

DIPLOMARBEIT

Numerische Simulation von Strömungen in
zeitabhängigen Gebieten und Anwendung auf Fluid-
Struktur-Wechselwirkungsprobleme

Angefertigt am
Institut für Angewandte Mathematik

Vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

April 2002

Von
Martin Engel
aus
Brühl

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Das mathematische Modell	11
2.1	Gekoppelte Probleme und Lösungsansätze	11
2.2	Erhaltungssätze der Kontinuumsmechanik	14
2.3	Das strömungsmechanische Teilproblem	19
2.4	Das strukturmechanische Teilproblem	20
2.5	Das Interface	26
2.6	Das Gesamtmodell	27
3	Strömungen in zeitabhängigen Geometrien	29
3.1	Euler-Methoden	29
3.2	Lagrange-Methoden	32
3.3	Die Arbitrary-Lagrange-Euler-Methode	33
3.4	Geometrische Erhaltungssätze	37
4	Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen auf zeitabhängigen Gebieten	41
4.1	Ortsdiskretisierung mittels der Finite-Volumen-Methode	42
4.1.1	Koordinatentransformation	42
4.1.2	Geometrische Größen	44
4.1.3	Interpolationsregeln	46
4.1.4	Transformation der Ortsableitungen	48
4.1.5	Die Kontinuitätsgleichung	49
4.1.6	Die Impulsgleichung I	49
4.1.7	Abschluss der Ortsdiskretisierung	53
4.2	Die Zeitbehandlung	54
4.2.1	Zeitabhängige Koordinatentransformation	54
4.2.2	Die Impulsgleichung II	56
4.2.3	Diskretisierung der geometrischen Erhaltungssätze	56
4.2.4	Die Projektionsmethode	59

4.3	Bemerkungen zur Implementierung	61
4.4	Numerische Ergebnisse	64
4.4.1	Gitterbewegung im Gebietsinneren	64
4.4.2	Kanal mit zeitabhängiger Verengung	68
5	Die Numerische Behandlung gekoppelter Probleme	77
5.1	Die numerische Behandlung des strukturmechanischen Problems	77
5.2	Der Algorithmus und Bemerkungen zur Implementierung	79
5.3	Bemerkungen zur Stabilität	80
5.4	Numerische Ergebnisse	84
5.4.1	Simulation mit dominierender externer Kraft	84
5.4.2	Simulation ohne externe Kraft	89
6	Zusammenfassung und Ausblick	93
A		95
A.1	Zusammenhang zwischen Basic Identity und Volume Conservation Law	95

Kapitel 1

Einleitung

Viele physikalische Vorgänge lassen sich mit Hilfe von Systemen partieller Differentialgleichungen als mathematisches Problem formulieren. Die explizite Angabe einer Lösungsfunktion ist dabei auf Grund der Komplexität der betrachteten Systeme nur für einige wenige Spezialfälle möglich. Die experimentelle Untersuchung der Problemstellung ist jedoch auch nicht immer praktikabel, denn physikalische Versuchsaufbauten sind teuer und aufwendig, in vielen Fällen, beispielsweise auf Grund der Größenordnungen der betrachteten Probleme, gar nicht durchführbar. Die numerische Simulation bedient sich nun des Computers als Hilfsmittel, um eine Näherungslösung für das betrachtete Problem zu ermitteln. Dazu müssen die Differentialgleichungen mit beispielsweise Finite-Differenzen-Verfahren diskretisiert werden. Im Zuge solcher Diskretisierungen entstehen große lineare Gleichungssysteme, deren schnelle Lösung eine zentrale Fragestellung des wissenschaftlichen Rechnens ist.

Sowohl die stetig vorangetriebene Entwicklung leistungsfähigerer Hardware als auch die Entwicklung effizienter numerischer Techniken zur Lösung von großen linearen Gleichungssystemen, wie z.B. Mehrgitterverfahren, ermöglichen nun nicht nur eine genauere Diskretisierung, sondern sie erlauben auch die Betrachtung komplexerer Probleme, bei denen das Zusammenspiel mehrerer physikalischer Effekte analysiert werden soll. Dabei handelt es sich um gekoppelte Probleme, das heißt, die Problemstellung läßt sich nicht durch Eliminieren der einem Teilaspekt entsprechenden Variable vereinfachen.

Ein Bereich aus dem Gebiet gekoppelter Probleme mit einem breitem Anwendungsfeld besteht in der Untersuchung von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen, d.h. man ist interessiert an Aussagen darüber, inwiefern ein strömendes Fluid elastische Materialien verformt und wie sich diese Verformung wiederum auf die Strömung auswirkt. Diese Fragestellung tritt beispielsweise auf bei der Untersuchung von Druckstößen in Rohrleitungen durch schnelles Öffnen oder Schließen von Ventilen, bei der Umströmung von Objekten wie Tragflächen oder Bauwerken, bei der Durchströmung poröser Medien oder auch in der Biomedizin bei der Analyse von fluiddynamischen Effekten in elastischen Blutgefäßen. Numerische und theoretische Untersuchungen von Fluid-Struktur-

Wechselwirkungsproblemen mit unterschiedlichen Anwendungen finden sich beispielsweise in [Tij96, CO92, QTV00, AHW92].

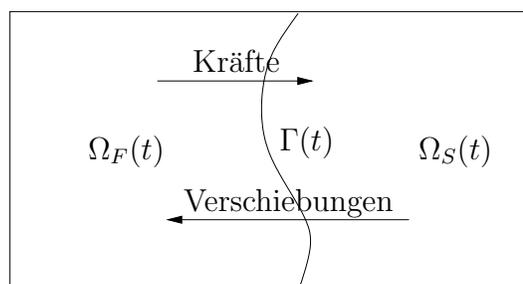


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung eines Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblems

Abbildung 1.1 zeigt den allgemeinen Aufbau eines Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblems, der auf die meisten der oben angeführten Beispiele zutrifft. Die interagierenden Komponenten des gekoppelten Systems sind auf disjunkten Teilgebieten gegeben. Die Strömung wird auf dem Gebiet $\Omega_F(t)$ mit Hilfe eines Systems nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, den Navier-Stokes-Gleichungen, beschrieben. Zur Modellierung des elastischen Festkörpers, der das Gebiet $\Omega_S(t)$ einnimmt, verwenden wir die Lamé-Gleichungen. Der gemeinsame Rand beider Gebiete bildet das bewegliche Interface $\Gamma(t)$, an dem die gegenseitige Beeinflussung stattfindet.

Ein weit verbreiteter Ansatz zur Lösung von gekoppelten Problemen besteht in der partitionierten Lösung, die hauptsächlich auf Arbeiten von Park und Felippa (siehe etwa [FP80]) zurückzuführen ist. Das wesentliche Merkmal ist ein modularer Aufbau des Lösungsverfahrens, der die auf natürliche Art und Weise gegebene Gebietszerlegung des Problems ausnutzt und die Lösung der Teilprobleme im Sinne von Black-Box-Verfahren in den Algorithmus integriert. Die Lösung eines Teilproblems geht dabei als Parameter, im Allgemeinen in Form von speziellen Randbedingungen, in das jeweils andere Teilproblem ein. Die Vorteile eines solchen Ansatzes liegen in der algorithmischen Einfachheit und in der Flexibilität, speziell an das Teilproblem angepasste Diskretisierungen verwenden zu können. Aus diesen Gründen soll auch in der vorliegenden Arbeit ein modularer Aufbau des Lösungsverfahrens zum Einsatz kommen.

In vielen Arbeiten zu Fluid-Struktur-Wechselwirkungen wird das komplexe gekoppelte System durch vereinfachende Annahmen in eine Form gebracht, die eine einfachere numerische Behandlung erlaubt. Beispielsweise werden häufig Symmetrien ausgenutzt, um eine Reduktion der zu behandelnden Dimensionen herbeizuführen, so wird in [QTV00] das ursprünglich dreidimensionale strukturmechanische Teilproblem durch ein eindimensionales sogenanntes verallgemeinertes Stab-Modell ersetzt. Zur Vereinfachung des Strömungsproblems werden statt der nichtlinearen Navier-Stokes-Gleichungen

gen Stokes-Probleme oder Potentialströmungen betrachtet (vgl. [CO92]).

Für bestimmte Problemstellungen, insbesondere wenn man an der konkreten Beobachtung lokaler Effekte interessiert ist, können die Lösungen solcher vereinfachter Modelle aber nur bedingt praxisrelevante Aussagen liefern.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Implementierung eines Verfahrens zur Analyse von vollständig dreidimensionalen, zeitabhängigen Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblemen.

Die numerische Lösung von Strömungsproblemen in zeitabhängigen Geometrien bedarf einer genaueren Betrachtung. Während die Diskretisierung von linearen Elastizitätsproblemen mittels Finite-Elemente-Methoden i.A. auf der Lagrange-Darstellung der zugrundeliegenden Gleichungen beruht und dadurch zeitabhängige Gebiete automatisch in den Lösungsprozess integriert werden, basieren vielfach eingesetzte Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen auf einer Darstellung bezüglich der ortsfesten Euler-Koordinaten, d.h. die Diskretisierung erfolgt auf zeitunabhängigen Gittern. Im Rahmen von Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblemen treten aber in den allermeisten Fällen Deformationen einer nicht vernachlässigbaren Größenordnung auf, beispielsweise ändert sich der Durchmesser von Arterien während eines Herzschlages um bis zu zehn Prozent.

Es gibt eine Reihe von Techniken, die eine Diskretisierung mit ortsfesten Gittern nachträglich um die Behandlung sich verformender Gebiete erweitern, als klassische Verfahren sind hier die Marker-and-Cell-Methode nach Harlow und Welch (vgl. [HW65]) sowie die Volume-of-Fluid-Methode nach Hirt und Nichols (s. [HN81]) zu nennen. Dabei wird durch Einführen von zusätzlichen Datenstrukturen das tatsächlich vom Fluid eingenommene Gebiet gekennzeichnet und die übrigen Zellen des Gitters werden aus dem Lösungsprozess ausgeblendet. Eine Gemeinsamkeit solcher Verfahren ist, dass die genaue Lage des Gebietsrandes, in unserem Fall also die Position des Interfaces, aus den zusätzlichen Datenstrukturen rekonstruiert werden muss. Durch diese Approximation des Randes, die für einfache Varianten der genannten Verfahren nicht einmal stetig sein muss, entstehen Ungenauigkeiten, die die Diskretisierung von Randbedingungen am Interface erschweren.

Lagrange-Verfahren hingegen bieten den Vorteil der genaueren Implementierung von Randbedingungen dadurch, dass das Gitter automatisch dem Verlauf des beweglichen Gebietsrandes angepasst ist, auf Grund starker zu erwartender Verzerrung des Gitters im Gebietsinneren sind sie zur Verwendung im Rahmen von Strömungssimulationen aber eher ungeeignet.

In dieser Arbeit verwenden wir zur Berechnung von Strömungen in zeitabhängigen Gebieten ein Verfahren, das auf der Arbitrary-Lagrange-Euler-Darstellung (ALE, vgl. [DP90]) der Navier-Stokes-Gleichungen basiert. Wir stellen eine Diskretisierung vor, die eine Finite-Volumen-Methode in gekrümmten Koordinaten um die Verwendung zeitabhängiger Gitter erweitert. Die Konservativität des Finite-Volumen-Verfahrens

im zeitabhängigen Fall wird durch die Diskretisierung des Volume Conservation Law gesichert. Um die flexible Behandlung allgemeiner Geometrien zu ermöglichen, werden blockstrukturierte Gitter verwendet.

Die ALE-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen liefert eine im kontinuierlichen Sinne exakte Beschreibung von Strömungen in zeitabhängigen Gebieten. Dies wird erreicht, indem die ursprünglichen Gleichungen auf ein geeignetes zeitunabhängiges Referenzgebiet transformiert werden. Dadurch wird analog zu Lagrange-Verfahren eine gute Randapproximation erreicht. Im Gegensatz zu Lagrange-Darstellungen muss das gewählte Referenzgebiet aber nicht dem Ausgangszustand $\Omega_F(0)$ entsprechen. Dies führt dazu, dass die Bewegung des Gitters im Inneren des Gebietes vom Geschwindigkeitsfeld der Strömung entkoppelt wird. Dadurch können die unerwünschten Verzerrungen des Gitters, die bei Lagrange-Methoden auftreten, vermieden werden, es ist sogar im Gegenteil möglich, die Bewegung des Gitters im Hinblick auf bestimmte Qualitätsmerkmale wie z.B. Glattheit zu kontrollieren.

Die ALE-Form der Navier-Stokes-Gleichungen wird mit einem Finite-Volumen-Verfahren diskretisiert, aus dem sich im Fall zeitlich konstanter Gitter das in [WSKB97] vorgestellte Verfahren ergibt. Als abhängige Variablen werden die kontravarianten Flüsse in Seitenflächenmittelpunkten und der Druck in Zellmittelpunkten verwendet. Falls das der Diskretisierung zugrundeliegende Gitter kartesisch ist, ergibt sich die klassische “staggered-mesh”-Diskretisierung aus [HW65], die angewendet wird, um unphysikalische Oszillationen im Druck zu verhindern. Die Zeitableitung der Transformationsabbildung geht in Form der Gittergeschwindigkeit in den konvektiven Term der Navier-Stokes-Gleichungen ein. Indem wir einem in [DP88] vorgeschlagenen Weg folgen und aus der Diskretisierung des Volume Conservation Law eine Berechnungsvorschrift für die Gittergeschwindigkeit ermitteln, stellen wir implizit die Einhaltung des VCL sicher. Dabei zeigt sich, dass eine aufwendige explizite Berechnung der kartesischen Komponenten der Gittergeschwindigkeit nicht notwendig ist, da sich auf direktem Wege die benötigten gewichteten kontravarianten Komponenten ermitteln lassen.

Zur Entkopplung von Druck und Geschwindigkeiten wird die Projektionsmethode nach Chorin verwendet und an die Behandlung zeitabhängiger Gitter angepasst. Dazu wird zunächst ein expliziter Transportschritt auf dem Gitter zum Zeitpunkt t^n ausgeführt, anschließend wird das intermediäre Geschwindigkeitsfeld durch eine Basistransformation auf das neue Gitter des Zeitpunkts t^{n+1} übertragen, bevor es mit Hilfe der Lösung einer Poisson-Gleichung für den Druck auf ein divergenzfreies Feld projiziert wird.

Das Berechnungsgebiet wird grob in mehrere Blöcke zerlegt. Mit Hilfe der Koordinatentransformation wird anschließend auf jedem der Blöcke ein randangepasstes strukturiertes Gitter erzeugt. Da die Berechnungen auf den einzelnen Blöcken weitestgehend unabhängig voneinander erfolgen können, wird eine insbesondere für die Simulation dreidimensionaler Strömungen wichtige Parallelisierung des Algorithmus

ermöglicht.

Das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren zur Berechnung dreidimensionaler Strömungen in zeitabhängigen Gebieten wird nun als Löser für den fluidodynamischen Teil eines gekoppelten Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblems eingesetzt. Das strukturmechanische Teilproblem wird mit einem Finite-Elemente-Verfahren diskretisiert. Um eine ineffiziente Abwicklung des Datenaustausch über das Dateisystem zu vermeiden, wird der Elastizitätslöser in die Implementierung des Strömungslösers integriert.

Die vorliegende Arbeit ist in der folgenden Art und Weise gegliedert:

Kapitel 2 stellt die Grundlagen zur mathematischen Beschreibung des gekoppelten Problems bereit. Nach einem kurzen Überblick über gekoppelte Probleme und Lösungsansätze leiten wir aus Erhaltungssätzen der Kontinuumsmechanik die partiellen Differentialgleichungen zur Modellierung des strömungsmechanischen sowie des strukturmechanischen Teilproblems her. Die Beschreibung der koppelnden Bedingungen vervollständigt das mathematische Modell.

Kapitel 3 gibt einen Überblick über Methoden zur Berücksichtigung von zeitabhängigen Gebieten bei Strömungsproblemen. Anschließend wird die in dieser Arbeit verwendete Arbitrary-Lagrange-Euler-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen hergeleitet und die Notwendigkeit des Volume Conservation Law wird erläutert.

Kapitel 4 beschreibt die Diskretisierung der ALE-Form der Navier-Stokes-Gleichungen unter Verwendung zeitabhängiger randangepasster Gitter. Der Algorithmus zur Lösung eines Strömungsproblems mit vorgegebener zeitlicher Entwicklung des Randes wird vorgestellt und an numerischen Experimenten getestet.

Kapitel 5 stellt die numerische Behandlung des Elastizitätsproblems vor und erläutert dessen Integration in den Ablauf zur Lösung des gekoppelten Problems. Nach einigen Bemerkungen zur Stabilität dieses Algorithmus geben wir numerische Ergebnisse an, die mit dem implementierten Verfahren erzielt wurden.

Kapitel 6 dient als Zusammenfassung der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse und gibt einen kurzen Ausblick auf mögliche Verbesserungen und Weiterentwicklungen.

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit nutzen, mich bei allen zu bedanken, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben. Insbesondere gilt mein Dank Prof. Dr. M. Griebel für die Überlassung des Themas und die stets motivierende Betreuung, sowie Frank Koster, der mir ebenfalls jederzeit mit Rat und Tat zur Seite stand.

Kapitel 2

Das mathematische Modell

In diesem Kapitel liefern wir zuerst eine allgemeine Klassifizierung gekoppelter Probleme und ordnen die Behandlung von Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblemen in diesen Rahmen ein. Anschließend stellen wir nach einer kurzen Einführung in die Kontinuumsmechanik die partiellen Differentialgleichungen und Randbedingungen vor, die zur Modellierung des vollständigen Wechselwirkungsproblems benötigt werden.

2.1 Gekoppelte Probleme und Lösungsansätze

In [Zie84] wird der Begriff *gekoppeltes Problem* definiert als Bezeichnung für eine mathematische Problemstellung, die auf mehreren Gebieten üblicherweise - aber nicht zwangsläufig - unterschiedliche physikalische Eigenschaften beschreibt und für die desweiteren gilt:

- die Lösung in keinem der Gebiete kann unabhängig von den Lösungen in den übrigen Gebieten ermittelt werden;
- kein Satz von abhängigen Variablen kann aus der Problemformulierung eliminiert werden.

Zur weiteren Untersuchung werden nun zwei Arten von gekoppelten Problemen unterschieden:

Klasse I umfasst Probleme, bei denen sich die Definitionsgebiete der unterschiedlichen miteinander wechselwirkenden physikalischen Effekte ganz oder zumindest teilweise überlappen;

Klasse II beinhaltet die Probleme, bei denen unterschiedliche oder auch gleiche physikalische Phänomene auf disjunkten Gebieten beschrieben werden und bei denen die Wechselwirkungen an den gemeinsamen Gebietsgrenzen auftreten.

Als Beispiel für ein Problem der Klasse I seien die Wechselwirkungseffekte in einem fluiddurchströmten porösen Medium, die beispielsweise bei Sickerströmungen im Boden beobachtbar sind, genannt. Verschiebungen, die im Boden auftreten, verändern den Wasserdruck, dieser Porendruck wiederum beeinflusst die Deformationen des porösen Stoffes. Die Differentialgleichungen, die hier miteinander koppeln, sind eine Form der Lamé-Gleichungen zur Beschreibung der Bodendeformation sowie die Richardson-Gleichung zur Bestimmung des Porendrucks. Auch die Untersuchung temperaturabhängiger Verformungen elasto-plastischer Körper fällt in die erste Problemklasse, da sowohl die Temperaturverteilung als auch Spannungen und Verzerrungen auf dem gleichen Gebiet definiert sind und dort interagieren.

Die Bestimmung des akustischen Feldes, das einen in ein Fluid getauchten elastischen Körper umgibt, ist ein Beispiel für eine Fragestellung der Klasse II. Eine ausführliche Betrachtung dieses Problems, bei dem die Bewegungsgleichungen zur Beschreibung der Deformation des Körpers mit der Helmholtzgleichung gekoppelt werden, findet sich z.B. in [AHW92].

Es ist offensichtlich, dass auch das in dieser Arbeit betrachtete Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblem in diese Kategorie der gekoppelten Probleme einzuordnen ist, da das Fluid vom Festkörper verdrängt wird und die Definitionsgebiete der betrachteten physikalischen Eigenschaften somit disjunkt sind. Wir verzichten deshalb an dieser Stelle auf eine detailliertere Klassifizierung und verweisen auf die Ausführungen in [Zie84] oder [ZC88].

Da für gekoppelte Probleme, die der oben gegebenen Definition entsprechen, eine Vereinfachung auf Modellierungsebene oder in den zu Grunde liegenden Differentialgleichungen, z.B. durch Elimination von Variablen, nicht möglich ist, setzen die üblicherweise zum Einsatz kommenden Verfahren zur Lösung gekoppelter Probleme auf der diskreten Ebene an. Die Differentialgleichungen werden zunächst einer (Semi-)Diskretisierung¹ unterzogen und anschließend finden unterschiedliche Methoden Verwendung, um die entstandenen Gleichungssysteme zu lösen.

Eine mögliche Vorgehensweise ist die der *simultanen Lösung*. Die diskretisierten Teilprobleme werden in Matrixschreibweise zusammengefasst und das so aufgebaute Gesamtsystem wird nun gelöst. Mit dem Ziel, eine starke Kopplung mittels einer einheitlichen Diskretisierung zu erreichen, wird beispielsweise in [Bun99] der eher untypische Vorschlag gemacht, den strukturmechanischen Teil eines Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblems ebenso wie das strömungsmechanische Teilproblem mit einer Finite-Volumen-Methode zu diskretisieren. Ein Nachteil der simultanen Lösung ist allerdings, dass in den meisten Fällen Standardverfahren, die Eigenschaften wie Symmetrie oder Dünnbesetztheit der Matrizen ausnutzen, nicht eingesetzt werden können,

¹semidiskretisieren bedeutet, die Gleichungen lediglich bezüglich der räumlichen Variablen zu diskretisieren

da sich ebendiese Eigenschaften, die die Matrizen der Teilprobleme in vielen Fällen aufweisen, nicht auf die Matrixdarstellung des Gesamtsystems übertragen lassen.

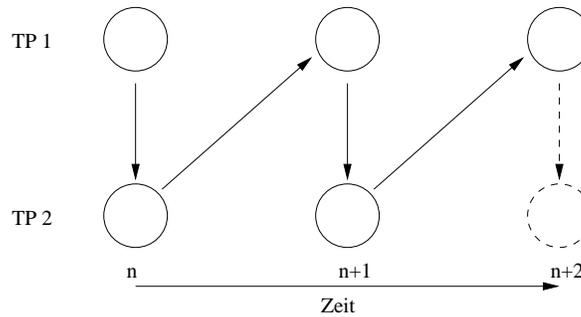


Abbildung 2.1: zeitliche Abfolge eines CSS-Verfahren für die Teilprobleme TP 1 und TP 2

Der zweite, weiter verbreitete Ansatz, besteht in der sogenannten *partitionierten Lösung*. Hierbei werden die Teilprobleme getrennt voneinander gelöst. Die Kopplungseffekte werden für jedes Teilproblem als Randbedingungen oder zusätzliche externe Kräfte formuliert, die aus den Lösungen der übrigen Teilprobleme berechnet werden. Eine spezielle Variante sind CSS-Verfahren². Bei diesen Methoden hat der Algorithmus die in Abbildung 2.1 skizzierte Form, d.h. das zeitliche Fortschreiten wird durch sequentielles Lösen der Teilprobleme und umwandeln der Lösung in Randbedingungen für das als nächstes zu behandelnde Teilproblem erreicht.

Die wesentlichen Vorteile der partitionierten Lösung gegenüber dem Ansatz der simultanen Lösung bestehen zum Einen in der Modularität des Verfahrens, d.h. man kann zur Implementierung auf speziell an die Teilprobleme angepasste Löser zurückgreifen. Zum Zweiten kann man davon ausgehen, dass der Aufwand pro Zeitschritt in etwa dem entspricht, den man ohnehin zum Lösen der beiden Teilprobleme aufbringen muss, da insbesondere bei großen dreidimensionalen Problemen der Mehraufwand, der durch Berücksichtigung der Kopplungseffekte entsteht, vergleichsweise gering ist.

Ein Nachteil der partitionierten Lösung ist jedoch, dass Aussagen zu Stabilität und Konvergenz der Verfahren gar nicht oder nur schwer und nur für spezielle Formulierungen zu erreichen sind. Einen allgemeinen Überblick zur partitionierten Lösung von gekoppelten Problemen bietet [FP80], in [PF97] werden verschiedenen Varianten von CSS-Methoden diskutiert. Ein weiteres Anwendungsfeld wird in [Liu87] beschrieben: hier werden Problemstellungen, die keine Wechselwirkungen im eigentlichen Sinne beinhalten, formal als gekoppeltes Problem betrachtet, um mit Hilfe einer partitionierten Lösung geeignete Strategien zu parallelen Bearbeitung zu entwickeln.

²conventional serial staggered

Auf Grund der oben aufgeführten Vorteile, die eine auf der partitionierten Lösung basierende Methode bietet, soll ein solches Verfahren auch in dieser Arbeit zum Einsatz kommen. Aus diesem Grund beschreiben wir zunächst die Modelle und Diskretisierungen der Teilprobleme unabhängig voneinander. Da die Differentialgleichungen zur Beschreibung von Strömungen sowie die zur Modellierung von elastischen Körpern ihren Ursprung in Erhaltungssätzen der Kontinuumsmechanik haben, beginnen wir mit deren Darstellung und erläutern anschließend die Spezialisierungen, die zur Modellierung von Fluiden bzw. Festkörpern führen.

2.2 Erhaltungssätze der Kontinuumsmechanik

Die Kontinuumsmechanik beschreibt das Verhalten kontinuierlicher Medien unter Einwirkung von Kräften. Da man i.A. nicht an Prozessen auf molekularer Ebene interessiert ist, benutzt man zur Beschreibung makroskopisch beobachtbare Größen, die man aus statistischen Mittelungen erhält. Die daraus resultierende “Nichtunterscheidbarkeit” einzelner kleiner Teilmengen des betrachteten Kontinuums ermöglicht die Anwendung der Infinitesimalrechnung zur Herleitung von Erhaltungssätzen. Ein Überblick über die Kontinuumsmechanik findet sich z.B. in [Bel98], eine weitere Einführung mit anschließender Darstellung der Strukturmechanik wird in [MH83] gegeben, als Übersicht zur Strömungsmechanik dient beispielsweise [SK89].

Wir betrachten ein Gebiet $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^3$, welches das Kontinuum zum Zeitpunkt $t = 0$ repräsentiert. Dieses Gebiet bezeichnen wir als *undeformierten Zustand* bzw. als *Ausgangskonfiguration*. Einzelne Teilchen dieses Kontinuums identifizieren wir mit den Koordinaten $\mathbf{X} \in \Omega_0$, die *Lagrange-Koordinaten* oder auch *materielle Koordinaten* genannt werden. Die Bewegung eines Teilchens sei gegeben durch eine Abbildung

$$\Phi : \Omega_0 \times T \rightarrow \Omega_t \subset \mathbb{R}^3,$$

die \mathcal{C}^1 -invertierbar ist, d.h. Φ und die Umkehrabbildung Φ^{-1} sind stetig differenzierbar und die Funktionalmatrix

$$D\Phi = \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial X_j} \right)_{i,j}$$

ist für jedes $\mathbf{X} \in \Omega_0$ und $t \geq 0$ invertierbar.

Ω_t ist das Gebiet, welches das Medium zum Zeitpunkt t einnimmt, es wird als *Momentankonfiguration* oder *deformierter Zustand* bezeichnet. Das Intervall $T \subset \mathbb{R}$ ist das betrachtete Zeitintervall. Die Position eines Teilchens mit den Koordinaten \mathbf{X} ist also zum Zeitpunkt t gegeben durch die *eulerschen* bzw. *räumlichen* Koordinaten

$$\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{X}, t).$$

Zur Beschreibung einer physikalischen Größe und ihres zeitlichen Verhaltens gibt es zwei³ grundlegende, unterschiedliche Ansätze,

- die *Lagrangesche Darstellung*, bei der die unabhängigen Variablen die Koordinaten $\mathbf{X} \in \Omega_0$ und die Zeit t sind;
- die *Eulersche Darstellung*, die als unabhängige Variablen die räumlichen Koordinaten $\mathbf{x} \in \Omega_t$ und ebenfalls die Zeit t verwendet.

Zur Veranschaulichung stellen wir uns einen Beobachter vor, der im Fall der Lagrange-Formulierung fest mit einem Teilchen des betrachteten Kontinuums, beispielsweise einer Strömung, verbunden ist und sich mit diesem Teilchen mitbewegt. Dadurch beobachtet er die zeitliche Veränderung von physikalischen Größen wie z.B. Geschwindigkeit oder Temperatur, für dieses Teilchen, Konvektion wird nicht als solche wahrgenommen⁴. Bei der Eulerschen Betrachtungsweise hingegen beobachtet man Eigenschaften und deren zeitliche Veränderung an einem festen Beobachtungspunkt im Raum, an dem sich zu verschiedenen Zeiten auch verschiedene Teilchen des Kontinuums befinden.

Es sei nun die Funktion f^L die Lagrange-Darstellung einer physikalischen Größe, f^E ihre Euler-Darstellung, dann liefert die Bewegungsabbildung Φ den Übergang von einer Darstellung zur anderen durch

$$f^L(\mathbf{X}, t) = f^E(\Phi(\mathbf{X}, t), t) = f^E \circ \Phi. \quad (2.1)$$

Die Verschiebung \mathbf{u} eines Teilchens $\mathbf{X} \in \Omega_0$ wird durch

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \Phi(\mathbf{X}, t) - \Phi(\mathbf{X}, 0) = \Phi(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} \quad (2.2)$$

beschrieben, seine Geschwindigkeit \mathbf{v} erhält man durch Differentiation der Verschiebung nach der Zeit bei fixierten \mathbf{X} -Koordinaten, also

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{X}, t)}{\partial t}. \quad (2.3)$$

Zeitableitungen mit fixierten materiellen Koordinaten heißen *materielle* oder *substantielle* Ableitung und werden üblicherweise mit dem Symbol $\frac{D}{Dt}$ bezeichnet. Ein wichtiges Hilfsmittel im weiteren Verlauf ist eine Vorschrift, die es ermöglicht, die materielle Ableitung einer Funktion in Eulerscher Darstellung zu berechnen. Eine solche Vorschrift erhalten wir, indem wir die Kettenregel auf die Verknüpfung $f^E \circ \Phi$ anwenden, es gilt

$$\frac{Df(\mathbf{x}, t)}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} + \sum_i \frac{\partial f(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_i(\mathbf{X}, t)}{\partial t}.$$

³Wir werden später sehen, dass es durchaus sinnvoll sein kann, einen weiteren Satz von *Referenzkoordinaten* einzuführen, auf den sich eine Beschreibung beziehen kann.

⁴Dies zeigt sich u.a. darin, dass in der Lagrange-Formulierung von Erhaltungssätzen keine konvektiven Terme auftreten.

Bei dem ersten Summanden auf der rechten Seite handelt es sich um eine gewöhnliche partielle Ableitung nach der Zeit bei fixierten räumlichen Koordinaten. Wenn wir nun noch beachten, dass die Zeitableitung der Bewegungsabbildung der Geschwindigkeit eines Teilchens entspricht, d.h. den zweiten Term der rechten Seite mittels (2.3) umformen, erhalten wir die folgende kompakte Schreibweise

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f. \quad (2.4)$$

Die materielle Ableitung setzt sich also zusammen aus einer lokalen Änderung an einem festen Ort und einem konvektiven Anteil, der aus der Bewegung des Kontinuums resultiert.

Ein hierauf aufbauendes, wichtiges Werkzeug im Rahmen der Herleitung von Erhaltungssätzen ist das *Reynolds-Transporttheorem*. Es gibt an, wie materielle Ableitungen von Integralen über zeitabhängige Gebiete zu berechnen sind.

In der weiteren Darstellung bezeichnet V_0 ein beliebiges materielles Teilgebiet des betrachteten Kontinuums im Referenzzustand Ω_0 und es ist $V_t = \Phi(V_0, t) \subset \Omega_t$ das zugehörige deformierte Teilgebiet. Für eine reellwertige \mathcal{C}^1 -Funktion $f(\mathbf{x}, t)$ gilt

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_t} f dV = \int_{V_t} \frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(f\mathbf{v}) dV \quad (2.5)$$

Erhaltung der Masse

Die Masse m eines Kontinuums ist gegeben durch das Integral seiner Dichte über das Volumen, welches das Kontinuum einnimmt, d.h.

$$m(V_t) = \int_{V_t} \rho(\mathbf{x}, t) dV \quad (2.6)$$

wobei ρ die Dichte bezeichnet. Erhaltung der Masse, also zeitliche Konstanz, bedeutet, dass die materielle Ableitung der Masse verschwinden muss, also

$$\frac{D}{Dt} m(V_t) = \frac{D}{Dt} \int_{V_t} \rho(\mathbf{x}, t) dV = 0 \quad (2.7)$$

Mit Hilfe des Transporttheorems (2.5) erhalten wir daraus

$$\int_{V_t} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{v}) dV = 0 \quad (2.8)$$

Da das Gebiet V_t beliebig gewählt werden kann, folgt, dass der Integrand selbst verschwindet und wir erhalten die partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\mathbf{v}) = 0 \quad (2.9)$$

zur Beschreibung des Masseerhalts in *konservativer* Form.

Erhaltung des linearen Moments

Die Erhaltung des linearen Moments basiert auf Newton's Zweitem Gesetz, welches die Beschleunigung, die ein Körper erfährt, in Relation zu auf ihn wirkenden Kräften setzt. Mögliche angreifende Kräfte lassen sich einteilen in die zwei Gruppen Flächenkräfte \mathbf{t} und Volumenkräfte $\rho\mathbf{b}$, hierbei ist \mathbf{t} ein Maß für Kraft je Flächeneinheit und \mathbf{b} für Kraft je Masseinheit. Die Gesamtkraft, die auf ein Kontinuum wirkt ist gegeben durch

$$F(t) = \int_{V_t} \rho\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dV + \int_{\partial V} \mathbf{t}(\mathbf{x}, t)dS \quad (2.10)$$

wobei ∂V der Rand des Gebietes V_t ist. Das lineare Moment bzw. der Impuls lässt sich durch

$$I(t) = \int_{V_t} \rho\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)dV \quad (2.11)$$

berechnen. Newton's Zweites Gesetz sagt nun, dass die zeitliche Änderung des Impulses gleich der Summe der wirkenden Kräfte ist, d.h.

$$\frac{D}{Dt} \int_{V_t} \rho\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)dV = \int_{V_t} \rho\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dV + \int_{\partial V} \mathbf{t}(\mathbf{x}, t)dS \quad (2.12)$$

Nun wenden wir zunächst auf das Integral der linken Seite zeilenweise das Transporttheorem (2.5) an und erhalten

$$\int_{V_t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v})dV = \int_{V_t} \rho\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)dV + \int_{\partial V} \mathbf{t}(\mathbf{x}, t)dS \quad (2.13)$$

Der Vektor $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}, t)$ beschreibt die Kraft, die auf ein infinitesimales Flächenelement $dA \subset \partial V$ mit zugehörigem Normalenvektor \mathbf{n} wirkt und wird auch als Cauchy-scher Spannungsvektor bezeichnet. Dabei muss \mathbf{t} keineswegs parallel zu \mathbf{n} sein. Ein wichtiger Satz von Cauchy liefert die Darstellung des Spannungsvektors \mathbf{t} durch einen symmetrischen Tensor zweiter Stufe. Es gilt

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}, t) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)\mathbf{n} , \quad (2.14)$$

$\boldsymbol{\sigma}$ ist der *Cauchysche Spannungstensor*. Der Zusammenhang zwischen \mathbf{t} und $\boldsymbol{\sigma}$ ist in Abbildung 2.2 für ein infinitesimales achsenparalleles Volumenelement skizziert. Dabei gilt für die Komponenten σ_{ij} des Spannungstensors:

- Der erste Index i bezeichnet die Normale des Flächenstückes, auf das die Kraft wirkt.
- Der zweite Index j bezeichnet die Richtung, in der die Kraft wirkt.

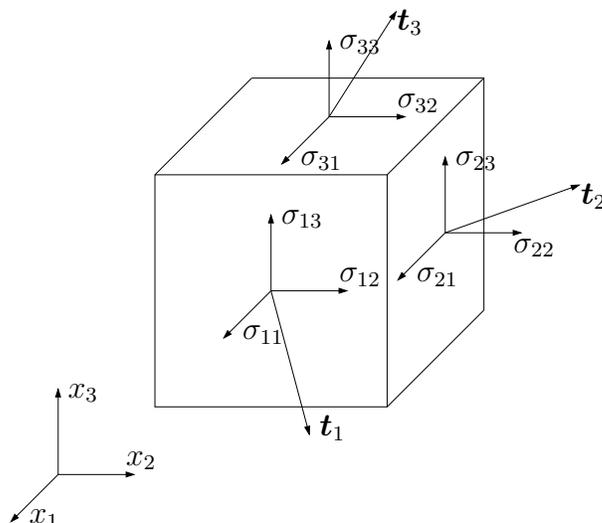


Abbildung 2.2: Komponenten des Spannungstensors an infinitesimalem Volumenelement

Die drei Diagonalelemente σ_{ii} werden Normalspannungen genannt, die übrigen Komponenten σ_{ij} , $i \neq j$ werden als Schubspannungen bezeichnet. Ein positiver Wert einer Normalspannung steht für eine Zugspannung, ein negativer Wert zeigt eine Kompressionskraft an.

Mit Hilfe der Cauchy'schen Formel (2.14) und des Gauß'schen Satzes können wir das Flächenintegral über den Spannungsvektor in (2.13) in ein Volumenintegral über die Divergenz des Spannungstensors umwandeln und dadurch alle Summanden unter einem gemeinsamen Integral zusammenfassen. Wegen der Beliebigkeit des Gebietes V_t muss wieder der Integrand selbst verschwinden und wir erhalten die partielle Differentialgleichung für den Momentenerhalt in konservativer Form:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho v v - \boldsymbol{\sigma}) = \rho \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \quad (2.15)$$

Erhaltung des Drehmoments

Aus der Forderung zum Erhalt des Drehmomentes ergibt sich keine zusätzliche Differentialgleichung, sondern man erhält zusätzliche Bedingungen an den Spannungstensor, speziell die Forderung der Symmetrie. Aus diesem Grund und da die in den meisten Fällen verwendeten Spannungstensoren wie z.B. der Cauchy'sche Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ symmetrisch sind, gehen wir hierauf nicht näher ein.

Die Erhaltungssätze in der bis hierher hergeleiteten Form bilden die gemeinsame Basis sowohl für das strömungsmechanische als auch das strukturmechanische Teilproblem.

Die maßgeblichen Unterschiede zwischen den beiden Teilgebieten der Kontinuumsmechanik resultieren nun hauptsächlich aus den verschiedenen Modellbildungen für den Spannungstensor. Der Hauptunterschied besteht darin, dass der Spannungstensor in der Strömungslehre von der Deformationsrate abhängt, wohingegen er bei Festkörpern vom Verschiebungsgradienten abhängig ist. Wir gehen nun nacheinander auf beide Teilprobleme ein.

2.3 Das strömungsmechanische Teilproblem

Es sei $\boldsymbol{\sigma}$ der Spannungstensor des Fluids und D der symmetrische Anteil des Deformationsgradienten, d.h.

$$D = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)$$

Die Eigenschaften eines Fluides werden bestimmt durch das *konstitutive Gesetz*, welches die Abhängigkeit des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ von D angibt. Fluide sind dadurch gekennzeichnet, dass sie in Ruhelage keine Zug- und Scherkräfte aufnehmen können, sondern nur Druckkräfte. Dieses Verhalten wird in einem ersten Ansatz durch

$$\boldsymbol{\sigma} = -pI + \boldsymbol{\tau} \quad (2.16)$$

modelliert, wobei $\boldsymbol{\tau}$ der sogenannte Zähigkeitstensor ist. Wenn die Abhängigkeit des Tensors $\boldsymbol{\tau}$ von D linear ist, spricht man von einem newtonischen Fluid. Für ein isotropes⁵ Fluid ergibt sich aus dem allgemeinen Newtonschen Schubspannungsansatz für $\boldsymbol{\tau}$ die Form

$$\boldsymbol{\tau} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{v})I + 2\mu D \quad (2.17)$$

mit den fluidabhängigen Viskositätskonstanten μ und λ . Der Parameter μ ist die dynamische (Scher-)Viskosität und λ heißt Volumenviskosität.

Durch Einsetzen von (2.16) zusammen mit (2.17) in die Gleichung für den Impulserhalt (2.15) und zeilenweises Anwenden des Divergenzoperators auf $\boldsymbol{\sigma}$ erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) + \nabla p - \mu \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} - (\mu + \lambda) \nabla \nabla \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{b} \quad (2.18)$$

Für inkompressible Fluide, d.h. Fluide mit konstanter Dichte, vereinfacht sich (2.18) in der folgenden Art und Weise: da die Zeitableitung der Dichte verschwindet, erhält man aus der Massebilanzgleichung (2.9) die Form

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.19)$$

⁵ein Medium heißt isotrop, wenn das Antwortverhalten keine bestimmte Richtung auszeichnet. Die Annahme der Isotropie gilt z.B. nicht für die meisten Kristalle oder geschichtetes Material.

nun beachtet man (2.19) in (2.18) und erhält die Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible Fluide:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) + \frac{1}{\rho_\infty} \nabla p - \nu \Delta \mathbf{v} &= \mathbf{b} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dabei ist ρ_∞ die (konstante) Dichte und $\nu = \frac{\mu}{\rho_\infty}$ die kinematische Viskosität. Zusammen mit einer Referenzgeschwindigkeit u_∞ und einer Referenzlänge l erhält man aus diesen Größen die dimensionslose *Reynoldszahl* $Re = u_\infty l / \nu$. Die Reynoldszahl beschreibt das Verhältnis von Trägheitskräften zu Reibungskräften in einem Fluid, sie ist hilfreich bei der Skalierung von Experimenten, um die dynamische Ähnlichkeit von Strömungen zu erkennen.

Randbedingungen

Zur Lösung dieses Systems ist die Angabe von Randbedingungen notwendig. Wir unterscheiden dabei zwischen *Dirichlet-Randbedingungen*, bei denen die Geschwindigkeitskomponenten am Rand vorgegeben werden, und *Neumann-Randbedingungen*, bei denen Vorgaben der Ableitungen der Geschwindigkeiten gemacht werden. Mit diesen beiden Typen von Randbedingungen kann man nun verschiedene Situationen modellieren:

- Einströmränder werden durch Vorgabe von von Null verschiedenen Dirichlet-Randwerten modelliert, d.h. man setzt $\mathbf{v} = g$ mit einer vorgegebenen Funktion g .
- an Ausströmrändern werden für alle Geschwindigkeitskomponenten homogene Neumann-Randbedingungen gesetzt, d.h. $\frac{\partial}{\partial n} \mathbf{v} = 0$.
- Haftbedingungen werden durch setzen von homogenen Dirichlet-Randwerten erreicht.
- Slip-Bedingungen simulieren reibungsfreies Fließen entlang einer Wand und werden erreicht durch homogene Dirichlet-Randwerte für die Geschwindigkeit in Normalenrichtung, d.h. $\mathbf{v}^n = 0$ und homogene Neumann-Bedingungen für die tangentialen Komponenten, also $\frac{\partial}{\partial n} \mathbf{v}^t = 0$, $t = t_1, t_2$.

2.4 Das strukturmechanische Teilproblem

Die Strukturmechanik ist das Teilgebiet der Kontinuumsmechanik, welches das Verhalten von Festkörpern unter dem Einfluss äußerer Kräfte beschreibt. Wie auch in der Strömungsmechanik erhält man aus den Erhaltungssätzen der Kontinuumsmechanik

zusammen mit der Kinematik, die die Relation zwischen Verzerrungen und Verschiebungen liefert, und dem konstitutiven Gesetz, welches das Materialverhalten modelliert, die grundlegenden Gleichungen der Strukturmechanik. Linearisierungen in der Kinematik und der Materialbeschreibung führen schließlich zur linearen Elastizitätstheorie, deren Ursprung in Arbeiten von Cauchy, Green, Poisson und Navier aus der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts liegt. Eine Verformung eines Körpers wird dabei elastisch genannt, wenn er nach Aufhebung des äußeren Krafteinflusses wieder in seinen Ausgangszustand zurückkehrt. Im Gegensatz dazu können plastische Deformationen, d.h. irreversible Zustandsänderungen des betrachteten Materials, auftreten, wenn ein bestimmter Spannungswert, der sogenannte Fließwert, überschritten wird. Dieses Verhalten legen z.B. Metalle bei großen Deformationen an den Tag.

Wir wollen uns bei der Modellbildung zur Beschreibung des Festkörpers im gekoppelten Problem auf elastische Verformungen beschränken und geben im Folgenden eine Einführung in die Elastizitätstheorie. Ausführliche Darstellungen finden sich bei [MH83], [Gou94] sowie [KZC95].

In der Strukturmechanik ist es, bereits im Hinblick auf die numerische Behandlung, üblich, die Lagrange-Koordinaten \mathbf{X} als unabhängige Variable zu verwenden. Aus diesem Grund wandeln wir die Differentialgleichung (2.15) in eine etwas andere Form um. Dazu wenden wir zunächst auf die Zeitableitung und den ersten Summanden der Divergenz die Produktregel⁶ an. Zwei der dadurch entstehenden vier Summanden fallen durch Berücksichtigung von (2.9) weg, die übriggeblieben fassen wir mittels der Definition der materiellen Ableitung zusammen und erhalten so

$$\rho \frac{D}{Dt} \mathbf{v} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \rho \mathbf{b} \quad (2.21)$$

Der Spannungstensor

Der Cauchysche Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ gibt die Spannungen in Bezug auf die Momentan-konfiguration des Körpers an. Oft ist es jedoch zweckmäßig, die Spannungen in den Koordinaten der Referenzkonfiguration angeben zu können. Dies ermöglicht der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor

$$\boldsymbol{\sigma}_{P_1} := \det(\nabla \Phi) \boldsymbol{\sigma} (\nabla \Phi)^{-T}.$$

Da dieser Tensor nicht symmetrisch ist, findet man in der Literatur auch häufig den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor

$$\boldsymbol{\sigma}_{P_2} := \det(\nabla \Phi) (\nabla \Phi)^{-1} \boldsymbol{\sigma}_{P_1} (\nabla \Phi)^{-T} = (\nabla \Phi)^{-1} \boldsymbol{\sigma}_{P_1}.$$

⁶die Produktregel für die Divergenz lautet bei zeilenweiser Anwendung $\nabla \cdot (\rho v_i \mathbf{v}) = v_i \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla v_i$

In der linearen Elastizitätstheorie, d.h. unter der Annahme kleiner Deformationsgradienten, wird zwischen den drei Darstellungen der Spannungstensoren sowie den Koordinaten \boldsymbol{x} und \boldsymbol{X} nicht unterschieden, im Folgenden verwenden wir deshalb nur noch die Bezeichnung $\boldsymbol{\sigma}$.

Der Verzerrungstensor

Wir benötigen nun ein Maß für die Verzerrungen im Körper, die durch eine Deformation Φ hervorgerufen werden. Dabei soll das Maß widerspiegeln, dass Starrkörperbewegungen, d.h. Rotationen und Translationen, keine Verzerrungen hervorrufen, also auch den Spannungszustand des Körpers nicht ändern.

Wir hatten an den Deformationsgradienten die Forderung $\det(\nabla\Phi) > 0$ gestellt, deshalb existiert eine eindeutige Polarzerlegung⁷ der Form

$$\nabla\Phi = RU = VR$$

dabei ist R eine orthogonale Matrix und U sowie V sind positiv definite, symmetrische Matrizen, die rechter bzw. linker Deformationstensor genannt werden. Nun kann man zeigen⁸, dass gilt

$$U^2 = (\nabla\Phi)^T(\nabla\Phi)$$

und

$$V^2 = (\nabla\Phi)(\nabla\Phi)^T$$

Man nennt

$$C := U^2 = (\nabla\Phi)^T(\nabla\Phi)$$

den rechten Cauchy-Green-Tensor und

$$B := V^2 = (\nabla\Phi)(\nabla\Phi)^T$$

den linken Cauchy-Green-Tensor. Weil C positiv definit und symmetrisch ist, sind die Eigenwerte $\lambda_i, i = 1, 2, 3$ von C positiv und reell.

Lokal betrachtet lässt sich also eine Deformation in erster Ordnung darstellen durch eine Rotation R mit anschließender Dehnung bzw. diesen Operationen in der umgekehrten Reihenfolge. Die Größenordnung der Dehnung entlang dreier orthogonaler Achsen (den Hauptrichtungen) ist dabei durch die Eigenwerte λ_i gegeben⁹. Ein Maß für die Verzerrung innerhalb des betrachteten Körpers ist die Abweichung der Eigenwerte λ_i von 1, und man definiert den Greenschen Verzerrungstensor als

$$E := \frac{1}{2}(C - I) \tag{2.22}$$

⁷für einen Beweis s. z.B. [Bri85]

⁸ein konstruktiver Beweis hierfür findet sich in [MH83]

⁹Weil C und B ähnliche Matrizen sind, besitzen sie die gleichen Eigenwerte $\lambda_i, i = 1, 2, 3$.

An der Darstellung (2.22) sieht man sofort, dass E für Starrkörperbewegungen verschwindet, denn für eine Deformation der Art

$$\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{X}) = R\mathbf{X} + \mathbf{X}_0$$

ist

$$\nabla\Phi = R$$

und somit

$$E = \frac{1}{2}(R^T R - I) = \frac{1}{2}(I - I) = 0$$

Um eine Darstellung der einzelnen Komponenten in Termen von Verschiebungsgradienten zu erhalten, setzt man (2.2) in (2.22) ein;

$$E_{ij}^L = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \sum_k \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) \quad (2.23)$$

ist die Darstellung bzgl. der Koordinaten \mathbf{X} ,

$$E_{ij}^E = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \sum_k \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) \quad (2.24)$$

die Darstellung bzgl. der Koordinaten \mathbf{x} . Für die lineare Theorie macht man an dieser Stelle analog zum Spannungstensor die Annahme kleiner Verschiebungsgradienten, vernachlässigt die quadratischen Terme und unterscheidet nicht zwischen Euler- und Lagrange-Koordinaten, so dass beide Tensoren zusammenfallen und den sogenannten infinitesimalen oder linearen Verzerrungstensor ϵ mit den Komponenten

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.25)$$

ergeben. Im Gegensatz zu den Verzerrungsmaßen E_{ij}^L und E_{ij}^E verschwindet ϵ nicht für Starrkörperbewegungen, weshalb er im Rahmen der Modellierung von geometrisch nichtlinearen Materialien nicht geeignet ist (s. z.B. [Bel98]).

Das Materialgesetz

Das bisher aufgebaute System von Gleichungen ist noch nicht geschlossen, die Gleichgewichtsbedingungen (2.21) enthalten die sechs unbekanntenen Komponenten des symmetrischen Spannungstensors und die Kinematik liefert mit (2.25) weitere sechs Gleichungen in neun Unbekannten, den sechs Komponenten ϵ_{ij} des Verzerrungstensors und den drei Komponenten u_i der Verschiebung. Die notwendige Verbindung zwischen Spannungen und Verzerrungen stellt das konstitutive Gesetz her, das auch Materialgesetz

genannt wird, weil an dieser Stelle das Verhalten des betrachteten Materials Eingang in das Modell findet.

Die elementarste Beschreibung eines Materialverhaltens ist die lineare Abhängigkeit der Spannung von der Verzerrung in einer Dimension, das Hookesche Gesetz

$$\sigma_{11} = E\epsilon_{11}. \quad (2.26)$$

Die Konstante E wird Elastizitätsmodul oder oft auch Young-Modul genannt. Das *verallgemeinerte Hookesche Gesetz* für linear elastische Materialien ist durch

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (2.27)$$

gegeben. Die auf Grund der Symmetrie von (2.27) 21 unterschiedlichen Komponenten des Elastizitätstensors vierter Ordnung E können für den wichtigen Spezialfall eines isotropen Materials soweit reduziert werden, dass E nur noch von zwei Konstanten abhängt. Das Materialgesetz (2.27) hat dann in Komponentenschreibweise die Form

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\mu + \lambda & \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & 2\mu + \lambda & \lambda & & & \\ \lambda & \lambda & 2\mu + \lambda & & & \\ & & & 2\mu & & \\ & & & & 2\mu & \\ & & & & & 2\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{23} \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

In kompakterer Schreibweise gilt also

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \operatorname{spur}(\boldsymbol{\epsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon}. \quad (2.29)$$

Die beiden materialabhängigen Parameter λ und μ heißen Lamé-Konstanten. Für den linearen Verzerrungstensor (2.25) gilt

$$\operatorname{spur}(\boldsymbol{\epsilon}) = \nabla \cdot \mathbf{u},$$

man sieht also an (2.29), dass der Parameter λ die Spannungen beschreibt, die durch Dichteänderungen hervorgerufen werden.

In der Praxis stößt man häufig auf andere Parameter zur Beschreibung des Materialverhaltens, die aus Messungen elementarer mechanischer Standardtests herrühren. Dies sind der aus (2.26) bekannte Young-Modul, der Schermodul G sowie die Querkontraktionszahl bzw. Poissonzahl ν . Dabei handelt es sich aber nicht um zusätzliche, unabhängige Parameter sondern der folgende Zusammenhang ermöglicht es, einen Satz

von Parametern durch den jeweils Anderen auszudrücken:

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}, \quad (2.30)$$

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad (2.31)$$

$$E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\mu + \lambda}, \quad (2.32)$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}, \quad (2.33)$$

$$G = \mu. \quad (2.34)$$

Aus (2.31) folgt für ν die Bedingung

$$-1 < \nu < 0.5,$$

physikalisch sinnvoll erscheinen i.A. allerdings nur positive Werte¹⁰, da die Querkontraktionszahl die relative Größe der Dehnung beschreibt, die auftritt, wenn ein Material in Querrichtung gestaucht wird. Für nahezu inkompressible Materialien wie z.B. Gummi ist ν nahe am Grenzwert $1/2$, d.h. es ist $\lambda \gg \mu$, für viele häufig betrachtete Materialien, z.B. die meisten Metalle, liegt ν in einem Bereich um $1/3$.

Die Lamé-Gleichungen

Um die Beschreibung des Modells übersichtlicher zu gestalten, bietet es sich an, die hergeleiteten Gesetze und Relationen zu verwenden, um mindestens eine der betrachteten Größen, Verzerrungen, Verschiebungen oder Spannungen, aus dem Modell zu eliminieren. Der wohl bekannteste Weg führt zu den Lamé-Gleichungen, indem zunächst mittels des Materialgesetzes (2.29) die Spannungen in den Gleichgewichtsbedingungen (2.21) eliminiert werden und anschließend in der entstandenen Gleichung die Verzerrungen mit Hilfe der kinematischen Relation (2.25) durch die Verschiebungen ausgedrückt werden. Die Lamé-Gleichungen lauten

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} - 2\mu \operatorname{div} \epsilon(\mathbf{u}) - \lambda \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} = \rho \mathbf{b} \quad (2.35)$$

bzw.

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} - \mu \operatorname{div} \operatorname{grad} \mathbf{u} - (\lambda + \mu) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} = \rho \mathbf{b}. \quad (2.36)$$

¹⁰Es gibt "antirubber" genannte Stoffe, die sich bei Dehnung in einer Richtung ebenfalls in der Querrichtung ausdehnen, was auf eine negative Poissonzahl hindeutet, s. z.B. [Gou94] sowie [Sie99].

Randbedingungen

Um die Beschreibung des strukturmechanischen Teilproblems zu vervollständigen, werden noch Randbedingungen benötigt. Dazu sei der Rand Γ des betrachteten Kontinuums gegeben als

$$\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_D \cup \Gamma_N.$$

Auf dem Teil Γ_0 des Randes ist der Körper fest eingespannt, was durch homogene Dirichlet-Randbedingungen

$$\mathbf{u} = 0 \text{ auf } \Gamma_0 \quad (2.37)$$

modelliert wird. Auf Γ_D seien die Verschiebungen vorgegeben durch

$$\mathbf{u} = g_D \text{ auf } \Gamma_D \quad (2.38)$$

und auf Γ_N sind durch

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = g_N \text{ auf } \Gamma_N \quad (2.39)$$

Flächenkräfte vorgegeben.

2.5 Das Interface

Wir haben nun die mathematische Beschreibung beider Teilprobleme erläutert, um die Modellierung des Gesamtproblems zu vervollständigen, müssen wir die Kopplungseffekte in das Modell einarbeiten. Wie bereits erwähnt wurde, findet die gegenseitige Beeinflussung von Festkörper und Struktur am gemeinsamen Rand der beiden Teilgebiete statt, den wir im Folgenden auch mit dem Begriff *Interface* bezeichnen wollen. Das Interface ist gegeben durch

$$\Gamma_t = \bar{\Omega}_F(t) \cap \bar{\Omega}_S(t). \quad (2.40)$$

Die Kopplungsbedingungen, die wir an das Modell stellen, müssen zwei Ziele erfüllen. Zum Einen sollen sie die physikalische Beschreibung des Problems sinnvoll ergänzen, zum Anderen müssen sie garantieren, dass beide Teilprobleme zu einem mathematisch gut gestellten und damit lösbaeren Problem werden. Dies erreichen wir durch die Angabe von geeigneten Randbedingungen auf Γ_t .

Wenn wir die betrachteten Gebiete $\Omega_F(t)$ und $\Omega_S(t)$ als Teilgebiete eines Gesamt-Kontinuums auffassen, ergeben sich passende Randbedingungen durch die Forderung der Stetigkeit an Geschwindigkeiten und Spannungen beider Teilprobleme am Interface Γ_t . Das bedeutet, wir fordern

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \text{ auf } \Gamma_t, \quad (2.41)$$

wobei \mathbf{v} die Geschwindigkeit des Fluids und \mathbf{u} die Verschiebung der Struktur ist. Außerdem verlangen wir

$$\boldsymbol{\sigma}_F \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}_S \cdot \mathbf{n} \text{ auf } \Gamma_t, \quad (2.42)$$

mit dem Fluid-Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}_F$ und den Spannungen $\boldsymbol{\sigma}_S$ des Festkörpers sowie dem Normalenvektor \mathbf{n} auf dem Rand Γ_t . Diese Forderungen liefern ausreichende Daten, um beide Teilprobleme auf Γ_t mit Randbedingungen versehen zu können. Aus (2.41) erhalten wir zeitabhängige, inhomogene Dirichlet-Randbedingungen für das Strömungsproblem, indem wir die Fluidgeschwindigkeit auf die Geschwindigkeit setzen, mit der sich die Struktur am Rand bewegt. Dies entspricht der Modellierung von Haftbedingungen an einer bewegten Wand. Für das strukturmechanische Teilproblem erhalten wir aus (2.42) Neumann-Randbedingungen, was bedeutet, dass sich die Flächenkräfte, die am Interface auf den Festkörper wirken, aus den Spannungen des Fluids ergeben.

2.6 Das Gesamtmodell

Um die Ergebnisse der vorangegangenen Abschnitte zusammenzufassen, geben wir an dieser Stelle die notwendigen Gleichungen zur vollständigen Beschreibung des gekoppelten Problems an.

Gesucht sind das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} und der Druck p des Fluids im Gebiet $\Omega_F(t)$, die Verschiebungen \mathbf{u} des Festkörpers im Gebiet $\Omega_S(t)$ sowie evtl. zusätzliche Daten von Interesse wie z.B. Spannungen¹¹, die das System partieller Differentialgleichungen

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \text{ in } \Omega_F(t), \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}\mathbf{v} + \frac{1}{\rho_\infty} \nabla p - \nu \Delta \mathbf{v} = \mathbf{g} \text{ in } \Omega_F(t), \quad (2.44)$$

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \mu \Delta \mathbf{u} - (\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} = \rho \mathbf{b} \text{ in } \Omega_S(t). \quad (2.45)$$

zusammen mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= g_D^F \text{ auf } \Gamma_D^F & (2.46) \\ \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{v} &= g_N^F \text{ auf } \Gamma_N^F \\ \mathbf{u} &= 0 \text{ auf } \Gamma_0^S, \\ \mathbf{u} &= g_D^S \text{ auf } \Gamma_D^S, \\ \boldsymbol{\sigma}_S \cdot \mathbf{n} &= g_N^S \text{ auf } \Gamma_N^S, \end{aligned}$$

¹¹die sich einfach angeben lassen, da sie im Rahmen der Lösung des strukturmechanischen Teilproblems ohnehin ermittelt werden müssen.

sowie den Kopplungsbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \text{ auf } \Gamma_t, \\ \boldsymbol{\sigma}_S \cdot \mathbf{n} &= \boldsymbol{\sigma}_F \cdot \mathbf{n} \text{ auf } \Gamma_t. \end{aligned} \tag{2.47}$$

erfüllen. Dabei gilt $\partial\Omega_F(t) = \Gamma_D^F \cup \Gamma_N^F \cup \Gamma_t$ und $\partial\Omega_S(t) = \Gamma_0^S \cup \Gamma_D^S \cup \Gamma_N^S \cup \Gamma_t$.

Bemerkungen

In Bezug auf die Kopplungsbedingungen (2.47) ist zu beachten, dass a priori nicht klar ist, ob die Daten eines Teilproblems evtl. Glattheitsforderungen des anderen Teilproblems an die Randdaten erfüllen. Desweiteren ist zu beachten, dass die Stabilität beider Teilprobleme nicht die Stabilität des gekoppelten Problems (2.43) - (2.47) sichert. Untersuchungen zu diesen Punkten finden sich in [QTV00], allerdings im Kontext Finiter Elemente und nur für den speziellen Fall, dass das vollständige dreidimensionale strukturmechanische Modell auf ein eindimensionales, sogenanntes *verallgemeinertes Stab-Modell* vereinfacht wurde.

Das angegebene Modell behandelt die Wechselwirkung zwischen Fluid und Struktur unter mechanischen Gesichtspunkten. Zur Modellierung zusätzlicher Effekte, z.B. chemischer Reaktionen am Interface, lässt sich das Modell erweitern um beispielsweise eine Konvektions-Diffusionsgleichung mit entsprechenden Randbedingungen am Interface Γ_t .

Da es sich bei $\Omega_F(t)$ und $\Omega_S(t)$ um zeitabhängige Gebiete handelt, deren Lage sogar Teil der Lösung des Problems ist, müssen die gesuchten Daten also in veränderlichen Geometrien ermittelt werden. Die Behandlung strukturmechanischer Probleme erfolgt üblicherweise in Lagrange-Darstellung, so dass die Bestimmung von $\Omega_S(t)$ hier keinen zusätzlichen Aufwand verursacht, für strömungsmechanische Probleme, die normalerweise in Eulerschen Koordinaten beschrieben werden, erfordert die Zeitabhängigkeit von $\Omega_F(t)$ jedoch genauere Untersuchungen im Hinblick auf die Formulierung des Problems sowie die numerische Lösung desselben. Verschiedene Ansätze zur Herangehensweise an diese Fragestellung wollen wir im nächsten Kapitel erläutern.

Kapitel 3

Strömungen in zeitabhängigen Geometrien

Es wurde bereits deutlich, dass das Gebiet Ω_F , in dem wir eine Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen suchen, einer zeitlichen Veränderung unterliegt, die durch Deformation des Gebietsrandes verursacht wird. Will man sich nicht auf einige spezielle Problemstellungen, bei denen nur verhältnismäßig kleine und damit u.U. vernachlässigbare Deformationen auftreten, einschränken, so muss das Verfahren zur numerischen Lösung in der Lage sein, zeitabhängige Gebiete in den Lösungsprozess mit einzubeziehen. In diesem Kapitel betrachten wir kurz einige häufig verwendete Verfahren und stellen dann die Methode vor, die in dieser Arbeit zum Einsatz kommt, die *Arbitrary-Lagrange-Euler-Methode*. Ein guter Überblick über Lösungsverfahren für die Navier-Stokes-Gleichungen auf zeitabhängigen Gebieten wird in [OB87] und [SUR96] geboten.

3.1 Euler-Methoden

Ein erstes Unterscheidungsmerkmal für Verfahren, die eine Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen in zeitabhängigen Gebieten ermitteln, ist die zugrundeliegende Formulierung der Gleichungen. Üblicherweise werden die Navier-Stokes-Gleichungen in Eulerschen Koordinaten formuliert. Die nun folgenden Verfahren basieren alle auf dieser, in Abschnitt 2.3 hergeleiteten Formulierung. Sie alle realisieren ein sich zeitlich veränderndes Gebiet auf festen strukturierten, meist kartesischen Gittern, wie sie im Zuge einer Diskretisierung mittels Finiter Differenzen bzw. Finiter Volumen gebildet werden. Das eigentliche Berechnungsgebiet wird dabei in das Grundgebiet eingebettet und mittels zusätzlicher Datenstrukturen beschrieben.

Bei der *Surface-Marker-Methode* nach [CJR91] werden auf dem Rand des Fluidgebietes masselose Partikel verteilt, die durch einen Polygonzug verbunden den Rand

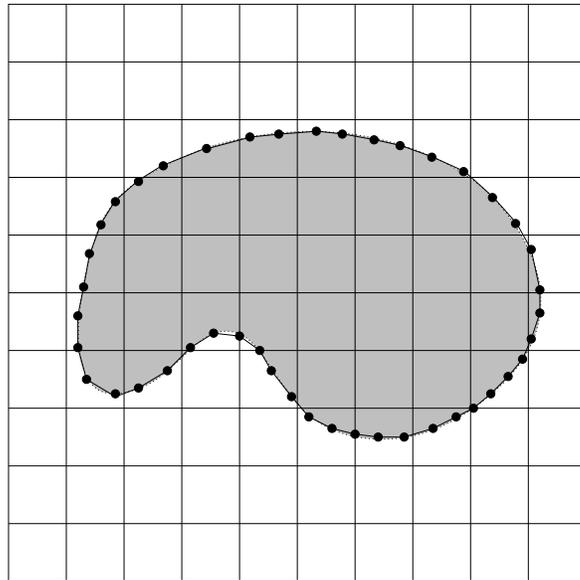


Abbildung 3.1: Surface-Marker-Methode

beschreiben, wie in Abbildung 3.1 skizziert. Die Teilchen werden in jedem Zeitschritt der Simulation mit den am Rand berechneten Geschwindigkeiten des Fluids fortbewegt. Um eine gewisse Genauigkeit der Randdarstellung aufrechtzuerhalten, muss im Laufe der Simulation der Abstand zwischen benachbarten Partikeln kontrolliert werden. Wird er zu groß, müssen gegebenenfalls zusätzliche Partikel auf dem Rand eingesetzt werden. Dadurch ist es auch möglich, das Interface mit einer größeren Genauigkeit darzustellen, als es die Auflösung des zugrundeliegenden kartesischen Gitters eigentlich zulässt. Außerdem ist eine stetige Darstellung des Randes gewährleistet. Die Berechnung von Druck und Geschwindigkeiten geschieht auf Basis des Typs, den eine Zelle des kartesischen Gitters hat. Zu Beginn der Simulation wird jeder Zelle des Berechnungsgebietes der Typ Fluidzelle, Hinderniszelle oder Randzelle zugewiesen, im Laufe der Simulation wird dann kontrolliert, ob eine Zelle ihren Typ ändert, dies ist der Fall, wenn der Rand über sie hinweggewandert ist.

Die größten Schwierigkeiten der Surface-Marker-Methode liegen darin, eine Zusammenführung mehrerer Ränder oder eine Aufspaltung des Fluidgebietes in zwei oder mehr Teilgebiete darzustellen, desweiteren ist die Erweiterung des Algorithmus auf drei Dimensionen aufwendig, statt einer eindimensionalen Liste der Partikel muss nämlich nun ein Dreiecksnetz samt Nachbarschaftsbeziehungen zur Darstellung der Oberfläche verwendet werden.

Die *Marker-and-Cell-Methode* aus [HW65] verwendet ebenfalls masselose Teilchen zur Kennzeichnung des Fluidgebietes, jedoch wird im Gegensatz zur Surface-Marker-

Methode nicht nur der Rand, sondern das gesamte Gebiet mit Partikeln markiert, die ebenfalls mit den berechneten Fluidgeschwindigkeiten bewegt werden. Fluidzellen sind nun dadurch gekennzeichnet, dass sie Partikel enthalten, Randzellen sind solche Zellen, die zwar Partikel enthalten, aber mindestens eine leere Nachbarzelle besitzen.

Diese Methode bietet Vorteile, wenn Fluidgebiete zusammengeführt oder aufgespalten werden müssen, dies ist ohne zusätzlichen Aufwand durchführbar, nachteilhaft ins Gewicht fällt allerdings der gegenüber der Surface-Marker-Methode offensichtlich größere Speicherbedarf sowie die ungenaue Repräsentation des Interfaces. Aus der Verteilung der Markierungspartikel lässt sich nämlich zunächst lediglich ablesen, durch welche Zellen der Rand des Fluidgebietes verläuft, die genaue Darstellung des Interfaces muss jedoch mit zusätzlichem Aufwand rekonstruiert werden.

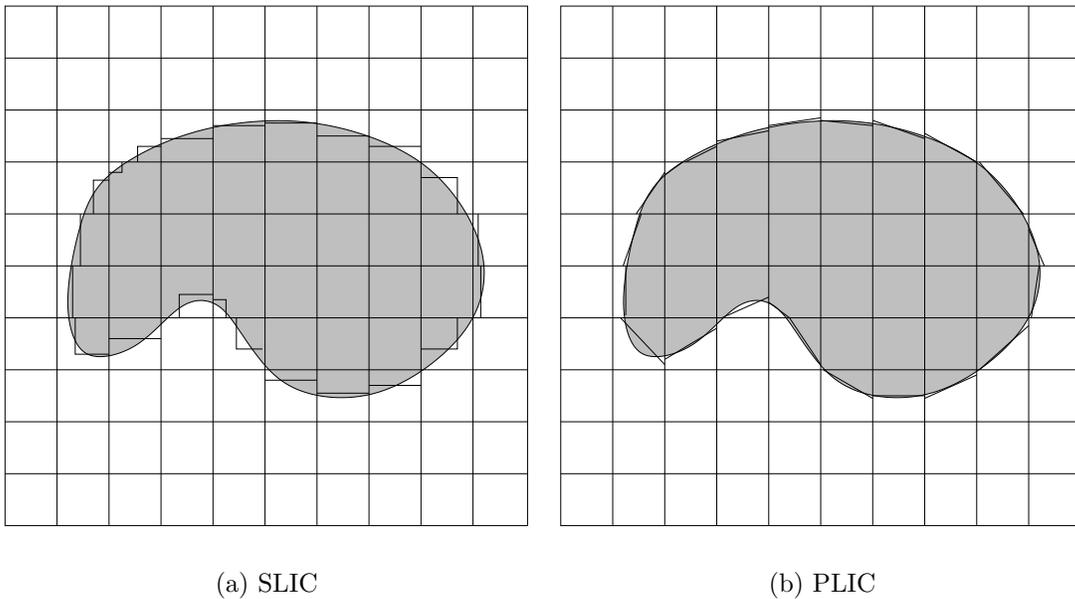


Abbildung 3.2: Rekonstruktion des Gebietsrandes bei der Volume-Of-Fluid-Methode

Ebenfalls zur Klasse der sogenannten Volume-Tracking-Verfahren gehört die in [HN81] vorgestellte *Volume-Of-Fluid-Methode*. Anstelle von Partikeln zur Markierung des Fluidgebietes wird eine Funktion F verwendet, die den “Füllstand” einer Zelle angibt. In Zellen, durch die das Interface verläuft, gibt sie den Anteil des Fluidvolumens am Zellvolumen an, in Zellen im Inneren des Fluidgebietes nimmt F den Wert 1 an, außerhalb verschwindet F . Die zeitliche Entwicklung des Fluidgebietes wird durch die Evolutionsgleichung

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla F = 0$$

bestimmt. Der Speicherbedarf der VOF-Methode ist im Vergleich zur Marker-and-Cell-Methode wesentlich reduziert. Die exakte Lage des Interfaces muss aber auch bei der Volume-of-Fluid-Methode gesondert bestimmt werden. Üblicherweise wird dazu der Rand linear approximiert, wie in Abbildung 3.2 gezeigt, in einer einfachen Version mittels achsenparalleler Geradenstücke (Simple-Line-Interface-Calculation, SLIC), bei einer verbesserten Variante (Piecewise-Linear-Interface-Calculation, PLIC) wird zunächst mit Hilfe des Gradienten von F die Normale des Gebietsrandes ermittelt, anschließend wird das Geradenstück so verschoben, dass seine Position den Fluidanteil in der Zelle korrekt wiedergibt. Keines dieser Verfahren garantiert jedoch eine stetige Approximation des Randes.

3.2 Lagrange-Methoden

Ein weiterer Typ von Verfahren zur Behandlung von beweglichen Geometrien basiert auf der Lagrange-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen. Diese erhält man aus (2.20) analog zu den Umformungen, die in Abschnitt 2.4 für das strukturmechanische Teilproblem gemacht wurden. Für inkompressible Fluide lautet die Darstellung mit den Lagrange-Koordinaten \mathbf{X} als unabhängigen Variablen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + f & (3.1) \\ \boldsymbol{\sigma} &= -pI + \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \end{aligned}$$

Verfahren zur Lösung von Erhaltungsgleichungen in der Lagrange-Formulierung kommen üblicherweise in der Festkörpermechanik zum Einsatz, es gibt jedoch auch gute Gründe, diese Methode in der Strömungsmechanik einzusetzen. Zunächst fällt auf, dass in den Gleichungen (3.1) keine konvektiven Terme auftreten. Dies liegt daran, dass die Erhaltungssätze auf materielle Kontrollvolumen angewendet werden, d.h. die Zuordnung zwischen den Teilchen eines Kontinuums und ihrem Kontrollvolumen bleibt erhalten und somit entstehen keine Masseflüsse über die Ränder dieser Kontrollvolumen. Für die numerische Lösung bedeutet dies, dass die schwierige Behandlung der konvektiven Terme, durch die oft unphysikalische numerische Diffusion entsteht, ersetzt wird durch ein einfaches geometrisches Problem, nämlich die Gitterpunkte mit der lokalen Fluidgeschwindigkeit mitzubewegen. Dies führt dazu, dass das Gitter automatisch in jedem Zeitschritt eine Zerlegung des tatsächlichen Fluidgebietes in Zellen liefert und der Rand des Gebietes durch Zellränder gegeben ist, was die Implementierung von Randbedingungen bei Lagrange-Verfahren einfacher und genauer möglich macht als bei den Verfahren aus dem vorigen Abschnitt.

In der Praxis zeigt sich jedoch ein gravierender Nachteil von rein Lagrangeschen Techniken. Ohne Einschränkung sind sie nur auf "gutmütige" Strömungen anwend-

bar, denn es ist offensichtlich, dass Scherkräfte oder Rotationen im Fluid sehr schnell zu großen Verzerrungen des Gitters führen können. In diesem Fall muss das Gitter vollständig neu generiert werden und anschließend müssen alle Feldgrößen mittels Interpolation auf das neue Gitter übertragen werden, was im Hinblick auf die Vermeidung numerischer Diffusion nicht wünschenswert ist. Außerdem ist es bisher mit Lagrange-Verfahren nicht möglich, topologische Änderungen des Berechnungsgebietes, etwa das Ablösen eines Teilgebietes, umzusetzen.

Die Entscheidung für ein Verfahren zur Behandlung flexibler Geometrien ist letztendlich auch vom zugrundeliegenden physikalischen Problem abhängig. Zu den Entscheidungskriterien gehört unter anderem die Frage, ob es notwendig ist, topologische Änderungen des Berechnungsgebietes zu berücksichtigen, dies würde beinahe zwangsläufig die Verwendung eines Volume-Tracking-Verfahrens nach sich ziehen. Ein weiterer wesentlicher Aspekt ist die Approximation des Gebietsrandes durch das verwendete Verfahren: wie wichtig ist eine möglichst exakte Rekonstruktion und welche Bedeutung haben die Randbedingungen am Interface? Dieser zweite Punkt ist ausschlaggebend für die vorliegende Arbeit. Im Rahmen der Lösung des gekoppelten Problems spielen die Randbedingungen am beweglichen Interface eine hervorgehobene Rolle, da durch sie sämtliche Kopplungseffekte modelliert werden. Wegen der genannten Schwierigkeiten mit der Randdarstellung soll deshalb kein Euler-Verfahren zum Einsatz kommen, eine reine Lagrange-Technik ist jedoch wegen der Entartung des Gitters auch nicht erste Wahl.

Einen Ausweg aus dieser Situation bietet die sogenannte *Arbitrary-Lagrange-Euler-Methode* (vgl. [DP90]). Sie entspricht einem Lagrange-Verfahren dahingehend, dass der Gebietsrand bzw. das Interface mit dem Rand von Gitterzellen zusammenfällt und sich die Gitterpunkte im Inneren ebenfalls bewegen. Um einer Verzerrung des Gitters vorzubeugen, ist diese Bewegung jedoch nicht an die lokale Fluidgeschwindigkeit gekoppelt, sondern es wird den Knoten gestattet, sich weitestgehend frei zu bewegen. Um dies zu erreichen, ist eine alternative Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen notwendig, die wir im folgenden Abschnitt herleiten wollen.

3.3 Die Arbitrary-Lagrange-Euler-Methode

Wir beginnen, indem wir den Rahmen der Euler- und Lagrange-Darstellung aus Abschnitt 2.2 um ein zusätzliches Gebiet Ω_Y zusammen mit einer \mathcal{C}^1 -invertierbaren Abbildung

$$\begin{aligned}\Psi : \Omega_Y &\rightarrow \Omega(t), \\ (\mathbf{Y}, t) &\rightarrow \mathbf{y}(t) = \Psi(\mathbf{Y}, t)\end{aligned}$$

erweitern, so dass sich die in Abbildung 3.3 skizzierte Situation ergibt.

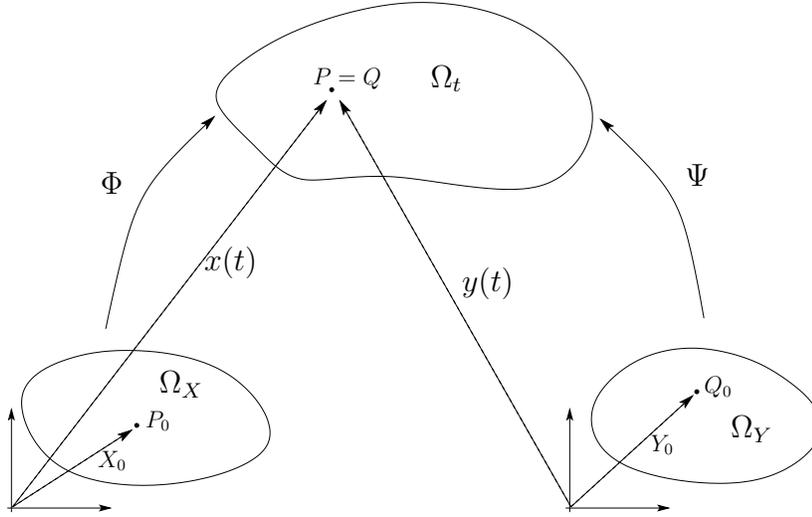


Abbildung 3.3: Zur Illustration der ALE-Formulierung

Wie bereits angesprochen, unterscheiden wir nun zwischen Anfangskonfiguration, d.h. undeformiertem Zustand des Kontinuums, und Referenzkonfiguration, indem wir Ω_Y zum Referenzgebiet machen. Die neue Abbildung $\Psi(\mathbf{Y}, t)$ liefert eine Bewegungsbeschreibung für Punkte $\mathbf{Y} \in \Omega_Y$, die unabhängig von der ist, die durch die Abbildung Φ für Teilchen aus dem materiellen Gebiet gegeben ist. Einen Punkt P mit den Koordinaten $\mathbf{x}(t) \in \Omega(t)$ kann man nun zu einem festen Zeitpunkt t auffassen als das Bild zweier Punkte P_0 mit den Koordinaten $\mathbf{X}_0 \in \Omega_X$ und Q_0 mit den Koordinaten $\mathbf{Y}_0 \in \Omega_Y$ unter den Abbildungen Ψ und Φ , d.h.

$$\mathbf{x}(t) = \Phi(\mathbf{X}_0, t) = \Psi(\mathbf{Y}_0, t) = \mathbf{y}(t)$$

Da die Abbildungen Φ und Ψ unterschiedliche Bewegungen beschreiben, gilt diese Identität nur zu diesem festen Zeitpunkt t .

Die Motivation für diese Konstruktion liegt darin, dass bei der später folgenden Diskretisierung, und damit der konkreten Festlegung der Abbildung Ψ , die Koordinaten \mathbf{Y} aus dem Referenzgebiet Ω_Y Knoten des Gitters repräsentieren werden. Analog zu den Definitionen aus Abschnitt 2.2 ist die Verschiebung eines Punktes aus dem Referenzgebiet durch

$$\mathbf{u}_g(\mathbf{Y}, t) = \Psi(\mathbf{Y}, t) - \Psi(\mathbf{Y}, 0) = \Psi(\mathbf{Y}, t) - \mathbf{Y} \quad (3.2)$$

gegeben und die Geschwindigkeit dieser Bewegung erhält man durch

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{Y}, t) = \frac{\partial \mathbf{u}_g}{\partial t} \Big|_{\mathbf{Y}} = \frac{\partial \Psi(\mathbf{Y}, t)}{\partial t} \Big|_{\mathbf{Y}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{Y}} \quad (3.3)$$

Der Index g soll hier bereits andeuten, dass es sich im diskreten Fall um Verschiebung und Geschwindigkeit des Gitters handelt.

Entsprechend zur substantiellen Ableitung aus Abschnitt 2.2 erhalten wir durch Anwenden der Kettenregel auf die Verknüpfung $\varphi \circ \Psi$ eine Formel zur Auswertung der Zeitableitung bei fixierten \mathbf{Y} -Koordinaten, nämlich

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}|_{\mathbf{Y}} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}|_{\mathbf{y}} + \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t}|_{\mathbf{Y}} \cdot \nabla \varphi \quad (3.4)$$

Zusammen mit (3.3) erhalten wir die folgende Beziehung zwischen der im folgenden ALE-Ableitung genannten Zeitableitung mit fixierten \mathbf{Y} -Koordinaten und der gewöhnlichen partiellen Zeitableitung:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}|_{\mathbf{y}} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}|_{\mathbf{Y}} - \mathbf{v}_g \cdot \nabla \varphi \quad (3.5)$$

Wir betrachten nun die allgemeine Form eines skalaren Erhaltungssatzes,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot F(\varphi) = f \quad (3.6)$$

Indem wir in (3.6) mittels (3.5) die partielle Zeitableitung durch die ALE-Ableitung ersetzen, erhalten wir die ALE-Formulierung

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}|_{\mathbf{Y}} + \nabla \cdot F(\varphi) - \mathbf{v}_g \cdot \nabla \varphi = f \quad (3.7)$$

Der Hauptunterschied zur ursprünglichen Darstellung besteht im Auftreten eines zusätzlichen konvektiven Terms, der aus der Bewegung des Berechnungsgebietes herrührt.

Als Grundlage für eine Diskretisierung mit der Finite-Volumen-Methode, die sich als zweckmäßig zur Diskretisierung von Erhaltungsgleichungen erwiesen hat und auch in dieser Arbeit zum Einsatz kommen soll, benötigen wir eine ALE-Formulierung in integraler Darstellung. Zu deren Herleitung verwenden wir die folgende Variante des Reynolds-Transport-Theorems (2.5): es sei $V_y \subset \Omega(t)$ das Bild eines beliebigen Teilvolumens $V_Y \subset \Omega_Y$ des Referenzgebietes unter der Abbildung Ψ , dann gilt

$$\frac{d}{dt} \int_{V_y} \varphi(\mathbf{y}, t) dV = \int_{V_y} \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{y}, t) + \nabla \cdot (\varphi \mathbf{v}_g) dV \quad (3.8)$$

wobei die Zeitableitung $\frac{d}{dt}$ bezüglich fester \mathbf{Y} -Koordinaten zu verstehen ist.

Wir integrieren nun (3.6) über ein Volumen $V \subset \Omega_t$ und benutzen (3.8), um die Zeitableitung des Integrals umzuformen und erhalten die integrale ALE-Darstellung des skalaren Erhaltungsgesetzes (3.6):

$$\frac{d}{dt} \int_V \varphi + \nabla \cdot (F(\varphi) - \varphi \mathbf{v}_g) dV = \int_V f dV \quad (3.9)$$

Wir können nun (3.9) benutzen, um eine integrale ALE-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen zu erhalten. Zur Herleitung des Masseerhalts in ALE-Form setzen wir $\varphi = \rho$, $F(\varphi) = \varphi \mathbf{v}$ und $f = 0$ und es ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_{\partial V} \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.10)$$

Für den Impulserhalt gilt $\varphi = \rho \mathbf{v}$ sowie $F(\varphi) = \rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \boldsymbol{\sigma}$ und durch komponentenweises Anwenden von (3.9) erhält man

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV + \int_{\partial V} [\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \mathbf{v} - \boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} dS = \int_V f dV \quad (3.11)$$

Dabei wurden die Volumenintegrale über eine Divergenz mit dem Gaußschen Satz in Randintegrale umgewandelt.

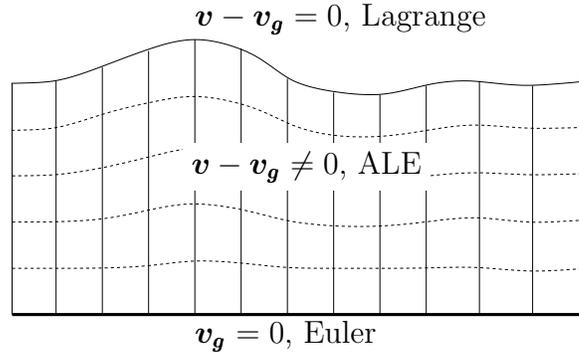


Abbildung 3.4: ALE als Verallgemeinerung von Euler- und Lagrange-Darstellung

In den Gleichungen (3.10)-(3.11) sind sowohl Lagrange- als auch Euler-Darstellung als Spezialfälle enthalten. Dies motiviert die Bezeichnung *Arbitrary-Lagrange-Euler*-Formulierung. Wählen wir als Referenzgebiet $\Omega_Y = \Omega_X$ und setzen $\Psi = \Phi$, so ergibt sich daraus $\mathbf{v}_g = \mathbf{v}$ und in den Gleichungen (3.10)-(3.11) verschwindet die *relative* Geschwindigkeit $\mathbf{v} - \mathbf{v}_g$, so dass wir die Lagrange-Darstellung der Navier-Stokes-Gleichungen erhalten. Die Wahl von $\Omega_Y = \Omega_t$ und Ψ als die Identitätsabbildung hingegen resultiert in $\mathbf{v}_g = 0$ und der Euler-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen.

Jede andere Wahl von Ω_Y und Ψ liefert eine neue Darstellung, die eine lagrangeartige Sichtweise an bewegten Rändern mit der Euler-Formulierung an festen Rändern verknüpft (s. Abbildung 3.4).

Die ALE-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen liefert uns eine im kontinuierlichen Sinne exakte Darstellung zur Berechnung von Geschwindigkeiten und Druck in zeitabhängigen Gebieten. Die in die neue Formulierung der Gleichungen eingebrachte Gebietsgeschwindigkeit \mathbf{v}_g scheint dabei a priori frei wählbar zu sein, so dass man

die Bewegung des Gitters nutzen kann, um bestimmte gewünschte Eigenschaften zu erfüllen. An festen Rändern wird sich natürlich $\mathbf{v}_g = 0$ ergeben, ebenso entspricht durch den randangepassten Verlauf des Gitters \mathbf{v}_g an bewegten Rändern der Randgeschwindigkeit, im Inneren des Gebietes wäre es nun sinnvoll, die Geschwindigkeit \mathbf{v}_g so zu wählen, dass Verzerrungen minimiert werden, dies könnte beispielsweise durch ein elliptisches Gitterglättungsverfahren erfolgen. Im folgenden Abschnitt wird sich allerdings zeigen, dass die Gittergeschwindigkeit einer *geometrischen* Einschränkung unterliegt.

3.4 Geometrische Erhaltungssätze

Bei vielen praktischen Problemstellungen wird die Geschwindigkeit des Gitters nicht explizit als Funktion gegeben sein. Viel wahrscheinlicher ist es, dass die Informationen, die zur Verfügung stehen, in der neuen Position der Knoten besteht. Dies ist z.B. auch im Rahmen eines Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblems der Fall, wo aus dem strukturmechanischen Teilproblem die neue Position des Randes hervorgeht. Da die Gittergeschwindigkeit \mathbf{v}_g zur Auswertung des konvektiven Termes benötigt wird, muss man sie also aus den Positionen des Gitters zu verschiedenen Zeitpunkten rekonstruieren. Dabei zeigt sich, dass die Geschwindigkeiten \mathbf{v}_g eine Art zusätzlicher Erhaltungsgleichung erfüllen müssen, nämlich

$$\frac{d}{dt} \int_V dV - \int_{\partial V} \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.12)$$

In [DP88] wird (3.12) als *Space Conservation Law* (SCL) bezeichnet, in [SPUC98] ist die Gleichung unter dem Begriff *Geometric Conservation Law* zu finden und in [ZRTC93] taucht sie mit der Bezeichnung *Volume Conservation Law* (VCL) als eine von zwei Gleichungen auf, die gemeinsam als *Geometric Conservation Laws* bezeichnet werden. Das VCL setzt die zeitliche Änderungsrate eines beweglichen Kontrollvolumens in Beziehung zur Geschwindigkeit des Gitters, seinen Ursprung hat es in dem selbstverständlichen Prinzip, dass ein beliebig bewegliches Gitter das Geschwindigkeitsfeld einer Strömung nicht beeinflussen darf. Formal kann man daher das VCL aus der ALE-Formulierung der Massebilanzgleichung herleiten, indem man in (3.10) konstante Dichte und ein verschwindendes Geschwindigkeitsfeld einsetzt.

Das zweite in [ZRTC93] erwähnte geometrische Erhaltungsgesetz ist das *Surface Conservation Law*

$$\int_{\partial V} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.13)$$

es ergibt sich aus (3.10) durch die Wahl eines konstanten Geschwindigkeitsfeldes in einer beliebigen Richtung \mathbf{a} auf einem festen Gitter und besagt, dass ein Volumen V durch seine Seitenflächen geschlossen sein muss. Diese Forderung mag auf den ersten Blick

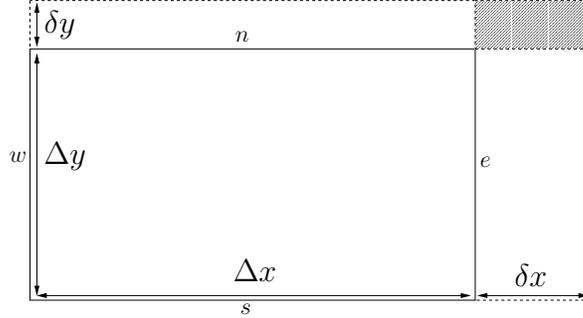


Abbildung 3.5: Zur Notwendigkeit des Space Conservation Laws

trivial erscheinen, besonders bei dreidimensionalen Finite-Volumen-Diskretisierungen ist jedoch Sorgfalt bei der Berechnung von Normalenvektoren geboten, um (3.13) zu erfüllen.

Bereits an einem einfachen Beispiel zeigt sich die Notwendigkeit, Gleichung (3.12) bei der numerischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen auf beweglichen Gittern zu erfüllen, denn die Verletzung des VCL führt zu Fehlern in der Massebilanz (vgl. [FP97, DP88]).

Wir betrachten ein Kontrollvolumen Ω eines zweidimensionalen kartesischen Gitters. Die einzelnen Teile des Randes von Ω bewegen sich mit konstanter, aber unterschiedlicher Geschwindigkeit, so dass sich Ω im Laufe der Zeit vergrößert, wie in Abbildung 3.5 skizziert. Die Gittergeschwindigkeit \mathbf{v}_g berechnen wir mit dem naheliegenden Ansatz

$$\mathbf{v}_g = \frac{\Delta \mathbf{x}}{\Delta t}, \quad (3.14)$$

wobei $\Delta \mathbf{x}$ die Strecke ist, die ein Gitterpunkt während eines Zeitschrittes der Größe Δt zurückgelegt hat. Diese Wahl von \mathbf{v}_g ist die exakte Geschwindigkeit eines Gitterpunktes, jedoch verletzt sie das VCL.

Wir diskretisieren nun die ALE-Massebilanzgleichung (3.10) mit dem expliziten Euler-Verfahren auf dem Kontrollvolumen Ω und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{|\Omega^{n+1}| - |\Omega^n|}{\Delta t} + [(u^n - u_g^n)|_e - (u^n - u_g^n)|_w](\Delta y)^n \\ + [(v^n - v_g^n)|_n - (v^n - v_g^n)|_s](\Delta x)^n = 0, \end{aligned} \quad (3.15)$$

wobei u und v die kartesischen Komponenten der Strömungsgeschwindigkeit sowie u_g und v_g entsprechend die Komponenten von \mathbf{v}_g sind. Indem wir konstante Strömungsgeschwindigkeit annehmen, vereinfachen wir (3.15) zu

$$\begin{aligned} \frac{|\Omega^{n+1}| - |\Omega^n|}{\Delta t} - (u_g^n|_e - u_g^n|_w)(\Delta y)^n \\ - (v_g^n|_n - v_g^n|_s)(\Delta x)^n = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Mit (3.14) erhalten wir die Ausdrücke

$$u_g^n|_e - u_g^n|_w = \frac{\delta x}{\Delta t} \quad (3.17)$$

und

$$v_g^n|_n - v_g^n|_s = \frac{\delta y}{\Delta t} \quad (3.18)$$

Für das Volumen zum alten respektive neuen Zeitschritt gilt

$$|\Omega^{n+1}| = (\Delta x)^{n+1}(\Delta y)^{n+1} \quad (3.19)$$

bzw.

$$|\Omega^n| = (\Delta x)^n(\Delta y)^n \quad (3.20)$$

Setzen wir nun (3.17)-(3.20) in (3.16) ein und beachten noch, dass

$$(\Delta x)^{n+1} = (\Delta x)^n + \delta x$$

sowie

$$(\Delta y)^{n+1} = (\Delta y)^n + \delta y$$

gilt, stellen wir fest, dass die Kontinuitätsgleichung (3.15) nicht erfüllt wird, wir erhalten den Fehlerterm

$$-\frac{\delta x \delta y}{\Delta t} = -(u_g^n|_e - u_g^n|_w)(v_g^n|_n - v_g^n|_s)\Delta t \quad (3.21)$$

Man erhält den gleichen Fehlerterm, lediglich mit umgekehrtem Vorzeichen, wenn man die Massebilanzgleichung mit dem impliziten Euler-Verfahren diskretisiert, ebenso liefern Verfahren höherer Ordnung Fehler, wenn die hier gemachten Vereinfachungen wie z.B. Annahme von konstanten Geschwindigkeiten wegfallen.

Obwohl der Fehler für konstante Gittergeschwindigkeiten proportional zur Zeitschrittgröße Δt ist und somit die gleiche Fehlerordnung hat wie die hier durchgeführte Zeitdiskretisierung, ist das keine Berechtigung, das VCL zu vernachlässigen, denn Fehler in Form von künstlichen Massequellen summieren sich im Laufe der Zeit auf und können dadurch die numerische Lösung zerstören.

Es kann mitunter, besonders in drei Dimensionen, schwierig sein, explizite Formeln für \mathbf{v}_g anzugeben, die das VCL erfüllen. In [ZRTC93] und [DP88] wird aber ein Weg aufgezeigt, wie das VCL so in Finite-Volumen-Diskretisierungen eingebaut werden kann, dass es implizit erfüllt ist. Weitere Angaben hierzu werden in Abschnitt 4.2.3 gemacht.

Bereits auf der kontinuierlichen Ebene kommt ein weiterer Grund zum Vorschein, der für die Verwendung des VCL spricht. Wenn nämlich die Gebietsgeschwindigkeit

\mathbf{v}_g das VCL erfüllt und wir diese Information in der ALE-Massebilanzgleichung (3.10) nutzen, reduziert sich (3.10) für inkompressible Fluide zur gewohnten Form

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\Omega} d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{n} dS}_{=0 \text{ wg. VCL}} + \int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.22)$$

da sich das Randintegral von \mathbf{v}_g gerade gegen die Volumenänderungsrate weghebt. Durch die Einführung beweglicher Gitter sind also am prinzipiellen Verlauf eines Splitting-Verfahrens, wie z.B. der Chorin'schen Projektionsmethode, keine Änderungen notwendig.

Kapitel 4

Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen auf zeitabhängigen Gebieten

In diesem Kapitel wird die Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen unter Einbeziehung zeitabhängiger Gitter durchgeführt. Anschließend wird der Algorithmus zur Behandlung von Strömungsproblemen mit zeitabhängiger, aber zu jedem Zeitpunkt explizit vorgegebener Geometrie erläutert und es werden einige numerische Ergebnisse, die mit diesem Verfahren erzielt wurden, vorgestellt.

Zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen ist es zunächst notwendig, das Berechnungsgebiet mit einem Gitter zu überziehen, d.h. es mit einer diskreten Menge von Punkten zu versehen, an denen dann die in den Gleichungen auftretenden Differentialoperatoren ausgewertet werden. Dabei unterscheidet man verschiedene Typen von Gittern. Bei Finite-Elemente-Methoden kommen zumeist *unstrukturierte* Gitter zum Einsatz, diese werden auf einem beliebigen Gebiet durch Unterteilung in Dreiecke oder Vierecke (bzw. Tetraeder, Hexaeder oder Prismen in drei Dimensionen) aufgebaut. Dies ist die allgemeinste Art, ein Gitter zu bilden, allerdings ist sie auch mit dem größten Aufwand sowohl bei der Generierung als auch bei der Datenverwaltung verbunden.

Strukturierte Gitter erweisen sich als besonders attraktiv dadurch, dass sie einfach zu erzeugen und zu verwalten sind, ohne zusätzlichen Aufwand liefert die Position eines Knotens in der Datenstruktur gleichzeitig seine Koordinaten und Informationen über Nachbarschaftsbeziehungen. Jedoch ist ihrer Anwendung hinsichtlich der Gebietsformen Grenzen gesetzt.

Ein weiterer weitverbreiteter Typ ist der des *blockstrukturierten* Gitters. Zuerst wird eine relative grobe Unterteilung des Berechnungsgebietes in Blöcke vorgenommen, anschließend wird jeder dieser Blöcke mit einem strukturierten Gitter versehen.

Diese Technik verbindet Flexibilität bei der Beschreibung von unregelmäßigen Geometrien mit den Implementierungsvorzügen, die strukturierte Gitter zu bieten haben. Die Blockunterteilung bietet auch einen möglichen Ansatz zur parallelen Bearbeitung, denn die Berechnungen auf den einzelnen Blöcken können weitestgehend unabhängig voneinander, und somit auf verschiedenen Rechnern oder Knoten eines Parallelrechners durchgeführt werden.

Einen guten Überblick über das Thema der Gittergenerierung bieten sowohl [Lis99] als auch [TWM85].

Als Implementierungsgrundlage für diese Arbeit dient der Strömungslöser *nscl*, der im Rahmen von [Mey01] entwickelt wurde. Das Programm verwendet ein blockstrukturiertes Gitter, bei dem in jedem Block durch eine Koordinatentransformation ein an gekrümmte Ränder angepasstes Gitter erzeugt wird. Dieses Vorgehen entspricht weitestgehend der Finite-Volumen-Methode, die in [Zij96] und [WSKB97] vorgestellt wurde.

Um die notwendigen Grundlagen für die zeitabhängige randangepasste Diskretisierung zu schaffen, beschreiben wir im folgenden Abschnitt zunächst die Diskretisierung eines einzelnen Blocks, dabei stützen wir uns auf die Darstellungen in [Zij96] und [WSKB97]. Im darauffolgenden Abschnitt 4.2 werden wir dann das ALE-Konzept konkretisieren, indem wir die Abbildung Ψ näher spezifizieren.

4.1 Ortsdiskretisierung mittels der Finite-Volumen-Methode

Zunächst benötigen wir einige Aussagen über Koordinatentransformationen und die Berechnung bestimmter geometrischer Größen. Sämtliche auftretenden Größen werden letztendlich auch von der Zeit t abhängen, in diesem Abschnitt betrachten wir jedoch einen festen Zeitpunkt und lassen der übersichtlicheren Darstellung wegen den Zeitindex t weg.

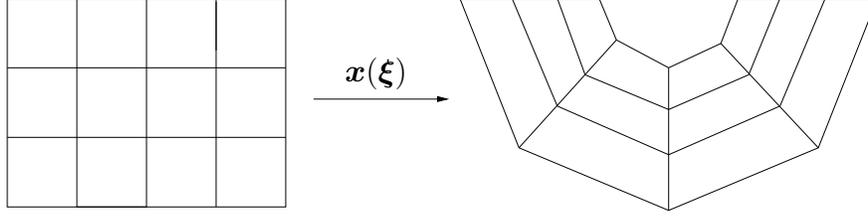
4.1.1 Koordinatentransformation

Wir betrachten ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, das topologisch äquivalent ist zu einem aus Einheitswürfeln zusammengesetzten Quader $G = [0, N_1] \times [0, N_2] \times [0, N_3]$. Es seien

$$e_1 = \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), \quad e_2 = \left(0, \frac{1}{2}, 0\right), \quad e_3 = \left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$$

die ‘‘halben’’ Standardbasisvektoren, dann ist für $0 \leq n_\alpha < N_\alpha$, $n \in \mathbb{N}$, $\alpha = 1, 2, 3$ der Mittelpunkt eines Würfels G_j gegeben durch

$$\mathbf{j} = (j_1, j_2, j_3) = \left(n_1 + \frac{1}{2}, n_2 + \frac{1}{2}, n_3 + \frac{1}{2}\right).$$


 Abbildung 4.1: Gittertransformation durch \mathbf{x}

Außerdem bezeichnen dann $\mathbf{j} \pm e_\alpha$ Seitenflächenmittelpunkte, $\mathbf{j} \pm e_\alpha \pm e_\beta$, $\beta \neq \alpha$ Kantenmittelpunkte sowie $\mathbf{j} \pm e_1 \pm e_2 \pm e_3$ die Eckpunkte des Würfels $G_{\mathbf{j}}$.

Wir konstruieren nun eine Transformationsabbildung $\mathbf{x} : \bar{G} \rightarrow \bar{\Omega}$ dadurch, dass wir sie zunächst nur auf den Eckpunkten der Würfel $G_{\mathbf{j}}$ vorgeben durch

$$\mathbf{x}(\mathbf{j} \pm e_1 \pm e_2 \pm e_3) = \mathbf{x}_{\mathbf{j} \pm e_1 \pm e_2 \pm e_3} \quad (4.1)$$

und dann mittels trilinearer Interpolation im Inneren eines Würfels fortsetzen, d.h. für ξ in $G_{\mathbf{j}}$ ist

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(\xi) &= \mathbf{x}_0 + \sum_{\alpha=1}^3 \mathbf{c}_\alpha (\xi_\alpha - j_\alpha) + \sum_{\alpha < \beta} \mathbf{c}_{\alpha\beta} (\xi_\alpha - j_\alpha) (\xi_\beta - j_\beta) \\ &+ \mathbf{c}_{123} (\xi_1 - j_1) (\xi_2 - j_2) (\xi_3 - j_3) \end{aligned}$$

mit Konstanten ξ_0 und \mathbf{c} , diese unterscheiden sich von Zelle zu Zelle und ergeben sich aus (4.1), müssen aber hier nicht näher bestimmt werden.

Weitere Bedingungen, die wir an die Transformationsabbildung \mathbf{x} richten, sind Bijektivität von \mathbf{x} und Positivität¹ der Jacobideterminante

$$J = \det D\mathbf{x} = \left| \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right)_{ij} \right|, \quad (4.2)$$

außerdem soll der Rand von G auf den Rand von Ω abgebildet werden, d.h. es gilt $\mathbf{x}(\partial G) = \partial \Omega$, und überall auf $\partial \Omega$ ist $\xi_\alpha = \text{const}$ für ein geeignetes $\alpha \in \{1, 2, 3\}$.

Das Bild eines Würfels $G_{\mathbf{j}}$ unter der Abbildung \mathbf{x} ist ein Kontrollvolumen im Gebiet Ω und wird mit $\Omega_{\mathbf{j}}$ bezeichnet. In Abbildung 4.2 wird die Transformation eines Würfels skizziert und exemplarisch sind einige der oben angegebenen Stellen eingezeichnet.

¹Die Forderung $J > 0$ statt $J \neq 0$ ergibt sich auch aus der Lagrange-Form des Masseerhalts(s. [Bel98]), für die Praxis bedeutet dies eine Einschränkung auf orientierungserhaltende Abbildungen.

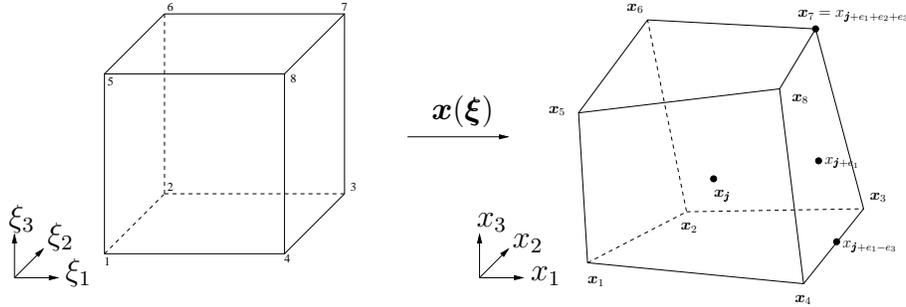


Abbildung 4.2: Transformation einer Zelle

4.1.2 Geometrische Größen

Bevor wir die in den Gleichungen auftretenden Differentialoperatoren in die logischen Koordinaten $\boldsymbol{\xi}$ transformieren können, benötigen wir noch die *kovarianten* und *kontravarianten* Basisvektoren. Die kovarianten oder auch tangentialen Basisvektoren sind gegeben durch

$$\mathbf{a}_{(\alpha)} := \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (4.3)$$

sie lassen sich aus den Eckpunkten einer Zelle Ω_j wie folgt berechnen: es bezeichne $\mathbf{x}_{ijkl} := \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j + \mathbf{x}_k + \mathbf{x}_l$ mit der Nummerierung der Ecken wie in Abbildung 4.2, dann sind die kovarianten Basisvektoren im Zellmittelpunkt gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{(1),j} &= \frac{1}{4}(\mathbf{x}_{3478} - \mathbf{x}_{1256}) \\ \mathbf{a}_{(2),j} &= \frac{1}{4}(\mathbf{x}_{2367} - \mathbf{x}_{1458}) \\ \mathbf{a}_{(3),j} &= \frac{1}{4}(\mathbf{x}_{5678} - \mathbf{x}_{1234}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Da \mathbf{x} stückweise definiert ist, sind die $\mathbf{a}_{(\alpha)}$ nicht überall stetig, insbesondere existiert $\mathbf{a}_{(\alpha)}$ zwar in Seitenflächen mit $\xi_\alpha = \text{const}$, stimmt dort aber für aneinandergrenzende Zellen nicht überein. Allerdings ist für eine solche Seitenfläche $\mathbf{a}_{(\beta)}$ mit $\beta \neq \alpha$ eindeutig definiert. Diese Größen lassen sich berechnen durch

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{(1),j-e_2} &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{48} - \mathbf{x}_{15}), & \mathbf{a}_{(1),j-e_3} &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{34} - \mathbf{x}_{12}), \\ \mathbf{a}_{(2),j-e_1} &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{26} - \mathbf{x}_{15}), & \mathbf{a}_{(2),j-e_3} &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{23} - \mathbf{x}_{14}), \\ \mathbf{a}_{(3),j-e_1} &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{56} - \mathbf{x}_{12}), & \mathbf{a}_{(3),j-e_2} &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{58} - \mathbf{x}_{14}), \end{aligned} \quad (4.5)$$

mit $\mathbf{x}_{ij} := \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j$.

Die kontravarianten oder auch normalen Basisvektoren sind definiert durch

$$\mathbf{a}^{(\alpha)} := \nabla \xi_\alpha, \alpha = 1, 2, 3, \quad (4.6)$$

wobei ξ die Umkehrabbildung von \mathbf{x} ist. Aus (4.2) ergibt sich²

$$\sqrt{g} = J = \mathbf{a}_{(1)} \cdot (\mathbf{a}_{(2)} \times \mathbf{a}_{(3)}) \quad (4.7)$$

Da sowohl der Vektor $\mathbf{a}_{(\beta)} \times \mathbf{a}_{(\gamma)}$ als auch der kontravariante Basisvektor $\mathbf{a}^{(\alpha)}$ normal zu einer Koordinatenfläche mit $\xi_\alpha = \text{const}$ sind, gilt bei zyklischer Vertauschung von α, β, γ

$$\mathbf{a}^{(\alpha)} = c(\mathbf{a}_{(\beta)} \times \mathbf{a}_{(\gamma)}) \quad (4.8)$$

mit einer Konstanten c . Beachten wir, dass gilt

$$\mathbf{a}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{a}_{(\beta)} = \delta_\beta^\alpha \quad (4.9)$$

und multiplizieren (4.8) mit $\mathbf{a}_{(\alpha)}$, so erhalten wir

$$1 = c\sqrt{g} \quad (4.10)$$

also

$$\mathbf{a}^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{g}}(\mathbf{a}_{(\beta)} \times \mathbf{a}_{(\gamma)}) \quad (4.11)$$

Aus den Glattheitseigenschaften von $\mathbf{a}_{(\alpha)}$ geht hervor, dass sowohl \sqrt{g} als auch $\mathbf{a}^{(\alpha)}$ unstetig in Seitenflächen der Kontrollvolumen sind. Jedoch ist

$$\sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha)} = \mathbf{a}_{(\beta)} \times \mathbf{a}_{(\gamma)} \quad (4.12)$$

stetig in Seitenflächen mit $\xi_\alpha = \text{const}$. In [WSKB97] wird gezeigt, dass sich diese Vektoren in den Seitenflächenmittelpunkten berechnen lassen durch

$$\sqrt{g}\mathbf{a}_{j+e_1}^{(1)} = \mathbf{s}_{4378}, \quad \sqrt{g}\mathbf{a}_{j+e_2}^{(2)} = \mathbf{s}_{2673}, \quad \sqrt{g}\mathbf{a}_{j+e_3}^{(3)} = \mathbf{s}_{5876}, \quad (4.13)$$

wobei $\mathbf{s}_{ijkl} := \frac{1}{2}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l) \times (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i)$ gilt. Die Größen $\sqrt{g}\mathbf{a}_{j+e_\alpha}^{(\alpha)}$ sind flächengewichtete Normalenvektoren, d.h. die Länge des Vektors $\sqrt{g}\mathbf{a}_{j+e_\alpha}^{(\alpha)}$ ist gleich dem Flächeninhalt der Seitenfläche mit Mittelpunkt \mathbf{x}_{j+e_α} und er ist normal zu dieser Fläche.

Wir benötigen noch eine Formel zur Berechnung des Zellvolumens, eine effiziente Berechnungsvorschrift wird ebenfalls in [WSKB97] angegeben mit

$$\begin{aligned} |\Omega_j| &= \frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{s}_{1265} + \mathbf{s}_{4378}) + \mathbf{b}_2 \cdot (\mathbf{s}_{1584} + \mathbf{s}_{2673}) \\ &\quad + \mathbf{b}_3 \cdot (\mathbf{s}_{1432} + \mathbf{s}_{8765})) \end{aligned} \quad (4.14)$$

²In der Literatur hat sich die Bezeichnung \sqrt{g} für J durchgesetzt, denn es ist $J^2 = g$, wobei g die Determinante des kovarianten metrischen Tensors (definiert durch $g_{ij} = \mathbf{a}_{(i)} \cdot \mathbf{a}_{(j)}$) ist.

wobei die Vektoren \mathbf{b} gegeben sind durch

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{1}{8}(\mathbf{x}_{3478} - \mathbf{x}_{1256}), & \mathbf{b}_2 &= \frac{1}{8}(\mathbf{x}_{2367} - \mathbf{x}_{1458}) \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{1}{8}(\mathbf{x}_{5678} - \mathbf{x}_{1234})\end{aligned}$$

Die Diskretisierung soll eine Verallgemeinerung des klassischen *Marker-and-Cell*-Verfahrens (s. [HW65]) sein, das bedeutet, die abhängigen Variablen werden versetzt³ auf dem Gitter angeordnet (*“staggered mesh”*). Der Druck wird in Zellmittelpunkten ausgewertet, in den Seitenflächen eines Kontrollvolumens werden die Normalenkomponenten der Geschwindigkeit gespeichert. Aus den oben aufgeführten Stetigkeitseigenschaften der kontravarianten Basisvektoren $\mathbf{a}^{(\alpha)}$ ergibt sich, dass die kontravarianten Geschwindigkeitskomponenten $U^\alpha = \mathbf{a}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}$ ungeeignet sind, aus diesem Grund wählen wir als abhängige Variablen die gewichteten kontravarianten Geschwindigkeitskomponenten

$$V_{\mathbf{j}+e_\alpha}^\alpha := \sqrt{g} \mathbf{a}_{\mathbf{j}+e_\alpha}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{u} \quad (4.15)$$

Ein weiterer Vorteil, der sich aus dieser Wahl ergibt, besteht darin, dass sich $\sqrt{g} \mathbf{a}^{(\alpha)}$ mittels (4.13) effizienter berechnen lässt als $\mathbf{a}^{(\alpha)}$.

Weil $\sqrt{g} \mathbf{a}_{\mathbf{j}+e_\alpha}^{(\alpha)}$ flächengewichtete Normalenvektoren sind, liefert (4.15) eine anschauliche physikalische Interpretation der V^α als Volumenfluss über die entsprechende Seitenfläche eines Kontrollvolumens.

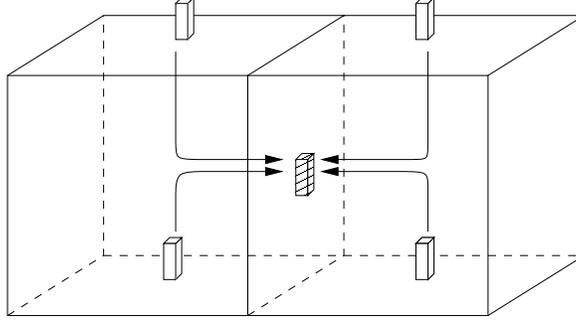
Mit (4.9) ergibt sich der folgende allgemeine Zusammenhang zwischen \mathbf{u} und V^α :

$$V^\alpha = \sqrt{g} \mathbf{a}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}, \quad \mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^3 \mathbf{a}_{(\alpha)} V^\alpha / \sqrt{g} \quad (4.16)$$

4.1.3 Interpolationsregeln

Im weiteren Verlauf ist es notwendig, V^α und \mathbf{u} an anderen Stellen als ihren Definitionspunkten auswerten zu können. Dies ermöglichen spezielle Interpolationsregeln, die sich aus der Forderung ergeben, dass ein konstantes Geschwindigkeitsfeld invariant unter der Transformation nach V^α und zurück sein soll. Genauer bedeutet dies: Transformation von konstantem \mathbf{u}_0 nach V^α , Interpolation von V^α in einen anderen Punkt und Rücktransformation dieses Wertes in kartesische Koordinaten muss den ursprünglichen Wert \mathbf{u}_0 ergeben. In [WSKB97] werden die folgenden Interpolationsregeln angegeben, die dieser Forderung genügen:

³Diese Anordnung der Variablen verhindert Oszillationen im Druck, siehe z.B. [GDN95]

Abbildung 4.3: Interpolation von V^3 in ξ_1 -Fläche

- in Zellmittelpunkten \mathbf{x}_j ist V^α gegeben durch

$$V_j^\alpha = \frac{1}{2}(V_{j+e_\alpha}^\alpha + V_{j-e_\alpha}^\alpha)$$

- in Seitenflächenmittelpunkten \mathbf{x}_{j+e_α} gilt für $\alpha \neq \beta$

$$V_{j+e_\alpha}^\beta = \frac{1}{4}(V_{j+e_\beta}^\beta + V_{j-e_\beta}^\beta + V_{j+2e_\alpha+e_\beta}^\beta + V_{j+2e_\alpha-e_\beta}^\beta)$$

- in Kantenmittelpunkten $\mathbf{x}_{j+e_\alpha+e_\beta}$ gilt

$$V_{j+e_\alpha+e_\beta}^\alpha = \frac{1}{2}(V_{j+e_\alpha}^\alpha + V_{j+e_\alpha+2e_\beta}^\alpha)$$

und für $\gamma \neq \alpha, \beta$

$$V_{j+e_\alpha+e_\beta}^\gamma = \frac{1}{8}(V_{j-e_\gamma}^\gamma + V_{j+e_\gamma}^\gamma + V_{j-e_\gamma+2e_\alpha}^\gamma + V_{j+e_\gamma+2e_\alpha}^\gamma + V_{j-e_\gamma+2e_\beta}^\gamma + V_{j+e_\gamma+2e_\beta}^\gamma + V_{j-e_\gamma+2e_\alpha+2e_\beta}^\gamma + V_{j+e_\gamma+2e_\alpha+2e_\beta}^\gamma)$$

- in Eckpunkten $\mathbf{x}_{j+e_1+e_2+e_3}$ definiert man

$$V_{j+e_1+e_2+e_3}^\alpha = \frac{1}{4}(V_{j+e_\alpha}^\alpha + V_{j+e_\alpha+2e_\beta}^\alpha + V_{j+e_\alpha+2e_\gamma}^\alpha + V_{j+e_\alpha+2e_\beta+2e_\gamma}^\alpha)$$

Dieselben Interpolationsregeln werden auch zur Auswertung von anderen Größen wie z.B. $\sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha)}$ an den entsprechenden Stellen verwendet.

4.1.4 Transformation der Ortsableitungen

Eine vollständig koordinatenunabhängige Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen mittels Tensorrechnung beinhaltet die sogenannten Christoffel-Symbole, diese setzen die zweimalige Differenzierbarkeit der Transformationsabbildung $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ voraus. Um diese Forderung abzuschwächen und eine lediglich stückweise differenzierbare Koordinatentransformation zulassen zu können, wird in [Zij96] ein etwas anderer Weg beschritten, der an dieser Stelle kurz skizziert werden soll.

Den Ausgangspunkt bilden die Navier-Stokes-Gleichungen formuliert in kartesischen Koordinaten. Zunächst werden die unabhängigen Variablen transformiert, die kartesischen Geschwindigkeitskomponenten werden jedoch noch beibehalten, so dass eine gemischte Vektor-Tensor-Formulierung entsteht. Diese wird mit der Finite-Volumen-Methode diskretisiert, wobei die Diskretisierung exakt ist für konstante Geschwindigkeitsfelder und linearen Druck auf beliebigen Gittern, außerdem ist sie von zweiter Ordnung, falls die Abbildung $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ glatt ist. Erst danach werden durch Skalarmultiplikation mit $\sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha)}$ die vektorwertigen Gleichungen für \mathbf{u} in skalare Gleichungen für V^α umgewandelt, wobei noch auftretende \mathbf{u} -Werte mittels (4.16) durch V^α ausgedrückt werden.

Einfache, lediglich mit der Kettenregel hergeleitete Transformationen der Ableitungen führen nicht zu konservativen Diskretisierungen, dazu benötigt man zusätzlich die sogenannte *Basic Identity*, sie lautet für eine n-dimensionale Koordinatentransformation⁴

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \right) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (4.17)$$

Für die Ableitung einer Funktion $f(\mathbf{x})$ gilt mit Kettenregel und Basic-Identity

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} &= \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial \xi_\beta}{\partial x_\alpha} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} + f \underbrace{\sum_{\beta=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_\beta}{\partial x_\alpha} \right)}_{=0 \text{ nach (4.17)}} \\ &= \sum_{\beta=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_\beta}{\partial x_\alpha} f \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Daraus ergibt sich für den Divergenzoperator

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot \mathbf{u} &= \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} = \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial \xi_\beta}{\partial x_\alpha} \frac{\partial u_\alpha}{\partial \xi_\beta} = \sum_{\beta=1}^3 \mathbf{a}^{(\beta)} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi_\beta} \\ &= \sum_{\alpha,\beta} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_\beta}{\partial x_\alpha} u_\alpha \right) = \sum_{\beta=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} V^\beta \end{aligned} \quad (4.19)$$

⁴vgl. [Lis99]

4.1.5 Die Kontinuitätsgleichung

Wie wir in Abschnitt 3.4 gesehen hatten, reduziert sich bei Beachtung der geometrischen Erhaltungssätze die Massebilanzgleichung auch für zeitabhängige Gitter auf die Form $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Integration über ein Kontrollvolumen Ω_j liefert zusammen mit (4.19) und der Transformationsregel

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega_j} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_i} V^i \, d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 \int_{G_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} V^i \, d\xi \\ &= \sum_{i=1}^3 \int_{j_1-\frac{1}{2}}^{j_1+\frac{1}{2}} \int_{j_2-\frac{1}{2}}^{j_2+\frac{1}{2}} \int_{j_3-\frac{1}{2}}^{j_3+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi_i} V^i \, d\xi_3 \, d\xi_2 \, d\xi_1 \end{aligned} \quad (4.20)$$

Für das Integral $\int_{j_i-1/2}^{j_i+1/2}$ nutzen wir die Stetigkeit von V^i innerhalb von G_j aus, die beiden übrigen Integrale werden mit der Mittelpunktsregel approximiert. So ergibt sich die diskrete Kontinuitätsgleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{j_2-\frac{1}{2}}^{j_2+\frac{1}{2}} \int_{j_3-\frac{1}{2}}^{j_3+\frac{1}{2}} V^1 \Big|_{j_1-\frac{1}{2}}^{j_1+\frac{1}{2}} \, d\xi_3 \, d\xi_2 + \int_{j_1-\frac{1}{2}}^{j_1+\frac{1}{2}} \int_{j_3-\frac{1}{2}}^{j_3+\frac{1}{2}} V^2 \Big|_{j_2-\frac{1}{2}}^{j_2+\frac{1}{2}} \, d\xi_3 \, d\xi_1 \\ &+ \int_{j_1-\frac{1}{2}}^{j_1+\frac{1}{2}} \int_{j_2-\frac{1}{2}}^{j_2+\frac{1}{2}} V^3 \Big|_{j_3-\frac{1}{2}}^{j_3+\frac{1}{2}} \, d\xi_2 \, d\xi_1 \\ &= \sum_{i=1}^3 (V_{\mathbf{j}+e_i}^i - V_{\mathbf{j}-e_i}^i) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Dabei ist hier und im folgenden $\Phi|_j^i := \Phi_i - \Phi_j$.

4.1.6 Die Impulsgleichung I

Der Impulssatz aus (2.20) lässt sich schreiben als

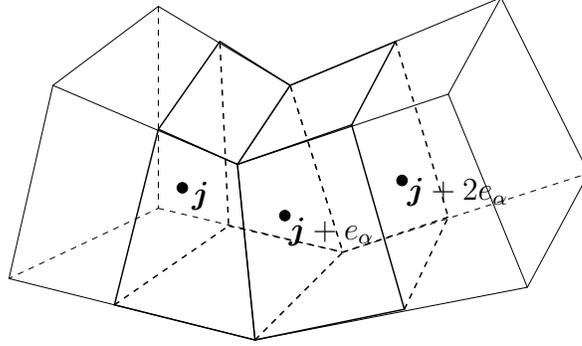
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) + \nabla p - \sum_{\alpha=1}^3 \nu \frac{\partial \mathbf{e}^{(\alpha)}}{\partial x_\alpha} = \mathbf{f} \quad (4.22)$$

mit

$$\mathbf{e}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_3} \end{pmatrix}$$

Mit (4.18) und (4.19) erhalten wir daraus

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (V^\alpha \mathbf{u}) + \nabla p - \sum_{\alpha, \beta} \nu \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (\sqrt{g} \mathbf{a}_\alpha^{(\beta)} \mathbf{e}^{(\alpha)}) = \mathbf{f} \quad (4.23)$$


 Abbildung 4.4: Verschobenes Kontrollvolumen $\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}$

Wir integrieren nun (4.23) für $\alpha = 1, 2, 3$ über ein in α -Richtung verschobenes Kontrollvolumen $\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}$ wie in Abbildung 4.4 dargestellt. Dabei ist

$$\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha} = \mathbf{x}(G_{\mathbf{j}+e_\alpha})$$

mit

$$G_{\mathbf{j}+e_\alpha} = \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]^3 + \mathbf{j} + e_\alpha.$$

Die Behandlung der Zeitableitung wird in Abschnitt 4.2.2 durchgeführt. Auf die Summanden des konvektiven Terms wenden wir zunächst die Transformationsregel an und erhalten

$$\sum_{\beta=1}^3 \int_{\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (V^\beta \mathbf{u}) d\mathbf{x} = \sum_{\beta=1}^3 \int_{G_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (V^\beta \mathbf{u}) d\xi$$

Wir betrachten nun den Summanden mit $\beta = \alpha$, diesen approximieren wir durch

$$\begin{aligned} \int_{G_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (V^\alpha \mathbf{u}) d\xi &= \int_{j_\alpha}^{j_\alpha+1} \int_{j_\beta-\frac{1}{2}}^{j_\beta+\frac{1}{2}} \int_{j_\gamma-\frac{1}{2}}^{j_\gamma+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (V^\alpha \mathbf{u}) d\xi_\gamma d\xi_\beta d\xi_\alpha \\ &= \int_{j_\beta-\frac{1}{2}}^{j_\beta+\frac{1}{2}} \int_{j_\gamma-\frac{1}{2}}^{j_\gamma+\frac{1}{2}} (V^\alpha \mathbf{u}) \Big|_{j_\alpha}^{j_\alpha+1} d\xi_\gamma d\xi_\beta \\ &\approx (V^\alpha \mathbf{u}) \Big|_{\mathbf{j}}^{\mathbf{j}+2e_\alpha} \end{aligned}$$

Dabei nutzen wir aus, dass $V^\alpha \mathbf{u}$ stetig in $G_{\mathbf{j}+e_\alpha}$ ist, auf die anderen Integrale wird die Mittelpunktsregel angewendet.

Für die Summanden mit $\beta \neq \alpha$ gilt

$$\begin{aligned}
 \int_{G_{j+e_\alpha}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (V^\beta \mathbf{u}) \, d\mathbf{x} &= \int_{j_\alpha}^{j_\alpha+1} \int_{j_\beta-\frac{1}{2}}^{j_\beta+\frac{1}{2}} \int_{j_\gamma-\frac{1}{2}}^{j_\gamma+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (V^\beta \mathbf{u}) \, d\xi_\gamma \, d\xi_\beta \, d\xi_\alpha \\
 &= \int_{j_\alpha}^{j_\alpha+1} \int_{j_\gamma-\frac{1}{2}}^{j_\gamma+\frac{1}{2}} (V^\beta \mathbf{u}) \Big|_{j_\beta-\frac{1}{2}}^{j_\beta+\frac{1}{2}} \, d\xi_\gamma \, d\xi_\alpha \\
 &\approx (V^\beta \mathbf{u}) \Big|_{j+e_\alpha-e_\beta}^{j+e_\alpha+e_\beta}
 \end{aligned}$$

Es ergibt sich also insgesamt die vorläufig noch vektorwertige Approximation des konvektiven Terms durch

$$(V^\alpha \mathbf{u}) \Big|_{j+e_\alpha}^{j+2e_\alpha} + (V^\beta \mathbf{u}) \Big|_{j+e_\alpha-e_\beta}^{j+e_\alpha+e_\beta} + (V^\gamma \mathbf{u}) \Big|_{j+e_\alpha-e_\gamma}^{j+e_\alpha+e_\gamma}, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (4.24)$$

Die Indizes β und γ sind dadurch bestimmt, dass das Tripel (α, β, γ) zyklische Vertauschungen von $(1, 2, 3)$ durchläuft. Für die Auswertung von V und \mathbf{u} an anderen Stellen als den Definitionspunkten von V (also den entsprechenden Seitenflächenmittelpunkten) werden die in Abschnitt 4.1.3 aufgeführten Interpolationen verwendet. Bei stark konvektiven Problemen kann es notwendig sein, eine sogenannte *Upwind*-Diskretisierung zu verwenden, um numerische Oszillationen auf zu groben Gittern zu vermeiden. Für eine einfache Upwind-Diskretisierung erster Ordnung⁵ berechnen sich die Werte von \mathbf{u} in (4.24) nach

$$\mathbf{u}_j := \begin{cases} \mathbf{u}_{j-e_\alpha} & \text{für } V_j^\alpha > 0 \\ \mathbf{u}_{j+e_\alpha} & \text{für } V_j^\alpha \leq 0 \end{cases} \quad \text{sowie} \quad \mathbf{u}_{j+e_\alpha+e_\beta} := \begin{cases} \mathbf{u}_{j+e_\alpha} & \text{für } V_{j+e_\alpha+e_\beta}^\beta > 0 \\ \mathbf{u}_{j+e_\alpha+2e_\beta} & \text{für } V_{j+e_\alpha+e_\beta}^\beta \leq 0 \end{cases}$$

Das Integral über den Druckterm wird approximiert durch

$$\int_{\Omega_{j+e_\alpha}} \nabla p \, d\mathbf{x} \approx \nabla p_{j+e_\alpha} |\Omega_{j+e_\alpha}|$$

Um einen Ausdruck für ∇p_{j+e_α} zu finden, wird die *Integrationspfad*-Methode verwendet. Dazu wird ∇p entlang geeigneter Kurven integriert, die durch \mathbf{x}_{j+e_α} verlaufen und jeweils zwei benachbarte Druckwerte verbinden. Daraus ergeben sich drei lineare Gleichungen für ∇p_{j+e_α} , die z.B. mittels Gauß-Elimination gelöst werden. Dies soll hier nicht näher ausgeführt werden, Details finden sich in [WSKB97] und [Zij96].

Zur Diskretisierung des diffusiven Terms wenden wir wieder zuerst die Transformationsregel an und erhalten

$$\int_{\Omega_{j+e_\alpha}} \nu \sum_{i,\beta} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\beta)} e^{(i)}) \, d\mathbf{x} = \nu \sum_{i,\beta} \int_{G_{j+e_\alpha}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\beta)} e^{(i)}) \, d\xi$$

⁵aus diesem Grund wird oft eine Konvexkombination von Upwind-Diskretisierung und Diskretisierung mittels zentraler Differenzen verwendet

Jeweils für $i = 1, 2, 3$ approximieren wir den Summanden mit $\beta = \alpha$ durch

$$\begin{aligned} & \nu \int_{G_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\alpha)} \mathbf{e}^{(i)}) d\xi \\ &= \nu \int_{j_\beta - \frac{1}{2}}^{j_\beta + \frac{1}{2}} \int_{j_\gamma - \frac{1}{2}}^{j_\gamma + \frac{1}{2}} (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\alpha)} \mathbf{e}^{(i)})|_{j_\alpha}^{j_\alpha+1} d\xi_\gamma d\xi_\beta \\ &\approx \nu (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\alpha)} \mathbf{e}^{(i)})|_{\mathbf{j}}^{j+2e_\alpha} \end{aligned}$$

Für die Summanden mit $\beta \neq \alpha$ ergibt sich

$$\begin{aligned} & \nu \int_{G_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\beta)} \mathbf{e}^{(i)}) d\xi \\ &= \nu \int_{j_\alpha}^{j_\alpha+1} \int_{j_\gamma - \frac{1}{2}}^{j_\gamma + \frac{1}{2}} (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\beta)} \mathbf{e}^{(i)})|_{j_\beta + \frac{1}{2}}^{j_\beta - \frac{1}{2}} d\xi_\gamma d\xi_\alpha \\ &\approx \nu (\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\beta)} \mathbf{e}^{(i)})|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\beta}^{j+e_\alpha+e_\beta} \end{aligned}$$

Hier gelten wiederum die Interpolationsregeln aus Abschnitt 4.1.3 an den notwendigen Stellen. In den Zellmittelpunkten $\mathbf{x}_{\mathbf{j}}$ ist die Abbildung \mathbf{x} stetig und wir können die zur Auswertung von $\mathbf{e}^{(i)}$ benötigten Ableitungen von \mathbf{u} approximieren durch

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \right)_{\mathbf{j}} = \left(\sum_{\beta=1}^3 \mathbf{a}_i^{(\beta)} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi_\beta} \right)_{\mathbf{j}} \approx \sum_{\beta=1}^3 (\mathbf{a}_i^{(\beta)})_{\mathbf{j}} \mathbf{u}|_{\mathbf{j}-e_\beta}^{j+e_\beta}$$

In Kantenmittelpunkten ist dies nicht möglich, daher verwenden wir dort analog zum Druckterm die Integrationspfadmethode, um ∇u_i zu berechnen. Einzelheiten hierzu finden sich wiederum in [WSKB97] und [Zij96].

Insgesamt ergibt sich also für $\alpha = 1, 2, 3$

$$\nu \sum_{i=1}^3 \left[\sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\alpha)} \mathbf{e}^{(i)}|_{\mathbf{j}}^{j+2e_\alpha} + \sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\beta)} \mathbf{e}^{(i)}|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\beta}^{j+e_\alpha+e_\beta} + \sqrt{g} \mathbf{a}_i^{(\gamma)} \mathbf{e}^{(i)}|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\gamma}^{j+e_\alpha+e_\gamma} \right] \quad (4.25)$$

als vektorwertige Approximation des diffusiven Terms.

Der Quellterm wird schließlich für $\alpha = 1, 2, 3$ approximiert durch

$$\int_{\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \mathbf{f} d\mathbf{x} \approx |\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}| \mathbf{f}_{\mathbf{j}+e_\alpha} \quad (4.26)$$

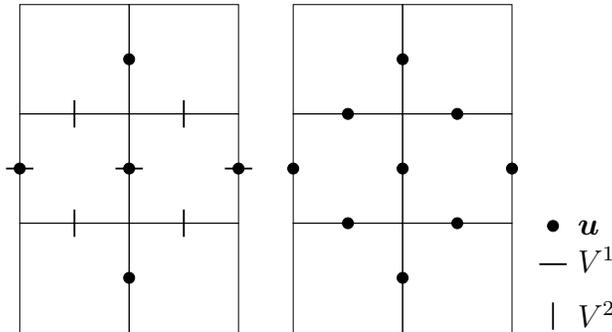


Abbildung 4.5: Diskretisierungssterne für den konvektiven Term(links) und den diffu- siven Term(rechts)

4.1.7 Abschluss der Ortsdiskretisierung

In Abbildung 4.5 sind für den zweidimensionalen Fall die Diskretisierungssterne dar- gestellt, wie sie sich aus (4.24) und (4.25) ergeben. Der Abschluss der Diskretisierung geschieht nun in zwei Schritten. Zunächst werden die vektorwertigen Integrale über Ω_{j+e_α} durch Multiplikation mit $\sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha)}$ in eine skalare Gleichung überführt. Da die Vektoren $\sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha)}$ im Fall von bewegten Gittern zeitabhängig sind, wird dies im fol- genden Abschnitt noch genauer erläutert. Außerdem werden alle in (4.24) und (4.25) auftretenden Werte von \mathbf{u} mittels der Beziehung (4.16) aus umgebenden V -Werten berechnet. Dadurch ergibt sich ein Diskretisierungsstern, wie er in Abbildung 4.6 bei- spielhaft für eine V^1 -Gleichung im zweidimensionalen Fall skizziert ist.

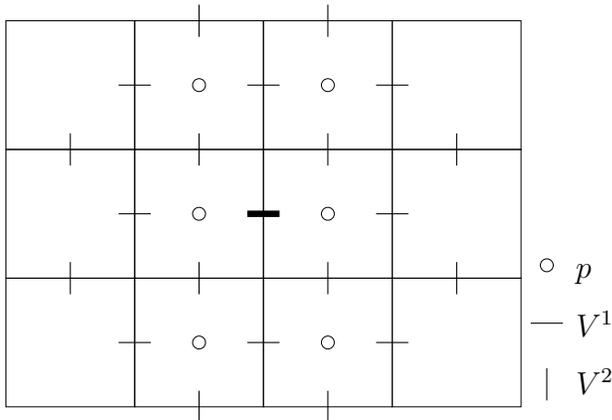


Abbildung 4.6: Diskretisierungsstern für die V^1 -Gleichung

Die Implementierung von Randwerten erfolgt ohne größeren Aufwand. Für Dirich- let-Randbedingungen werden die Normalkomponente V^n und die Tangentialkomponen-

ten V^{t_1} und V^{t_2} gesetzt. Nähere Einzelheiten zur Berechnung dieser Komponenten aus vorgegebenen Randwerten u^n , u^{t_1} und u^{t_2} sind in [Zij96] beschrieben. Homogene Neumann-Randbedingungen lassen sich durch lineare Extrapolation der entsprechenden Größen implementieren.

4.2 Die Zeitbehandlung

Wir werden nun die Zeitabhängigkeit der Koordinatentransformation und die sich daraus ergebenden Ergänzungen untersuchen. Zuerst erweitern wir die Abbildung \mathbf{x} um die Zeitkomponente, anschließend diskretisieren wir die bisher noch nicht behandelte Zeitableitung in der Impulsgleichung. Dadurch werden die Gittergeschwindigkeiten in die Impulsgleichung eingeführt. Um diese zu berechnen, diskretisieren wir das Volume Conservation Law. Anschließend wird zur entkoppelten Berechnung von Druck und Geschwindigkeiten die Chorin-Projektionsmethode beschrieben.

4.2.1 Zeitabhängige Koordinatentransformation

Wir betrachten die zeitabhängige Koordinatentransformation

$$\mathbf{x}(t, \boldsymbol{\xi}) : G \rightarrow \Omega_t, \quad \boldsymbol{\xi} \in G, \quad t \in I \subset \mathbb{R}, \quad (4.27)$$

die zu jedem Zeitpunkt t durch die Koordinatentransformation aus Abschnitt 4.1.1 definiert ist. Wir nehmen an, dass sich der Rand von $\Omega(t)$ glatt in Bezug auf t ändert und dass $\mathbf{x}(t, \boldsymbol{\xi})$ für jedes t invertierbar ist, so dass auch die zeitabhängige Umkehrabbildung $\boldsymbol{\xi}(t, \mathbf{x})$ existiert.

Im Sinne einer konsistenten formalen Darstellung ist es zweckmäßig, die Zeitvariable t genauso zu behandeln wie die Ortsvariablen. Dazu definieren wir die vierdimensionale Koordinatentransformation

$$\hat{\mathbf{x}}(\hat{\boldsymbol{\xi}}) : I \times G \rightarrow I \times \Omega_t \quad (4.28)$$

durch $\hat{\mathbf{x}}_0(\hat{\boldsymbol{\xi}}) = \xi_0$ und $\hat{\mathbf{x}}_i(\hat{\boldsymbol{\xi}})$ gegeben durch (4.27) mit $\hat{\mathbf{x}} = (x_0, \mathbf{x}) \in I \times \Omega_t$, $\hat{\boldsymbol{\xi}} = (\xi_0, \boldsymbol{\xi}) \in I \times G$ und den Zeitvariablen $x_0 = t$ und $\xi_0 = \tau$. Analog erhalten wir die erweiterte Umkehrabbildung $\hat{\boldsymbol{\xi}}$.

Die Zeitableitung der Transformationsabbildung \mathbf{x} repräsentiert die Geschwindigkeit eines Gitterpunktes, sie ist gegeben durch

$$\mathbf{u}_g = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \tau},$$

ihre kontravarianten Komponenten erhalten wir durch

$$\bar{w}^\alpha := \mathbf{a}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}_g.$$

Wegen $D\hat{\xi}D\hat{\mathbf{x}} = 0$ gilt für die Ableitung der Verknüpfung von $\hat{\xi}$ und $\hat{\mathbf{x}}$ nach ξ_0 jeweils für $i = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \xi_i}{\partial x_0} \frac{\partial x_0}{\partial \xi_0} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_0} \\ &= \frac{\partial \xi_i}{\partial t} + \mathbf{a}^{(i)} \cdot \mathbf{u}_g \end{aligned} \quad (4.29)$$

also

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial t} = -\bar{w}^i \quad (4.30)$$

Aus der Basic-Identity

$$\sum_{i=0}^n \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \right) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, n \quad (4.31)$$

angewendet auf $\hat{\mathbf{x}}$ ergibt sich für $j = 0$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial \tau} (\sqrt{g}) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_i}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \tau} (\sqrt{g}) - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} (\sqrt{g} \bar{w}^i) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Analog zur Transformation der Ortsableitungen in Abschnitt 4.1.4 benutzen wir nun die Kettenregel und (4.32), um die Zeitableitung einer skalaren Funktion $f(t, \mathbf{x})$ in (τ, ξ) -Koordinaten zu transformieren und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial f}{\partial \tau} + \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial f}{\partial \xi_\alpha} \frac{\partial \xi_\alpha}{\partial t} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \tau} - \sum_{\alpha=1}^3 \bar{w}^\alpha \frac{\partial f}{\partial \xi_\alpha} + \frac{1}{\sqrt{g}} f \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \sqrt{g} - \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (\sqrt{g} \bar{w}^\alpha) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} (\sqrt{g} f) - \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (\sqrt{g} \bar{w}^\alpha f) \right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

Wir definieren noch analog zu V^α die gewichteten kontravarianten Komponenten der Gittergeschwindigkeit durch

$$V_g^\alpha := \sqrt{g} \bar{w}^\alpha = \sqrt{g} \mathbf{a}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}_g \quad (4.34)$$

4.2.2 Die Impulsgleichung II

Wir wenden nun (4.33) zeilenweise auf die Zeitableitung der Impulsgleichung an und erhalten

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \tau} (\sqrt{g} \mathbf{u}) - \sum_{\alpha=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} (V_g^\alpha \mathbf{u}) \quad (4.35)$$

Den ersten Summanden integrieren wir zunächst über ein verschobenes Kontrollvolumen $\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}$ und approximieren das Integral mit der Mittelpunktsregel, so dass sich der Ausdruck

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g} \mathbf{u}}{\partial t} d\Omega &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \mathbf{u} d\Omega \\ &\approx \frac{d}{dt} |\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}| \mathbf{u} \end{aligned} \quad (4.36)$$

ergibt. Die Zeitableitung $\frac{d}{dt}$ wird im Zusammenhang mit der Projektionsmethode in Abschnitt 4.2.4 diskretisiert.

Den zweiten Term in (4.35) fassen wir mit dem konvektiven Term aus (4.23) zusammen und erhalten dadurch einen neuen Ausdruck, in dem nun die transportierende Geschwindigkeit durch die in Bezug auf die Gitterbewegung relative Geschwindigkeit ersetzt ist. Es ergibt sich

$$\sum_{\alpha=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} ((V^\alpha - V_g^\alpha) \mathbf{u}) \quad (4.37)$$

Mit diesem Ausdruck verfahren wir nun genauso wie in Abschnitt 4.1.6 und ersetzen die bisherige Diskretisierung des konvektiven Terms (4.24) durch den Ausdruck

$$((V^\alpha - V_g^\alpha) \mathbf{u})|_{\mathbf{j}}^{j+2e_\alpha} + ((V^\beta - V_g^\beta) \mathbf{u})|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\beta}^{j+e_\alpha+e_\beta} + ((V^\gamma - V_g^\gamma) \mathbf{u})|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\gamma}^{j+e_\alpha+e_\gamma}, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (4.38)$$

4.2.3 Diskretisierung der geometrischen Erhaltungssätze

Wir hatten bereits im Zuge der Entwicklung der ALE-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen gesehen, dass die Gebietsgeschwindigkeit, die im diskreten Fall der Gittergeschwindigkeit entspricht, das Volume Conservation Law (VCL) erfüllen muss. Diesen Umstand machen wir uns nun zu Nutze, um die in (4.38) auftretenden Gittergeschwindigkeiten zu berechnen. Anstatt das VCL als eigenständige Gleichung zu behandeln oder als Formel zu verwenden, um metrische Größen an den neuen Zeitschritt anzupassen⁶, gehen wir den in [ZRTC93] und [DP88] vorgeschlagenen Weg und benutzen das VCL als Berechnungsvorschrift für die Gittergeschwindigkeiten. Diese werden in jedem Transportschritt bestimmt und in der Diskretisierung des konvektiven Terms

⁶vgl. [TWM85]

(4.38) eingesetzt. Speziell in drei Raumdimensionen erweist sich dieses Vorgehen als effizienteste Methode, um das VCL automatisch im Verlauf der Rechnung zu erfüllen.

Da wir eine Diskretisierung auf einem versetzten Gitter durchführen, müssen wir die Gittergeschwindigkeiten im Gegensatz zum Vorgehen in [DP90] ebenfalls auf dem versetzten Gitter auswerten. Die genauen Stellen, an denen die Gittergeschwindigkeit benötigt wird, ergeben sich aus (4.38), es sind die Seitenflächenmittelpunkte der verschobenen Kontrollvolumen $\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}$. Wir betrachten also nun jeweils für $\alpha = 1, 2, 3$ für solch ein Kontrollvolumen $\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}$ das VCL, es lautet

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}} d\Omega = \int_{\partial\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}} \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS \quad (4.39)$$

Eine einfache Zeitdiskretisierung erster Ordnung⁷ liefert

$$|\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}^{n+1}| - |\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}^n| = \Delta t \int_{\partial\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}^{n+1}} \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS \quad (4.40)$$

Wir betrachten zunächst die linke Seite. Die Differenz der Volumen zu zwei Zeitpunkten t^n und t^{n+1} lässt sich auch ausdrücken als die Summe über die Teilvolumen, die durch die Verschiebung der Seitenflächen des Ausgangsvolumens während des Zeitschritts entstehen, d.h.

$$|\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}^{n+1}| - |\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}^n| = \sum_{i=1}^3 [(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i} + (\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_i}] \quad (4.41)$$

Dabei ist $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i}$ das Volumen, das durch die Verschiebung der Seitenfläche mit dem Mittelpunkt $\mathbf{j} + e_\alpha + e_i$ entsteht. Abbildung 4.7 illustriert dies für den zweidimensionalen Fall.

Die Eckpunkte für $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i}$ mit $i = \alpha$ sind

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_\beta+e_\gamma}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+3e_\alpha+e_\beta+e_\gamma}^\tau), \quad \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_\beta-e_\gamma}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+3e_\alpha+e_\beta-e_\gamma}^\tau), \\ & \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\beta+e_\gamma}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+3e_\alpha-e_\beta+e_\gamma}^\tau), \quad \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_\beta-e_\gamma}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+3e_\alpha-e_\beta-e_\gamma}^\tau), \end{aligned}$$

jeweils für $\tau = n$ und $\tau = n + 1$.

Im Fall $i \neq \alpha$ setzt sich $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i}$ aus den zwei Teilvolumen $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_i}$ und $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+2e_\alpha+e_i}$ zusammen. Die Eckpunkte von $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_i}$ sind

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i+e_j}^\tau, \quad \mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i-e_j}^\tau, \quad j \neq i, \alpha, \\ & \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}-e_\alpha+e_i+e_j}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i+e_j}^\tau), \quad \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}-e_\alpha+e_i-e_j}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i-e_j}^\tau), \quad j \neq i, \alpha \end{aligned}$$

⁷Es sind auch Diskretisierungen höherer Ordnung möglich, jedoch muss dann eine entsprechende Diskretisierung in der Impulsgleichung vorgenommen werden und zur Berechnung der Gittergeschwindigkeit müssen die Gitterdaten von mehreren Zeitpunkten vorgehalten werden.

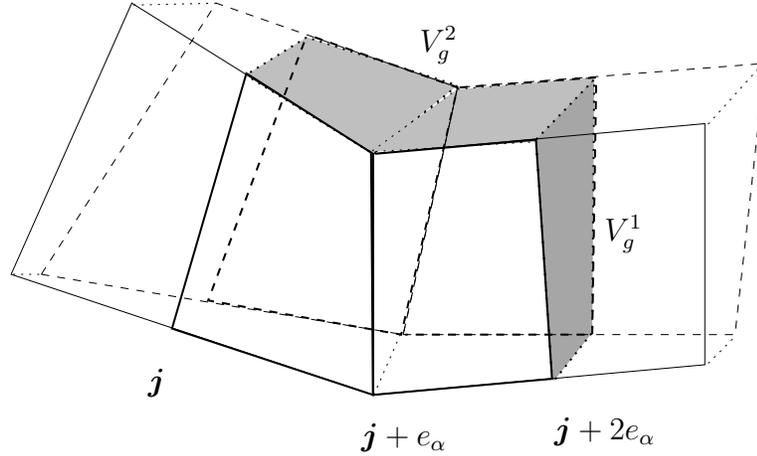


Abbildung 4.7: Volumenänderung und Gittergeschwindigkeit

das Volumen $(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+2\mathbf{e}_\alpha+e_i}$ hat die Eckpunkte

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i+e_j}^\tau, & \mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i-e_j}^\tau, & \quad j \neq i, \alpha, \\ & \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i+e_j}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+3e_\alpha+e_i+e_j}^\tau), & \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i-e_j}^\tau + \mathbf{x}_{\mathbf{j}+3e_\alpha+e_i-e_j}^\tau), & \quad j \neq i, \alpha \end{aligned}$$

ebenfalls für $\tau = n$ und $\tau = n + 1$.

Wir betrachten nun die rechte Seite von (4.40) und approximieren durch⁸

$$\begin{aligned} \Delta t \int_{\partial\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}^{n+1}} \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS & \approx \Delta t \sum_{i=1}^3 (\mathbf{u}_g^{n+1} \cdot \mathbf{s}^{n+1})|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_i}^{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i} \\ & = \Delta t \sum_{i=1}^3 V_g^{i,n+1}|_{\mathbf{j}+e_\alpha-e_i}^{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i} \end{aligned} \quad (4.42)$$

wobei \mathbf{s}^n die in Abschnitt 4.1.2 definierten flächengewichteten Normalenvektoren, ausgewertet zum Zeitpunkt t^n , sind.

Betrachtet man nun (4.41) und (4.42), so legt dies die Definition

$$V_{g,\mathbf{j}+e_\alpha+e_i}^{i,n+1} := \frac{(\Delta\Omega)_{\mathbf{j}+e_\alpha+e_i}}{\Delta t} \quad (4.43)$$

für die Gittergeschwindigkeit in gewichteten kontravarianten Komponenten nahe. Wir können also die benötigten kontravarianten Komponenten der Gittergeschwindigkeit

⁸Zum gleichen Ergebnis kommt man, wenn man auf das Randintegral den Gaußschen Satz anwendet und dann die Divergenz diskretisiert wie im Fall der Kontinuitätsgleichung.

mittels der angegebenen Teilvolumen berechnen, explizite Kenntnis der Gittergeschwindigkeit in kartesischen Koordinaten ist nicht notwendig. Die einzelnen Volumina werden aus den oben angegebenen Eckpunkten durch die Formel (4.14) aus Abschnitt 4.1.2 berechnet.

Analog zu den Flüssen V^α ist die gewichtete kontravariante Darstellung der Gittergeschwindigkeit eine Approximation der mittleren Geschwindigkeit, mit der sich die Seitenfläche eines Kontrollvolumens in Normalenrichtung bewegt.

In Abschnitt 3.4 wurde als zweiter, für Finite-Volumen-Diskretisierungen wichtiger, geometrischer Erhaltungssatz das Surface Conservation Law erwähnt. Im vorliegenden Fall zeigt man leicht (vgl. [WSKB97]), dass mit der angegebenen Definition der Vektoren \mathbf{s} gilt

$$\int_{\partial\Omega_j} \mathbf{n} dS = \sum_{\partial\Omega_j} \mathbf{s}_{mnpq} = 0$$

wobei über alle Seitenflächen summiert wird, die den Rand von Ω_j bilden.

4.2.4 Die Projektionsmethode

Da zur Bestimmung des Drucks in den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen keine Zustandsgleichung zur Verfügung steht, wird in den allermeisten Verfahren zur numerischen Lösung eine *Projektionsmethode* zur Entkopplung von Druck und Geschwindigkeiten eingesetzt. Der Kernpunkt dieser Verfahren besteht darin, dass mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung eine elliptische Gleichung für den Druck gewonnen wird. Diese Verfahren, die in der Literatur auch unter den Namen *Splitting-Methoden* oder *Fractional-Step-Verfahren* zu finden sind, haben zahlreiche Varianten hervorgebracht. Eine Übersicht bietet z.B. [PT83].

Für $\alpha = 1, 2, 3$ lauten die semidiskretisierten, noch vektorwertigen Navier-Stokes-Gleichungen

$$\begin{aligned} DV &= 0 & (4.44) \\ \frac{d}{dt}(Q\mathbf{u}) + M(V^\alpha - V_g^\alpha, \mathbf{u}) + QGp - F &= 0, \end{aligned}$$

wobei D der mittels (4.21) diskretisierten Divergenz entspricht, Q bedeutet Multiplikation mit dem Volumen $|\Omega_{j+e_\alpha}|$, M ist die Diskretisierung von konvektivem minus diffusivem Term, G ist der diskrete Gradientenoperator und F der diskretisierte Quellterm. Bei der von uns verwendeten Chorin-Projektionsmethode wird die Zeitableitung mit einem expliziten Euler-Verfahren diskretisiert, d.h. alle anderen auftretenden Größen werden zum Zeitpunkt t^n betrachtet, mit Ausnahme des Drucks, diesen betrachten wir

zum Zeitpunkt t^{n+1} und erhalten so

$$DV^{n+1} = DV^n = 0 \quad (4.45)$$

$$Q^{n+1}\mathbf{u}^{n+1} - Q^n\mathbf{u}^n + \Delta t [M(V^{\alpha,n} - V_g^{\alpha,n}, \mathbf{u}^n) + Q^{n+1}Gp^{n+1} - Q^n F^n] = 0$$

Um nun jeweils für $\alpha = 1, 2, 3$ eine skalare Gleichung zu erhalten, multiplizieren wir die diskretisierte Impulsgleichung mit dem entsprechenden gewichteten kontravarianten Basisvektor $\sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha),n}$, dabei ist zu beachten dass gilt

$$V^{\alpha,n} = \sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha),n} \cdot \mathbf{u}^n \quad \text{und} \quad V^{\alpha,n+1} = \sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha),n+1} \cdot \mathbf{u}^{n+1} \quad (4.46)$$

Der erste Schritt der Projektionsmethode besteht darin, ein intermediäres Geschwindigkeitsfeld \tilde{V} mittels der Impulsgleichung unter Vernachlässigung des Druckgradienten zu bestimmen, wir berechnen dazu

$$V^* = \frac{Q^n}{Q^{n+1}}V^n - \Delta t \frac{1}{Q^{n+1}}M(V^n - V_g^n)V^n + \Delta t \frac{Q^n}{Q^{n+1}}F^n \quad (4.47)$$

Dabei ist

$$V^{\alpha,*} = \sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha),n} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}, \quad (4.48)$$

wobei $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ die kartesischen Koordinaten des geschätzten Geschwindigkeitsfeldes sind. Um letztendlich V^{n+1} bestimmen zu können, müssen wir an dieser Stelle eine Basistransformation durchführen, indem wir $\tilde{V} = \sqrt{g}\mathbf{a}^{(\alpha),n+1} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ durch

$$\tilde{V} = T_{\mathcal{B}^n}^{\mathcal{B}^{n+1}}V^* = C_{n+1}C_n^{-1}V^* \quad (4.49)$$

mit

$$C_t = \begin{pmatrix} \sqrt{g}\mathbf{a}^{(1),t} \\ \sqrt{g}\mathbf{a}^{(2),t} \\ \sqrt{g}\mathbf{a}^{(3),t} \end{pmatrix} \quad (4.50)$$

berechnen.

Dieses Geschwindigkeitsfeld ist noch nicht divergenzfrei. Es gilt wegen (4.45) und (4.47)

$$\tilde{V} - V^{n+1} = \Delta t Gp^{n+1} \quad (4.51)$$

Wir wenden den Divergenzoperator D auf die Differenz (4.51) an und nutzen aus, dass wir $DV^{n+1} = 0$ erreichen wollen, dies ergibt

$$D\tilde{V} - DV^{n+1} = D\tilde{V} = \Delta t DGp^{n+1} \quad (4.52)$$

und daraus folgt die *Poissongleichung*

$$DGp^{n+1} = \frac{1}{\Delta t}D\tilde{V} \quad (4.53)$$

Die Lösung dieses linearen Gleichungssystems bestimmt den Druck.

Im letzten Schritt der Projektionsmethode wird \tilde{V} entsprechend (4.51) korrigiert, um das divergenzfreie Geschwindigkeitsfeld V^{n+1} zu erhalten:

$$V^{n+1} = \tilde{V} - \Delta t G p^{n+1} \quad (4.54)$$

Aufgrund der expliziten Zeitdiskretisierung unterliegt die Zeitschrittweite Δt zwei einschränkenden Bedingungen. Aus der Stabilitätsanalyse einer Diffusionsgleichung (vgl. [PT83]) erhält man die erste Bedingung

$$\Delta t \leq \min_{1 \leq \alpha \leq 3, \Omega_j} \frac{1}{4\nu} |\mathbf{x}_{j+e_\alpha} - \mathbf{x}_{j-e_\alpha}|^2 \quad (4.55)$$

Die zweite Beschränkung besteht in der bekannten *Courant-Friedrichs-Levi*-Bedingung. Für eine diskretisierte ALE-Form der Gleichungen lautet sie (vgl. [ZRTC93])

$$\Delta t \leq \min_{1 \leq \alpha \leq 3, \Omega_j} \frac{|\Omega_{j+e_\alpha}|}{|V_{j+e_\alpha}^\alpha - V_{g,j+e_\alpha}^\alpha|} \quad (4.56)$$

Eine adaptive Steuerung der Zeitschrittweite erreicht man, indem man Δt als das Minimum der zu prüfenden Bedingungen festsetzt. Üblicherweise wird der erhaltene Wert noch mit einem Sicherheitsfaktor $\lambda \in (0, 1)$ multipliziert.

4.3 Bemerkungen zur Implementierung

Unter der Voraussetzung, dass die Bewegung oder Position des Berechnungsgebietes zu jedem Zeitpunkt gegeben ist, sind wir nun in der Lage, Strömungen in dreidimensionalen, zeitabhängigen Geometrien zu berechnen. Die Zeitschleife des implementierten Verfahrens ist in Algorithmus 1 dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung des Programms *nscl*, das als Basis für die vorliegende Implementierung diente, ist in [Mey01] gegeben. Die wichtigsten Aspekte sollen hier noch einmal kurz skizziert werden, bevor wir auf einige Besonderheiten im Fall bewegter Gitter eingehen.

Das gesamte Berechnungsgebiet wird mit einem blockstrukturierten Gitter beschrieben, d.h. das Gebiet ist überdeckt mit Blöcken, die an gemeinsamen Seitenflächen miteinander verbunden sind. Das strukturierte Gitter eines einzelnen Blocks wird an den Rändern jeweils um eine Schicht von Zellen, die sogenannten Ghost-Zellen, erweitert. Diese Ghost-Zellen dienen im Fall, dass sie an einem "echten" Gebietsrand liegen, der Implementierung der Randbedingungen, falls sie an einem "verklebten" Rand liegen, werden alle zugehörigen Variablen, d.h. $V_{j+e_\alpha}^\alpha$ für $\alpha = 1, 2, 3$ und p_j , aus dem angrenzenden Block kopiert. Dies ist immer notwendig, bevor eine Operation, z.B. Auswertung eines Differentialoperators, am Blockrand durchgeführt werden kann. Die Kopieraktion wird in Algorithmus 1 mit dem Ausdruck "Aktualisiere Ghost-Zellen" bezeichnet.

```

Setze Anfangsbedingungen,  $t = 0$ 
while  $t < T_{\text{End}}$  do
  Berechne  $\Delta t$  nach (4.56) und (4.55)
  Bestimme  $\Omega_h^{n+1}$  und berechne  $V_g^{n+1}$  nach (4.43)
  Berechne  $V^*$  nach (4.47)
  Aktualisiere  $V^*$  in den Ghost-Zellen
  Basistransformation  $V^* \rightarrow \tilde{V}$  und Gitteraustausch  $\Omega_h^n \rightarrow \Omega_h^{n+1}$ 
  Setze Randwerte für  $\tilde{V}$ , aktualisiere  $\tilde{V}$  in den Ghost-Zellen
  Löse die Poissongleichung (4.53)
  Korrekturschritt nach (4.54):  $V^{n+1} = \tilde{V} - \Delta t G p^{n+1}$ 
  Aktualisiere Ghost-Zellen
  Setze Randwerte für  $V^{n+1}$ 
   $t = t + \Delta t$ 
end while

```

Algorithmus 1: Die Hauptschleife zur Berechnung von Strömungen in zeitabhängigen Gebieten

Die bei der parallelen Berechnung anfallenden Kommunikationen zwischen Prozessoren, die miteinander verklebte Blöcke bearbeiten, werden mittels der Bibliothek MPI⁹ realisiert.

Die Bestimmung des neuen Gitters Ω_h^{n+1} erfolgt in zwei Schritten. Zuerst werden die Randflächen, die als beweglich definiert sind, entsprechend der neuen Lage des Interfaces, die zu diesem Zeitpunkt bekannt sein muss, angepasst. Anschließend werden die Knoten im Inneren des Gebietes mittels trilinearer Interpolation neu verteilt. Die Auflösung des Gitters, d.h. die Anzahl der Zellen in jeder Richtung, bleibt dabei erhalten. An dieser Stelle könnten weitere Maßnahmen zur Sicherung der Gitterqualität, beispielsweise eine elliptische Glättung, erfolgen. Dies ist in der vorliegenden Implementierung jedoch nicht umgesetzt.

Die Lösung der Poissongleichung (4.53) erfolgt mit einem iterativen Verfahren, einen Überblick über verschiedene Methoden bietet [BBC⁺94]. Einzelheiten zur Implementierung der Verfahren GMRES und BiCGStab in *nscL* entnehme man [Mey01]. Da bei der Diskretisierung in gekrümmten Koordinaten unsymmetrische Matrizen auftreten, ist ein Einsatz effizienterer Verfahren wie z.B. CG nicht möglich.

An bewegten Gebietsrändern wird die Normalengeschwindigkeit des Randes, die als Randbedingung gesetzt werden muss, entsprechend des VCL mit (4.43) berechnet. Benötigte tangentielle Komponenten werden mit den Interpolationsregeln aus Abschnitt 4.1.3 an den entsprechenden Stellen berechnet.

Die Basistransformation zur Bestimmung von \tilde{V} wird für jedes $\Omega_{\mathbf{j}+e_\alpha}$ lokal durchgeführt, dabei wird $C_n^{-1}V^*$ in (4.49) mittels (4.16) berechnet. Vor der eigentlichen

⁹MPI = *message passing interface*, s. z.B. [SOHL⁺96]

Basistransformation ist an “verklebten” Rändern ein zusätzlicher Kopierschritt notwendig, da zur Basistransformation in einem Punkt alle drei kontravarianten Komponenten der Geschwindigkeit benötigt werden. Die Komponenten, die nicht in den Seitenflächen, die den Rand bilden, definiert sind, müssen daher aus dem angrenzenden Block kopiert werden, da sie zur Interpolation der entsprechenden Komponente im Seitenflächenmittelpunkt benötigt werden. Diese Situation ist in Abbildung 4.3 für den zweidimensionalen Fall skizziert.

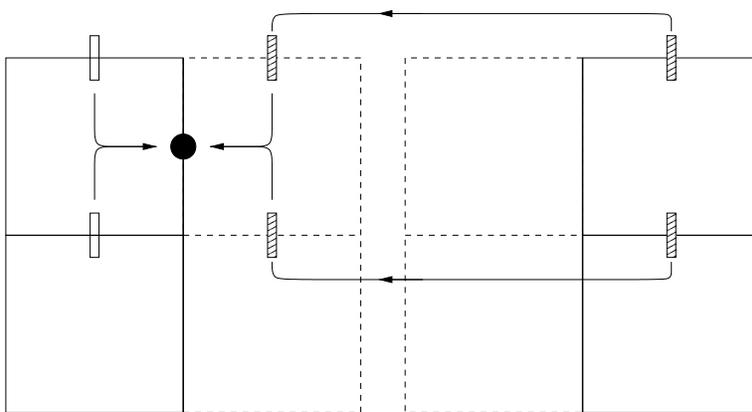


Abbildung 4.8: Kopieren von V^* für die Basistransformation

Für die parallele Berechnung wird dieser Kommunikationsschritt am effizientesten mit einem asynchronen Schema implementiert. Es ergibt sich der folgende Ablauf:

1. Falls Daten zu empfangen sind: stelle Speicherplatz zur Verfügung und melde Empfangsbereitschaft bei MPI an. Im anderen Fall bereite die Daten zum Senden vor und melde Sendebereitschaft bei MPI an.
2. Falls die aneinandergrenzenden Blöcke vom gleichen Prozessor verwaltet werden, kopiere die notwendigen Daten.
3. Führe die Basistransformation im Inneren des Gebietes durch.
4. Prüfe, ob die im ersten Schritt angekündigten Sende- und Empfangsoperationen abgeschlossen sind.
5. Vervollständige die Basistransformation am Blockrand.

Entsprechende Hardware(etwa ein autonomer Kommunikations-Controller) und Implementierung von MPI vorausgesetzt, ermöglicht diese Abfolge den Austausch von Daten über das Kommunikationssystem, während gleichzeitig andere Operationen, in diesem Fall die Basistransformation im Gebietsinneren, durchgeführt werden.

4.4 Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt stellen wir Ergebnisse von Strömungsberechnungen auf bewegten Gittern vor, die mit der Implementierung des in diesem Kapitel erläuterten Verfahrens erzielt wurden.

4.4.1 Gitterbewegung im Gebietsinneren

In einem ersten Test soll die Korrektheit der Implementierung überprüft werden. Dazu betrachten wir eine Kanalströmung und geben eine Deformation des Gitters im Inneren des Berechnungsgebietes Ω willkürlich vor. Da der Rand von Ω fixiert ist, können wir die berechnete Strömung auf dem bewegten Gitter mit der bekannten Referenzlösung vergleichen. Bei korrekter Implementierung darf das Strömungsprofil durch die Bewegung des Gitters nicht beeinflusst werden.

Als Grundgebiet wählen wir einen dreidimensionalen Kanal mit den Maßen $L_x = 3, L_y = L_z = 1$. Die exakte Lösung ist gegeben durch ein stationäres parabolisches Strömungsprofil der Form

$$\mathbf{u}(x, y, z, t) = 16 u_{max} y(1 - y)z(1 - z)$$

mit den zugehörigen Volumenkräften

$$f(x, y, z, t) = 32u_{max} \nu(z - z^2 + y - y^2) + \nabla p$$

sowie einem konstanten Druckgradienten

$$\nabla p \equiv -1$$

Abbildung 4.9 zeigt die exakte Lösung für die Parameter $u_{max} = 1$ und $\nu = 0.01$. Dargestellt ist eine Isofläche der Geschwindigkeitskomponente u in Hauptströmungsrichtung zum Wert 0.75, die Farbkodierung von u auf der Ausströmfläche $\xi_1 = \xi_{1,max}$ sowie Farbkodierung des Drucks sowohl auf der Seitenfläche $\xi_2 = \xi_{2,max}$ als auch auf der Bodenfläche $\xi_3 = \xi_{3,min}$.

Als Randbedingungen werden an allen Seitenwänden Haftbedingungen d.h. homogene Dirichlet-Randbedingungen gesetzt, auf der Randfläche $\xi_1 = \xi_{1,max}$ kommen Ausströmrandbedingungen zum Einsatz. Im Einströmbereich $\xi_1 = \xi_{1,min}$ ist das Profil der exakten Lösung als Dirichlet-Randbedingung vorgegeben. Als Anfangsbedingung für alle Rechnungen wurde die voll entwickelte Strömung verwendet.

Es wurde nun eine Rechnung über einen Zeitraum der Länge T durchgeführt, in deren Verlauf das Gitter im Gebietsinneren verzerrt wird. Als Ausgangsgitter zum Startzeitpunkt t_0 wird ein äquidistantes kartesisches Gitter verwendet, dieses wird deformiert durch

$$\text{disp}(x) = \begin{cases} -\frac{1}{2}d \cos(\pi x - \frac{\pi}{2}) + \frac{1}{2} & \text{für } \frac{1}{2} \leq x \leq \frac{5}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

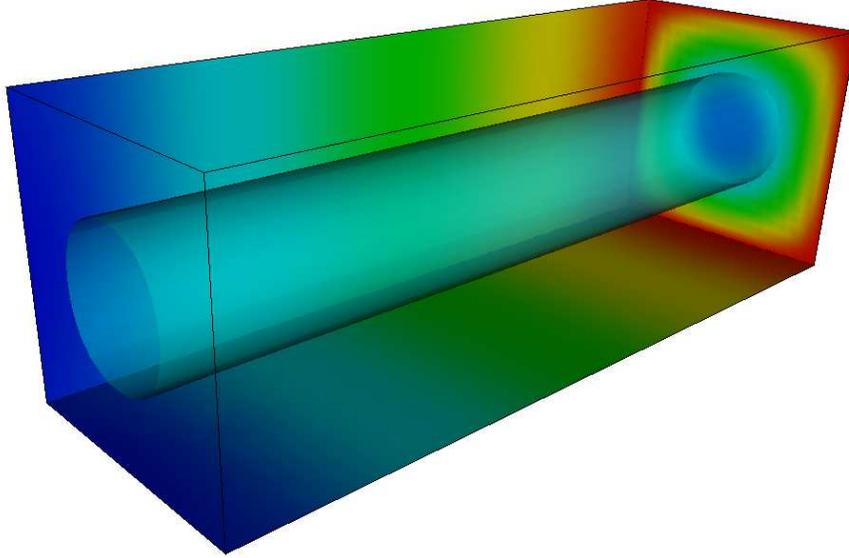


Abbildung 4.9: exakte Lösung des Testproblems

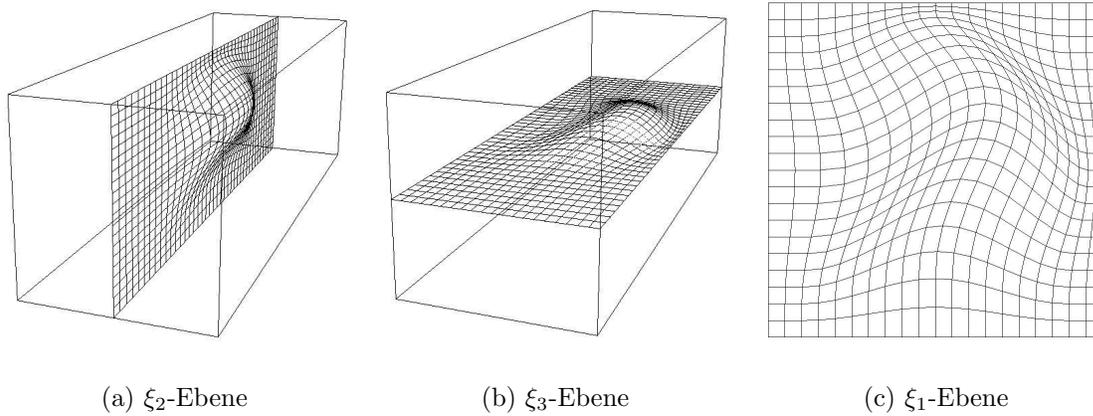
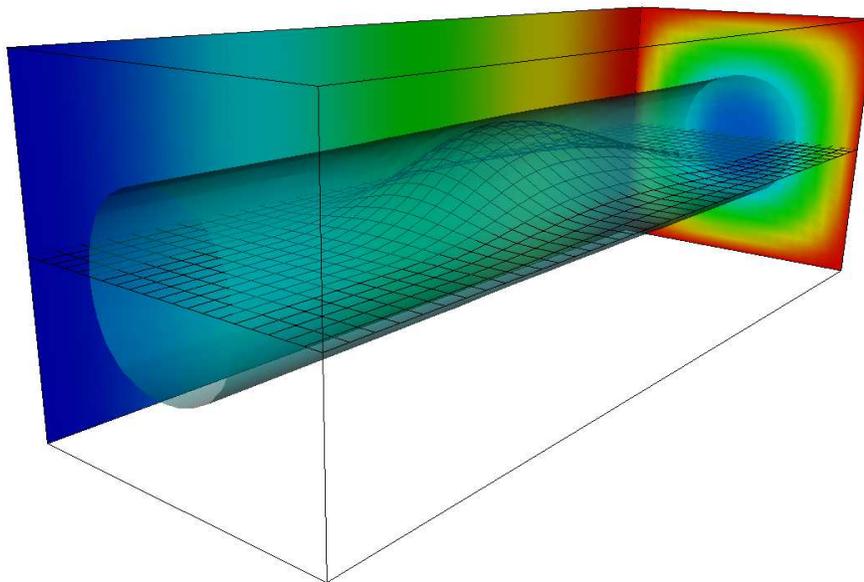
mit

$$d = \frac{1}{2}d_{\max}\left(1 - \cos\left(2\pi\frac{t - t_0}{T}\right)\right)$$

Diese Verzerrung wird in y - und z -Richtung durchgeführt. Die maximale Verzerrung des Gitters wird so zum Zeitpunkt $T/2$ erreicht, wir bezeichnen das entsprechende Gitter im folgenden mit $\Omega_{h,T/2}$. In Abbildung 4.10 wird dieses Gitter mit einer Auflösung von $40 \times 20 \times 20$ Zellen gezeigt, dabei ist $d_{\max} = 0.15$ für die Verzerrung in y -Richtung und $d_{\max} = 0.2$ in z -Richtung.

Abbildung 4.11 zeigt die errechnete Lösung zum Zeitpunkt $T/2$ auf dem verzerrten Gitter $\Omega_{h,T/2}$ mit einer Auflösung von $40 \times 20 \times 20$ Kontrollvolumen. Entsprechend zu Abbildung 4.9 ist auch hier eine Isofläche der Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung zum Wert 0.75 sowie die Farbkodierung dieser Geschwindigkeitskomponente auf der Fläche $\xi_1 = \xi_{1,\max}$ zu sehen. Ebenfalls abgebildet ist die Farbkodierung des Drucks auf der Seitenfläche $\xi_2 = \xi_{2,\max}$ sowie das Gitter in der Ebene $\xi_3 = \xi_{3,\max}/2$.

Es wurden nun zwei Vergleichsrechnungen durchgeführt, eine auf dem zeitlich konstanten kartesischen Ausgangsgitter sowie eine weitere auf einem ebenfalls zeitlich konstanten Gitter, das dem Zustand von $\Omega_{h,T/2}$ entspricht. Es ist nun zu erwarten, dass die Rechnung auf dem kartesischen Gitter die größte Genauigkeit bietet, wohingegen der Fehler $e := \mathbf{u} - \mathbf{u}_h$ für die Rechnung auf dem qualitativ schlechteren, gekrümmten Gitter $\Omega_{h,T/2}$ größer ausfallen sollte. Der Fehler für die Rechnung auf dem bewegten Gitter sollte sich jeweils entsprechend der Qualität des Gitters zum Zeitpunkt t zwischen diesen beiden Schranken bewegen. Diese Erwartung wird von den durchgeführten

Abbildung 4.10: Das Gitter $\Omega_{h,T/2}$ Abbildung 4.11: errechnete Lösung auf $\Omega_{h,T/2}$

Rechnungen bestätigt. In Abbildung 4.12 sieht man den zeitlichen Verlauf von e für alle drei Rechnungen auf den entsprechenden Gittern mit einer Auflösung von $40 \times 20 \times 20$ Kontrollvolumen, gemessen wurde e in der gitterabhängigen Norm

$$\| e \|_{\Omega, h} = \left(\sum_{\Omega_i} \| e \|_{2, \Omega_i} \right)^{1/2}$$

mit der L^2 -Norm

$$\| e \|_{\Omega} = \int_{\Omega} |e|^2 d\Omega$$

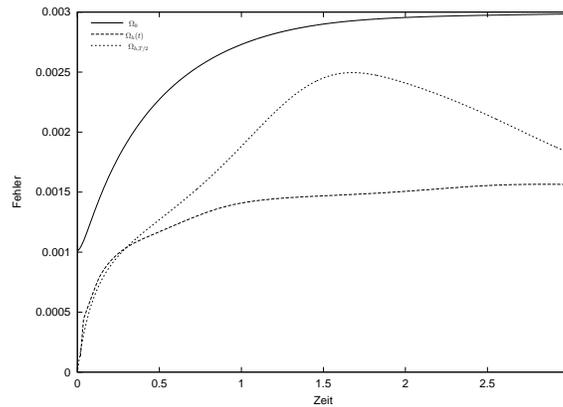


Abbildung 4.12: zeitlicher Verlauf des L_2 -Fehlers

Für Rechnungen mit anderen Auflösungen des Gitters ergeben sich natürlich andere absolute Werte des Fehlers, der prinzipielle Verlauf der Fehlerkurven entspricht aber immer dem in Abbildung 4.12. Eine analoge zeitliche Entwicklung des Fehlers ergibt sich bei Rechnungen mit der gleichen Deformation des Gitters, aber anderer Länge des betrachteten Zeitintervalls T , woraus unterschiedliche Gittergeschwindigkeiten resultieren. Der Fehler hängt also von der Approximationsgüte des jeweiligen Gitters zum Zeitpunkt t , nicht aber von der Deformationsgeschwindigkeit ab.

Es wurden nun weitere Rechnungen mit der beschriebenen Gitterverzerrung durchgeführt, dabei wurden jeweils unterschiedlich feine Gitter verwendet. Tabelle 4.1 listet für die verschiedenen Auflösungen jeweils den größten Fehler im Intervall $[0, T]$ für verschiedene Normen mit den zugehörigen numerischen Konvergenzraten $p = (\ln |e_h| - \ln |e_{h/2}|) / (\ln 2)$ auf. Für alle Rechnungen wurde eine konstante Zeitschrittweite $\Delta t = 0.000196$ verwendet, die sich aus der CFL-Bedingung für das feinste Gitter ergab. Für die höheren Auflösungen wurde das Berechnungsgebiet in bis zu 32 Blöcke für das feinste Gitter unterteilt, diese Rechnungen wurden auf dem Parallelrechner *parnass2* der Abteilung für Wissenschaftliches Rechnen und Numerische Simulation des Instituts für Angewandte Mathematik der Universität Bonn durchgeführt.

# CV	L_1	p_{L_1}	L_∞	p_{L_∞}	L_2	p_{L_2}
20x10x10	1.30e-02	—	4.45e-02	—	9.96e-03	—
40x20x20	3.36e-03	1.95	6.70e-03	2.73	2.51e-03	1.98
80x40x40	8.32e-04	2.01	1.85e-03	1.85	6.25e-04	2.01
160x80x80	2.09e-04	1.99	4.81e-04	1.94	1.56e-04	2.00

Tabelle 4.1: Übersicht über maximale Fehler im Intervall $[0, T]$

Tabelle 4.1 zeigt eine Konvergenz zweiter Ordnung in Bezug auf die Feinheit des Gitters, d.h. bei einer Verdoppelung der Anzahl der Kontrollvolumen in jeder Richtung viertelt sich der Fehler. Diese Ordnung, die im Fall glatter Gitter bereits für die Diskretisierung auf zeitlich konstanten Gittern gilt, überträgt sich also auf die Diskretisierung zeitabhängiger Gitter.

4.4.2 Kanal mit zeitabhängiger Verengung

Als weiteres Experiment wurde die Strömung in einem Kanal mit zeitabhängiger Verengung untersucht. Dieser Testfall wurde in [PS85] experimentell behandelt und später u.a. in [RP88] und [DP90] numerisch untersucht.

Die Geometrie des Kanals ist in Abbildung 4.13 dargestellt. Die Auslenkung der unteren Wand des Kanals wird beschrieben durch

$$y(x) = \begin{cases} h & \text{für } 0 < x < x_1 \\ 0.5h(1 - \tanh(a(x - x_2))) & \text{für } x_1 < x < x_2 \\ 0 & \text{für } x > x_3 \end{cases} \quad (4.57)$$

wobei

$$\begin{aligned} a &= 4.14 & x_1 &= 4b \\ x_3 &= 6.5b & x_2 &= 0.5(x_1 + x_3) \end{aligned}$$

sowie

$$h = 0.5h_{max}(1 - \cos(2\pi t^*)) \quad t^* = (t - t_0)/T$$

als weitere Parameter gegeben sind. Hierbei ist b die Höhe des Kanals, T ist die Länge des betrachteten Zeitintervalls und durch $h_{max} = 0.38b$ ist die maximale Einschnürung des Kanals zum Zeitpunkt $t^* = 0.5$ gegeben. Weiterhin ist die beschriebene Geometrie symmetrisch um $x = 0$.

Das Fluid wird beschrieben durch die Dichte $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ und die kinematische Viskosität $\nu = 1.97\text{e-}5 \text{ m}^2/\text{s}$. Aus diesen Parametern ergibt sich die Reynoldszahl $Re = bu_\infty/\nu = 507$. Als Anfangsbedingung wird eine Poiseulle-Strömung mit einer maximalen Geschwindigkeit $u_{max} = 1.5 \text{ m/s}$ verwendet, dieses Profil wird während der

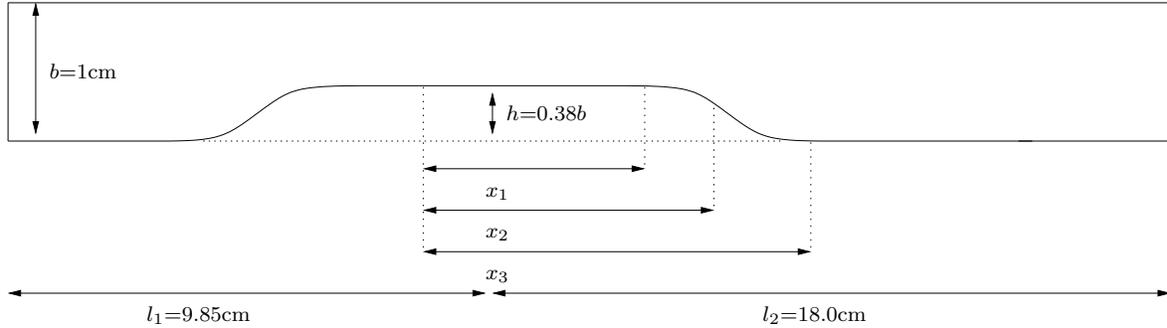


Abbildung 4.13: Geometrie des Testfalls

Simulation als Dirichlet-Randbedingung am Einströmrand vorgeschrieben. Am Ausströmrand werden Neumann-Bedingungen für die Geschwindigkeit angenommen. An der oberen und unteren Kanalwand werden Haftbedingungen gesetzt, wobei diese an der unteren Wand dazu führen, dass die Strömungsgeschwindigkeit auf die der Wandbewegung gesetzt wird.

Die Simulation wurde für zwei verschiedenen feine Gitter durchgeführt, eine grobe Auflösung von 91×20 Zellen und eine feinere mit 221×40 Zellen. Weil es sich um eine zweidimensionale Simulation handelt, wurden in y -Richtung periodische Randbedingungen und nur wenige Zellen Auflösung verwendet. Es zeigte sich bei den durchgeführten Rechnungen, dass das grobe Gitter nicht geeignet ist, um die durch die Wandbewegung gestörte, instationäre Strömung aufzulösen. Abbildung 4.14 zeigt die Wandschubspannung

$$\tau_S = \nu \frac{\partial u}{\partial z}$$

an der unteren, beweglichen Kanalwand zum Zeitpunkt $t^* = 0.7$ und für verschiedene Parameter α einer Mittelung aus zentralen Differenzen und einfacher Upwind-Diskretisierung des konvektiven Terms, wobei $\alpha = 0.0$ keinen Upwind-Anteil bedeutet und $\alpha = 1.0$ entsprechend eine reine Upwind-Diskretisierung.

Wie man an Abbildung 4.14 erkennen kann, führen beide Diskretisierungen mit Upwind-Anteil dazu, dass durch die hinzugefügte künstliche Diffusion wesentliche Eigenschaften der Strömung weggeglättet werden. Bei Verwendung reiner zentraler Differenzen treten auf Grund der zu geringen Auflösung leichte Oszillationen auf. Auch in [DP90] wurden deutliche qualitative Unterschiede zwischen Grob- und Feingitterrechnung festgestellt. Aus diesen Gründen beschränken wir uns in der Diskussion auf die Ergebnisse der Rechnung für das feinere Gitter mit einer Diskretisierung mit zentralen Differenzen.

In den nachfolgenden Abbildungen 4.16 - 4.24 sind jeweils untereinander Farbkodierungen der horizontalen und vertikalen Geschwindigkeitskomponenten sowie des Drucks zu mehreren aufeinanderfolgenden Zeitpunkten zu sehen. Die zugehörigen Farb-

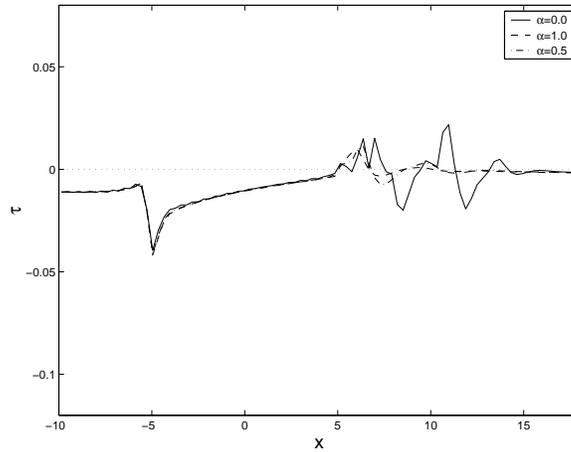


Abbildung 4.14: Vergleich der Wandschubspannung τ_S für verschiedene Upwind-Parameter α

tabellen sind in Abbildung 4.15 dargestellt. Die Abbildungen beschränken sich auf den interessanteren hinteren Bereich, im vorderen Einströmbereich und auch zu Beginn der Einschnürung bleibt das Strömungsprofil weitestgehend ungestört.

Die vorliegenden Ergebnisse weisen eine gute qualitative Übereinstimmung mit den Resultaten in [DP90] auf. Zunächst ist ersichtlich, dass durch die Verdrängung des Fluids in der Phase der zunehmenden Verengung, d.h. für $t^* < 0.5$, der Massefluss hinter der Verengung über den Wert der konstanten Einströmrates ansteigt. Die horizontale Geschwindigkeitskomponente erreicht zum Zeitpunkt $t^* = 0.4$ einen maximalen Wert von 2.6603 m/s, d.h. der zeitlich konstante Wert $u_{\max} = 1.5$ m/s im Einströmbereich wird um ca. 77.3% überschritten. Der in [DP90] angegebene Maximalwert von 2.645 m/s entspricht einem Zuwachs von ca. 76.3%. Umgekehrt nimmt die Fließrate im Bereich hinter der Verengung mit zunehmender Weitung des Kanals in der Phase $t^* > 0.5$ wieder ab und sinkt anfänglich unter den Wert der Einströmrates, weil das nachströmende Fluid zunächst den durch Absenken des Bodens entstehenden Leerraum

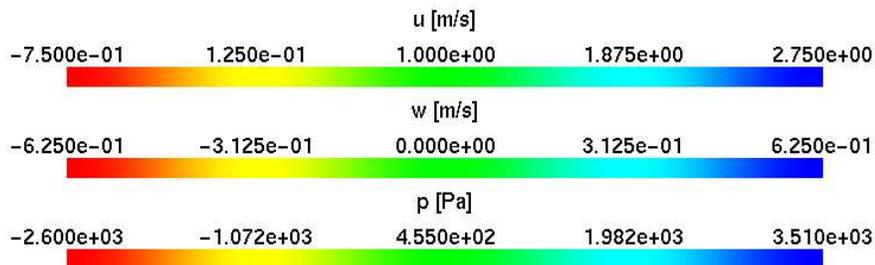
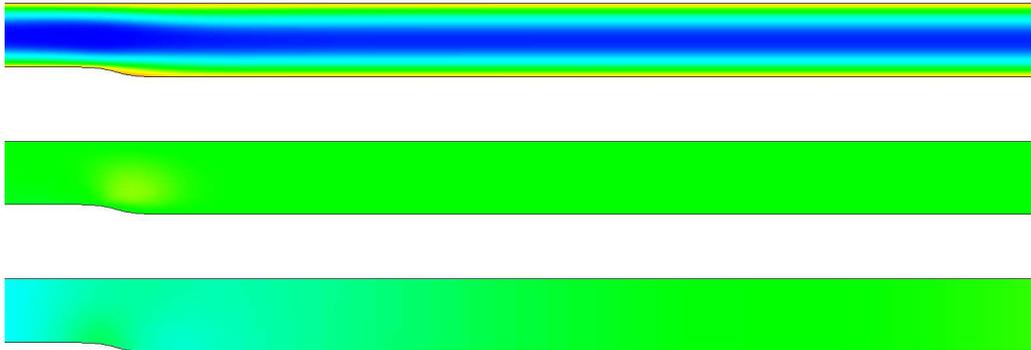
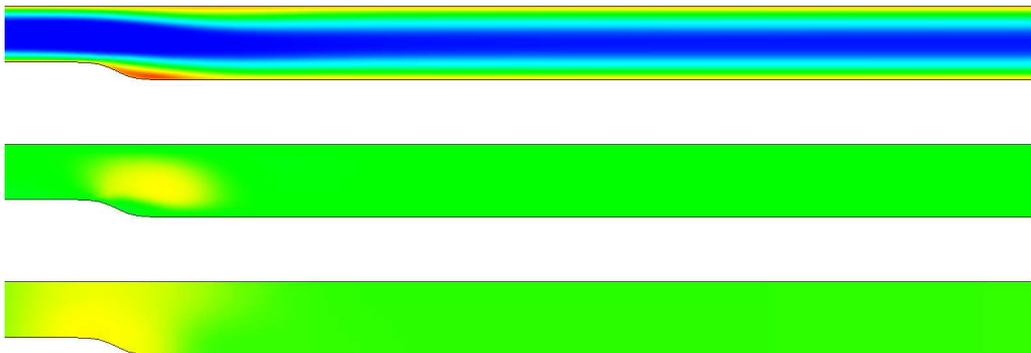
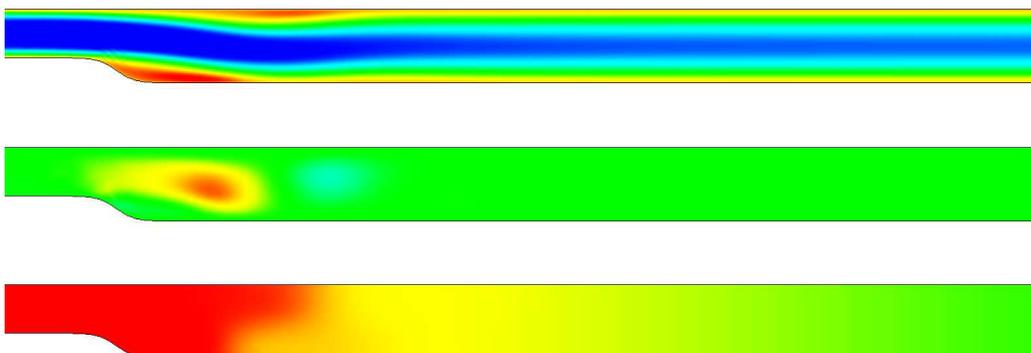
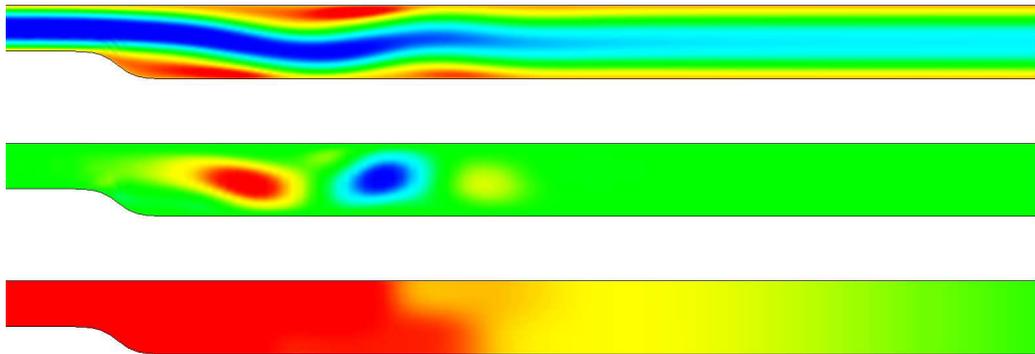
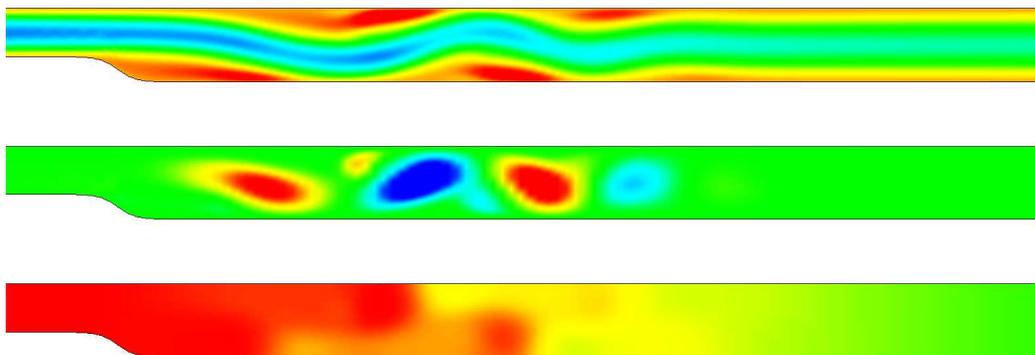
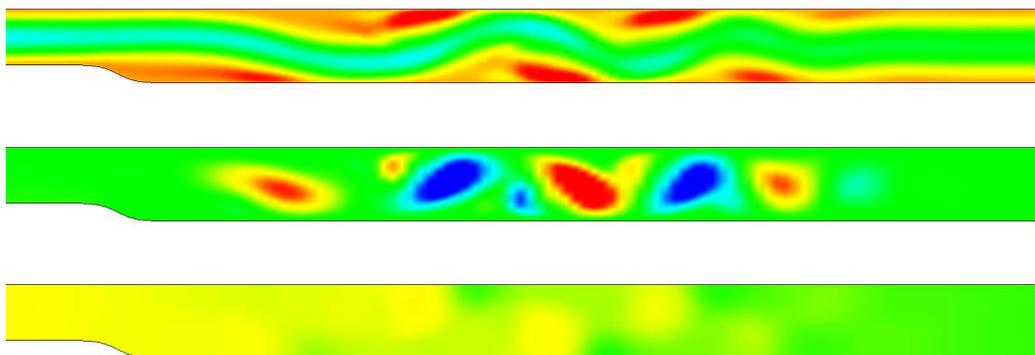
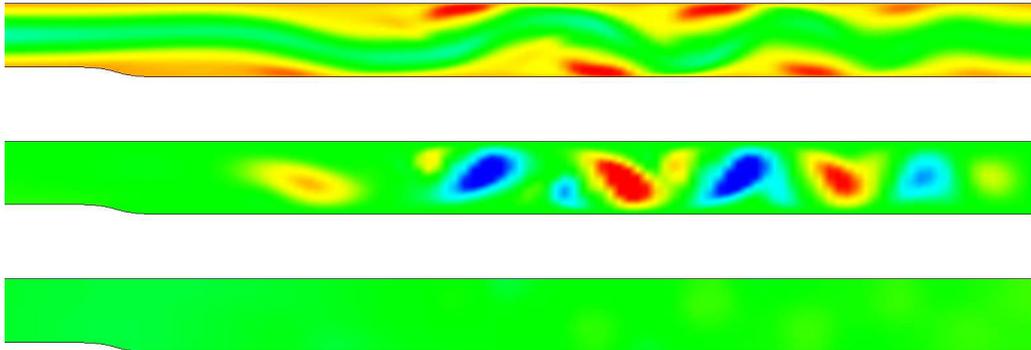
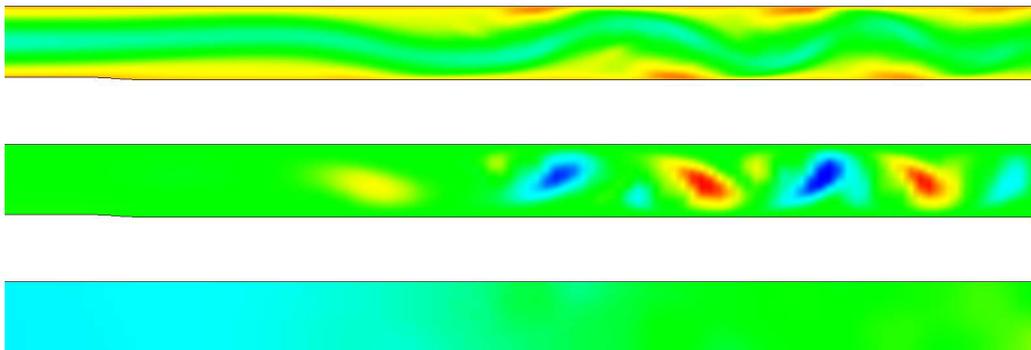
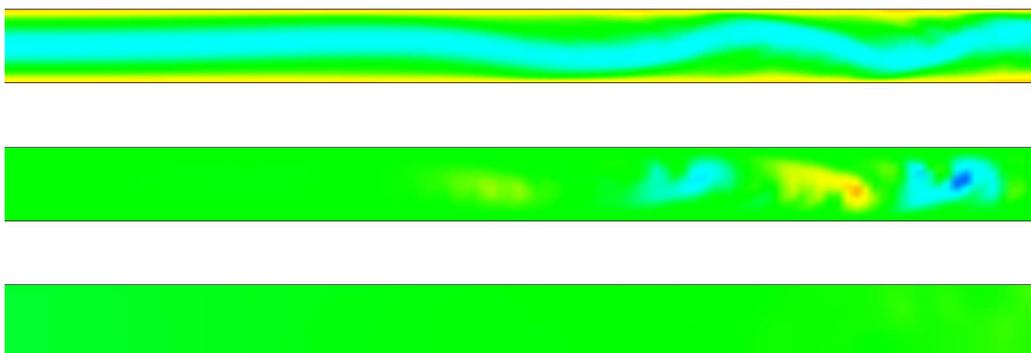


Abbildung 4.15: Farbtabeln zu den Abbildungen 4.16 - 4.24

Abbildung 4.16: $t^* = 0.2$ Abbildung 4.17: $t^* = 0.3$ Abbildung 4.18: $t^* = 0.4$

Abbildung 4.19: $t^* = 0.5$ Abbildung 4.20: $t^* = 0.6$ Abbildung 4.21: $t^* = 0.7$

Abbildung 4.22: $t^* = 0.8$ Abbildung 4.23: $t^* = 0.9$ Abbildung 4.24: $t^* = 1.0$

im mittleren Kanalbereich ausfüllt. Zum Ende der Periode hin nähern sich Fließrate bzw. Geschwindigkeit immer mehr dem Ausgangszustand an.

Zwischen $t^* = 0.2$ und $t^* = 0.3$ kommt es zu einer ersten Ablösung der Strömung unmittelbar hinter der Kanalverengung. Etwas später, zwischen $t^* = 0.3$ und $t^* = 0.4$ bildet sich ein weiterer Wirbel, diesmal an der gegenüberliegenden Kanalseite und etwa um die Länge einer Kanalhöhe b in Strömungsrichtung versetzt. Es bilden sich nun weitere Wirbel abwechselnd an der oberen und unteren Kanalwand, die mit der Strömung mitwandern und ab etwa $t^* = 0.7$ beginnen, sich abzuschwächen. Zum Ende der Periode haben sich die Wirbel weitestgehend aufgelöst, so dass eine nur noch leicht wellige Strömung zurückbleibt. Entsprechend entwickelt sich die komplexe Struktur des Drucks etwa zu $t^* = 0.6$ wieder zurück zu einem nahezu konstanten Gradienten der Poiseulle-Strömung.

Ein weiteres in [RP88] beschriebenes Merkmal ist das Auseinanderbrechen des ersten Wirbels hinter der Verengung an der oberen Kanalwand, vom Hauptwirbel spaltet sich ein etwas schwächerer Nebenwirbel ab. Dies ist in den Abbildungen 4.20 bis 4.22 zu erkennen.

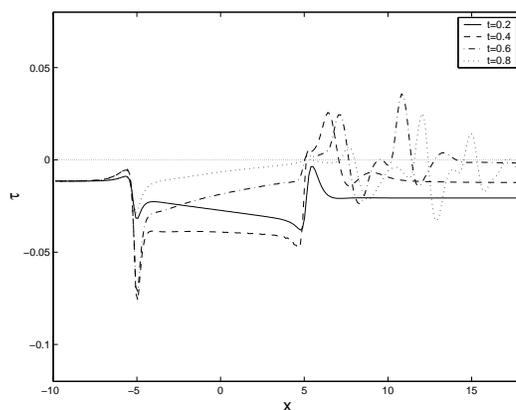


Abbildung 4.25: Wand Schubspannung τ_S an der unteren Kanalwand zu verschiedenen Zeitpunkten

Die Übereinstimmung mit den Ergebnissen in [DP90] zeigt sich erwartungsgemäß auch bei der Untersuchung der Wand Schubspannung. Abbildung 4.25 zeigt die Entwicklung von τ_S entlang der unteren Kanalwand zu verschiedenen Zeitpunkten, in Abbildung 4.26 ist jeweils τ_S und τ_N zu den ausgewählten Zeitpunkten $t^* = 0.5$ und $t^* = 0.7$ dargestellt.

Die Extremwerte von τ ergeben sich aus der Position der zugehörigen Wirbel, die Größe des Ausschlags entspricht dabei der Stärke des Wirbels. Jeweils die zwei zuerst auftretenden Wirbel an jeder Wand sind dabei deutlich stärker als die Wirbel im hinteren Bereich nahe des Ausströmrandes. Ein möglicher Grund hierfür können die

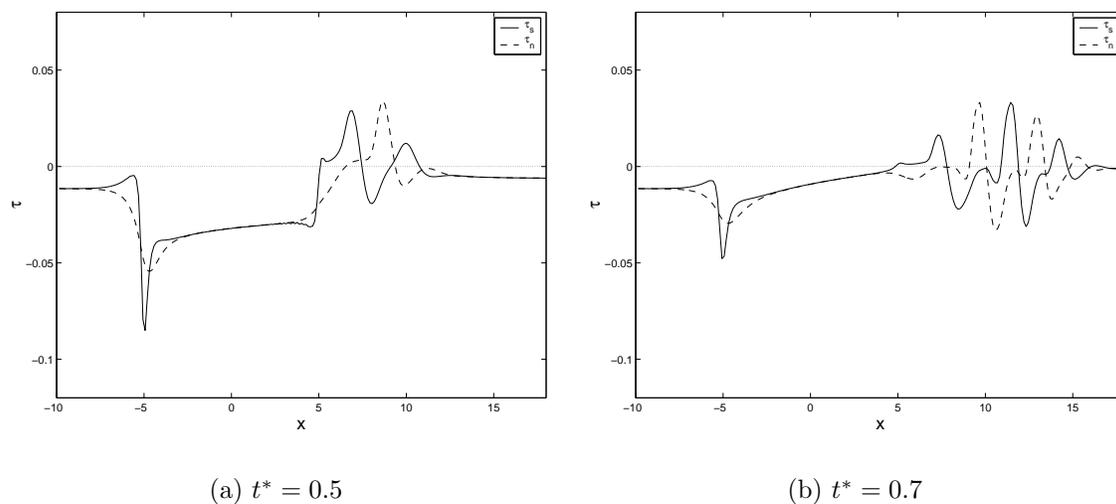


Abbildung 4.26: Wandschubspannung an der oberen (τ_N) und unteren (τ_S) Kanalwand

einfachen Ausströmrandbedingungen sein, dies wird auch in [DP90] vermutet, weitergehende Untersuchungen in diese Richtung wurden aber nicht gemacht. Schließlich ist in allen drei Abbildungen das relativ ungestörte Verhalten der Strömung vor und in der Engstelle zu erkennen.

Kapitel 5

Die Numerische Behandlung gekoppelter Probleme

In diesem Kapitel erläutern wir die numerische Lösung des gekoppelten Problems. Die Position des Gebietsrandes, die in Algorithmus 1 aus dem vorigen Kapitel noch explizit gegeben sein musste, soll daher nun durch das Lösen des strukturmechanischen Teilproblems ermittelt werden. Wir skizzieren kurz die numerische Behandlung dieses Teilproblems, anschließend geben wir den Algorithmus zur Lösung des gekoppelten Problems an zusammen mit einigen Aspekten zur Implementierung und zur Stabilität des Verfahrens. Abschließend werden numerische Ergebnisse vorgestellt, die mit dem beschriebenen Verfahren erzielt werden konnten.

5.1 Die numerische Behandlung des strukturmechanischen Problems

Üblicherweise werden in der Praxis elliptische Differentialgleichungen, wie sie in der Strukturmechanik auftreten, auf numerischem Weg mit der Methode der Finiten Elemente gelöst. Zeitabhängige parabolische Probleme werden dabei in vielen Fällen mit der vertikalen Linienmethode (vgl. [GR94]) behandelt, d.h. es wird zunächst bezüglich der räumlichen Variablen diskretisiert und das entstehende System gewöhnlicher Differentialgleichungen wird i.A. mit Differenzenverfahren gelöst. Um die Ortsdiskretisierung mit der Finite-Elemente-Methode darzustellen, betrachten wir das elastostatische Problem

$$-2\mu \operatorname{div} \epsilon(\mathbf{u}) - \lambda \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u} = \mathbf{b} \text{ in } \Omega \quad (5.1)$$

mit Randbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= 0 \text{ auf } \Gamma_0, \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} &= g \text{ auf } \Gamma_N, \quad \partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_N, \end{aligned} \quad (5.2)$$

das sich aus den Lamé-Gleichungen (2.35) unter Vernachlässigung der Trägheitskräfte ergibt. Das zugehörige Variationsproblem besteht darin, $\mathbf{u} \in H_\Gamma^1$ zu finden mit

$$2\mu \int_{\Omega} \epsilon(\mathbf{u}) : \epsilon(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} + \lambda \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \mathbf{b} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Gamma_N} g \mathbf{v} \, d\mathbf{x} \quad (5.3)$$

für $\mathbf{v} \in H_\Gamma^1$ mit

$$H_\Gamma^1 := \{\mathbf{v} \in H^1(\Omega)^3 : \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0 \text{ für } \mathbf{x} \in \Gamma_0\}$$

und

$$a : b := \sum_{i,k} a_{ik} b_{ik}$$

Wir ordnen also dem Differentialoperator aus (5.1) eine Bilinearform $a(\cdot, \cdot)$ zu mit

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := 2\mu(\epsilon(\mathbf{u}), \epsilon(\mathbf{v}))_0 + \lambda(\operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v})_0, \quad (5.4)$$

wobei $(\cdot, \cdot)_0$ das L_2 -Skalarprodukt ist. Wir ermitteln nun die numerische Lösung \mathbf{u}_h , indem wir das Variationsproblem auf einem endlichdimensionalen Unterraum $V_h \subset H_\Gamma^1$ betrachten:

$$a(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) = (\mathbf{b}_h, \mathbf{v}_h)_0 + (g, \mathbf{v}_h)_{0, \Gamma_N} \text{ für } \mathbf{v}_h \in V_h \quad (5.5)$$

Bilden nun Funktionen $\varphi_i, i = 1, \dots, n$ eine Basis von V_h , so ist (5.5) äquivalent zu

$$a(\mathbf{u}_h, \varphi_i) = (\mathbf{b}_h, \varphi_i)_0, \quad i = 1, \dots, n \quad (5.6)$$

Mit dem Ansatz

$$\mathbf{u}_h = \sum_{j=1}^n u_j \varphi_j \quad (5.7)$$

resultiert aus (5.6) das lineare Gleichungssystem

$$A\mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (5.8)$$

mit

$$a_{ij} = a(\varphi_j, \varphi_i) \text{ und } b_i = (\mathbf{b}_h, \varphi_i)_0 \quad (5.9)$$

Dieses Gleichungssystem wird i.A. mit iterativen Methoden gelöst. Zur Bestimmung einer Basis von V_h wird das Gebiet Ω zunächst in einfache Teilgebiete zerlegt, in zwei Dimensionen verwendet man meistens Dreiecke oder Vierecke, in drei Raumdimensionen werden Tetraeder oder Quader benutzt. Die Funktionen φ_i werden nun als stückweise Polynome über der Zerlegung von Ω konstruiert, mit zusätzlichen Forderungen an die globale Stetigkeit oder Differenzierbarkeit sowie möglichst kleinem Träger.

Eine Einführung in die Theorie der Finiten Elemente bieten [Zie75], [Bra97] und [GR94].

5.2 Der Algorithmus und Bemerkungen zur Implementierung

```

Initialisiere Strömungslöser:  $t = 0, V^0, P^0, \Omega_{F,h}^0, \Gamma_0$ 
Initialisiere Strukturlöser:  $t = 0, u^0, \Omega_{S,h}^0, \Gamma_0$ 
while  $t < T_{\text{End}}$  do
  Berechne Kräfte  $F^n$  aus  $V^n, P^n$ 
  Übermittle Kräfte  $F^n$  an Strukturlöser
  Löse Strukturproblem
  Übermittle neue Position von  $\Gamma_t$  an Strömungslöser
  Berechne  $\Delta t$  nach (4.56) und (4.55)
  Bestimme  $\Omega_{F,h}^{n+1}$  mit  $\Gamma_t$  und berechne  $V_g^{n+1}$  nach (4.43)
  Berechne  $V^*$  nach (4.47)
  Aktualisiere  $V^*$  in den Ghost-Zellen
  Basistransformation  $V^* \rightarrow \tilde{V}$  und Gitteraustausch  $\Omega_h^n \rightarrow \Omega_h^{n+1}$ 
  Setze Randwerte für  $\tilde{V}$ , aktualisiere  $\tilde{V}$  in den Ghost-Zellen
  Löse die Poissongleichung (4.53)
  Korrekturschritt nach (4.54):  $V^{n+1} = \tilde{V} - \Delta t G p^{n+1}$ 
  Aktualisiere Ghost-Zellen
  Setze Randwerte für  $V^{n+1}$ 
   $t = t + \Delta t$ 
end while

```

Algorithmus 2: Die Hauptschleife des Programms zur Lösung des gekoppelten Problems

In Algorithmus 2 wird der Ablauf des Programms zur Lösung des gekoppelten Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblems dargestellt. Er ergibt sich im Wesentlichen aus dem bereits beschriebenen Algorithmus 1, wobei die Position des Interfaces nun durch Lösung eines Elastizitätsproblems bestimmt wird. Zur Lösung dieses Teilproblems wird das frei verfügbare, ursprünglich an der TU Delft entwickelte Finite-Elemente-Programm *tochnog*¹ herangezogen. Da *tochnog* im Quellcode vorliegt, war es möglich, eine Abwicklung des Datenaustauschs über das Dateisystem, der die Laufzeit des Programms negativ beeinflussen würde, zu vermeiden. Dies wurde realisiert, indem die nötigen Routinen aus *tochnog* dem Hauptprogramm in einer Bibliothek zur Verfügung gestellt wurden.

Das Gebiet Ω_S wurde mit trilinearen isoparametrischen C^0 -Elementen (sog. "brick"-Elemente) zerlegt. Soll nur der Rand des Fluidgebietes und kein echt dreidimensionaler Körper betrachtet werden, bietet sich die Verwendung von Shell-Elementen an, diese

¹s. <http://tochnog.sourceforge.net>

werden aber von *tochnog* nicht zur Verfügung gestellt. Es konnte nun eine einfache Verknüpfung von Strömungs- und Strukturgitter am Rand dadurch erfolgen, dass eine bei der Gittergenerierung erzeugte Seitenfläche eines Fluidvolumens auf Γ_t gleichzeitig auch die Seitenfläche eines angrenzenden Elementes der Zerlegung von Ω_S bildet². Dies bietet außerdem den Vorteil, dass lediglich die in Abschnitt 4.1.3 beschriebenen Interpolationen verwendet werden müssen, um die Kräfte F in den Randknoten zu bestimmen.

Die Kräfte F werden entsprechen der Bedingung (2.47) berechnet. Die dazu notwendigen Anteile des Zähigkeitstensors werden wie bei der Diskretisierung des diffusiven Terms ermittelt. Der ebenfalls benötigte Druck P ist durch Lösung der Poisson-Gleichung nur bis auf eine additive Konstante bestimmt. Daher wird diese Konstante vor Berechnung von F durch die Forderung

$$\int_{\Gamma_{\text{out}}} p \, d\Omega = 0 \quad (5.10)$$

festgesetzt, wobei Γ_{out} der Teil des Randes mit Ausströmbedingungen ist.

Da das Programm *tochnog* keine Gebietszerlegung unterstützt, wird für Ω_S ein zusammenhängendes Gitter erzeugt, jedoch kann für das Strömungsproblem eine Blockzerlegung durchgeführt werden, so dass das Interface möglicherweise aus dem Rand mehrerer Blöcke besteht. Bei einer parallelen Bearbeitung des Problems wird das Elastizitätsproblem von einem Prozess gelöst. Zum Einsammeln der Kräfte und zum Verteilen der Positionsdaten des Randes muss dieser Prozess dann mit allen Prozessen des Strömungslösers, zu deren Blockrand ein Teil des Interfaces gehört, kommunizieren.

5.3 Bemerkungen zur Stabilität

Es wurde bereits früher darauf hingewiesen, dass Stabilität und Konvergenz der einzelnen Teilprobleme nicht die Existenz oder Eindeutigkeit einer Lösung des gekoppelten Problems oder die Stabilität des gekoppelten Algorithmus garantieren können. Um die Schwierigkeiten zu illustrieren, betrachten wir die folgende formale Schreibweise für das gekoppelte Problem:

$$\begin{pmatrix} S & C_{SF} \\ C_{FS} & F_u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_S \\ \mathbf{b}_F \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

Hierbei bezeichnet S den Operator des strukturmechanischen Teilproblems, \mathbf{u} sind die Daten des Strukturproblems, d.h. die Verschiebungen, F_u bezeichnet den Operator des Strömungsproblems mit den Daten \mathbf{v} , dies sind Geschwindigkeiten und Druck. Die Einträge C_{SF} und C_{FS} stehen für die Kopplungsbedingungen, der Vektor \mathbf{b} für etwaige

²Dies setzt natürlich am Rand eine gleich feine Diskretisierung von Fluid- und Strukturproblem voraus. Sollen unterschiedlich feine Gitter verwendet werden, müssen zum Datenaustausch u.U. aufwendige Interpolationsoperationen verwendet werden.

zusätzliche externe Kräfte. Es sei betont, dass (5.11) nur eine abstrakte Schreibweise ist, denn zum Einen ist der Operator F_u nichtlinear, zum Anderen sind die Kopplungsbedingungen nicht explizit durch Gleichungen gegeben. Im Fall des Strömungsproblems gehen die Verschiebungen nicht nur als Randbedingung in die Wechselwirkung ein, sondern das zu Grunde liegende Gebiet Ω_F hängt von \mathbf{u} ab, was durch den zusätzlichen Index u an F angedeutet werden soll.

Verwendet man zur iterativen Lösung des Systems (5.11) das Gauß-Seidel-Verfahren, so ergibt sich der Ablauf von Algorithmus 2: Für ein lineares Gleichungssystem $Ax = b$ ist ein Schritt des Gauß-Seidel-Verfahrens gegeben durch

$$Dx^{k+1} = Lx^{k+1} + Rx^k + b \quad (5.12)$$

wobei D die Diagonale von A ist und L bzw. R sind die linke untere bzw. entsprechend rechte obere Dreiecksmatrix mit Diagonale 0, die sich aus der Zerlegung $A = D - L - R$ ergeben. Für das System (5.11) ergibt sich so

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{k+1} &= S^{-1}(\mathbf{b}_S - C_{SF}\mathbf{v}^k) \\ \mathbf{v}^{k+1} &= F_u^{-1}(\mathbf{b}_F - C_{FS}\mathbf{u}^{k+1}) \end{aligned} \quad (5.13)$$

Ein Iterationsschritt des Gauß-Seidel-Verfahrens entspricht also einem Zeitschritt von Algorithmus 2.

Die Iteration (5.12) ist von der Form

$$x^{k+1} = Gx^k + d \quad (5.14)$$

mit $d = D^{-1}\mathbf{b}$ und der Iterationsmatrix $G = (D - L)^{-1}R$. Für das System (5.11) ist die Iterationsmatrix gegeben durch

$$G = \begin{pmatrix} 0 & -C_{SF}S^{-1} \\ 0 & -C_{SF}S^{-1}C_{FS}F_u^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & g_1 \\ 0 & g_1 \cdot g_2 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

Es ist bekannt, dass die Iteration (5.14) genau dann konvergiert, wenn

$$\rho(G) < 1 \quad (5.16)$$

ist. Im skalaren Fall, d.h. wenn G eine 2×2 -Matrix ist, ergibt sich daraus die Bedingung

$$|g_1 \cdot g_2| < 1 \quad (5.17)$$

In [KG99] wird versucht, Konvergenzaussagen für die Lösung des gekoppelten Problems zu gewinnen, indem stark vereinfachte Modelle verwendet werden, um skalare Approximationen für die Einträge g_1 und g_2 in (5.15) zu bestimmen. Dabei wurde festgestellt, dass die Gauß-Seidel-Iteration für bestimmte physikalische Parameter des

Fluidmodells nicht konvergent ist. Durch numerische Untersuchungen wurde bestätigt, dass insbesondere bei der Verwendung der Parameter für Wasser keine Konvergenz erreicht werden konnte, im Gegensatz zu Rechnungen mit den Parametern für Luft.

Bei der Durchführung von numerischen Experimenten im Rahmen dieser Arbeit wurden ähnliche Beobachtungen gemacht. Zum Einen treten Konvergenzprobleme auf, wenn das simulierte Fluid im Strömungsproblem eine vergleichsweise große Dichte hat, wie beispielsweise Wasser³. Zum Anderen führt eine geringe Dichte des modellierten Feststoffs ebenfalls zur Divergenz des gekoppelten Problems, so dass insgesamt die Lösbarkeit des gekoppelten Problems vom Verhältnis der Dichten des Fluids und des Feststoffs abhängt.

Eine Schlüsselrolle scheint hier die Beschleunigung $\mathbf{a}_\Gamma = \ddot{\mathbf{u}}|_\Gamma$ des Interfaces zu haben. Wie man an den Lamé-Gleichungen (2.35) erkennt, hängt \mathbf{a}_Γ reziprok von der Dichte ρ_S des modellierten elastischen Materials ab. Eine starke Beschleunigung des Randes in Richtung der (vom Fluid aus gesehen) äußeren Normale führt zu einem starken Druckabfall, im nächsten Kopplungsschritt wiederum ruft dieser Druckabfall eine Kraftumkehrung und damit eine Bewegung des Randes in entgegengesetzter Richtung hervor. Dieser Prozess setzt sich nun in jedem Zeitschritt fort und die Effekte Druckänderung und Randbeschleunigung verstärken sich gegenseitig, bis eines der Teilprobleme nicht mehr lösbar ist oder das Gitter zu stark deformiert ist, um die Rechnung fortführen zu können.

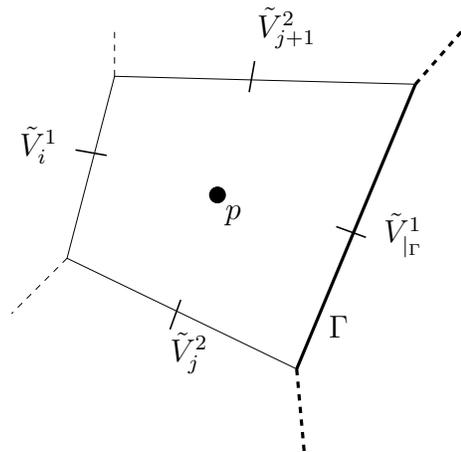


Abbildung 5.1: Fluidvolumen am Rand

Die Sensitivität des Fluiddrucks gegenüber der Beschleunigung des Randes erkennen wir, wenn wir die Poissongleichung (4.53) für ein an den Rand grenzendes Kontrollvolumen betrachten. In Abbildung 5.1 ist dieser Fall skizziert für ein Fluidelement, dessen

³zum Vergleich: bei einer Temperatur von 20°C und einem Luftdruck von 1000 hPa hat Wasser eine Dichte von 998,23 kg/m³ und Luft eine Dichte von 1,205 kg/m³.

Seitenfläche mit Mittelpunkt $\mathbf{x}_{j+\epsilon_1}$ auf dem Rand Γ liegt. Mit der im vorhergehenden Kapitel durchgeführten Diskretisierung des Divergenzoperators D gilt

$$DGp = \frac{1}{\Delta t}(\tilde{V}_{|\Gamma}^1 - \tilde{V}_i^1 + \tilde{V}_{j+1}^2 - \tilde{V}_j^2) \quad (5.18)$$

Der benötigte Randwert $\tilde{V}_{|\Gamma}^1$ wird vor der Berechnung von $D\tilde{V}$ auf den Randwert für $V^{1,n+1}$, also auf $V_{g,\Gamma}^{1,n+1}$ gesetzt. Es sei ϵ die Änderung der Randgeschwindigkeit vom Zeitschritt n zum Zeitschritt $n+1$, also

$$V_{g,\Gamma}^{1,n+1} = V_{g,\Gamma}^{1,n} + \epsilon \quad (5.19)$$

Dann folgt aus (5.18)

$$\begin{aligned} DGp &= \frac{1}{\Delta t}(V_{g,\Gamma}^{1,n} + \epsilon - \tilde{V}_i^1 + \tilde{V}_{j+1}^2 - \tilde{V}_j^2) \\ &= \frac{1}{\Delta t}(V_{g,\Gamma}^{1,n} - \tilde{V}_i^1 + \tilde{V}_{j+1}^2 - \tilde{V}_j^2) + \frac{1}{\Delta t}\epsilon \\ &= \frac{1}{\Delta t}D\hat{V} + \frac{V_{g,\Gamma}^{1,n+1} - V_{g,\Gamma}^{1,n}}{\Delta t} \end{aligned} \quad (5.20)$$

Dabei entspricht der Summand $\frac{1}{\Delta t}D\hat{V}$ genau der rechten Seite der Poissongleichung, die sich für nicht bewegliche Ränder, d.h. zeitlich konstante Randbedingungen ergeben würde. Der zweite Term zeigt die angesprochene Abhängigkeit des Drucks von der Beschleunigung des Randes; um das Geschwindigkeitsfeld \hat{V} divergenzfrei machen zu können, muss der Druck die zusätzliche ‘‘Störung’’ in Form der Randbeschleunigung ausgleichen. Möglicherweise bedarf die Vorgabe von Randbedingungen für das intermediäre Geschwindigkeitsfeld bei Lösungsverfahren, die die ALE-Formulierung mit einer Projektionsmethode verbinden, einer genaueren Analyse.

Ein anderer Ansatzpunkt zur Stabilisierung des numerischen gekoppelten Problems besteht in der Verwendung impliziter Verfahren. Sowohl an Algorithmus 2 als auch an (5.13) sieht man, dass die Kopplungsbedingungen nicht zum gleichen Zeitpunkt berücksichtigt werden. Die Bedingung des Kräftegleichgewichts wird zum Zeitpunkt t^n erfüllt, die Stetigkeit der Randgeschwindigkeit hingegen wird zum Zeitpunkt t^{n+1} verwendet. Es ist zu Vermuten, dass der zeitlich explizite Charakter der numerischen Kopplung die starke physikalische Kopplung nur unzureichend nachbildet. Ein impliziter Ansatz, der garantiert, dass die Kopplungsbedingungen auch tatsächlich zum selben Zeitpunkt erfüllt werden, kann hier möglicherweise die Stabilität verbessern. Falls für beide Teilprobleme auf Löser zurückgegriffen werden kann, die ihrerseits auf impliziten Zeitdiskretisierungen aufbauen, die mittels eines iterativen Verfahrens, beispielsweise SIMPLE im Fall des Strömungslösers, umgesetzt sind, könnte durch Koppeln in jedem inneren Iterationsschritt eine implizite Lösung des Gesamtproblems erreicht werden. Im Rahmen dieser Arbeit standen Löser mit dieser Eigenschaft jedoch nicht zur Verfügung.

5.4 Numerische Ergebnisse

In den beiden folgenden Abschnitten stellen wir Ergebnisse vor, die mit dem implementierten Verfahren erzielt wurden.

5.4.1 Simulation mit dominierender externer Kraft

Wir beginnen mit einem Versuch, der einen ähnlichen Aufbau hat wie in [VMS99] beschrieben.

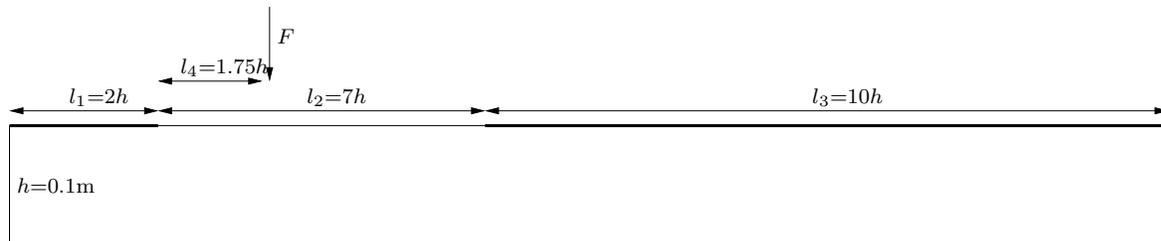


Abbildung 5.2: Geometrie des Testfalls

Wir betrachten eine Strömung in einem Kanal mit den in Abbildung 5.2 angegebenen Abmessungen. Die Ausdehnung in y -Richtung beträgt ebenfalls $h = 0.1$ Meter. Der dünne Bereich der oberen Kanalwand ist das flexible Interface, dessen Lage vom Elastizitätslöser berechnet wird. Zusätzlich zu den Fluidkräften, die sich aus den Kopplungsbedingungen ergeben, prägen wir an der markierten Stelle eine Kraft F auf, die einen sinusförmigen zeitlichen Verlauf annimmt mit einem Spitzenwert von $1.0 \text{e}6 \text{ N}$. Die Reynoldszahl des simulierten Fluids beträgt 100, zur Modellierung des Interfaces wurde ein Elastizitätsmodul E von $1.93 \text{e}11 \text{ N/m}^2$, eine Dichte ρ_S von 8030 kg/m^3 und eine Poissonzahl ν von 0.29 verwendet, dies entspricht den Materialparametern für Stahl.

Als Anfangsbedingung für die Simulation wurde eine voll entwickelte Poiseulle-Strömung mit einer maximalen Geschwindigkeit von 1 m/s verwendet sowie ein unbelasteter Zustand der oberen Kanalwand angenommen. Für die gesamte Dauer der Simulation wird am Einströmrand das zeitlich konstante Profil der Poiseulle-Strömung vorgeschrieben. Als weitere Randbedingungen wurden Ausströmrandbedingungen sowie Haftbedingungen an der unteren und oberen Kanalwand verwendet. Letztere resultieren in den beschriebenen Kopplungsbedingungen. In y -Richtung wurden periodische Randbedingungen gewählt. Der Kanal wurde in drei Blöcke aufgeteilt und insgesamt mit $190 \times 10 \times 10$ Zellen aufgelöst. Daraus ergab sich für das Finite-Element-Netz des Elastizitätsproblems eine Auflösung von 1400 Elementen.

In Abbildung 5.3 ist der zeitliche Verlauf der aufgebrachten Belastung (links) und die daraus resultierende maximale Auslenkung in positiver und negativer z -Richtung

entlang des beweglichen Teils der oberen Kanalwand zu sehen. Offensichtlich nimmt die Größe des Fluidgebietes ihren maximalen und minimalen Wert an, wenn auch die belastende Kraft maximal bzw. minimal ist.

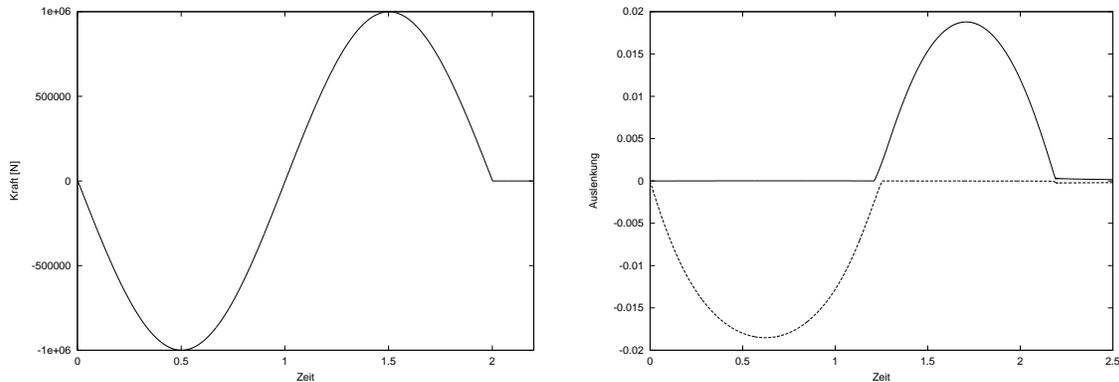


Abbildung 5.3: Aufgeprägte Kraft(links) und resultierende Auslenkung(rechts)

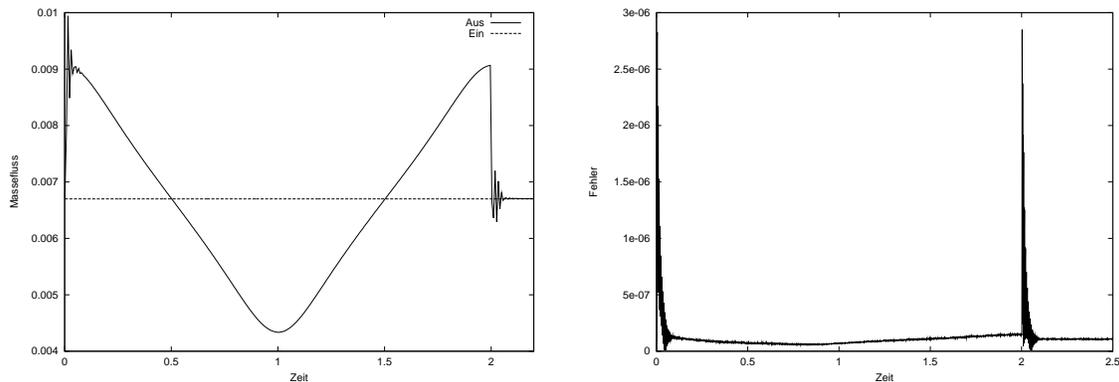


Abbildung 5.4: Volumenänderungsrate und Massefluss

In Abbildung 5.4 ist auf der rechten Seite der Fehler der Masseerhaltungsgleichung dargestellt. Insgesamt zeigt sich eine gute Erhaltung der Masse, lediglich der abrupte Beginn und entsprechend das Ende der Bewegung führen zu den sichtbaren Ausschlägen. Diese spiegeln sich analog in der Darstellung des Massestroms auf der linken Seite von Abbildung 5.4 wieder. Abgesehen von diesen Oszillationen zu Beginn und Ende der betrachteten Periode zeigt sich aber exakt das Verhalten, das man nach

Betrachten der Massebilanzgleichung in der ALE-Formulierung

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_F} dV + \int_{\partial\Omega_F} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_g) \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (5.21)$$

erwartet. Der Rand des Gebietes Ω_F lässt sich folgendermaßen aufteilen:

$$\partial\Omega_F = \Gamma_I \cup \Gamma_O \cup \Gamma_D, \quad (5.22)$$

wobei Γ_I der Teil des Randes mit Einströmbedingungen ist, Γ_O der Ausströmrand sowie Γ_D der Teil des Randes mit Haftbedingungen. Das Randintegral der relativen Geschwindigkeit $\mathbf{v} - \mathbf{v}_g$ über Γ_D verschwindet, weil entweder $\mathbf{v} = \mathbf{v}_g = 0$ gilt (an festen Rändern) oder $\mathbf{v} - \mathbf{v}_g = 0$ (an beweglichen Rändern). Also folgt

$$\int_{\Gamma_O} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = -\frac{d}{dt} \int_{\Omega_F} dV - \int_{\Gamma_I} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \quad (5.23)$$

wenn wir davon ausgehen, dass $\mathbf{v}_g = 0$ an Ein- und Ausströmrändern. Das heißt, es gilt

$$m_O(t) = m_I(t) - \frac{d}{dt} \int_{\Omega_F} dV \quad (5.24)$$

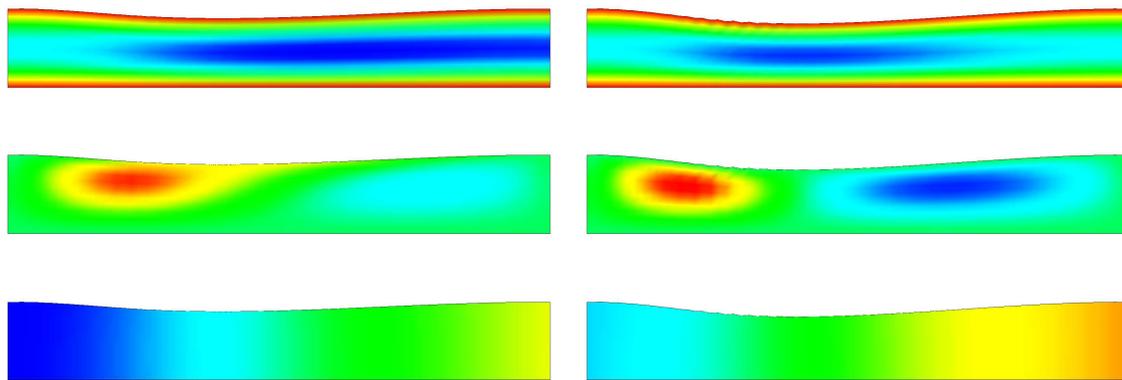
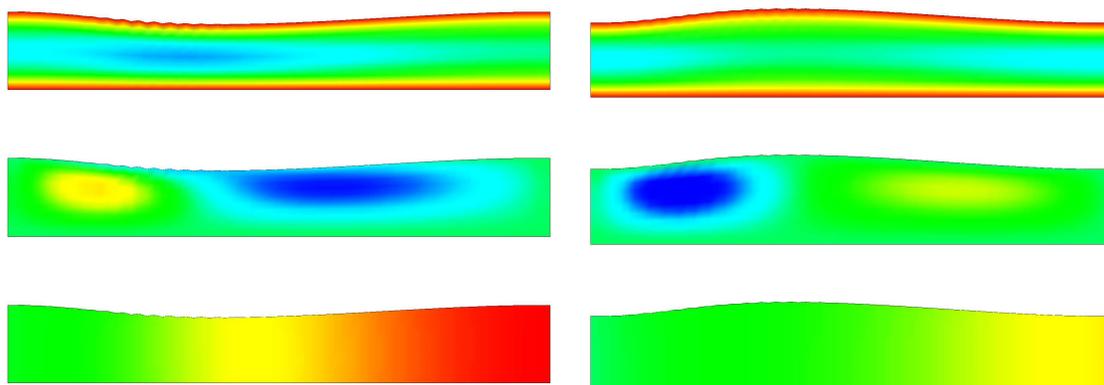
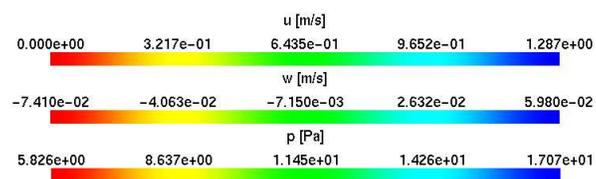
mit der einströmenden Masse m_I und der ausströmenden Masse m_O .

Genau dieses Verhalten zeigt sich in Abbildung 5.4(links). Zum Zeitpunkt $t = 0.5$ und $t = 1.5$, wenn das Gebiet Ω_F seine minimale bzw. maximale Ausdehnung annimmt, ist

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_F} dV = 0 \quad (5.25)$$

und somit $m_O(t) = m_I(t)$. Im Intervall $t \in (0.5, 1.5)$ nimmt das Volumen von Ω_F zu und somit sinkt die Ausströmmasse unter den Wert der einfließenden Masse ab. Dies ist auch deshalb einsichtig, weil das nachströmende Fluid zuerst den entstehenden Raum einnimmt, bevor es den Kanal wieder verlässt. Umgekehrt wird durch Verkleinern des Gebietes, also in den Intervallen $t \in (0, 0.5)$ und $t \in (1.5, 2.0)$ Masse aus dem Kanal “herausgedrückt” und der Volumenfluss am Ausströmrand liegt über dem am Einströmrand. Die Ursache der Oszillationen zu Beginn und Ende der betrachteten Periode lässt sich an Hand von Gleichung (5.24) präzisieren, es entstehen Sprünge, weil $\frac{d}{dt} \int_{\Omega_F} dV$ für $t = 0.0$ und $t = 2.0$ unstetig ist.

Abbildung 5.5 zeigt Farbkodierungen der horizontalen Geschwindigkeitskomponente u , der vertikalen Komponente w sowie des Drucks p auf einer Schnittfläche für $y = 0.05$ zu einigen ausgewählten Zeitpunkten. Es ist nur der Bereich des Kanals abgebildet, dessen obere Wand das Interface bildet. Insbesondere der Verlauf von u verdeutlicht noch einmal die oben dargestellten Überlegungen.

(a) $t = 0.25$ (b) $t = 0.5$ (c) $t = 0.75$ (d) $t = 1.5$ 

(e) Legende

Abbildung 5.5: Kontourplots von u , w und p zu ausgewählten Zeitpunkten

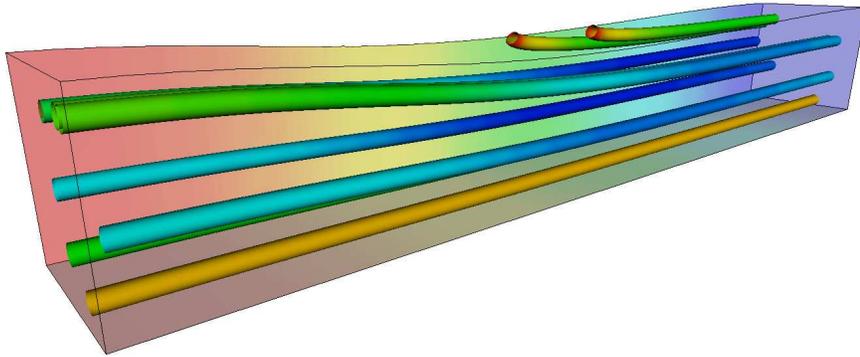


Abbildung 5.6: Stromlinien zum Zeitpunkt $t=0.25$

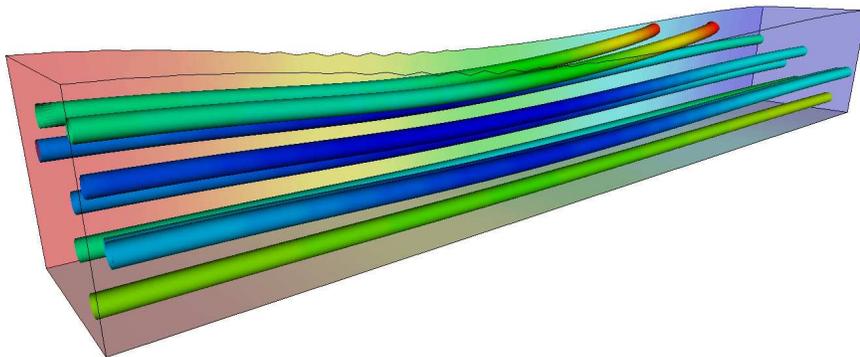


Abbildung 5.7: Stromlinien zum Zeitpunkt $t=0.75$

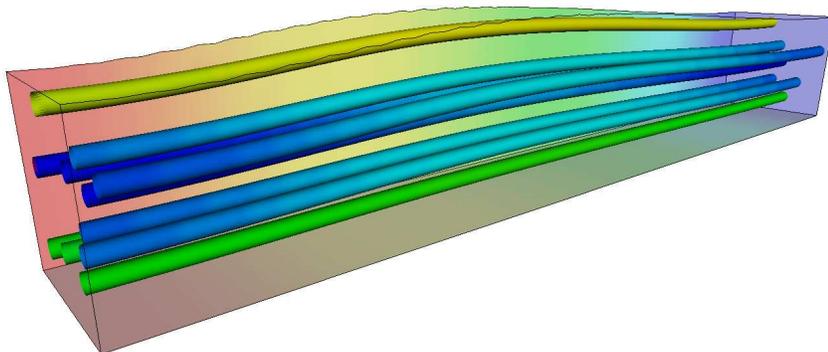


Abbildung 5.8: Stromlinien zum Zeitpunkt $t=1.5$

Die Abbildungen 5.6 bis 5.8 illustrieren den Verlauf der Strömung durch Stromlinien. Es ist ebenfalls nur der Bereich für $0.2h < x < 0.9h$ dargestellt. Die Seitenwände zeigen eine Farbkodierung des Drucks, die Stromlinien sind entsprechend des Geschwindigkeitsbetrages eingefärbt. In den Abbildungen 5.6 und 5.7 verdeutlichen die am oberen Rand endenden bzw. beginnenden Stromlinien den Einfluss der Wandbewegung auf die Strömung.

5.4.2 Simulation ohne externe Kraft

Bei dem im vorigen Abschnitt durchgeführten Versuch war die externe Kraft des Elastizitätsproblems der bestimmende Faktor. In diesem Abschnitt soll nun der Einfluss der Fluidkräfte auf eine flexible Kanalwand untersucht werden. Dazu wird die gleiche Geometrie wie im vorigen Abschnitt verwendet. Das Interface muss nun aber wesentlich nachgiebiger als Stahl sein, damit es zu Verformungen kommt. Zur Modellierung des elastischen Materials wurde eine einheitliche Dichte von $\rho_S = 1000 \text{ kg/m}^3$ und eine Poissonzahl $\nu = 0.29$ verwendet, für das Elastizitätsmodul wurden verschiedene Werte im Bereich von $1\text{e}6 \text{ N/m}^2$ bis $4\text{e}6 \text{ N/m}^2$ getestet. Rand- und Anfangsbedingungen werden ebenso wie im vorigen Abschnitt gewählt.

Abbildung 5.9 zeigt die maximale Abweichung in z -Richtung der oberen Kanalwand für die verwendeten Werte von E . Es zeigt sich ein Schwingungsverhalten der elastischen Wand, dass sich im Laufe der Zeit abschwächt und in einen stationären Zustand übergeht, in dem die Fluidkräfte mit den vom Feststoff entgegengesetzten Kräften im Gleichgewicht sind. Dabei bleibt eine Auslenkung bestehen, die in ihrer Größe von E abhängig ist.

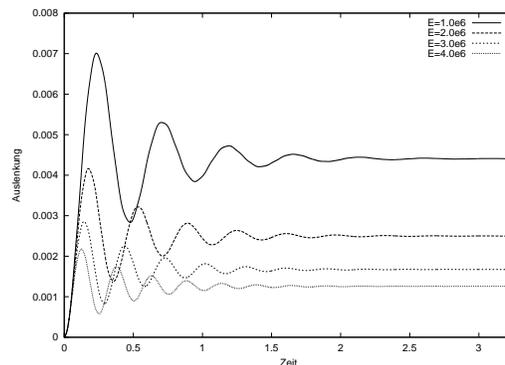


Abbildung 5.9: Maximale Auslenkung des Interfaces für verschiedene Elastizitätsmoduli E

Tabelle 5.1 fasst die wichtigsten Punkte für die untersuchten Werte von E zusammen, dies sind die maximale Auslenkung in Metern zusammen mit dem Zeitpunkt, zu

dem dieser Wert erreicht wird, sowie die Größe der Auslenkung im stationären Endzustand.

E	$z_{\max} - z_0 [m]$	$t [s]$	$dz(t_{\max}) [m]$
1.0e6	7.012e-3	2.33747e-1	4.416e-3
2.0e6	4.162e-3	1.75385e-1	2.498e-3
3.0e6	2.858e-3	1.43185e-1	1.672e-3
4.0e6	2.179e-3	1.24457e-1	1.257e-3

Tabelle 5.1: Maximale Auslenkung und Auslenkung im stationären Endzustand

Abbildung 5.10 zeigt die zeitliche Entwicklung der entstehenden Masseflüsse am Ausströmrand für die verwendeten Werte von E sowie als Vergleichswert den konstanten Volumenstrom im Einströmbereich. Der Verlauf dieser Kurven bestätigt nocheinmal die Überlegungen des vorigen Abschnitts zum Zusammenhang zwischen $m_I(t)$ und $m_O(t)$. Die rechte Seite von Abbildung 5.10 zeigt die gute Erhaltung der Masse. Die Schwankungen spiegeln die variierende Qualität des Gitters im zeitlichen Verlauf wieder.

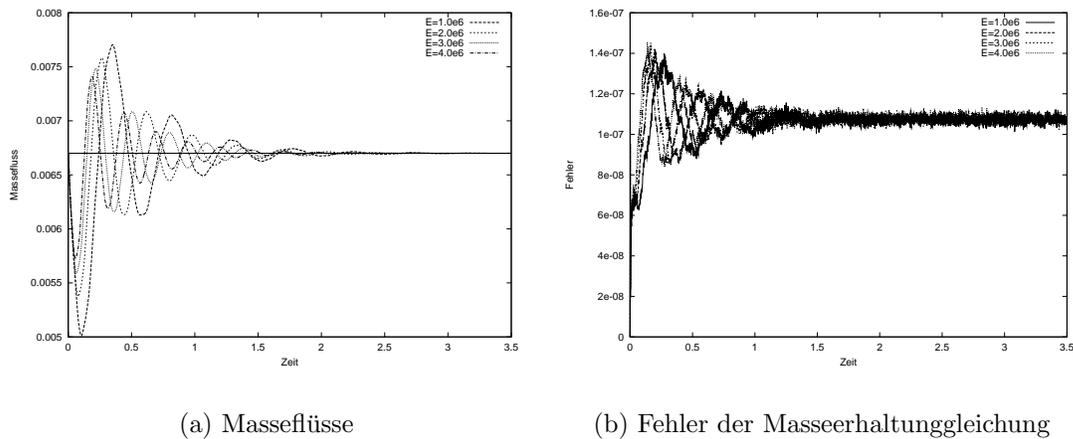


Abbildung 5.10: Masseflüsse und Fehler der Masseerhaltungsgleichung für verschiedene Elastizitätsparameter E

In Abbildung 5.11 sind Farbkodierungen der horizontalen und vertikalen Geschwindigkeitskomponenten zum Zeitpunkt der maximalen Ausdehnung dargestellt. Dargestellt ist nur der Kanalbereich, der das Interface enthält.

Abbildung 5.12 veranschaulicht den Verlauf der Strömung im stationären Zustand mit einigen Stromlinien, die mit dem Geschwindigkeitsbetrag farbkodiert sind.

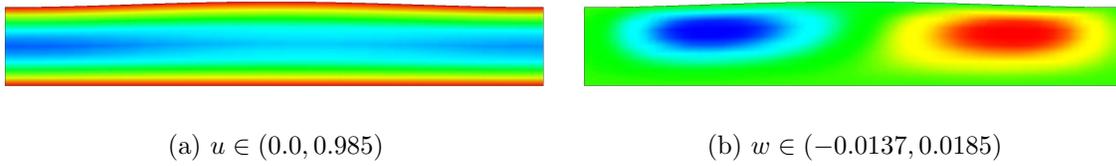


Abbildung 5.11: Farbkodierung von u und w zum Zeitpunkt der maximalen Auslenkung ($E=1e6$)

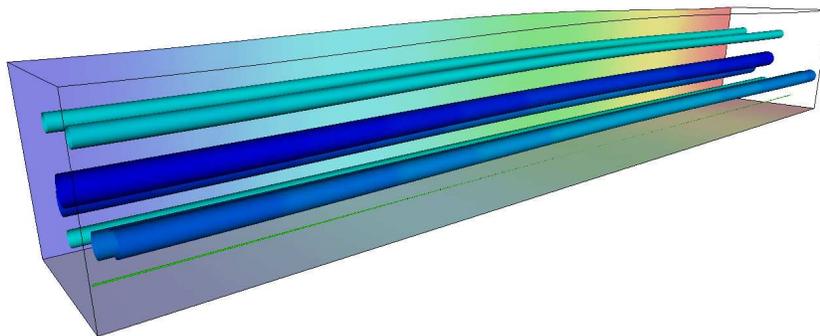


Abbildung 5.12: Stromlinien im stationären Endzustand

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein Verfahren zur parallelen Lösung von dreidimensionalen, zeitabhängigen Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblemen vorgestellt. Als grundlegender Ansatz wurde ein modularer Aufbau gewählt, der dadurch gekennzeichnet ist, dass die einzelnen Teilprobleme jeweils mit speziell abgestimmten Lösungsmethoden weitestgehend unabhängig voneinander behandelt werden. Die Kopplungseffekte schlagen sich in Randbedingungen für die Teilprobleme nieder. Diese Randbedingungen werden jeweils durch die Lösung des anderen Teilproblems festgelegt.

Besonderes Augenmerk wurde auf die Lösung des Strömungsproblems gerichtet: es ergibt sich die zusätzliche Aufgabe, zeitabhängige Gebiete in die Lösung mit einzubeziehen. Hierzu wurde die Arbitrary-Lagrange-Euler-Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen hergeleitet und anschließend als Basis für eine koordinateninvariante Diskretisierung auf zeitabhängigen, randangepassten Gittern verwendet.

Es wurde gezeigt, dass zur Sicherung der Masseerhaltung ein zusätzlicher geometrischer Erhaltungssatz, das Volume-Conservation-Law, berücksichtigt werden muss. Dieser wurde in die Lösung des Strömungsproblems dadurch mit einbezogen, dass der Ansatz der gewichteten kontravarianten Flüsse als abhängige Variablen auf die Gittergeschwindigkeit übertragen wurde. So konnte eine insbesondere in drei Raumdimensionen teure explizite Berechnung der kartesischen Komponenten der Gittergeschwindigkeit vermieden werden.

Die ALE-Methode wurde vervollständigt, indem die Projektions-Methode zur Entkopplung von Druck und Geschwindigkeiten an die Situation zeitabhängiger Gitter angepasst wurde.

Die Implementierung der ALE-Methode wurde an numerischen Experimenten getestet und es konnte nachgewiesen werden, dass die Konvergenz zweiter Ordnung im Fall glatter Gitter auch für zeitabhängige Gitter erhalten bleibt.

Zur Lösung des gekoppelten Problems wurde ein Finite-Elemente-Programm in den Algorithmus integriert. Es wurden numerische Experimente durchgeführt, bei denen die Lage des Interfaces vom Elastizitätsproblem bestimmt wurde. Dabei wurde sowohl der

alleinige Einfluss von vom Fluid ausgeübten Kräften als auch der zusätzlicher externer Kräfte untersucht.

Es ist deutlich geworden, dass der vorgestellte Algorithmus eine flexible Möglichkeit bietet, gekoppelte Probleme, insbesondere die Fragestellung von Fluid-Struktur-Wechselwirkungsproblemen, zu untersuchen, dennoch gibt es einige Punkte, die Anlass zu zukünftigen Verbesserungen geben.

Das Hauptziel für folgende Untersuchungen sollte eine Verbesserung der Stabilität des Algorithmus sein. Mit numerischen Experimenten und einfachen Überlegungen wurde festgestellt, dass das verwendete Verfahren Instabilitäten in Abhängigkeit von Materialparametern zeigt.

Indem das gekoppelte Problem in abstrakter Form als Gleichungssystem formuliert wurde, konnte beobachtet werden, dass ein Zeitschritt des implementierten Algorithmus der Anwendung eines Iterationsschritts des Gauß-Seidel-Verfahrens auf das Gleichungssystem entspricht. Diese Art der Behandlung der Kopplung ist zeitlich gesehen expliziter Natur, d.h. die Kopplungsbedingungen werden nicht exakt zum gleichen Zeitpunkt erfüllt. Hier ist zu untersuchen, inwieweit andere iterative Verfahren, insbesondere impliziten Typs, auf das gekoppelte System angewendet werden können.

Möglicherweise kann auch eine eingehendere Untersuchung des Druckverhaltens im Rahmen der ALE-Methode einen Ansatz für Stabilitätsverbesserungen liefern. Ein wesentlicher Punkt könnte hier die Analyse der Randbedingungen für das intermediäre Geschwindigkeitsfeld in der Projektions-Methode sein.

Um das Feld möglicher Anwendungen zu erweitern, sind einige Ergänzungen im Strömungslöser denkbar. Beispielsweise kann man die Modellierung des Spannungstensors auf die Behandlung nicht-newtonischer Fluide erweitern. Zur Simulation von zusätzlichen Stofftransportprozessen in der Strömung ist es möglich, die ALE-Form einer Transportgleichung in das Programm zu integrieren.

Anhang A

A.1 Zusammenhang zwischen Basic Identity und Volume Conservation Law

Das Volume Conservation Law

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}_g \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (\text{A.1})$$

das in Abschnitt 3.4 aus geometrischen Überlegungen heraus motiviert worden war, läßt sich auch von einem anderen Standpunkt aus sehen.

Für die Transformation der Zeitableitung der Impulsgleichung in $(\tau, \boldsymbol{\xi})$ -Koordinaten wie sie in Abschnitt 4.2.1 vorgeführt wurde, ist die Basic Identity

$$\sum_{i=0}^n \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \right) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, n \quad (\text{A.2})$$

insbesondere für $j = 0$ ein wesentliches Hilfsmittel.

Multiplikation von (A.2) für $j = 0$ mit $\frac{1}{\sqrt{g}}$ und Integration über Ω liefert

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=0}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_0} \right) d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_0} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_0}{\partial x_0} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{g} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_0} \right) d\Omega \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Mit

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial x_0} = -\bar{w}^i$$

und den Bezeichnungen $x_0 = t$ und $\xi_0 = \tau$ wie in Abschnitt 4.2.1 ergibt sich aus (A.3):

$$0 = \int_{\Omega} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \tau} \sqrt{g} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} (\sqrt{g} \bar{w}^i) d\Omega \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{d}{d\tau} \int_{\Omega} d\Omega - \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi_i} (\sqrt{g} \mathbf{a}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}_g) d\Omega \\ &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u}_g d\Omega \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Die Diskretisierung des VCL lässt sich also auch unabhängig von geometrischen Überlegungen auffassen als Finite-Volumen-Diskretisierung der algebraischen Bedingung (A.2).

Literaturverzeichnis

- [AHW92] S. Amini, P. J. Harris, and D. T. Wilton. Coupled boundary and finite element method for the solution of the dynamic fluid-structure interaction problem. In C. A. Brebbia and S. A. Orszag, editors, *Lecture Notes in Engineering*, number 77. Springer, 1992.
- [BBC⁺94] R. Barret, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems*. SIAM, 1994.
- [Bel98] Ted Belytschko. Continuum mechanics. Northwestern University, Dezember 1998. Draft.
- [Bra97] D. Braess. *Finite Elemente, Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie*. Springer, 1997.
- [Bri85] Egbert Brieskorn. *Lineare Algebra und Analytische Geometrie II*. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1985.
- [Bun99] U. Bunge. Die Behandlung der Strukturmechanik mittels der Finite-Volumen-Methode. Technical report, Institut für Strömungsmechanik der TU Berlin, 1999.
- [CJR91] S. Chen, D. Johnson, and P. Raad. The surface marker method. In L. Wrobel and C. Brebbia, editors, *Computational Modelling of free and moving boundary problems*. de Gruyter, 1991.
- [CO92] J. M. Crolet and R. Ohayon, editors. *Computational methods for fluid-structure interaction*. Longman Scientific & Technical, 1992.
- [DP88] I. Demirdžić and M. Perić. Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8:1037–1050, 1988.

- [DP90] I. Demirdžić and M. Perić. Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 10:771–790, 1990.
- [FP80] C. A. Felippa and K. C. Park. Staggered transient analysis for coupled mechanical systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 24:61–111, 1980.
- [FP97] H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 1997.
- [GDN95] M. Griebel, T. Dornseifer, and T. Neunhoeffler. *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik - eine praxisorientierte Einführung*. Vieweg, Wiesbaden, 1995.
- [Gou94] Phillip L. Gould. *Introduction to linear elasticity*. Springer, New York, 2nd edition, 1994.
- [GR94] Ch. Großmann and H.-G. Roos. *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Teubner, 1994.
- [HN81] Hirt and Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39:201–225, 1981.
- [HW65] F. Harlow and J. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surfaces. *The Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [KG99] A. Klein and G. Gerlach. Investigation of simulator coupling based on Gauss-Seidel iteration for modeling of fluid-structure interaction in micropumps. SFB report, TU Dresden, 1999.
- [KZC95] Feng Kang and Shi Zhong-Ci. *Mathematical Theory of Elastic Structures*. Springer, Berlin Heidelberg New York, 1995.
- [Lis99] V. D. Liseikin. *Grid Generation Methods*. Scientific Computing. Springer, 1999.
- [Liu87] W. K. Liu. Parallel computations for mixed-time integrations. In R. W. Lewis, E. Hinton, P. Bettes, and B. A. Schrefler, editors, *Numerical Methods in Transient And Coupled Problems*. John Wiley & Sons, 1987.
- [Mey01] Michael Meyer. Optimierung und parallele Berechnung von Strömungen in gekrümmten dreidimensionalen Koordinaten. Master’s thesis, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Bonn, April 2001.

- [MH83] Jerrold E. Marsden and Thomas J.R. Hughes. *Mathematical foundations of elasticity*. Dover Publications, Inc., New York, 1983.
- [OB87] E. S. Oran and J. P. Boris. *Numerical simulation of reactive flow*. Elsevier, 1987.
- [PF97] S. Piperno and C. Farhat. Design and evaluation of staggered partitioned procedures for fluid-structure interaction simulations. Technical Report 3241, INRIA, 1997.
- [PS85] T. J. Pedley and K. D. Stephanoff. Flow along a channel with a time-dependent indentation in one wall: the generation of vorticity waves. *J. Fluid Mech.*, 160:337–367, 1985.
- [PT83] R. Peyret and T. D. Taylor. *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [QTV00] A. Quarteroni, M. Tuveri, and A. Veneziani. Computational vascular fluid dynamics: Problems, models and methods. *Comp. Vis. Science*, 2:163–197, 2000.
- [RP88] M. E. Ralph and T. J. Pedley. Flow in a channel with a moving indentation. *J. Fluid Mechanics*, 190:87–112, 1988.
- [Sie99] Lee Siegel. The Math of Mixtures. Originally published in the Salt Lake Tribune, October 1999. <http://www.science.utah.edu/milton.2.html>.
- [SK89] H. Schade and E. Kunz. *Strömungslehre*. de Gryuter, 1989.
- [SOHL⁺96] M. Snir, S. Otto, S. Huss-Ledermann, D. Walker, and J. Dongarra. *MPI: The Complete Reference*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1996.
- [SPUC98] W. Shuy, S. Pal, H. S. Udaykumar, and D. Choi. Structured moving grid and geometric conservation laws for fluid flow computation. *Numerical Heat Transfer*, 34:369–397, 1998.
- [SURS96] W. Shuy, H. S. Udaykumar, M. Rao, and R. W. Smith. *Computational Fluid dynamics with moving boundaries*, chapter Numerical techniques for fluid flow with moving boundaries. Taylor & Francis, 1996.
- [Tij96] A. S. Tijsseling. Fluid-structure interaction in liquid filled pipe systems. *Journal of Fluids and Structures*, 10:109–146, 1996.

- [TWM85] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, and C. W. Mastin. *Numerical Grid Generation*. Elsevier Science, 1985.
- [VMS99] G. Vatkova, S. Meynen, and M. Schäfer. Numerical simulation of fluid-structure interaction in pipe systems. TU Darmstadt, 1999.
- [WSKB97] P. Wesseling, A. Segal, C.G.M. Kassels, and H. Bijl. Computing flows on general three-dimensional nonsmooth staggered grids. Technical Report 97-23, TU Delft, 1997.
- [ZC88] O. C. Zienkiewicz and A. H. C. Chan. Coupled problems and their numerical solution. In I. S. Doltsinis, editor, *Advances in Computational Non-Linear Mechanics*. Springer Verlag, 1988.
- [Zie75] O. C. Zienkiewicz. *Methode der finiten Elemente*. Carl Hanser Verlag, München, 1975.
- [Zie84] O. C. Zienkiewicz. Coupled problems and their numerical solution. In R. W. Lewis, P. Bettles, and E. Hinton, editors, *Numerical Methods in Coupled Systems*. John Wiley & Sons Ltd, 1984.
- [Zij96] Marcel Zijlema. *Computational modeling of turbulent flow in general moving domains*. PhD thesis, TU Delft, 1996.
- [ZRTC93] H. Zhang, M. Reggio, J. Y. Trepanier, and R. Camarero. Discrete form of the GCL for moving meshes and its implementation in CFD schemes. *Computers Fluids*, 22:9–23, 1993.