

Diszkretizáció véges térfogatok módszerével

Kristóf Gergely
2017.9.11.

A Navier-Stokes egyenlet diszkretizálása

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0$$

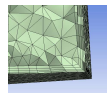
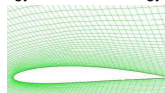
$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial \rho uw}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho vu}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial \rho vw}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_y + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho wu}{\partial x} + \frac{\partial \rho wv}{\partial y} + \frac{\partial \rho w^2}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

Diszkretizálhatnánk ezeket véges differencia sémákkal egy egyenközü kocka rácson, azonban ...

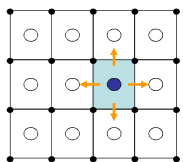
a gazdaságos számítás érdekében a háló igazodjon a megoldáshoz...



görbe vonalú, nem egyenközü, hálón vagy struktúrátlan, hibrid hálókön.

Az általános megmaradási tétel

Mezőváltozók értékei



U: valamilyen megmaradó mennyiség térfogati sűrűsége

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V U dV + \oint_A \vec{f} \cdot d\vec{A} = \int_V S_V dV + \oint_A \vec{S}_A \cdot d\vec{A}$$

A megmaradó mennyiség egységnyi tömegről vonatkoztatva:

$$\Phi = U / \rho$$

Konvektív és konduktív fluxusok:

$$\vec{f}_C = \rho \Phi \mathbf{v} \quad \vec{f}_D = -\Gamma \nabla \Phi$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Phi dV + \oint_A \rho \Phi \mathbf{v} \cdot d\vec{A} = \oint_A (\Gamma \nabla \Phi + \vec{S}_A) \cdot d\vec{A} + \int_V S_V dV$$

A fluxusok a számítás során tényleges számértéket kapnak.
Konzervatív tulajdonság: a numerikus közelítés hibái a megmaradási tételeket nem rontják el. (Pl. a teljes tartományra pontosan teljesül a tömeg és az energia megmaradása.)

Felületi és térfogati integrálok közelítése

Felületi integrálok

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Phi dV + \oint_A \rho \Phi \mathbf{v} \cdot d\vec{A} = \oint_A (\Gamma \nabla \Phi + \vec{S}_A) \cdot d\vec{A} + \int_V S_v dV$$

Térfogati integrálok

$$F_e = \int_A \vec{f} \cdot d\vec{A} = \langle f_{\perp} \rangle_e A_e \cong \frac{1}{2} (\vec{f}_P + \vec{f}_E)_{\perp} A_e$$

másodrendű (CDS séma)

Alternatív felületi integrálási módszerek:

$$F_e \cong A_e \frac{1}{2} (\vec{f}_{ne} + \vec{f}_{se})_{\perp}$$

másodrendű (trapéz szabály)

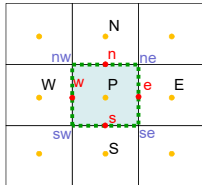
$$F_e \cong \frac{A_e}{6} (\vec{f}_{ne} + 4\vec{f}_e + \vec{f}_{se})_{\perp}$$

negyedrendű (Simpson-szabály)

$$Q_P \cong \int_V q_{\phi} dV \cong q_{\phi,P} V_P$$

másodrendű

Az interpolációt legalább olyan pontosnak kell végezni, mint az integrálást.

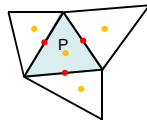


Térbeli deriváltak közelítés véges térfogatok módszerével

Az általános transzportegyenlet differenciál alakja:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \vec{v}) = \nabla \cdot \vec{S}_A + \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_v$$

A hely szerinti differenciálást mindig **div(...)**, **grad(...)**, vagy **div(grad(...))** alakban kell elvégezni, csak ezekre kell tehát közelítő sémákat találni. Véges térfogatok módszere esetében a fenti operátorokat felületi és térfogati integrálokra valamint a hálón végzett interpolációkra vezetjük vissza.



Adottak a felületvektorok $d\vec{A}$ koordinátái.

- Cella középpontokban tároljuk a mezőváltozókat.
- Felület középpontokra bármit interpolálhatunk a középpontokból

A divergencia közelítő alakja

Véges térfogatos módszere esetében a divergencia operátort felületi integrálásra visszavezetve közelítjük, ezért a Gauss-tételből kell kiindulni:

$$\int_V \nabla \cdot \vec{u} dV = \oint_A \vec{u} \cdot d\vec{A}$$

Diszkrét közelítés elvégzéséhez \vec{u} vektor a cella felületére **Interpolálnunk kell**. Jelöljük ezt „i” indexszel!

A felületre interpolált \vec{u} vektor Descartes koordinátáit $u_{i,j}$ -vel jelölve az alábbi módon definiálhatjuk a divergencia operátor diszkrét alakját egy P középpontú, k oldalú cellára:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}_i = \frac{\sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^3 u_{i,j} dA_{l,j}}{V_P}$$

Ez az operátor tehát egy tárolt értékekből álló algebrai kifejezést jelöl.

A gradiens közelítő alakja

Egy skaláris mennyiség gradiensét a Gauss-tételből levezetett alábbi integrál átalakító tételből határozhatjuk meg:

$$\int_V \nabla \phi \, dV = \oint_A \phi \cdot d\vec{A}$$

A gradiens operátor i komponensét tehát az alábbi alakban számolhatjuk:

$$\nabla_i \phi = \frac{\sum_{\ell} \phi_{\ell} dA_{\ell,i}}{V_P}$$

$A_{i,j}$ a felületvektor i komponensét jelöli Descartes koordináta-rendszerben.

A Laplace-operátor közelítő alakja

Egy skaláris mennyiségre vonatkozó Laplace operátor felírható a gradiens divergenciájaként:

$$\Delta \phi = \nabla \cdot \nabla \phi$$

Ugyanez elvégezhető a diszkrét operátorokkal:

$$\tilde{\Delta} \phi = \nabla \cdot (\nabla_i \phi)$$

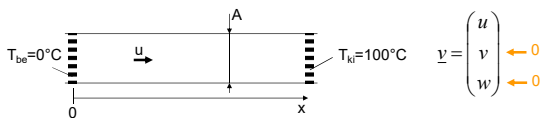
Gyakorlatilag a nyomás kivételével (pl. hőmérséklet vagy transzportált passzív skalárok esetében) a gradiens felületre merőleges komponensét egyszerűbben is közelíthetjük a két szomszédos cellában tárolt ϕ értékek alapján. Ilyen esetben a Laplace operátor közelítő alakja a P pontban és a szomszédos cellákban tárolt Φ értékek lineáris kombinációja lesz:

$$\tilde{\Delta} \phi = a_P \phi_P + \sum a_{\ell} \phi_{\ell}$$

Az „a” skalár együtthatók csak a háló méreteitől függenek.

1D példa

Stacionárius áramlás egyenes csőben, állandó ρ sűrűség mellett:



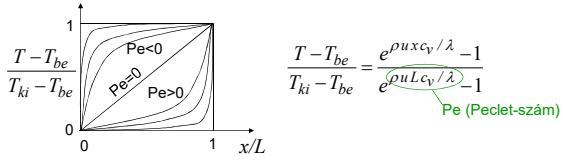
Kontinuitás: $\oint_A \rho \underline{v} \cdot d\vec{A} = 0 \implies \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \xrightarrow{\rho=\text{áll.}} u = \text{állandó}$

Energiaegyenlet: $\oint_A [c_p T + \frac{u^2}{2}] \rho \underline{v} \cdot d\vec{A} = \oint_A \lambda \nabla T \cdot d\vec{A}$

Egy cellára felírva:
pl. pozitív irányú fluxus feltételezésével



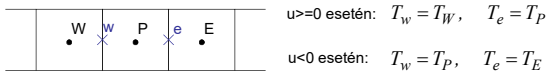
Az analitikus megoldás



Példaprogram

- Hasonló megoldást kapunk több, különböző paraméter változatra. $Pe = \frac{\rho u L}{\lambda / c_v}$
- Hiba N^2 -el arányosan csökken. Másodrendű pontosság. $Re = \frac{\rho u L}{\mu}$
- Néha oszcillál. Mikor kezd oszcillálni? $Pe_{\Delta x} = \frac{\rho u \Delta x}{\lambda / c_v} > 2$

UDS séma



$$A_W T_W + A_E T_E = A_P T_P$$

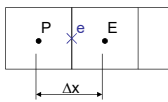
A_W	A_E	A_P
$Max(C_w, 0) + D_w$	$Max(-C_e, 0) + D_e$	$A_W + A_E$

További numerikus kísérletek...

A pontosság elsőrendűre csökken.

Mesterséges „diffúzió” (1)

A numerikus hibának egy fontos fajtája. A pontatlan interpolációból adódott:



$$T_e = T_P + \frac{\Delta x}{2} \frac{dT}{dx} + o(\Delta x)$$

ezt elhagyjuk

$$F_e = C_e T_P + C_e \frac{\Delta x}{2} \frac{dT}{dx} - D_e (T_E - T_P)$$

Olyan mintha megnöveltük volna a hővezetést!
Írjuk be T deriváltjának diszkrét közelítését:

$$F_e = C_e T_P + \frac{C_e}{2} (T_E - T_P) - D_e (T_E - T_P)$$

$$D_e = \frac{\lambda}{c_v \Delta x} \rightarrow \frac{\lambda_{mest}}{c_v \Delta x} = \frac{\rho u}{2} \rightarrow \lambda_{mest} = \frac{\rho u c_v \Delta x}{2}$$

Transzportivitás

Fizikai szempontból:
növekvő Pe esetén egyre T_E hatása egyre kevésbé érvényesül T_P-re.

Tudja ezt a numerikus séma?

$$A_E = D_e - C_e / 2$$

$$C_e = \rho u \quad D_e = \frac{\lambda}{c_v \Delta x} \quad Pe = \frac{\rho u L}{\lambda / c_v}$$

$$A_E = \frac{D_e}{2} \left(2 - \frac{C_e}{D_e} \right) = \frac{D_e}{2} \left(2 - \frac{\rho u \Delta x}{\lambda / c_v} \right) = \frac{D_e}{2} (2 - Pe_{\Delta x})$$

Cella Peclet-szám: a konvektív és konduktív hőfluxusok hányadosa.
Pe_{Δx} > 2 esetén A_E nagysága újra nőni kezd.
A stabilitási probléma is ilyen esetekben lép fel.

HDS séma Spalding (1972)

Az a fontos, hogy az „A” együtthatók ne legyenek negatívak.
Pe_{Δx} értéke alapján számoljuk a felületi fluxust:

$$Pe_{\Delta x} \leq -2 \quad F_e = C_e T_E$$

$$-2 < Pe_{\Delta x} \leq 2 \quad F_e = C_e \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{2}{Pe_{\Delta x}} \right) T_P + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{Pe_{\Delta x}} \right) T_E \right]$$

$$2 < Pe_{\Delta x} \quad F_e = C_e T_P \quad \text{Legalább kis } Pe_{\Delta x} \text{ esetén másodrendű.}$$

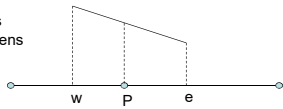
$$A_W T_W + A_E T_E = A_P T_P$$

A_W	A_E	A_P
$Max \left(C_w, \left[D_w + \frac{C_w}{2} \right], 0 \right)$	$Max \left(-C_e, \left[D_e - \frac{C_e}{2} \right], 0 \right)$	$A_W + A_E$

SOU séma

másodrendű szélfelőli súlyozás

Cellán belül lineáris interpoláció a gradiens segítségével:



Pl. a cellafali hőmérséklet: $T_e = T_p + \left. \frac{dT}{dx} \right|_p \frac{\Delta x}{2}$

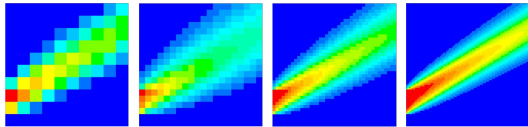
A gradiens meghatározása két lépésben:

1. lépés $\left. \frac{dT}{dx} \right|_p = \frac{T_e - T_w'}{\Delta x}$ $T_e' = \frac{T_p + T_E}{2}$, $T_w' = \frac{T_W + T_P}{2}$

2. lépés $\left. \frac{dT}{dx} \right|_p$ értékét úgy korlátozzuk, hogy ne vezethessen be extrémumokat. Gradiens limiterek: C Hirsch.

Oldalirányú mesterséges diffúzió 2D áramlás esetén

First Order Upwinding (UDS) alkalmazásával:



Second Order Upwinding (SOU) alkalmazásával:

