgleichung
$\phi = h$	$\Gamma = \frac{\mu_{eff}}{\text{Pr}}$	$S = 0$	Energieerhaltung
$\phi = k$	$\Gamma = \frac{\mu_{eff}}{Sc}$	$S = P_k - \rho \varepsilon$	Turbulenzenergie
$\phi = \varepsilon$	$\Gamma = \frac{\mu_{eff}}{Sc}$	$S = P_\varepsilon - E_\varepsilon$	Dissipationsrate

3 Numerische Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen

3.1 Einleitung (siehe Teil Dr. Offner)

Das aus der Modellierung resultierende kontinuierliche Problem, in der Regel im Rahmen der Kontinuumsmechanik abgeleitete Systeme von Differential- oder Integralgleichungen, muss nun durch ein geeignetes diskretes Problem approximiert werden, d. h. die zu berechnenden Größen müssen durch eine endliche Anzahl von Werten angenähert werden.

Dieser Prozess wird als Diskretisierung bezeichnet und beinhaltet im Wesentlichen zwei Aufgaben:

- *die Diskretisierung des Problemgebiets,*
- *die Diskretisierung der Gleichungen.*

Die Diskretisierung des Problemgebiets approximiert das kontinuierliche Gebiet (in Raum und Zeit) durch eine endliche Anzahl von Teilgebieten, in denen dann numerische Werte der unbekannt Variablen bestimmt werden. Die Beziehungen zur Berechnung dieser Werte werden durch die Diskretisierung der Gleichungen gewonnen, welche die kontinuierlichen Systeme durch algebraische approximiert. Im Gegensatz zu einer analytischen Lösung, stellt eine numerische Lösung einen Satz von diskretisierten Problemgebiet-zugeordneten Werten dar, aus dem der Verlauf der Variablen näherungsweise konstruiert werden kann. Als Diskretisierungsverfahren stehen im Wesentlichen drei unterschiedliche Ansätze zur Verfügung:

- *die Finite – Differenzen – Methode (FD),*
- *die Finite – Volumen – Methode (FV),*
- *die Finite – Elemente – Methode (FE).*

Der nächste Schritt im Ablauf der Simulation besteht in der Lösung der algebraischen Gleichungssysteme (die eigentliche Berechnung), wobei man es oftmals mit Gleichungen mit mehreren Millionen Unbekannten zu tun hat.

3.2 Diskretisierung

Ziel der Diskretisierung ist es ist, algebraische Gleichungen herzuleiten, die die unbekannt Werte von ϕ an diskreten Gitterpunkten oder in Finiten Volumen beschreiben. 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 nicht praktikabel erwiesen. Stattdessen werden stückweise Profile (Segmente) verwendet. Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, dass der Wert von ϕ an einem Punkt nur durch die ϕ –Verteilung in seiner unmittelbaren Umgebung beeinflusst wird. Jedes Segment beschreibt die Variation von ϕ über ein kleines Gebiet in Abhängigkeit von den benachbarten ϕ –Werten. Für das Verständnis des Verfahrens, werden hier nur eindimensionale Probleme betrachtet $\phi = \phi(x)$

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. Für die Herleitung der Diskretisierungsgleichungen lassen sich unterschiedliche Verfahren verwenden. Die Typenvielfalt resultiert aus Unterschieden in den Profilannahmen und in der Methode der Herleitung:

Der Verlauf der Lösung zwischen den Gitterpunkten wird im Allgemeinen durch mehr oder weniger hochgradige Polynome angenähert. Die Stützwerte an den Gitterpunkten $\phi_0; \phi_1; \phi_2$ für diesen Polynomansatz ergeben sich aus der Kollokationsart:

- Bei der Finite-Differenzen-Methode werden die Stützwerte so berechnet, dass der damit gewonnene Funktionsverlauf in den Gitterpunkten $x_0; x_1; x_2$; die Differentialgleichung erfüllt (= Punktkollokation).
- Bei der Finite-Volumen-Methode werden die Stützwerte so berechnet, dass der damit gewonnene Funktionsverlauf in den (finiten) Volumen $\pm V_1; \pm V_2$ im Mittel die Differentialgleichung erfüllt (= Gebietskollokation).

3.3 Kontroll-Volumen-Formulierung

Die Diskretisierung einer Differentialgleichung mit Hilfe der Finite-Volumen-Methode basiert auf einer Zerlegung des Untersuchungsgebietes in Kontrollvolumen (KV) und erfolgt nach folgendem Schema:

Zerlegung des Rechengebietes in KV, so dass jeder Gitterpunkt von einem eindeutigen KV umgeben ist. Dabei dürfen keine Lücken und keine Überschneidungen auftreten.

- Integration der Differentialgleichungen über jedes KV.
- Verwendung von stückweisen Profilen für die Variable ϕ zur Auswertung der Integrale.
- Als Ergebnis erhält man die Diskretisierungsgleichung, die die ϕ -Werte für ein Volumen beschreibt.

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 Finiten Volumen erfüllt.

3.3.1 KV-Formulierung am Beispiel der eindimensionalen stationären Wärmeleitung

Im Folgenden wird die KV-Formulierung am einfachen Beispiel der eindimensionalen stationären Wärmeleitungsgleichung mit Wärmequellen gezeigt:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S = 0 \quad \text{Gl. 67}$$

k Wärmeleitfähigkeit [W/mK]

T Temperatur [K]

S Wärmeerzeugung pro Volumeneinheit [W/m³]

Die Bezeichnung der Gitterpunkte in den nachfolgenden Darstellungen der eindimensionalen Wärmeleitung folgt der Kompassnotation mit folgenden Vereinbarungen:

P betrachteter (zentraler) Punkt (Mittelpunkt des Kontrollvolumens)

W westlicher (linker) Nachbarpunkt

E östlicher (rechter) Nachbarpunkt

w Grenzfläche zum westlichen Nachbarpunkt

e Grenzfläche zum östlichen Nachbarpunkt

Δx Ausdehnung des Kontrollvolumens in x -Richtung

$(\delta x)_w$; $(\delta x)_e$ Abstände zwischen den Mittelpunkten der Kontrollvolumina

In y - und z -Richtung wird zur Vereinfachung die Einheitslänge angenommen: $\Delta y = 1$, $\Delta z = 1$. Das Volumen ergibt sich damit zu $\Delta V = \Delta x \cdot 1 \cdot 1$

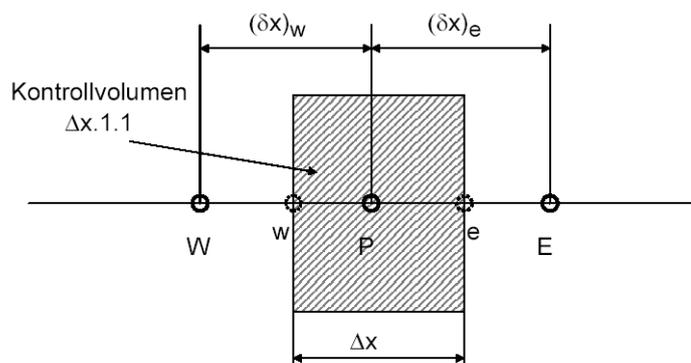


Abbildung 11: Bezeichnung der Orte in einem Finiten Volumen

Integration der Funktion über Δx von w nach e :

$$\int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S \right] dx = 0$$

Gl. 68

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_e - \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_w + \int_w^e S dx = 0$$

Dazu wurde keine Näherung verwendet. Es muss also für die Berechnung der Wärmeleitung der jeweilige Gradient der Temperatur an allen Oberflächen des Finiten Volumen bekannt sein. Im eindimensionalen Fall sind das die Oberflächen, die normal auf die Richtung der Wärmeleitung stehen. Es müssen also die Temperaturgradienten an der östlichen und der westlichen Grenzfläche bekannt sein, um die Gleichung lösen zu können.

3.3.2 Profilannahme

Nun muss eine Profilannahme und damit eine Gleichung zur Beschreibung des T -Verlaufs zwischen den Gitterpunkten gewählt werden. Es sollen möglichst einfache Profilannahmen, die noch sinnvoll sind, verwendet werden. Naheliegender ist ein stückweise lineares Profil, da

dadurch der Gradient an den Kontrollvolumenoberflächen näherungsweise bestimmt ist. Der Gradient ist durch die Unstetigkeit der 1. Ableitung im Punkt P nicht bestimmt. Eine Berechnung des Gradienten der Temperatur ist jedoch auch nur an den Oberflächen notwendig.

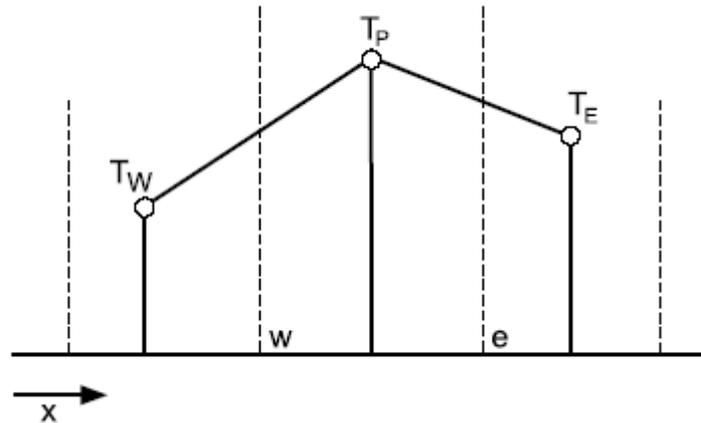


Abbildung 12: Vereinfachte Darstellung der Temperaturgradienten über die Oberflächen in einem finiten Volumen

Die Diskretisierungsgleichung lässt sich nun wie folgt aus den Stützwerten und den geometrischen Abmessungen konstruieren.

Aus der Profilannahme einer linearen Verteilung der Temperatur zwischen den Stützstellen folgt:

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e \cong k_e \frac{(T_E - T_P)}{(\delta x)_e} \quad \text{Gl. 69}$$

$$\frac{k_e (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} + \bar{S} \Delta x = 0 \quad \text{Gl. 70}$$

Darin ist \bar{S} , der über das Kontrollvolumen gemittelte auf das Volumen bezogene (volumetrische) Quellterm.

Durch Umformung ergibt sich:

$$\frac{k_e}{\delta x_e} T_E - \left[\frac{k_e}{\delta x_e} + \frac{k_w}{\delta x_w} \right] T_P + \frac{k_w}{\delta x_w} T_W + \bar{S} \Delta x = 0$$

und

$$\left(\frac{k_e}{\delta x_e} + \frac{k_w}{\delta x_w} \right) T_P = \frac{k_e}{\delta x_e} T_E + \frac{k_w}{\delta x_w} T_W + \bar{S} \Delta x \quad \text{Gl. 71}$$

Somit kann eine allgemeine Form der Diskretisierungsgleichung angegeben werden:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad \text{Gl. 72}$$

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 für ein Finites Volumen, kann bei Betrachtung aller vorhandenen Finiten Volumen als Satz von Koeffizienten für ein lineares Gleichungssystem (LGS) verstanden werden. Dieses lässt sich im Allgemeinen numerisch lösen.

Bemerkungen:

- Diese Gleichung ist die Standardform der FV–Diskretisierungsgleichung mit dem (unbekannten) zentralen T_P –Term auf linken Gleichungsseite sowie den Nachbarpunkten und einem konstanten Term auf der rechten Gleichungsseite.

$$a_p T_P = \sum a_{NB} T_{NB} + b \quad \text{Gl. 73}$$

mit: $NB...$ Nachbarpunkte $W, E, S (= South), N (=North), T (= Top), B (= Bottom)$

- Es wurden die einfachsten Profilannahmen für die Ableitung verwendet. In diesem Fall ist es eine lineare Verteilung. Es sind jedoch auch weitere Interpolationsfunktionen möglich. Im allgemeinen werden Polynome unterschiedlichen Grades m verwendet:

$$\text{z. B.: } T_{(x)} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots + a_m x^m \quad \text{Gl. 74}$$

- Nicht alle Terme der Erhaltungsgleichung müssen mit den gleichen Profilen berechnet werden. So muss z.B. S nicht aus einer linearen S –Verteilung berechnet werden; ebenso wenig 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 berechnet werden.

3.4 Leitprinzipien

Es ist daher eine Vielfalt von Formulierungen für die Diskretisierung möglich. Für eine sinnvolle Auswahl sind jedoch einige zusätzliche einschränkende Forderungen zu stellen:

Die Diskretisierungsmethode soll für jede Anzahl an Finiten Volumen

- physikalisch sinnvolle Ergebnisse und
- die globale (integrale) Erhaltungseigenschaft liefern.

D.h., Massen–, Energie–, Impulsströme müssen mit entsprechenden Quellen/Senken eine perfekte Erhaltung ergeben, unabhängig von der Anzahl der Finiten Volumen.

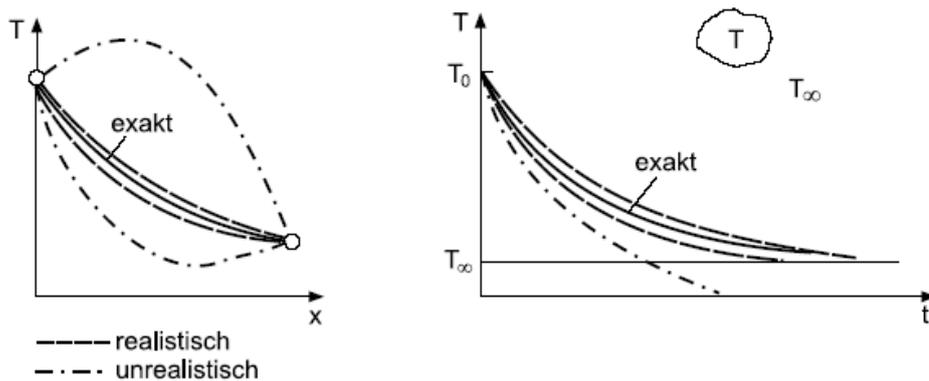


Abbildung 13: Realistische und unrealistische (unphysikalische) Verteilungen

3.5 Quelltermbehandlung

In vielen Fällen ist der Quellterm von der Variablen abhängig: $S = S(T)$. Diese Abhängigkeit kann noch dazu nichtlinear sein. Die Berücksichtigung der Abhängigkeit in der Diskretisierungsgleichung ist jedenfalls wünschenswert. Formal kann jedoch nur eine lineare Abhängigkeit berücksichtigt werden.

$$S = S_C + S_P T_P \quad \text{Gl. 75}$$

mit: S_C konstanter Teil von S

S_P linearer Koeffizient für den Teil der Quelle der proportional zu T_P ist

Die Linearisierung des Quellterms verändert zwar die Form der Gl. 72 nicht, jedoch die Definition der Koeffizienten:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + b \quad \text{Gl. 72}$$

mit:

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

Gl. 76

$$a_P = a_E + a_W - \bar{S}_P \Delta x \quad b = \bar{S}_C \Delta x$$

Wenn der Quellterm von der Variablen (im gezeigten Beispiel von der Temperatur T) abhängig ist ($S = f(T)$), ist es günstig diese Abhängigkeit mit Hilfe eines Quellterms, der aus einem konstantem Anteil und einem von der Variablen (T) linear abhängigen Anteil (Proportionalteil) besteht, zu berücksichtigen: $S = S_C + S_P T_P$. Dabei sind die Fälle mit linearer Abhängigkeit direkt abbildbar:

$S_C =$ konstanter Anteil ; $S_P = f(T) \dots$ proportionaler Anteil

Wenn die Funktion nicht linear ist, muss eine Linearisierung durch Aufspaltung in S_C und S_P , erfolgen. Eine mögliche Vorgehensweise ist, beide Terme von der Temperatur abhängig zu machen. Im Term S_C wird dabei der Wert der vorhergehenden Iteration $T_P = T_P^*$ (alter Wert) berücksichtigt und für die Berechnung von S_P wird der aktuelle Wert von T_P verwendet (siehe auch Kapitel 3.6.3).

3.6 Grundregeln bei der numerischen Behandlung

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

3.6.1 Konsistenz an den Flächen der Kontrollvolumina (Grundregel 1)

Gehört eine Fläche zu zwei einander berührende Kontrollvolumina, so muss der Fluss über diese Fläche (Wand) z.B.: $\left(k \frac{dT}{dx}\right)$ durch die gleichen Ausdrücke in der diskretisierten Gleichung beschrieben werden. D.h., dass der Wärmefluss, der ein Kontrollvolumen verlässt gleich dem Fluss sein muss, der in das nächste Kontrollvolumen durch die gleiche Wand eintritt. Sonst ist Erhaltung der transportierten Größe nicht gegeben.

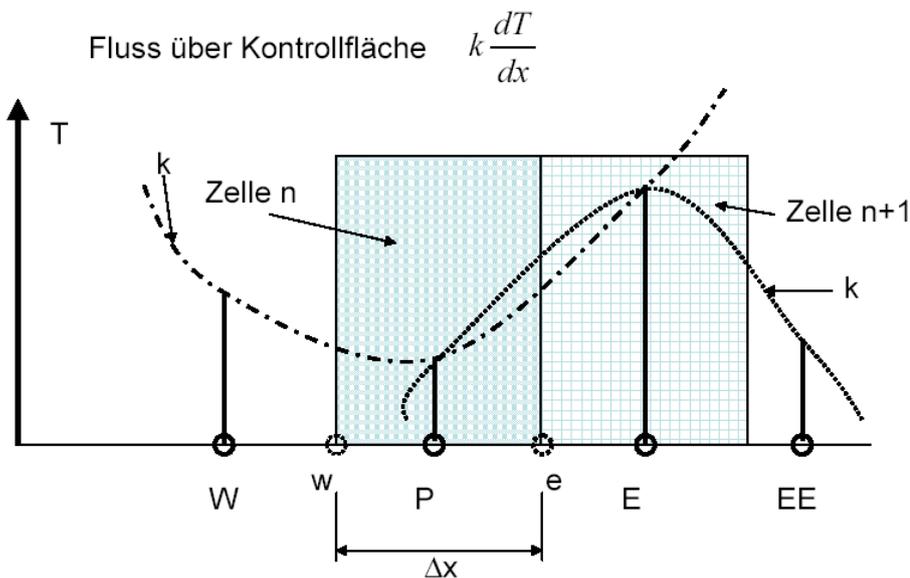


Abbildung 14: Regel 1: Konsistenz an den Kontrollvolumen-Wänden.

3.6.2 Positive Koeffizienten (Grundregel 2)

Alle Koeffizienten (a_p ; a_{NB}) sollten immer positiv sein. Die Koeffizientendefinition erfüllt diese Regel. Eine Verletzung der Regel führt i. A. zu physikalisch unrealistischen Ergebnissen. Negative Werte können nur in Ausnahmefällen (Diskretisierung höherer Ordnung) in eingeschränktem Maß vorhanden sein. Ein negativer Koeffizient bedeutet im Beispiel der Wärmeleitung, dass sich bei einer Erhöhung des Temperaturgradienten der Wärmestrom verringert, was physikalisch nicht sinnvoll ist.

3.6.3 Linearisierung des Quelltermes (Grundregel 3)

Wird der Quellterm mit folgender Gleichung: $S = S_C + S_P T_P$ 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. Für den Fall, dass $S_P > 0$ ist, ergibt sich ein sich selbst verstärkendes System (Anstieg in der Temperatur \rightarrow Verstärkung der Wärmequelle \rightarrow Anstieg in der Temperatur), das rasch instabil werden kann.

Beispiele für Linearisierungen

- a) $S = 5 - 4 T$
- (1) $S_c = 5, S_p = -4$ empfohlen
- (2) $S_c = 5 - 4 T_p^*, S_p = 0$ bei komplexen Ansätzen oft der am besten geeignete Weg
- (3) $S_c = 5 + 7 T_p^*, S_p = -11$ führt zu einem „steileren“ Zusammenhang zwischen S und T
 $\rightarrow (y = d + k x)$
 und reduziert daher die Geschwindigkeit der Konvergenz
 ist aus numerischen Gründen oft gewollt!
- b) $S = 5 + 7 T$
- (1) $S_c = 5, S_p = 7 \rightarrow S_c = 5, S_p = 7 \rightarrow$ i. A. nicht brauchbar, da $S_p > 0$ zu numerischen Instabilitäten führt. Sind keine Iterationen notwendig, dann ist das die richtige Lösung
- (2) $S_c = 3 + 7 T_p^*, S_p = 0$; empfehlenswert
- (3) $S_c = 3 + 11 T_p^*, S_p = -4$; geringere Konvergenzgeschwindigkeit, gewünscht siehe a) (3)
- c) $S = 4 - 5 T^3$
- (1) $S_c = 4 - 5 T_p^{*3}, S_p = 0$; möglich, berücksichtigt jedoch nicht die bekannten $S \sim T$ Zusammenhänge
- (2) $S_c = 4, S_p = -5 T_p^{*2}$; Annähernd korrekte Beschreibung, da jedoch T_p^* und T_p unterschiedlich \rightarrow schwächerer Zusammenhang als in Realität
- (3) Empfohlener Weg (Taylorreihenentwicklung)
- $$S = S^* + \left(\frac{dS}{dT} \right)^* (T_p - T_p^*)$$
- $$S = 4 - 5 T_p^{*3} - 15 T_p^{*2} (T_p - T_p^*)$$
- $$S_c = 4 + 10 T_p^{*3}; \quad S_p = -15 T_p^{*2}$$
- \rightarrow Tangente an $S \sim T$ Kurve im Punkt T_p^*
- (4) $S_c = 4 + 20 T_p^{*3} \quad S_p = -25 T_p^{*2}$;
 wie a) (3)
 b) (3)

3.6.4 Summe der Nachbarkoeffizienten (Grundregel 4)

Der Koeffizient a_p entspricht der Summe der Werte der Nachbarkoeffizienten:

$$a_p = \sum a_{nb} \text{ wenn } S_p = 0 \quad \text{Gl. 77}$$

$$a_p = \sum a_{nb} - S_p \quad \text{Gl. 78}$$

Daraus folgt, dass T_p ein gewichteter Mittelwert der Nachbarpunkte ist. Die Regel gilt für Situationen, in denen die Differentialgleichung weiter erfüllt bleibt, wenn man eine Konstante zur abhängigen Variablen addiert. Die Differentialgleichung enthält oft nur Ableitungen der abhängigen Variablen (z.B. T), dann erfüllen sowohl T als auch $T + \text{konst. Wert}$ die Differentialgleichung. 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 . Der Konvektionsterm in der allgemeinen Erhaltungsgleichung erfordert spezielle Formulierungen (siehe Kapitel 6). Die anderen Terme werden im Rahmen der Wärmeleitung (nächstes Kapitel) behandelt.

3.7 Anfangs- und Randbedingungen

3.7.1 Anfangsbedingungen

Bei der Bedeutung der Anfangsbedingungen muss zwischen stationären und instationären Problemstellungen unterschieden werden. Für stationäre Probleme haben die Anfangbedingungen wenig Bedeutung. Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt iterativ, daher beeinflusst die Qualität der Anfangsbedingungen (Anfangswerte der Variablen) i. A. lediglich die Anzahl der notwendigen Iterationen bis zur Erzielung einer konvergenten Lösung (stabiles Lösungsverfahren vorausgesetzt). Im instationären Fall beschreiben die Anfangsbedingungen den Zustand der Variablen im Rechengebiet, von dem aus die zeitliche Entwicklung beginnt. Dabei sollte diese Anfangsbedingungen die Gleichungen erfüllen, da sonst eine gewisse Zeit für das Abklingen der eingebrachten Fehler notwendig ist.

3.7.2 Randbedingungen

Für jedes Finite Volumen eines Berechnungsgebietes existiert eine Diskretisierungsgleichung für die zu berechnende Variable (z.B. T) an diesem Punkt, die sich aus der Profilannahme und aus dem Transportterm für die entsprechende Grenzfläche zum nächsten Finiten Volumen ergibt (siehe Abbildung 15). Für die Finiten Volumen, die an der Oberfläche des Rechengebietes liegen, müssen nun jedoch Randbedingungen angegeben werden. Es bestehen prinzipiell folgende Möglichkeiten:

1. Die Temperatur des Finiten Volumen außerhalb des Rechengebiets T_B wird unveränderlich vorgegeben (\Leftrightarrow dann wird der Wert von T_B im Finiten Volumen B nicht berechnet!). Diese außen vorhandene nicht-mitberechnete Zelle wird öfters auch als "Ghost"-Zelle bezeichnet.
2. Der Wärmefluss über den Rand des letzten Finiten Volumens q_B ist gegeben.
3. Der Wärmefluss als eine (lineare) Funktion von T_B ist gegeben,

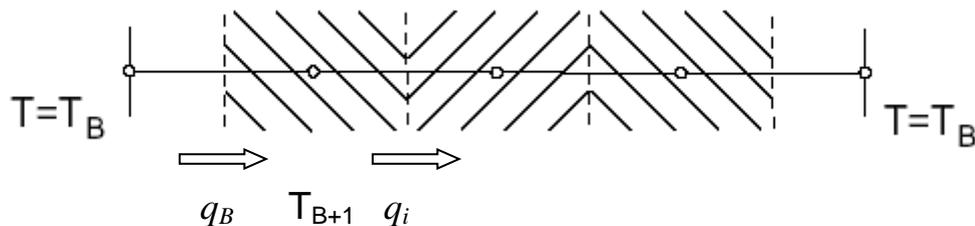


Abbildung 15: Innere und am Rand liegende Finite Volumen (q_B = Wärmestrom über die Außenfläche)

Für 2. und 3. muss eine zusätzliche Gleichung konstruiert werden (Beispiel linker Rand, Abbildung 15):

Wenn T_B direkt gegeben ist, ergibt die Integration der Differentialgleichung über das Finite Volumen am Rand folgende Gleichung:

$$q_B + q_i + S\Delta x = 0$$

$$\text{mit: } \left(q_i = -k \frac{dT}{dx} \right) \text{ ergibt sich: } q_i = -k \frac{T_{B+1} - T_i}{(\delta x)_i} \quad \text{Gl. 79}$$

Ebenso wie q_i wird auch der Wärmestrom q_B über die Außenfläche berechnet:

$$q_B = -k \frac{T_i - T_B}{(\delta x)_B} \quad \text{Gl. 80}$$

Eingesetzt in die Kontrollvolumen-Gleichung erhält man:

$$q_B - k \frac{T_{B+1} - T_i}{(\delta x)_i} + (S_c + S_p T_{B+1}) \Delta x = 0 \quad \text{Gl. 81}$$

Wenn der Wärmefluss q_B am Rand direkt gegeben ist, ergibt sich folgende Diskretisierungsgleichung:

$$a_{B+1} T_{B+1} = a_I T_I + b \quad \text{Gl. 82}$$

$$\text{mit: } a_I = \frac{k_i}{\delta x_i} \quad a_{B+1} = a_I - S_p \Delta x$$

$$b = S_c \Delta x + q_B$$

Bei konvektivem Wärmeübergang an der Oberfläche zu einem strömenden Medium ist der Wärmefluss von der Temperatur des Mediums linear abhängig :

$$q_B = f(T_{Fluid}) \quad q_B = \alpha (T_f - T_{B+1}) \quad \text{Gl. 83}$$

Damit ergibt sich folgende Diskretisierungsgleichung:

$$a_{B+1} T_{B+1} = a_I T_I + b$$

mit: α = Wärmeübergangskoeffizient [W/m²K]

$$a_I = \frac{k_i}{\delta x_i}$$

$$a_{B+1} = a_I - S_p \Delta x + \alpha$$

$$b = S_c \Delta x + \alpha T_f$$

Falls q_B eine nichtlineare Funktion von T_B ist, muss q_B nach den gleichen Regeln wie für den Quellterm (Taylorreihen-Entwicklung) linearisiert werden. Dabei ist zu beachten, dass Gradienten-Randbedingungen nicht über eine Approximation des Gradienten aus den Gitterpunktwerten dargestellt wird. Der Gradient wird in Form des Wärmeflusses direkt in der Energiebilanz des letzten berechneten Randvolumens verwendet.

3.8 Zeitabhängigkeit am Beispiel der instationären eindimensionalen Wärmeleitung

Neu zu betrachten ist nun der zeitabhängige Term der instationären Wärmeleitungsgleichung. Unter der Annahme, dass $\rho * c_p$ konstant ist und keine Wärmequelle vorhanden ist, ergibt sich:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad \text{Gl. 84}$$

Die Zeit ist eine einseitig gerichtete Koordinate. Daraus ergibt sich ein Fortschreitungsverfahren in Zeitrichtung. Ausgehend von der bekannten Verteilung der Temperatur T zur Zeit t wird in einem typischen Zeitschritt die Verteilung zur Zeit $t + \Delta t$ berechnet. Es ist daher eine Integration über Zeit und Ort notwendig.

Zum Zeitpunkt t sind die bekannten Variablenwerte $T_P^\circ, T_E^\circ, T_W^\circ$. Zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ ergeben sich die neuen Variablenwerte T_P^1, T_E^1, T_W^1 .

Die Diskretisierungsgleichung aus Integration von Gl. 84 über ein Kontrollvolumen und über einen Zeitschritt von t bis $t + \Delta t$ ergibt:

$$\rho c_p \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt \quad \text{Gl. 85}$$

Unter Verwendung des räumlichen Mittelwertes der Temperatur zum jeweiligen Zeitpunkt, kann für die zeitliche Änderung der Temperatur folgende Diskretisierung verwendet werden:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = (T^1 - T^0) \Delta x \quad \text{Gl. 86}$$

Die zweite Ableitung in Raumrichtung kann gleich wie bei der stationären Wärmeleitungsgleichung diskretisiert werden. Damit ergibt sich:

$$\rho c_p (T_P^1 - T_P^0) \Delta x = \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{k_e [T_E - T_P]}{\delta x_e} - \frac{k_w [T_P - T_W]}{\delta x_w} \right) dt \quad \text{Gl. 87}$$

Zur Lösung des Zeitintegrals auf der rechten Seite, muss ein Verlauf der Temperatur über dem Zeitschritt gewählt werden. Unter Annahme eines linearen Verlaufs mit dem Wichtungsfaktor f ergibt sich:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_p dt = [f T_p^1 + (1-f) T_p^0] \Delta t \quad \text{Gl. 88}$$

Dabei muss der Wert f zwischen 0 und 1 liegen. Eingesetzt in Gleichung 87 erhält man die einfachste Diskretisierungsgleichung für Gl. 84:

$$\rho c_p (T_p^1 - T_p^0) \Delta x = \Delta t \left\{ f \left[\frac{k_e (T_E^1 - T_p^1)}{\delta x_e} - \frac{k_w (T_p^1 - T_W^1)}{\delta x_w} \right] + (1-f) \left[\frac{k_e (T_E^0 - T_p^0)}{\delta x_e} - \frac{k_w (T_p^0 - T_W^0)}{\delta x_w} \right] \right\} \quad \text{Gl. 89}$$

Durch Zusammenfassen aller Koeffizienten für die einzelnen Variablen zu den Einflussternen a_p, a_p^0, a_E, a_W kann die Diskretisierungsgleichung unter Weglassen des Zeitindex 1 ($T_p^1 \rightarrow T_p, T_E^1 \rightarrow T_E$ usw.) wie folgt geschrieben werden.

$$a_p T_p = a_E [f T_E + (1-f) T_E^0] + a_W [f T_W + (1-f) T_W^0] + [a_p^0 - (1-f) a_E - (1-f) a_W] T_p^0 \quad \text{Gl. 90}$$

mit: $a_E = \frac{k_e}{\delta x_e}, a_W = \frac{k_w}{\delta x_w}, a_p^0 = \rho c_p \frac{\Delta x}{\Delta t}$ und $a_p = a_p^0 + f a_E + f a_W$

Wird der Wichtungsfaktor für den zeitlichen Verlauf der Variablen $f = 0$ gesetzt, ergibt sich das **explizite** Zeitschema:

$$a_p T_p = a_E T_E^0 + a_W T_W^0 + [a_p^0 - a_E - a_W] T_p^0 \quad \text{Gl. 91}$$

Darin ist T_p eine Funktion von ausschließlich bereits bekannten Werten zum alten Zeitpunkt $T_p = f(T_p^0, T_E^0, T_W^0)$. T_p ist unabhängig von den Nachbarpunkten T_E, T_W zum neuen Zeitpunkt $t + \Delta t$.

Wenn $f \neq 0$ ist, ergibt sich ein implizites Zeitdiskretisierungsschema. Für $f = 1$ heißt dieses Schema voll implizites Schema, für $f = 0,5$ das Crank – Nicolson Schema. In beiden Fällen ist der Wert T_p auch von den Werten der Nachbarpunkte zum neuen Zeitpunkt abhängig. $T_p = f(T_p^0, T_E^0, T_W^0 \dots \text{bekannt und } T_E, T_W \dots \text{unbekannt})$. Da diese auch im selben Zeitschritt erst berechnet werden, ist hier jedenfalls die Lösung eines linearen Gleichungssystems notwendig.

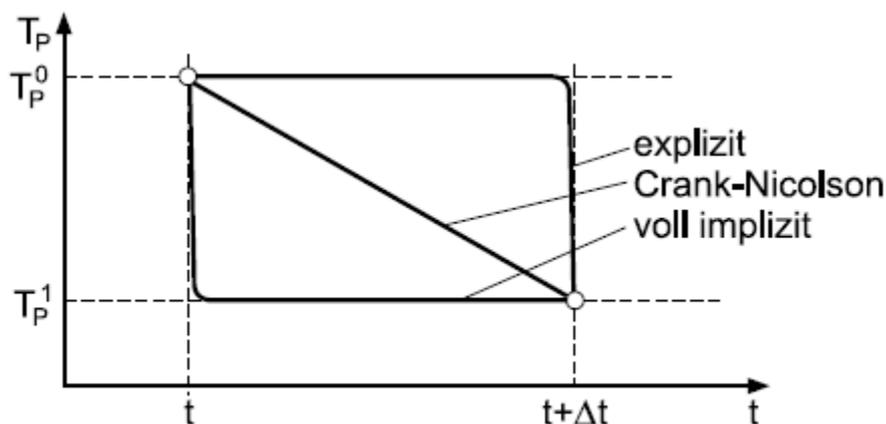


Abbildung 16: Verlauf der Variablenwerte über der Zeit für unterschiedliche Schemata

3.8.1 Explizites Zeitintegrationsschema

Der Vorteil des expliziten Schemas liegt darin, dass nur bekannte Werte der Variablen aus dem alten Zeitpunkt zur Berechnung von T_P verwendet werden. Dadurch entsteht jedoch eine Einschränkung bei der Länge des Zeitschritts. Um die diagonal dominante Systemmatrix zu erhalten, muss der Einflussfaktor für T_P^0 , $(a_P^0 - a_E - a_W)$ ein positiver Wert sein. Damit ergibt sich für einen äquidistanten Gitterabstand Δx und eine gleich bleibende Wärmeleitfähigkeit k folgende Bedingung (Stabilitätskriterium):

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{k} \quad \text{Gl. 92}$$

Wenn der Zeitschritt größer ist, entstehen physikalisch unsinnige Ergebnisse.

3.8.2 Implizite Schemata

Das Crank–Nicolson Schema ist bedingungslos stabil. Das bedeutet nicht, dass sich physikalisch realistische Ergebnisse für beliebige Zeitschritte und Gitterabstände ergeben. Oft ergeben sich oszillierende Lösungen. Das voll implizite Schema ist für große Zeitschritte besser geeignet als das Crank – Nicolson – Schema. Die Forderung nach beliebig großen Zeitschritten kann nur das voll implizite Schema erfüllen. Es ergibt immer ein physikalisch sinnvolles Verhalten. Für kleine Δt ist das Crank–Nicolson Schema genauer.

3.8.3 Voll implizites Schema

Für das voll implizite Schema ergibt sich folgende Diskretisierungsgleichung:

$$a_P T_P = a_P^0 T_P^0 + a_E T_E + a_W T_W + b \quad \text{Gl. 93}$$

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

mit: $b = S_c \Delta x + a_P^0 T_P^0$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^0 - S_p \Delta x$$

Darin ist in b der Einfluss aus dem letzten Zeitschritt, wie ein Quellterm, enthalten.

Für $\Delta t \gg$ ergibt sich die stationäre Wärmeleitungsgleichung. Für den Fall, dass die Wärmeleitfähigkeit temperaturabhängig ist, kann dieser Einfluss nur iterativ berücksichtigt werden. Im instationären Fall gelten dieselben Regeln für die Behandlung der Randbedingungen, der Quellterm - Linearisierung und dem Aufstellen und Lösen des linearen Gleichungssystems, wie im stationären Fall. Die Erweiterung auf mehr Dimensionen ist einfach möglich.

3.9 Mehrdimensionale Lösungen

Mehrdimensionale Lösungen funktionieren ähnlich wie die eindimensionalen. Es sind lediglich die Beziehungen in allen Koordinatenrichtungen anzusetzen und zu berücksichtigen. Abbildung 17 zeigt einen Gitterausschnitt eines kartesischen Gitters mit Gitterpunkt P, W und E als Nachbarn in x -Richtung, S und N als Nachbarn in y -Richtung. Die Dicke in z -Richtung ist 1. Die Bezeichnungen für Δy_j , $(\delta y)_s$ etc. sind analog zur eindimensionalen Situation. Die tatsächliche Lage der Oberflächen der Kontrollvolumen ist damit noch nicht

festgelegt. Die Berechnung des Wärmeflusses q_e über die gemeinsame Oberfläche e zwischen P und E erfolgt unter der Annahme, dass q_e der Mittelwert über die Fläche $\Delta y \times 1$ ist. Die anderen Wärmeströme werden gleich berechnet. Im kartesischen Gitter vereinfachen sich die Gleichungen, so dass keine so genannten 'Kreuzdiffusionsterme' entstehen.

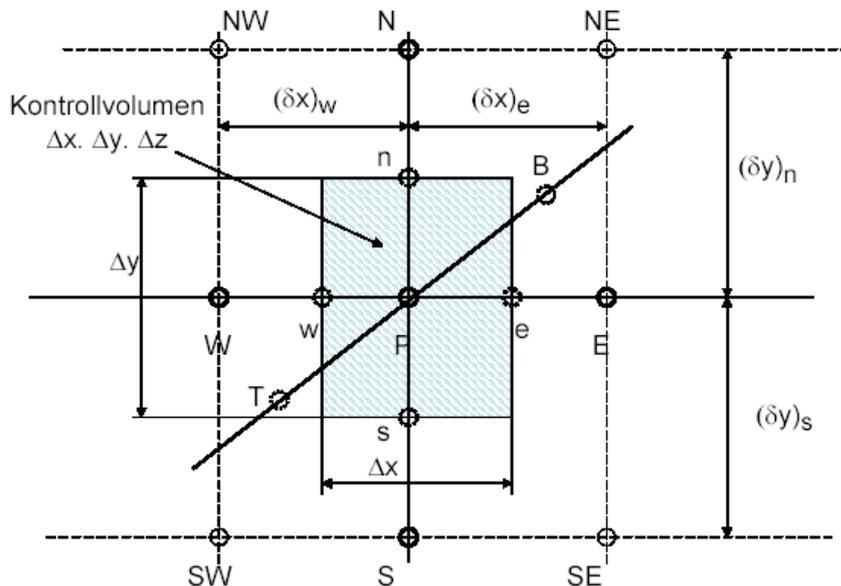


Abbildung 17: Kartesisches (numerisches) Gitter für eine 3-dimensionale Lösung

Damit erweitert sich die Differentialgleichung um den Wärmeleitungsterm in y -Richtung bzw. im dreidimensionalen Fall auch um den Term in z -Richtung (in eckigen Klammern):

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] + S \quad \text{Gl. 94}$$

Die Diskretisierungsgleichung ergibt sich daraus, wie folgt:

$$a_p T_P = a_p^0 T_P^0 + a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_T T_T + a_B T_B + b \quad \text{Gl. 95}$$

mit folgenden Koeffizienten:

$$a_E = \frac{k_e \Delta y \Delta z}{\delta x_e} \quad a_N = \frac{k_n \Delta x \Delta z}{\delta y_n} \quad a_T = \frac{k_t \Delta x \Delta y}{\delta z_t}$$

$$a_W = \frac{k_w \Delta y \Delta z}{\delta x_w} \quad a_S = \frac{k_s \Delta x \Delta z}{\delta y_s} \quad a_B = \frac{k_b \Delta x \Delta y}{\delta x_b} \quad a_p^0 = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t}$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y \Delta z + a_p^0 T_P^0$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_p^0 - S_p \Delta x \Delta y \Delta z \quad \text{Gl. 96}$$

$$(a_p = \sum a_{nb} - S_p \Delta V)$$

Die physikalische Bedeutung der Koeffizienten ist, wie folgt: Die Nachbarkoeffizienten stellen die Wärmeleitfähigkeiten zwischen P und dem jeweiligen Nachbarpunkt dar. $a_p^0 T_P^0$ ist die (innere) Energie im Kontrollvolumen zur Zeit t . Der Term b enthält diese innere Energie und die Wärmequelle (bzw. Senke) aus S_c . Der Polkoeffizient a_p ist die Summe aller Nachbarkoeffizienten (einschließlich des Zeitnachbarkoeffizienten a_p^0) und dem linearen Quelltermanteil S_p .

3.10 Wärmeleitungsähnliche Probleme

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

Massendiffusion

Elektromagnetische Felder

Spezielle Strömungsprobleme, wie

– Potentialströmung

– Strömung in porösen Medien

4 Konvektion und Diffusion

Nach der Diskretisierung des Instationärterms, des Diffusionsterms und des Quellterms in der allgemeinen Erhaltungsgleichung fehlt nun noch der Konvektionsterm. Der Konvektionsterm beeinflusst die Einflussterme a^i zu den benachbarten Stützwerten. Das lineare Gleichungssystem bleibt jedoch erhalten, so dass die Lösungsmethoden für algebraische Gleichungen weiter verwendet werden können. Der konvektive Transport wird durch die Strömung verursacht. Das zugrunde liegende Strömungsfeld muss daher bestimmte Eigenschaften erfüllen, um eine korrekte Verteilung der transportierten Größe ϕ zu erhalten. Die Diskretisierung des Konvektionsterms ist anspruchsvoll und bedarf mehrerer Überlegungen. Da die Konvektion ebenso wie die Diffusion einen Transport über die Oberfläche des Kontrollvolumens darstellt, werden beide Effekte oft gemeinsam betrachtet.

4.1 Eigenschaften des Strömungsfeldes

Die wichtigste Eigenschaft des Strömungsfeldes für den konvektiven Transport ist die Erfüllung der Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad \text{Gl. 9}$$

Da diese Gleichung in differentieller Form für jedes beliebige Kontrollvolumen gilt, ist diese Forderung für ein nur an diskreten Orten (in den Finiten Volumen) als Mittelwert vorhandenes Geschwindigkeitsfeld nur für Sonderfälle erfüllbar. In einem Finiten Volumen-Verfahren wird diese Eigenschaft nur von den Massenflüssen über die Kontrollvolumenoberflächen genau erfüllt. Daher muss die Erhaltungsgleichung für eine beliebige Erhaltungsgröße ϕ dieselben Finiten Volumen verwenden, wie sie für die Kontrolle der Massenerhaltung vorhanden sind.

Eine weitere Forderung für das Strömungsfeld ist die Erfüllung der Impulserhaltung, der Energieerhaltung und der Zustandsgleichung.

4.2 Eindimensionale, stationäre Konvektion und Diffusion

In der allgemeinen dreidimensionalen Erhaltungsgleichung für eine spezifische Größe ϕ bewirken sowohl die Diffusionsterme als auch die Konvektionsterme einen Transport.

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

Um nun das Zusammenspiel zwischen Konvektion und Diffusion näher zu betrachten, wird der Fall eines stationären, eindimensionalen Transports ohne Quellterm in x -Richtung betrachtet:

$$\frac{d}{dx} (\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad \text{Gl. 97}$$

Aus Kontinuitätsgründen ist im eindimensionalen Fall für ein inkompressibles Medium $\rho u A$ (= Massenfluss) konstant, d.h. es fließt auf der einen Kontrollvolumenseite der gleiche Massenstrom ein, wie auf der anderen Seite aus. In der Kontrollvolumendarstellung wird ohne Einschränkung der Allgemeingültigkeit ein äquidistantes Gitter mit gleichen Grenzflächen A_e und A_w verwendet.

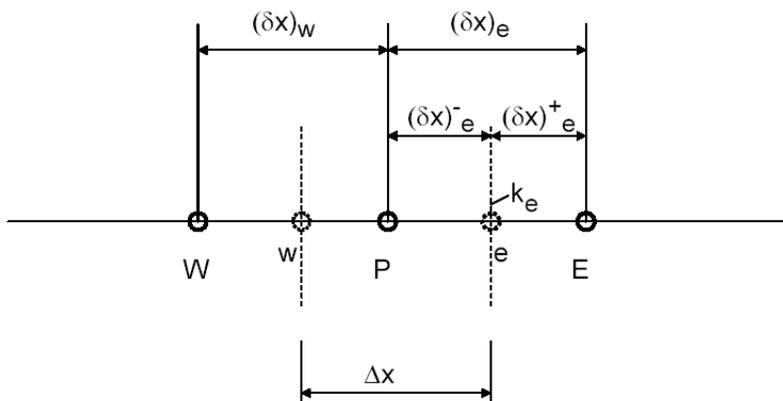


Abbildung 18: Gitter für die Konvektions- und Diffusionsdarstellung (eindimensional)

Die Darstellung der Gradienten für die Diffusionsterme mit Hilfe einer linearen Verteilung der Größe ϕ zwischen den Nachbarwerten, wurde bereits im vorherigen Abschnitt gezeigt. Ein logischer Schritt ist es daher, dieselbe Verteilung auch für die Berechnung des Konvektionsterms zu verwenden. Durch Integration der Erhaltungsgleichung (Gl. 97) über das Volumen $\Delta V = \Delta x * 1 * 1$ (räumliche Diskretisierung) ergibt sich folgende Gleichung:

$$(\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_w = \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad \text{Gl. 98}$$

Zur Bestimmung des konvektiven Flusses muss also der Wert von ϕ an der Stelle e bzw. w während des Zeitschrittes bekannt sein. Unter Annahme einer linearen Funktion zwischen W und P bzw. P und E ergibt sich bei einem äquidistanten Gitter mit einer Oberfläche exakt in der Mitte zwischen den beiden Nachbarorten:

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) \quad \phi_w = \frac{1}{2}(\phi_w + \phi_P) \quad \text{mit } (\delta x_e^- = \delta x_e^+) \quad \text{Gl. 99}$$

Die lineare Verteilung zwischen den Gitterzellen wird auch als Zentralfdifferenzen-Schema (Central Differencing Scheme CDS) bezeichnet. Eingesetzt in die Diskretisierungsgleichung ergibt sich:

$$(\rho u)_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - (\rho u)_w \frac{\phi_P + \phi_W}{2} = \Gamma_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\delta x_e} - \Gamma_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_w} \quad \text{Gl. 100}$$

Mit der Bezeichnung der Flüsse über die Zellgrenzen mit F für den konvektiven und D für den diffusiven Fluss, erhält man:

$$F = \rho u \quad D = \frac{\Gamma}{\delta x} \quad \text{Gl. 101}$$

Eingesetzt in die Diskretisierungsgleichung unter Verwendung der Indizes für die Oberflächen e und w führt zu:

$$F_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - F_w \frac{\phi_P + \phi_W}{2} = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad \text{Gl. 102}$$

Nach der Umformung der Gleichung und Zusammenfassung aller Terme erhält man:

$$\phi_P \left[\frac{F_e}{2} - \frac{F_w}{2} + D_e + D_w \right] = \phi_E \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) + \phi_W \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \quad \text{Gl. 103}$$

Die Koeffizienten zu den Nachbarvolumen in der allgemeinen Diskretisierungsgleichung ($a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W$) ergeben damit:

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \quad a_W = D_w + \frac{F_w}{2} \quad a_P = D_e + \frac{F_e}{2} + D_w - \frac{F_w}{2} \quad \text{Gl. 104}$$

$$a_P = a_E + F_e + a_W - F_w = a_E + a_W + (F_e - F_w)$$

Nur bei Erfüllung der Kontinuitätsgleichung erreicht man, dass $F_e = F_w$. Damit ergibt sich wieder die Grundregel 4, nämlich, dass $a_P = a_E + a_W$ ist. Wichtig ist dabei, dass auch Grundregel 2 (nur positive Koeffizienten!) erfüllt sein muss.

Wenn nun in einem Beispiel der konvektive Fluss den Wert $F_e = F_w = 4$ annimmt und der diffusive Fluss $D_e = D_w = 1$, dann erhält man bei Werten von $\phi_E = 200$ und $\phi_W = 100$ beim Einsetzen in Gl. 103 den Wert $\phi_P = 50$.

$F_e = F_w = 4$ und $D_e = D_w = 1$ ergeben bei $\phi_E = 200$ und $\phi_W = 100$:

$$\phi_P = \frac{a_E \phi_E + a_W \phi_W}{a_P} = \frac{(1-2)200 + (1+2) \cdot 100}{(1-2) + (1+2) + (4-4)} = \frac{-200 + 300}{-1+3} = \frac{100}{2} = 50 = \phi_P \quad \text{Gl. 105}$$

$\downarrow \quad \quad \downarrow \quad \quad \downarrow$
 $(a_E) \quad (a_W) \quad (F_e - F_w)$

Für den Fall, dass die Werte $\phi_E = 100$ und $\phi_W = 200$ sind ergibt sich:

$$\phi_P = \frac{-1 \cdot 100 + 3 \cdot 200}{2} = \frac{500}{2} = 250 = \phi_P \quad \text{Gl. 106}$$

Da beim Transport einer spezifischen Größe durch Konvektion und/oder Diffusion der Wert nicht größer als der größte Nachbarwert und nicht kleiner als der kleinste Nachbarwert werden darf (2. Hauptsatz der Thermodynamik) ist dieses Ergebnis falsch!

Diese Ergebnisse sind auch zu erwarten, da im gezeigten Beispiel der Koeffizient a_E negativ ist. Damit wird die Grundregel 2 verletzt, nämlich dass alle Koeffizienten ein positives

Vorzeichen haben müssen. Wenn also der Betrag von $|F| < 2D$ wird, dann ergibt sich ein negativer Koeffizient. Dies gilt sowohl für positive als auch negative Strömungsrichtung:

$$\text{bei } F \text{ ist positiv} \quad \rightarrow a_E < 0$$

$$\text{bei } F \text{ ist negativ} \quad \rightarrow a_W < 0$$

Wenn nun ein negativer Koeffizient vorhanden ist, ist die Diagonaldominanz der Matrix im linearen Gleichungssystem (im eindimensionalen Fall) nicht mehr gegeben:

$$a_P = \sum a_{nb} < \sum |a_{nb}| \quad \text{Gl. 107}$$

Für den Fall, dass keine Diffusion vorhanden ist und Kontinuität vorliegt ($F_e = F_w$) ergibt sich für den Polkoeffizienten: $a_P = 0$.

Damit kann die Diskretisierungsgleichung: $a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W$ nicht mehr durch ein Punktlösungsverfahren (z.B. Punkt-Gauß-Seidel Verfahren) gelöst werden.

Im vorhergehenden Teil wurde damit gezeigt, dass die Verwendung des Mittelwertes der beiden benachbarten Volumen für die Berechnung des Konvektionsterms für Fälle mit hohem Konvektionsanteil nicht funktioniert. Es muss daher ein anderes, allgemein gültiges Konvektionsschema gefunden werden. Daher wird im nächsten Abschnitt auf weitere Möglichkeiten zur Behandlung des Konvektionsterms eingegangen.

4.3 Exakte Lösung des eindimensionalen Konvektions-Diffusionsproblems

Eine exakte Lösung des Konvektions- Diffusionsproblems ist nur für den eindimensionalen Fall möglich:

$$\rho u \frac{d\phi}{dx} = \Gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad \text{Gl. 108}$$

Dabei wird wiederum von der Erfüllung der Kontinuitätsgleichung für ein inkompressibles Medium ausgegangen, so dass ρu vor die Ableitung der transportierten Größe ϕ in Raumrichtung x gestellt werden darf. Zur Erklärung der Erhaltungsgleichung wird die charakteristische Größe der Peclet-Zahl Pe eingeführt. Bei konstanten Werten für den Diffusionskoeffizienten Γ (= konstant) und den Massenfluss ρu (= konstant), ist die Peclet-Zahl als Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Transport wie folgt definiert:

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} = \frac{\text{Konvektion}}{\text{Diffusion}} \quad \text{Gl. 109}$$

$$x = 0 \rightarrow \phi = \phi_0$$

$$x = L \rightarrow \phi = \phi_L$$

Die exakte, geschlossene Lösung der Transportgleichung (für eine konstante Peclet-Zahl zwischen 0 und L) ergibt folgenden Verlauf der Größe ϕ , der in Abbildung 19 für unterschiedliche Pe -Zahlen dargestellt ist:

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{\exp(Pe \cdot x/L) - 1}{\exp(Pe) - 1} \quad \text{Gl. 110}$$

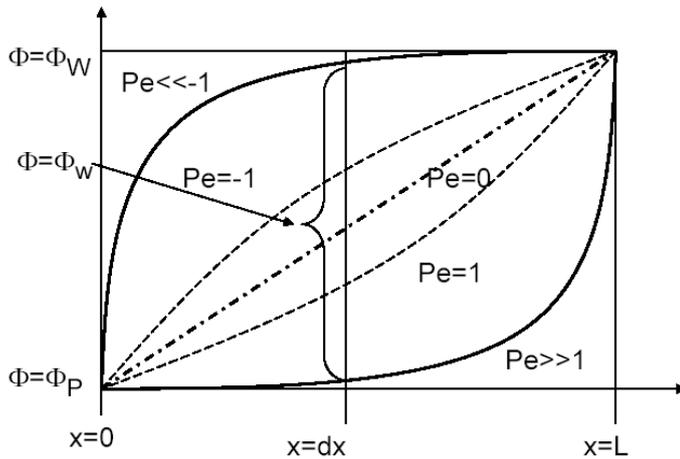


Abbildung 19: Variablenwert als Funktion der Peclet- Zahl

Für den Grenzfall $Pe = 0$ (reine Diffusion oder Leitung) ergibt sich ein linearer ϕ - x -Verlauf. Bei Strömung in positiver x -Richtung (d.h. $Pe > 0$), wird der ϕ -Wert mehr durch den Wert ϕ_0 von stromauf beeinflusst. Bei sehr großen positiven Pe -Werten liegt der ϕ -Wert im größten Teil des Gebiets nahe beim Wert ϕ_0 von stromauf. Analoges gilt für die Strömung in negativer x -Richtung. Die Konsequenzen für ein physikalisch realistisches $\phi(x)$ -Profil zwischen den Gitterpunkten, die sich aus der Betrachtung der exakten Lösung des Konvektions-Diffusions-Problems in Abbildung 19 ergeben, sind:

Die Annahme für eine lineare Verteilung der transportierten Größe ϕ stimmt nur für kleine Pe -Zahlen. Für große Pe -Zahlen ist die Annahme richtig, dass der Wert nahe dem stromauf liegenden Wert liegt. Für alle anderen Fälle liegen die Werte offensichtlich zwischen diesen beiden Extrem Lösungen.

Für die Betrachtung der Fälle mit großem Konvektionsanteil wird nachfolgend das sogenannte Upwind-Schema untersucht.

4.4 1st Order Upwind-Schema

Bei großem Konvektionsanteil ist der Wert an der Grenzfläche (w bzw. e) ϕ_w bzw. ϕ_e im Transportterm nahe dem Wert in der stromauf liegenden Zelle (siehe Abbildung 19). Dieses Schema wird nachfolgend als 1st order Upwind-Schema (UDS) bezeichnet. Es ist auch unter aufstrom-gewichtete Differenzen, upwind differencing scheme oder donor-cell method bekannt. Bei einer Strömung in positiver x -Richtung ergibt sich damit an der Grenzfläche e:

$$F_e > 0: \phi_e = \phi_P \quad \text{bzw. bei umgekehrter Strömungsrichtung} \quad F_e < 0: \phi_e = \phi_E$$

ϕ_w wird analog definiert. Unter Verwendung des Operators: $\text{MAX}(a, b)$ (= der größere Wert von a und b), kann der konvektive Transport durch das UDS wie folgt geschrieben werden:

$$F_e \phi_e = \phi_P \text{MAX}(F_e, 0) - \phi_E \text{MAX}(-F_e, 0) \tag{Gl. 111}$$

Gleichung 111 kann auch wie folgt geschrieben werden:

$$F_e \phi_e = \phi_P F_e^+ - \phi_E F_e^- \quad \text{mit:} \quad F_e^+ = \text{MAX}(F_e, 0) \quad \text{und} \quad F_e^- = \text{MAX}(-F_e, 0) \tag{Gl. 112}$$

Damit sind beide Anteile des konvektiven Teils des Einflusssterms positiv! Sie treten jedoch nie gleichzeitig auf. Wenn die Strömung in x-Richtung erfolgt, ist $F_e^+ > 0$ und $F_e^- = 0$ und umgekehrt.

Die entsprechende Diskretisierungsgleichung unter Berücksichtigung des diffusiven Transports lautet:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad \text{Gl. 113}$$

$$\text{mit: } a_E = D_e + \text{MAX}(-F_e, 0) = D_e + F_e^-$$

$$a_W = D_w + \text{MAX}(F_w, 0) = D_w + F_w^+$$

$$a_P = a_W + a_E + F_e^+ + F_w^- - F_e^- - F_w^+$$

mit: $F_e = F_e^+ - F_e^-$ und $F_w = F_w^+ - F_w^-$ ergibt sich:

$$a_P = a_W + a_E + F_e + F_w$$

Daraus ist ersichtlich, dass keine negativen Koeffizienten auftreten. Die Lösung wird dadurch physikalisch sinnvoll. Jedoch nur für Strömungen mit einer hohen Peclet-Zahl. Der numerische Aufwand für dieses Schema ist klein, daher wird es nach wie vor häufig verwendet. So z.B. als Teil des Hybrid-Schemas. In Abbildung 20 ist das Prinzip des UDS grafisch für die Berechnung der Werte ϕ_w bzw. ϕ_e für beide Strömungsrichtungen dargestellt:

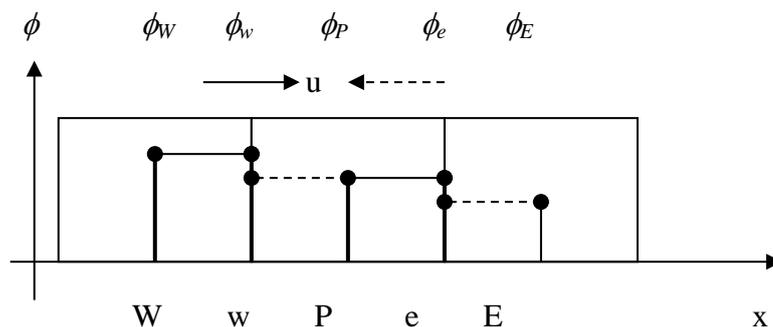


Abbildung 20: Grafische Darstellung des 1st order Uwpind-Schemas (UDS)

4.4.1 Hybrid Schema:

Das Hybrid-Schema löst das eindimensionale Konvektions-Diffusionsproblem näherungsweise. Zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen der exakten Lösung und dem Hybrid-Schema erfolgt den Vergleich der dimensionslosen Form des Einflussfaktors a_E/D_e als Funktion der Peclet-Zahl Pe . Aus Gleichung 110 folgt:

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{Pe}{\exp(Pe) - 1} \quad \text{Gl. 114}$$

Dieser Verlauf ist in Abbildung 21 dargestellt. Für positives Pe ist der Gitterpunkt E der Stromab-Nachbar und sein Einfluss verschwindet mit zunehmendem Pe . Für negatives Pe ist E der Stromauf-Nachbar und hat großen Einfluss. 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. In kompakter Form ergibt sich:

$$a_E = De[-Pe, 1 - \frac{Pe}{2}, 0] = [-Fe, De - \frac{Fe}{2}, 0] \quad \text{Gl. 115}$$

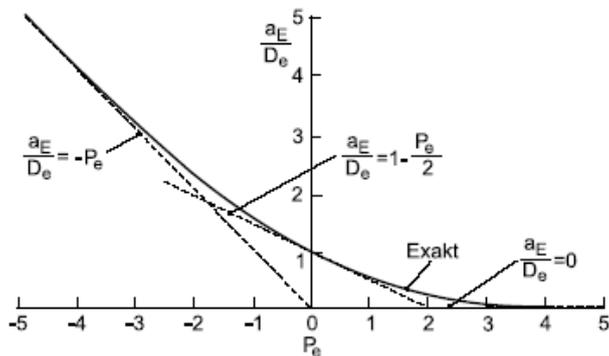


Abbildung 21: Hybrid-Schema: Verlauf des Koeffizienten a_E/D_e über der Peclet-Zahl

Es ist identisch mit dem CDS für $-2 < Pe < 2$, und außerhalb reduziert es sich auf das UDS ohne Diffusion. Die Konvektions-Diffusions-Diskretisierungsgleichung für das Hybrid-Schema ist also

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \tag{Gl. 116}$$

mit:

$$a_E = \left[-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0 \right]$$

$$a_W = \left[+F_w, D_w + \frac{F_w}{2}, 0 \right]$$

$$a_P = a_E + a_W + (F_e - F_w)$$

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

4.5 Eigenschaften von Konvektionsschemata

Das UDS löst also die konvektiven Terme der Erhaltungsgleichungen. Es stellt sich jetzt die Frage, wie gut diese Lösung ist. Im Folgenden werden Kriterien für die Bewertung von Konvektionsschemata gegeben. Ein Konvektionsschema soll die eindimensionale, instationäre Differentialgleichung für ein inkompressibles Medium perfekt lösen:

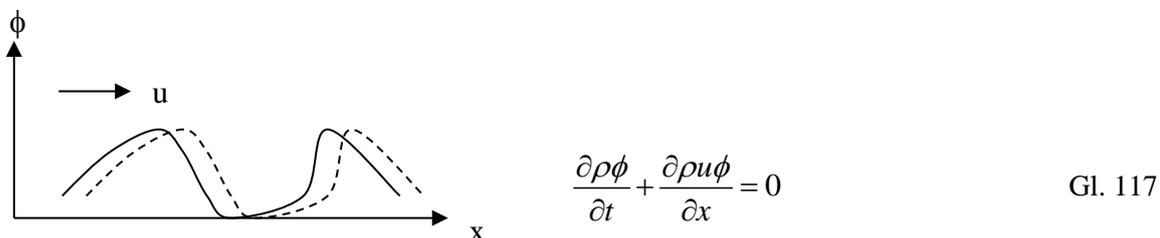


Abbildung 22: Eigenschaft des 1-dimensionalen Konvektionsterm

Die Lösung stellt dabei den reinen Transport des Verlaufs von ϕ um das Wegstück $\Delta x = u \cdot \Delta t$ dar. Dabei soll die Form unverändert bleiben. Die Maxima und Minima sollten auf denselben Werten liegen. Diese ideale Eigenschaft wird im Normalfall nicht erreicht. Um ein Konvektionsschema beurteilen zu können, werden hier fünf grundlegende Eigenschaften für Konvektionsschemata definiert:

4.5.1 Beschränktheit

Die Beschränktheit der Lösung ist eine notwendige Bedingung für die Berechnung komplexer mehrdimensionaler Strömungen. Sie bedeutet, dass der reine konvektive Transport einer spezifischen Größe ϕ keine Werte erzeugen darf, die höher als der Maximalwert oder niedriger als der Minimalwert sind. Dies widerspricht dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik. Die Bedingung kann also wie folgt beschrieben werden:

$$\min(\phi) \leq \phi \leq \max(\phi) \quad \text{Gl. 118}$$

Eine ausreichende Bedingung für die Einhaltung dieser Eigenschaft ist, dass alle Einflusskoeffizienten größer gleich null sind.

$$a_i \geq 0 \quad \text{Gl. 119}$$

Wobei der Index i für alle Nachbarvolumen eines Kontrollvolumens steht. Nicht-beschränkte Lösungen führen zu neuen, unphysikalischen Maxima bzw. Minima oder zum Auftreten von unphysikalischen Schwingungen.

4.5.2 Genauigkeit

Konvektionsschemata sollen, wie in Abbildung 22 gezeigt, für den eindimensionalen Fall gezeigt, die Verteilung der transportierten Größe möglichst genau erhalten. Komplexe dreidimensionale Strömungen ergeben keine derart einfachen Lösungen. (Dennoch gibt es Verfahren, die den Konvektionsterm exakt abbilden. Diese beruhen auf dem Transport von Teilchen, die jeweils mit ihrer Verteilung die Verteilung der skalaren Größe wiedergeben. Sie werden dabei wie masselose Teilchen mit der Hauptströmung mittransportiert.). Der Vergleich mit diesen sehr rechenintensiven exakten Methoden mit den einfachen Methoden, die hier behandelt werden, zeigt die so-genannte berechnete Genauigkeit. Eine Verfeinerung des Berechnungsgitters erhöht die Genauigkeit jedes Konvektionsschemas. Ein Verfahren höherer Ordnung erhöht im Allgemeinen diese Genauigkeit gegenüber dem UDS bei gleicher Gitterauflösung.

4.5.3 Transportivität

Die Konvektion hat eine ausgezeichnete Richtung. Der konvektive Transport soll nur in diese Richtung erfolgen. Das bedeutet, dass dieser Term nur durch stromauf liegende Werte der transportierten Größe ϕ beeinflusst wird. Diese Eigenschaft wird von allen so-genannten Upwind-Schemata erfüllt.

4.5.4 Erhaltung der Größe ϕ

Das Erhaltungsprinzip für die Konvektion besagt, dass durch den Transport die einfließende und die ausfließende Menge der Erhaltungsgröße ϕ für eine Kontrollvolumen im stationären Fall gleich sein muss. Darüber hinaus muss auch die Menge, die aus einem Volumen über eine Zellfläche austritt gleich der Menge, die in die Nachbarzelle über diese (gemeinsame) Zellfläche eintritt, sein. Das Erhaltungsprinzip ist für eine physikalisch richtige Lösung der Erhaltungsgleichungen grundlegend.

4.5.5 Stabilität

Die Stabilität eines Verfahrens ist direkt verbunden mit der Struktur und den Werten der Koeffizientenmatrix. Diese wiederum hängen vom verwendeten Diskretisierungsschema ab. Je nach Komplexität des Schemas sind mehr oder weniger Koeffizienten besetzt. Eine

positive Koeffizientenmatrix erhält man, wenn Bedingung (Gl. 119) erfüllt ist. Diagonaldominanz ist erfüllt, wenn die Koeffizienten in der Hauptdiagonale größer gleich der Summe der Koeffizienten in derselben Zeile sind:

$$|a_{ii}| \geq \sum_{i \neq j} |a_{ij}| \quad \text{Gl. 120}$$

Eine positive und diagonal dominante Koeffizientenmatrix ist dabei eine hinreichende jedoch keine notwendige Bedingung, um eine stabile Lösung zu erhalten. Die Verletzung dieses Kriteriums führt jedoch meist zu instabilen Lösungen.

Der Grund warum, diese beiden Bedingungen dennoch absichtlich verletzt werden, liegt in der Idee genauere Konvektionsschemata zu verwirklichen.

4.6 Numerische Diffusion

Bei der Diskretisierung des Konvektionsterms tritt je nach Konvektionsschema das Problem der so-geannten „numerischen“ Diffusion auf. Diese kann sowohl in eindimensionalen als auch vermehrt in mehrdimensionalen Problemstellungen auftreten. Der Grund ist, dass durch die räumliche und zeitliche Mittelung der transportierten Größen in den Finiten Volumen die Auflösung von starken Gradienten praktisch nicht möglich ist. Es stellt sich dadurch zusätzlich zur i.A. vorhandenen physikalischen Diffusion eine durch die numerische Umsetzung verursachte zusätzliche, falsche oder numerische Diffusion ein. Beeinflusst kann die numerische Diffusion durch die Wahl des verwendeten Konvektionsschemas werden. Je höher die Ordnung des Schemas, desto geringer fällt die numerische Diffusion aus. Dabei bezieht sich die Ordnung des Schemas auf die Darstellung des Verlaufs der transportierten Größe ϕ als Taylorreihe, wobei die Ordnung der Potenz des ersten nicht-berücksichtigten Terms entspricht (siehe Skriptum Offner).

Diskretisierung mit dem Zentralknoten-Schema (CDS):

Das CDS ist von einer Genauigkeit zweiter Ordnung, da die Taylor Reihe bei Δx^2 abgebrochen wird.

Diskretisierung mit dem Upwind Schema (UDS):

Das UDS ist von einer Genauigkeit erster Ordnung, da die Reihe bereits bei Δx abgebrochen wird.

Daraus lässt sich schließen, dass Zentralknoten, die ebenso wie UDS sehr einfach berechnet werden können, solange wie möglich verwendet werden sollten. Die Einschränkung besteht darin, dass die Einflusskoeffizienten a_i nicht negativ werden dürfen (siehe Hybridschema). Es gibt jedoch auch weitere Möglichkeiten die numerische Diffusion einzuschränken (siehe nachfolgendes Kapitel: Limitierte Konvektionsschemata)

Als ein Beispiel für das Auftreten numerischer Diffusion wird hier die Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen für ein zweidimensionales Mischungsproblem mit einer einfachen Strömung diskutiert. Aufgrund der einfachen Lösung kann der Einfluss der Gitterausrichtung im Bezug zur Strömungsrichtung auf den Transport der Temperatur (Enthalpie) gezeigt werden.

Beispiel:

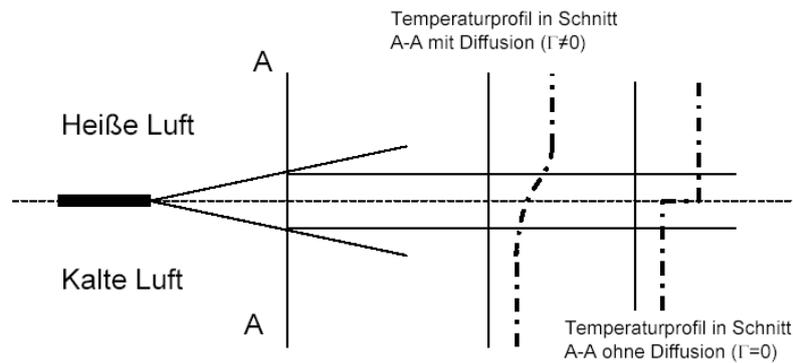


Abbildung 23: Beispiel Vermischung von zwei Luftströmen unterschiedlicher Temperatur

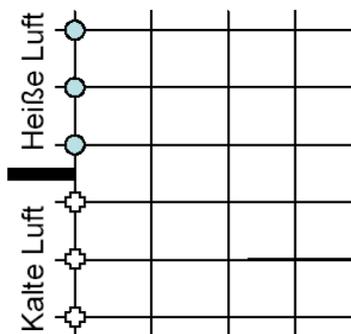


Abbildung 24: Numerisches Gitter zur Umsetzung des Beispiels (strömungsparallel)

Unter der Annahme, dass der physikalische Diffusionskoeffizient null ist ($\Gamma = 0$), folgt, dass die bei der numerischen Berechnung feststellbare Diffusion nur der numerischen Diffusion zurechenbar ist. Die Strömungsgeschwindigkeit ist im ganzen Berechnungsgebiet gleich groß mit einer einheitlichen Richtung und erfüllt bei Annahme gleichbleibender Dichte die Kontinuitätsgleichung.

Zentraldifferenzen $\Gamma = 0 \rightarrow a_p = 0$
 da $F_E = F_W$
 $F_W = F_S$

Damit ergibt sich das Problem in der Berechnung: $\frac{1}{a_p} = \frac{1}{0}$. Damit ist keine Lösung mittels eines Punktsolvers möglich.

Upwind

a) Unter der Annahme einer Strömung in positive x-Richtung und keiner Geschwindigkeit in y-Richtung ($v = 0$), ergibt sich bei einem Diffusionskoeffizienten von $\Gamma = 0$:

$$a_N \text{ und } a_S = 0, \quad a_E \text{ ist stromabwärts und daher auch null} \rightarrow a_w = a_p \rightarrow \phi_p = \phi_w$$

mit: $a_E = D_E + \max[-Fe, 0]$ Fe ist positiv $\rightarrow \max[Fe, 0] = 0$

Damit bleiben die beiden Teilströme ungemischt, was der richtigen Lösung für dieses Problem entspricht. Es tritt also keine numerische Diffusion auf. Alle stromabwärts liegenden Gitterpunkte weisen die gleiche Temperatur wie stromaufwärts auf. D.h., oben 100°C (heiße Luft), unten 0°C (kalte Luft)

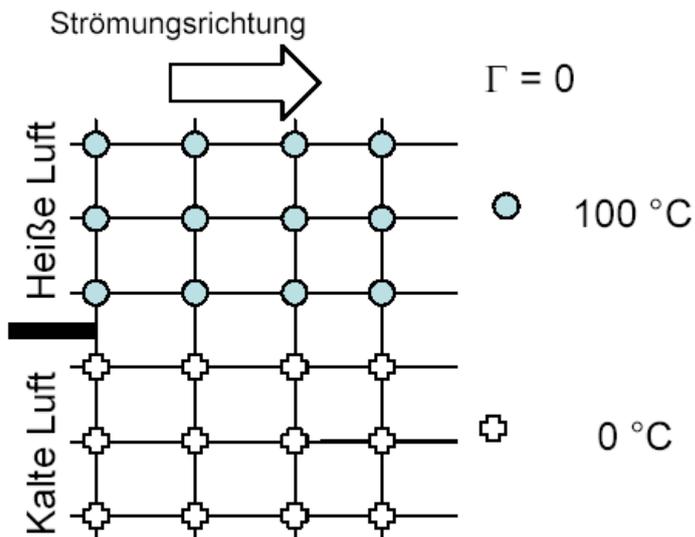


Abbildung 25: Wärmetransport bei $\Gamma = 0$, strömungsparalleles Gitter

b) Strömung unter 45° zu den Gitterlinien

Vereinfachung $\Delta x = \Delta y$ und $u = v = 1\text{m/s}$

$\rightarrow a_W$ und a_S sind gleich

$$a_E \text{ und } a_N \text{ sind } 0 \quad \rightarrow \phi_P = 0,5 * \phi_W + 0,5 * \phi_S$$

Das Medium strömt unter einem Winkel von 45° zur Gitterausrichtung ein. Ohne Diffusion müssten die Werte an den Gitterpunkten oberhalb der Diagonalen 100°C und unterhalb 0°C haben. Dies ist jedoch aufgrund der nun auftretenden numerischen Diffusion nicht mehr der Fall.

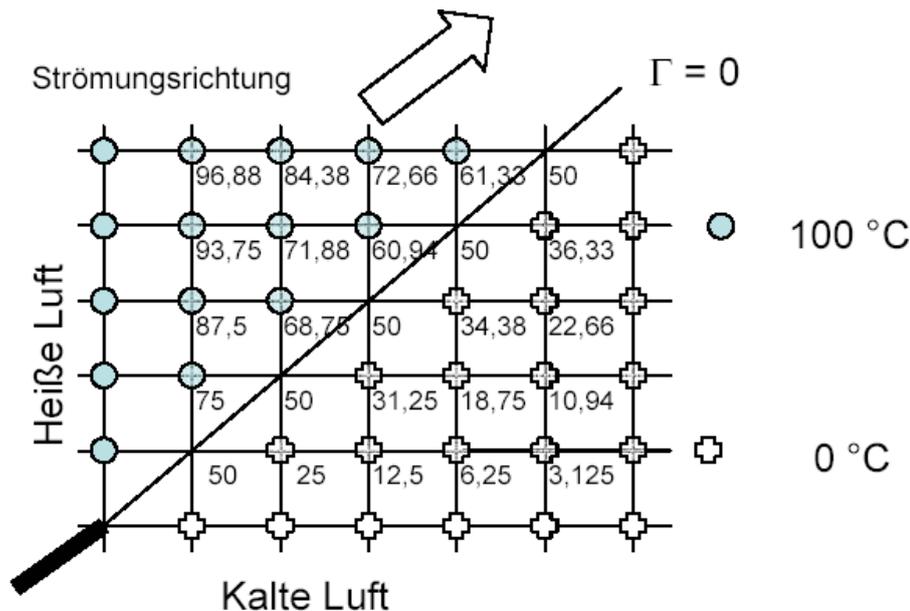


Abbildung 26: Wärmetransport bei $\Gamma = 0$, Strömungsrichtung unter 45° zur Gitterrichtung

4.7 Limitierte Konvektionsschemata

Konvektionsschemata höherer Ordnung basieren auf der Interpolation der Werte an der Grenzfläche durch Polynome. Derartige Kurven weisen eine proportional zur Ordnung steigende Anzahl von lokalen Extremwerten auf. Die Polynome wirken sich auf das Ergebnis eines numerischen Lösungsverfahrens derart aus, dass in den Verläufen von ϕ Schwankungen auftreten. So treten auch bei einem Schema mit einem Polynom 1. Ordnung (z.B. 2nd Order Upwind, siehe unten) Oszillationen in der Lösung auf. Dieser Effekt tritt besonders bei steilen Gradienten auf und ist ausschlaggebend dafür, dass der Gitterabstand bei den nicht-limitierten Verfahren höherer Ordnung nicht zu groß gewählt werden darf.

Die Idee der limitierten Konvektionsschemata besteht darin, die Oszillationen durch Reduktion der Ordnung des Polynoms in der Nähe von Extremwerten zu verhindern. Auf diese Weise sollen Verfahren höherer Ordnung wie beispielsweise 2nd Order Upwind 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 Konvektionsschemata grundsätzlich nichtlinear. Die Vermeidung von Oszillationen wird letztlich durch die Inkaufnahme von lokalen Verminderungen der Approximationsordnung und ein nichtlineares Verfahren erreicht.

4.7.1 TVD Eigenschaft

Harten beschrieb 1983 Anforderungen an limitierte Konvektionsschemata. 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 diese Gruppe der limitierten

Konvektionsverfahren auch TVD–Verfahren (Total Variation Diminishing). Kontrolliert wird dabei die Monotonie-Eigenschaft der zweiten Ableitung.

Die Totale Variation von ϕ über ein Intervall ist definiert als:

$$TV(\phi) = \sum_{i=1}^n |\phi_{i+1} - \phi_i| \tag{Gl. 121}$$

Bezogen auf eine eindimensionale skalare Erhaltungsgleichung für ϕ vom Typ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad u > 0 \tag{Gl. 122}$$

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

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n) \tag{Gl. 123}$$

eingehalten werden. Erfüllt ein Schema diese Forderung, so wird es als TVD (Total Variation Diminishing) bezeichnet. Die oberen Indizes markieren die Zeitpunkte; $n + 1$ 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, die Zunahme von Oszillationen von einem Zeitschritt zum nächsten zu vermeiden, so gelingt es auch beim Schritt von einer Iteration zur nächsten.

4.7.2 2nd Order Upwind Schema

Konvektionsschemata höherer Ordnung sind z.B. auf der Basis des linearen Konvektionsschemas 2. Ordnung erstellt. Bei diesem Schema werden die Werte an der Oberfläche mittels einer Geraden extrapoliert.

In Abbildung 27 ist das Prinzip des 2nd order Upwind Schemas grafisch für die Berechnung des Wertes ϕ_w für beide Strömungsrichtungen dargestellt:

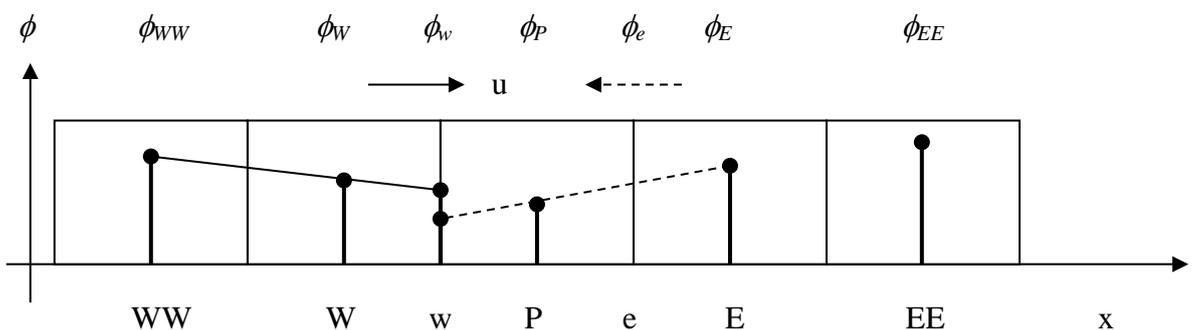


Abbildung 27: Grafische Darstellung des 2nd Order Upwind-Schemas

Die Diskretisierung des Konvektionsterms über die beiden Oberflächen und die Berechnung von ϕ_w bzw. ϕ_e (für ein äquidistantes Gitter) erfolgt dabei mit folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} \text{für } u_w > 0: \quad \phi_w &= \frac{3}{2} \phi_w - \frac{1}{2} \phi_{WW} & \text{für } u_w < 0: \quad \phi_w &= \frac{3}{2} \phi_P - \frac{1}{2} \phi_E & \text{Gl. 124} \\ \text{für } u_e > 0: \quad \phi_e &= \frac{3}{2} \phi_P - \frac{1}{2} \phi_W & \text{für } u_e < 0: \quad \phi_e &= \frac{3}{2} \phi_E - \frac{1}{2} \phi_{EE} \end{aligned}$$

Es können daher unter Berücksichtigung der Vorzeichen und der Definitionen F_w^+ bzw. F_w^- (siehe Gl. 112) für die Konvektionsterme wie folgt geschrieben werden:

$$F_w \phi_w = F_w^+ \left(\frac{3}{2} \phi_w - \frac{1}{2} \phi_{ww} \right) - F_w^- \left(\frac{3}{2} \phi_p - \frac{1}{2} \phi_e \right) \quad \text{Gl. 125}$$

$$F_e \phi_e = F_e^+ \left(\frac{3}{2} \phi_p - \frac{1}{2} \phi_w \right) - F_e^- \left(\frac{3}{2} \phi_e - \frac{1}{2} \phi_{ee} \right)$$

Die Diskretisierungsgleichung enthält nun auch Einflussterte, die über die unmittelbaren Nachbarzellen hinausgehen:

$$a_p \phi_p = a_e \phi_e + a_w \phi_w + a_{ee} \phi_{ee} + a_{ww} \phi_{ww} + b \quad \text{Gl. 126}$$

Die konvektiven Einflußterme lauten nun (darin sind die Koeffizientenanteile, die aus der Gleichung für $F_e \phi_e = \dots$ stammen negativ berücksichtigt, um die Tatsache zu berücksichtigen, dass F_e^+ einen Ausströmvorgang und F_w^+ einen Einströmvorgang darstellt):

$$\begin{aligned} a_w &= \frac{3}{2} F_w^+ + \frac{1}{2} F_e^+ \\ a_e &= \frac{3}{2} F_e^- + \frac{1}{2} F_w^- \\ a_{ww} &= -\frac{1}{2} F_w^+ \\ a_{ee} &= -\frac{1}{2} F_e^- \end{aligned} \quad \text{Gl. 127}$$

4.7.3 2nd Order Upwind TVD Schema

Die oben angeführten Berechnungsterme können nun so zerlegt werden, dass sie aus dem UDS Schema und einem so genannten Korrekturterm bestehen. Dieser liefert offensichtlich den Unterschied zwischen den 1st Order Upwind Konvektionsterm und dem der höheren Ordnung (in diesem Fall: 2nd Order Upwind).

$$\begin{aligned} \text{für } u_w > 0: \quad \phi_w &= \phi_w + \frac{1}{2} \phi_w - \frac{1}{2} \phi_{ww} & \text{für } u_w < 0: \quad \phi_w &= \phi_p + \frac{1}{2} \phi_p - \frac{1}{2} \phi_e \quad \text{Gl. 128} \\ \text{für } u_e > 0: \quad \phi_e &= \phi_p + \frac{1}{2} \phi_p - \frac{1}{2} \phi_w & \text{für } u_e < 0: \quad \phi_e &= \phi_e + \frac{1}{2} \phi_e - \frac{1}{2} \phi_{ee} \end{aligned}$$

Damit ergeben sich folgende Konvektionsterme:

$$F_w \phi_w = F_w^+ \left(\phi_w + \frac{1}{2} \phi_w - \frac{1}{2} \phi_{ww} \right) - F_w^- \left(\phi_p + \frac{1}{2} \phi_p - \frac{1}{2} \phi_e \right) \quad \text{Gl. 129}$$

$$F_e \phi_e = F_e^+ \left(\phi_p + \frac{1}{2} \phi_p - \frac{1}{2} \phi_w \right) - F_e^- \left(\phi_e + \frac{1}{2} \phi_e - \frac{1}{2} \phi_{ee} \right)$$

Im Vergleich mit den UDS zeigen sich bei dieser Darstellung die Korrekturanteile (Erweiterungen 2. Ordnung):

$$F_w \phi_w = \underbrace{F_w^+ \phi_w - F_w^- \phi_p}_{\text{UDS}} + \underbrace{\frac{1}{2} (F_w^+ \phi_w - F_w^- \phi_p) - \frac{1}{2} (F_w^+ \phi_{ww} - F_w^- \phi_e)}_{\text{Erweiterung 2. Ordnung}} \quad \text{Gl. 130}$$

$$F_e \phi_e = \underbrace{F_e^+ \phi_P - F_e^- \phi_E}_{UDS} + \underbrace{\frac{1}{2} F_e^+ (\phi_P - \phi_W) - \frac{1}{2} F_e^- (\phi_E - \phi_{EE})}_{\text{Erweiterung 2.Ordnung}}$$

Die Erweiterung kann nun mit Hilfe von so genannten „Flux-Limitern“ Ψ dargestellt werden.

$$F_w \phi_w = (F_w^+ \phi_W - F_w^- \phi_P) \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \Psi_w - \frac{1}{2} \frac{\Psi_{ww}}{r_{ww}} \right) \quad \text{Gl. 131}$$

$$F_e \phi_e = (F_e^+ \phi_P - F_e^- \phi_E) \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \Psi_e - \frac{1}{2} \frac{\Psi_{ee}}{r_{ee}} \right)$$

Die Idee des TVD-Schemas ist es nun die Erweiterungen für die 2. Ordnung mit Hilfe der Flux-Limiter nur dann zu verwenden, wenn die lokale Lösung das zulässt. Das Kriterium für die Verwendung der Erweiterung 2. Ordnung ist das Vorhandensein eines Extremwertes. Die Quotienten der Differenzen der Werte von ϕ zu den beiden Nachbarzellen zeigen dabei den Extremwert an:

$$r_w = \frac{\phi_E - \phi_P}{\phi_P - \phi_W} \quad \text{Gl. 132}$$

So ergibt der Verlauf von ϕ in Abbildung 27 für r_w einen negativen Wert, da die beiden Steigungen für ϕ links und rechts von ϕ_P ein unterschiedliches Vorzeichen haben und damit ist an dieser Stelle ein Minimum vorhanden (bei einem äquidistantem Gitter entspricht dies einem direkten Vergleich der Steigungen links und rechts von ϕ_P). Bei monoton steigenden bzw. monoton fallenden Verläufen ist der Quotient positiv. Ebenso sind die weiteren Quotienten definiert:

$$r_e = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_P} \quad r_{ee} = \frac{\phi_E - \phi_P}{\phi_{EE} - \phi_E} \quad r_{ww} = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_W - \phi_{WW}} \quad \text{Gl. 133}$$

Die Flux-Limiter sind Funktionen der Quotienten, wobei unterschiedliche Ansätze in der Literatur veröffentlicht sind, z.B.:

$$(1) \quad \Psi_{(r)} = \frac{r + |r|}{1 + r} \quad \text{Gl. 134}$$

$$(2) \quad \Psi_{(r)} = \max[0, \min(1, r)] = \min \text{mod}(1, r) \quad (\text{Minmod})$$

$$(3) \quad \Psi_{(r)} = \max[0, \min(1, 2r), \min(r, 2)] \quad (\text{Superbee})$$

Die TVD - Schemata erzielen bedingungslos beschränkte Lösungen und können auch im Überschallbereich eingesetzt werden. Sie sind transportiv und erfüllen die Erhaltung der transportierten Größe. Je nach Flux-Limiter sind sie mehr oder weniger stabil. Wobei gilt, dass weniger stabile Lösungen genauer sind. Der Flux-Limiter (3) erzeugt öfter einen konvektiven Fluss 2. Ordnung und ist daher weniger stabil als die Flux-Limiter (1) oder (2).

Bei Verwendung der oben gezeigten Ansätze wechselt die Genauigkeit des Konvektionsschemas zwischen 1. und 2. Ordnung. In der Nähe eines Extremwertes geht die Genauigkeit auf die 1. Ordnung zurück, sonst ist das Schema 2. Ordnung genau. Der Einfluss auf das Ergebnis ist jedoch schwierig abzuschätzen. Darüber hinaus wird hier nicht mehr in jedem Fall der Einflusskoeffizient positiv gehalten. Damit kann auch die Diagonaldominanz

der Koeffizientenmatrix verloren gehen. Dennoch gibt es eine Lösung des linearen Gleichungssystems.

4.7.4 Convective Bounded Schemes

Eine weitere Gruppe von Konvektionsschemata basieren auf dem so genannten „Convective Boundedness“ Kriterium. Die Idee dieses Ansatzes ist es physikalisch realistische Lösungen dadurch zu erreichen, dass die Lösung monoton bleibt. Dabei kann ebenso wie beim TVD-Schema die Regel verletzt werden, dass alle Koeffizienten positiv sind und damit die Lösungsmatrix diagonal dominant ist. Das „Convective Boundedness“ Kriterium basiert auf einer Normalisierung der transportierten Größe ϕ . Für eine Geschwindigkeit $u_w > 0$ an der Grenzfläche w wird folgende normalisierte Variable $\hat{\phi}$ erzeugt:

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_{ww}}{\phi_p - \phi_{ww}} \quad \text{Gl. 135}$$

Diese Normalisierung ist auf die stromauf liegenden Werte bezogen. Es kann nun mit diesen normalisierten Werten ein Diagramm erzeugt werden, das die Werte an den Orten W und w (siehe Abbildung 27), nämlich $\hat{\phi}_w$ bzw. $\hat{\phi}_w$ auf den beiden Koordinaten darstellt (Abbildung 28). Die schattierte Fläche und die Linie a , für die $\hat{\phi}_w = \hat{\phi}_w$ gilt, stellen die Regionen dar, die zu einer beschränkten Lösung führen. Die Linie a stellt aber auch gleichzeitig das UDS Verfahren dar, das immer zu beschränkten Lösungen führt. Das Zentral Differenzen Schema (CDS) (siehe Gl. 99) führt zu folgender Beziehung:

$$\hat{\phi}_w = \frac{1}{2}\hat{\phi}_w + \frac{1}{2} \quad \text{Gl. 136}$$

Das 2nd Order Upwind Schema ergibt:

$$\hat{\phi}_w = \frac{3}{2}\hat{\phi}_w \quad \text{Gl. 137}$$

Dargestellt im Diagramm erkennt man bereits, dass die Linie b und c die Region mit beschränkten Lösungen verlässt, und daher auch hier die Tatsache bestätigt wird, dass diese beiden Schemata nicht - beschränkte Lösungen erzeugen.

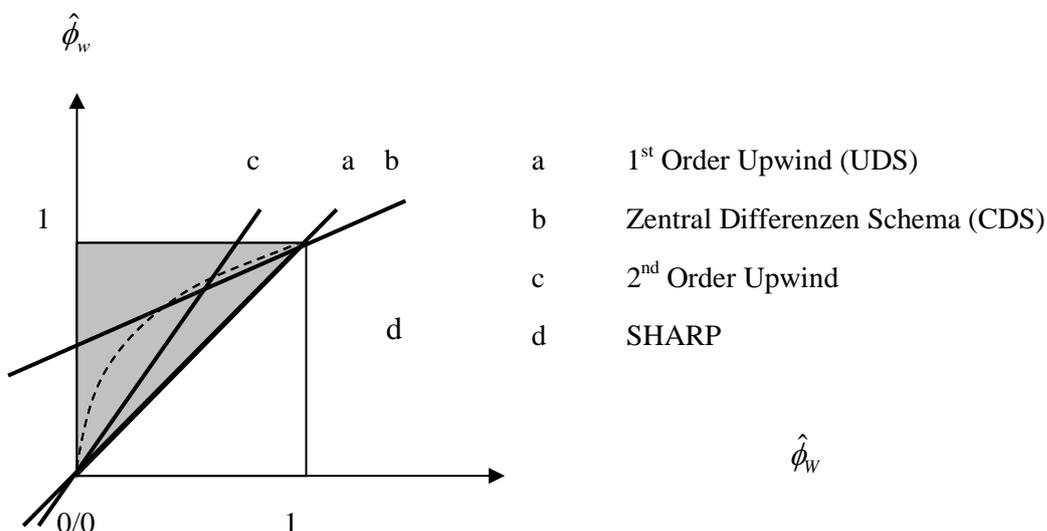


Abb. 28: Diagramm der normalisierten Variablen

Die Idee der „Convective Boundedness“ Schemata liegt nun darin, dass der Verlauf der Funktion des Konvektionsschemas möglich weit in das schattierte Dreieck eintritt. D.h. der Verlauf der Funktion außerhalb der Dreiecksfläche ist ident mit dem UDS und innerhalb des Dreiecks verläuft es nach der strichlierten Linie (z.B. SHARP Simple High-Accuracy Resolution Program).

Zusammenfassend kann hier festgestellt werden, dass die so genannten limitierten Konvektionsschemata von der Idee abgehen, alle Einflusskoeffizienten positiv zu halten. Damit kann auch die Eigenschaft der diagonalen Dominanz der Lösungsmatrix verloren gehen. Das Kriterium für die Verwendung eines Konvektionsschemas höherer Ordnung ist die lokale Verteilung der transportierten Größe. Liegt ein monoton steigender oder fallender Verlauf vor, wird das Verfahren höherer Ordnung verwendet. Liegt ein Extremum vor, wird auf das UDS zurückgeschaltet. Damit ist jedoch auch die Einheitlichkeit des Verfahrens nicht mehr gegeben. In eindimensionalen Berechnungsmodellen gibt es auch Konvektionsschemata, die einheitlich über das gesamte Rechengebiet ein Verfahren höherer Ordnung verwenden. Diese sind jedoch bis heute in 3d CFD Simulationsmodellen nicht vorhanden.

5 Lösung des Gleichungssystems zur Berechnung der Strömung

Die Navier-Stokes Gleichungen stellen ein System nicht-linearer, gekoppelter, partieller Differentialgleichungen dar. Sie können als die Erhaltungsgleichungen für die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten, die Masse und die Energie unter Berücksichtigung der Stoffwerte betrachtet werden. Die Kontinuitätsgleichung hat keine „eigene“ Variable; nur bei kompressiblen Strömungen kann sie als Bestimmungsgleichung für die Dichte betrachtet werden. Der Druck hat auch keine „eigene“ Gleichung; er beeinflusst alle Impulserhaltungsgleichungen gleichermaßen, lässt sich aber aus keiner Gleichung direkt berechnen. Aus diesen Gründen ist die Lösung der Navier-Stokes Gleichungen schwierig. Es ist notwendig, einen speziellen Kopplungsalgorithmus zu entwickeln, um die Geschwindigkeitskomponenten und den Druck so zu bestimmen, dass alle Gleichungen erfüllt sind.

Zur Lösung von Strömungsproblemen im inkompressiblen Bereich wird meistens eine der Druckkorrekturmethode eingesetzt. Sie werden aus den diskretisierten Kontinuitäts- und Impulsgleichungen abgeleitet.

Die diskretisierten Impulserhaltungsgleichungen für u_i , beschrieben für ein Kontrollvolumen (KV) um den Punkt P, lauten:

$$a_P u_{i,P} = \sum_k a_{NB} u_{i,NB} + \Delta V \cdot S_i - \Delta V \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_P \quad \text{Gl. 138}$$

Hier ist ΔV das Volumen des KVs und im Term S_i sind alle explizit behandelten Teile der diskretisierten Impulserhaltungsgleichung außer den Drucktermen zusammengefasst. Der Druckquellterm wurde symbolisch in der Form des Produkts aus einem diskretisierten Ausdruck für den Druckgradienten im KV-Zentrum und des KV-Volumens dargestellt.

Der Druckquellterm kann aber auch konservativ als Summe der Flächenkräfte in x_i -Richtung über alle Seiten des KV, u_i , diskretisiert werden; in diesem Fall steht der obige symbolische Ausdruck für den Gradienten stellvertretend für:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x_i}\right) = \frac{\sum_k (x_i \cdot \vec{n}_k) p_k S_k}{\Delta V} \quad \text{Gl. 139}$$

Die diskretisierte Kontinuitätsgleichung lautet:

$$\sum_k \dot{m}_k = 0 \quad \text{Gl. 140}$$

Die Massenflüsse \dot{m}_k sind wie folgt definiert:

$$\dot{m}_k = \int_{S_k} \rho \vec{v} \cdot \vec{n}_k dS \approx \sum_{i=1,3} (\rho u_i n_i S)_k \quad \text{Gl. 141}$$

Wobei u_i und n_i die kartesischen Anteile des Geschwindigkeitsvektors bzw. des Normalenvektors der Fläche S_k darstellen.

Wenn alle Variablen an der gleichen Stelle, z.B. in der Mitte des Kontrollvolumens, gespeichert sind, treten Probleme in der Kopplung von Druck und Geschwindigkeiten auf. Harlow und Welch haben als Lösung vorgeschlagen, die Geschwindigkeiten und den Druck versetzt auf zwei Gittern zu berechnen (siehe Abbildung 29).

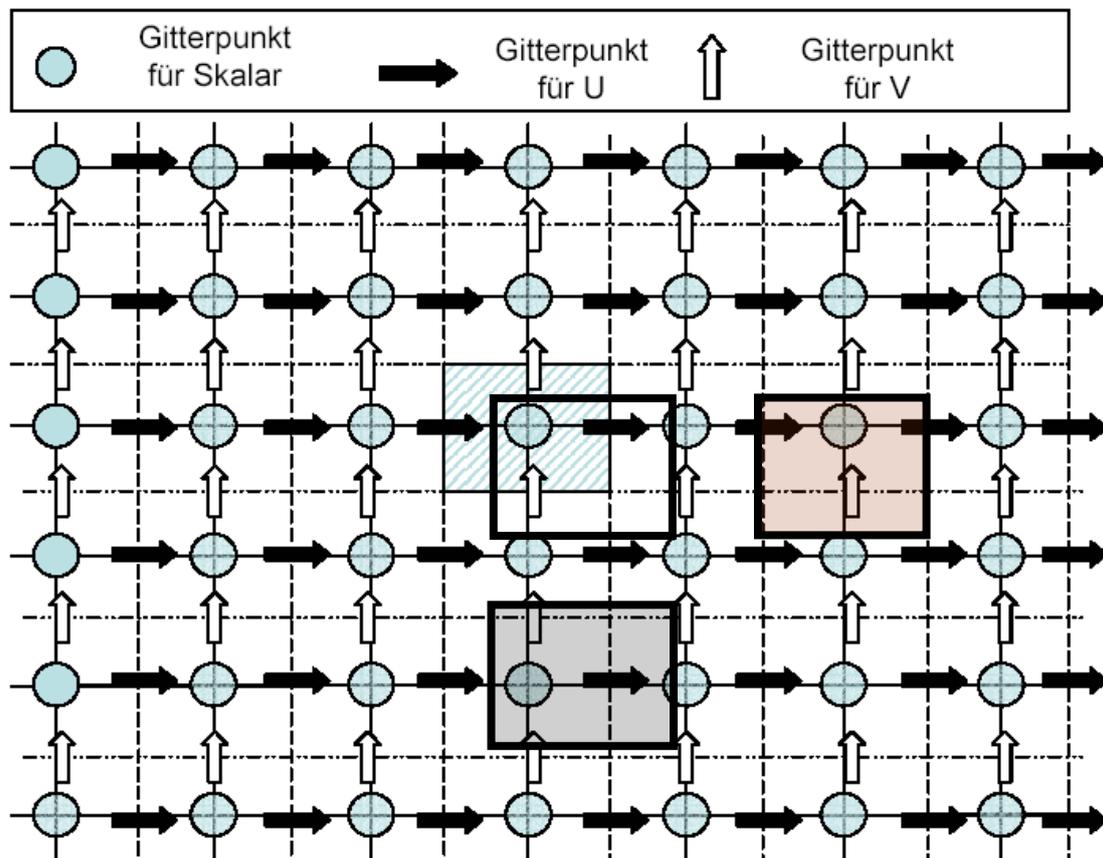


Abbildung 29: Gestaffeltes Gitter für die einfache Kopplung von Druck und Impuls

In dem so genannten staggered grid (gestaffeltes Gitter) sind die Druckterme der Impulserhaltungsgleichungen im Rahmen einer Approximation 2. Ordnung ohne Interpolation

verfügbar. Jede Geschwindigkeitskomponente kann mit den Druckwerten in den benachbarten KV-Zentren gekoppelt werden.

Die Massenflüsse in der Kontinuitätsgleichung können direkt berechnet werden, da die Geschwindigkeiten genau an den Oberflächen der KV für skalare Größen vorhanden sind. Die Kontinuitätsgleichung wird auf einem Satz von von KV, nämlich dem für die skalaren Größen, überprüft und erfüllt. Für die KV der Geschwindigkeitskomponenten müssen die Massenflüsse interpoliert werden. Dabei müssen auch die interpolierten Massenflüsse auf diesen KV die Kontinuitätsgleichung erfüllen:

$$(\dot{m}_e)_u = 0,5 \cdot (\dot{m}_p + \dot{m}_E) \quad (\dot{m}_n)_u = 0,5 \cdot (\dot{m}_{ne} + \dot{m}_{nw}) \quad \text{Gl. 142}$$

In diesem Fall stellt die Kontinuitätsgleichung für ein u_i –Kontrollvolumen die Summe der Kontinuitätsgleichungen für zwei skalare KV dar und ist damit ebenso erfüllt, wenn die Massenflüsse \dot{m}_k die Kontinuitätsgleichungen erfüllen. Eine analoge Interpolation folgt für die Bestimmung der Massenflüsse für die KVs der beiden anderen Geschwindigkeitskomponenten.

5.1 SIMPLE Algorithmus (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations)

Die diskretisierten Impulserhaltungsgleichungen ergeben nun, wenn die (noch nicht richtigen) Drücke p^* aus der vorhergehenden Iteration eingesetzt werden, die Geschwindigkeitskomponenten u_i^* . Aufgrund der Gleichung 138 kann man schreiben:

$$u_{i,P}^* = \frac{\sum_k a_{NB} u_{i,NB}^*}{a_p} + \frac{\Delta V \cdot S_i^*}{a_p} - \frac{\Delta V}{a_p} \left(\frac{\partial p^*}{\partial x_i} \right)_P \quad \text{Gl. 143}$$

Die nach der Lösung der Gleichungen vorhandenen Geschwindigkeiten u_i^* erfüllen nun die diskretisierten Erhaltungsgleichungen für den Impuls. Sie erfüllen jedoch nicht die diskretisierte Kontinuitätsgleichung:

$$\sum_k \dot{m}_k^* \neq 0 \quad \text{sondern} \quad \sum_k \dot{m}_k^* = S_m \quad \text{Gl. 144}$$

Im SIMPLE-Verfahren werden nun die korrigierten Geschwindigkeiten u_i^{**} gesucht, die die diskretisierte Kontinuitätsgleichung erfüllen. Die Korrektur wird durch die Anpassung des Druckfeldes erzeugt. Die korrigierten Geschwindigkeiten sollen also folgende Impulserhaltungsgleichungen erfüllen:

$$u_{i,P}^{**} = \frac{\sum_k a_{NB} u_{i,NB}^*}{a_p} + \frac{\Delta V \cdot S_i^*}{a_p} - \frac{\Delta V}{a_p} \left(\frac{\partial p^{**}}{\partial x_i} \right)_P \quad \text{Gl. 145}$$

Wobei $\sum_k \dot{m}_k^{**} = 0$ die Kontinuitätsgleichung mit den neuen korrigierten Geschwindigkeiten erfüllt ist.

Durch die Subtraktion von Gl. 143 von Gl. 145 ergeben sich folgende Beziehungen zwischen den Geschwindigkeitskorrekturen $u'_{i,P}$ und den Druckkorrekturen p' :

$$u'_{i,P} = -\frac{\Delta V}{a_P} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)_P \quad \text{Gl. 146}$$

Dabei gilt folgender Zusammenhang zwischen den korrigierten Geschwindigkeiten u_i^{**} bzw. dem korrigierten Druck p^{**} und den Geschwindigkeitskorrekturen $u'_{i,P}$ bzw. den Druckkorrekturen p' :

$$u_i^{**} = u_i^* + u'_i \quad \text{und} \quad p_i^{**} = p_i^* + p' \quad \text{Gl. 147}$$

Damit ergibt sich für die Geschwindigkeitskorrekturen u'_i eingesetzt in die Kontinuitätsgleichung, dass diese die Massendivergenzen in den KV auflösen:

$$\sum_k \dot{m}'_k + S_m = 0 \quad \text{Gl. 148}$$

Wenn die Ergebnisse aus Gleichung 147 in die Massenflusskorrekturen eingesetzt werden, ergeben sich eine diskretisierte Druckkorrekturgleichung:

$$a_P^p p'_P = \sum_k a_{NB}^p p'_{NB} - S_m \quad \text{Gl. 149}$$

(Der hochgestellte Index p bedeutet darin, dass sich der Einflusskoeffizient auf den Druck bezieht)

Welche Nachbar-KV in der obigen Gleichung auftreten, hängt von der Approximation des Druckterms in den Impulserhaltungsgleichungen und vom Gittertyp ab. In einem zweidimensionalen kartesischen Gitter und einer Approximation der Druckterme mit dem Zentral Differenzen Schema (CDS) ergeben sich folgende Einflussterte (Koeffizienten):

$$\begin{aligned} a_E^p &= \left[\frac{\rho \cdot (\Delta y)^2}{a_P^u} \right]_e & a_W^p &= \left[\frac{\rho \cdot (\Delta y)^2}{a_P^u} \right]_w \\ a_N^p &= \left[\frac{\rho \cdot (\Delta x)^2}{a_P^v} \right]_n & a_S^p &= \left[\frac{\rho \cdot (\Delta x)^2}{a_P^v} \right]_s \end{aligned} \quad \text{Gl. 150}$$

und $a_P^p = -\sum_k a_{NB}^p$

(Die hochgestellten Indizes u und v bedeuten darin, dass sich die Einflussterte auf die Geschwindigkeitskomponenten u bzw. v beziehen).

a_P^u bzw. a_P^v sind die Polkoeffizienten in den entsprechenden Impulserhaltungsgleichungen. Die Indizes e, w, n und s beziehen sich auf die Oberflächen des Skalar-KV.

Nach der Lösung der Druckkorrekturgleichung, können die Geschwindigkeiten bzw. die Massenflüsse korrigiert werden. Der Druck wird ebenfalls korrigiert, jedoch nicht mit dem vollen Korrekturwert p' , sondern nur mit einem unterrelaxierten Wert $\alpha_p p'$ mit $\alpha_p < 1$.

Die Unterrelaxation der Druckkorrektur ist notwendig, da in der Herleitung der Druckkorrekturgleichung einige Vereinfachungen vorgenommen worden sind. Es wurden z.B. in Gl. 145 statt der (richtigen) Geschwindigkeiten $u_{i,NB}^{**}$, die in der Iteration vorhandenen Geschwindigkeiten $u_{i,NB}^*$ verwendet. Noch dazu werden die Koeffizienten nicht für jede Iteration neu berechnet. Da diese selbst wieder von den Geschwindigkeiten und der turbulenten Diffusion abhängen, kann die Korrektur in den Iterationen nur mit

Unterrelaxation erfolgen. Dies fördert auch ein stabiles Iterationsverhalten. Eine nahezu optimale Konvergenz wird erreicht, wenn $\alpha_p = 1 - \alpha_u$ gesetzt wird. Darin ist α_u der Unterrelaxationsparameter für die Impulserhaltungsgleichungen.

Anmerkung: Relaxation der Lösungen

Wie oben erwähnt kann es bei numerischen Lösungen zu keiner konvergenten Lösung kommen. Es sind daher Relaxationen notwendig. Unterschieden werden Über- und Unterrelaxation, wobei bei Unterrelaxationen eine Dämpfung der Lösung erfolgt (d.h. die neue Lösung wird nur in abgeschwächter Form verwendet) oder eine Überrelaxation (d.h. das Ergebnis der neuen Iteration wird verstärkt).

Iteration i:

$$a_p T_p = \sum a_{nb} T_{nb} + b \quad \text{Gl. 151}$$

$$\rightarrow T_p = \frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{a_p}$$

bezeichnet man T_p^* als Wert der „alten“ Iteration und führt folgende Umwandlung durch:

$$T_p = T_p^* + \left(\frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{a_p} - T_p^* \right) \quad \text{Gl. 152}$$

so bleibt die Gleichung formal gleich. Durch Einführung eines Relaxationsfaktors (α) erhält man:

$$T_p = T_p^* + \alpha \left(\frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{a_p} - T_p^* \right) \quad \text{Gl. 153}$$

$\alpha = 0 \dots 1 \rightarrow$ Unterrelaxation

$\alpha > 1 \dots$ Überrelaxierung

Damit erreicht man, dass das Ergebnis der neuen Iteration nur gedämpft ($\alpha < 1$) in die Berechnung eingeht und somit leichter ein konvergentes Ergebnis erzielt werden kann.

5.2 Lösungsweg der Impulsgleichungen

Für den SIMPLE Algorithmus werden folgende Schritte nacheinander durchlaufen:

Schätzen eines Druckfeldes (meist wird das Druckfeld aus der letzten Iteration bzw. aus dem letzten Zeitschritt genommen)

Lösung der Impulserhaltungsgleichungen; Ergebnis: u^* , v^* , w^*

Druckkorrektur p' berechnen

Korrigierten Druck berechnen aus $p = p^* + p'$

Berechnung der korrigierten Geschwindigkeiten: z.B.: $u = u^* + a_E (p_p' - p_E')$

Lösen der Gleichungen für die restlichen skalaren Größen wie Temperatur T , turbulente kinetische Energie k , Dissipation ε etc.

Der neu berechnete, korrigierte Wert von p ist für die nächste Iteration: p^*

Die Schritte (1) bis (7) werden iterativ so oft durchlaufen, bis eine Konvergenz erreicht ist.

Zu Punkt (6): Wenn eine skalare Größe ϕ das Strömungsfeld nicht beeinflusst, ist es besser diese erst nach der Berechnung des konvergenten Strömungsfeldes zu berechnen (z.B. Konzentrationen). Man nennt solche skalare, „nur“ mittransportierte Größen auch „passive Skalare“.

In einem Lösungsverfahren für elliptische Strömungsprobleme wird grundsätzlich zwischen den inneren und den äußeren Iterationen unterschieden. Die inneren Iterationen bezeichnen die wiederholte Ausführung eines Lösungsalgorithmus für das lineare Gleichungssystem für eine Variable ϕ . Während dieser Wiederholungen bleiben die Koeffizientenmatrix und die Quellterme konstant. Es ändern sich nur die Werte der Variablen ϕ .

Die äußeren Iterationen bezeichnen die Wiederholung des Zyklus, in dem die Gleichungssysteme für die einzelnen Variablen gelöst werden und auch die Koeffizienten und die Quellterme neu berechnet werden. Diese äußeren Iterationen sind immer dann notwendig, wenn mehrere gekoppelte oder nicht-lineare Gleichungen gelöst werden. (Z.B. die Navier-Stokes Gleichungen). Die Lösung der einzelnen Erhaltungsgleichungen wird auch als sukzessive Lösung (sequential solver) bezeichnet. Durch die Zunahme an Rechnerkapazität und für stark gekoppelte Probleme werden heute auch bereits gekoppelte Lösungsalgorithmen verwendet. Diese lösen alle Variablen gleichzeitig in einem sehr viel größeren Gleichungssystem.

Literatur

- [1] Eichlseder, H.: Thermodynamik. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz, 2009
- [2] Suhas V. Patankar: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow; McGraw Hill

Prüfungsfragen

Gleichungen

1. Schreiben Sie die einzelnen Terme der Erhaltungsgleichung für die spezifische Erhaltungsgröße ϕ und erklären Sie deren Bedeutung.
2. Wie lautet die instationäre Wärmeleitungsgleichung im 3 dimensionalen Fall? Erklären Sie die Terme.
3. Wie verändert sich die Erhaltungsgleichung für den Impuls durch die Reynoldsmittelung (Zeitmittelung)?
4. Woher kommen die Terme des Reynold'schen Spannungstensors und was bedeuten sie?

5. Was ergibt sich für das Produkt zweier zeitlich schwankender Größen nach der Zeitmittelung.
6. Wie verändert sich eine Erhaltungsgleichung für die spezifische Erhaltungsgröße ϕ durch die Zeitmittelung?
7. Leiten Sie die eindimensionale Energieerhaltungsgleichung her!
8. Wie kann die Turbulenz einer Strömung berücksichtigt werden? Schließung des Gleichungssystems; Turbulenzmodelle
9. Turbulenzmodelle; Prandtl'scher Mischungsweg-Ansatz; Schließung des Gleichungssystems; Schließung 1. Ordnung; Beschreibung eines bekannten Turbulenzmodells
10. Definition der turbulenten kinetischen Energie
11. Was ist ein Newton'sches Fluid?
12. Wie lautet das Stokes'sche Gesetz für Newton'sche Fluide. Zeichnen und erklären Sie die Schub- und Normalspannungen im zweidimensionalen Fall

Diskretisierung

13. Erklären Sie die 4 Grundregeln für die numerische Umsetzung von Erhaltungsgleichungen
14. Wie lautet die allgemeine Diskretisierungsgleichung für eine Erhaltungsgleichung?
15. Wie können die Terme einer allgemeinen Erhaltungsgleichung auf einem kartesischen Gitter diskretisiert werden (Skizze und Gleichungen)? Welcher Ordnung genau sind die von Ihnen dargestellten Diskretisierungsschemata?
16. Wie kann die Kontinuitätsgleichung an einem 2 dimensional kartesischen Gitter berechnet werden.
17. Welche Diskretisierungsgleichungen ergeben sich für den Konvektions- und den Diffusionsterm beim CDS?
18. Erklären Sie das Hybridschema: Was kann man damit berechnen, Gleichungen, Vorteile, Nachteile ?
19. Bei der Diskretisierung der Differentialgleichungen sind partielle Ableitungen nach der Zeit darzustellen. Welche Vorgangsweisen sind möglich?
20. Aus welchen Termen bestehen die Einflusskoeffizienten eines 2nd order upwind Schemas für ein kartesisches Gitter (Skizze, Gleichung)
21. Aus welchen Termen bestehen die Einflusskoeffizienten für die instationäre 3d-Wärmeleitungsgleichung (Zentraldifferenzenschema) in einem kartesischen Gitter mit Quelltermen
22. Geben Sie die Quellterm-Linearisierung für folgenden Quellterm an: $S(T) = 15 - 4 \cdot T^3$
23. Welche Möglichkeiten zur Vorgabe von Randbedingungen gibt es?
24. Bei der Diskretisierung des Konvektionsterms wird von einer Reihenentwicklung ausgegangen! Was bedeutet ein Konvektionsschema, das zweiter Ordnung genau ist?
25. Welche Konvektionsschemata 2. Ordnung kennen Sie?
26. Nach welchen Kriterien können Konvektionsschemata beurteilt werden?

27. Wie können diese Kriterien bei einem Konvektionsschema 2. Ordnung eingehalten werden?
28. Erklären Sie den Unterschied zwischen explizitem und implizitem Zeitintegrationsschema. Wie groß darf ein expliziter Zeitschritt für den Konvektionsterm maximal sein?
29. Bei der Diskretisierung der Differentialgleichungen sind partielle Ableitungen erster und zweiter Ordnung im Gitter darzustellen. Zeichnen Sie in je eine Skizze für ein kartesisches 2-dimensionales Gitter die Transportgrößen für die Terme
30. $\frac{\partial \rho u \phi}{\partial x} + \frac{\partial \rho v \phi}{\partial y}$ und $\frac{\partial \mu_{\text{eff}} \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial \mu_{\text{eff}} \phi}{\partial y^2}$ ein.
31. Welche Methoden zur Verminderung der numerischen Diffusion kennen Sie?
32. Welche 5 Eigenschaften muss ein Diskretisierungsschema für den Konvektionsterm besitzen?

Druckkorrektur & Lösung der RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes Gleichungen)

33. Wie funktioniert die Druckkorrekturgleichung in einem staggered grid ?
34. Wie erfolgt die Berechnung der Divergenz in einer Zelle in einem kartesischen Gitter mit den Koordinatenrichtungen x, y bzw. den dazugehörigen Geschwindigkeiten u, v. Wie kann diese mit Hilfe des Drucks korrigiert werden?
35. Erklären Sie den SIMPLE Lösungsalgorithmus
36. Eine wichtige Eigenschaft des Strömungsfeldes ist die Erfüllung der Kontinuitätsgleichung. Mit welcher Gleichung erfolgt die Korrektur des Strömungsfeldes, wenn es die Kontinuitätsgleichung nicht erfüllt, bei druckkorrigierten Verfahren? (Kontinuitätsgleichung, Gleichung für die Druckkorrektur, prinzipielle Darstellung an einem 2d kartesischen Gitter mit staggered grid)