
PROJEKT 2

13. August 2017

Katayoun Chaman Ara (358013)

Sascha Timme (348922)

Technische Universität Berlin

13. August 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Problemstellung	3
1.1	Lösungsschritte	4
2	Räumliche Diskretisierung	4
3	Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes	5
3.1	Resultate	6
4	Lösung Konvektion-Diffusion	7
4.1	Resultate	9
5	Ausblick	10

1 Problemstellung

Gegeben sei das Gebiet $\Omega := (\Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3) \subset \mathbb{R}^2$, wobei

$$\Omega_1 =]0, 2[\times]0, 1[, \quad \Omega_2 = [2, 6[\times]0, 1[\quad \text{und} \quad \Omega_3 =]2, 6[\times]1, 3[.$$

Den Rand $\Gamma = \partial\Omega$ teilen wir auf in $\Gamma_1 := \{0\} \times]0, 1[$, $\Gamma_2 := \{6\} \times]0, 3[$ und $\Gamma_3 := \partial\Omega \setminus (\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup (2, 1))$.

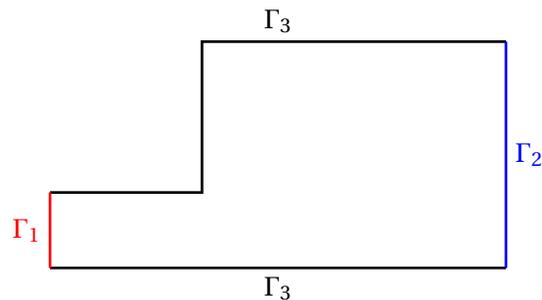


Abbildung 1: Darstellung des Gebietes Ω mit den Rändern Γ_1, Γ_2 und Γ_3 .

Zunächst soll das Geschwindigkeitsfeld $\vec{v} = (u, v)$ bestimmt werden. Dazu ist am Einlass (Γ_1) das parabolische Geschwindigkeitsprofil $\vec{v}(x, y) = (y(1 - y), 0)$ gegeben. Am rechten Rand (Γ_2) sollen typische Auslassbedingungen, also $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ und $v = 0$, gelten. Auf dem restlichen Rand (Γ_3) gilt die Wandhaftbedingung $\vec{v} = 0$.

Zur Bestimmung von \vec{v} muss für die Stromfunktion Ψ die Lösung der Geschwindigkeitspotentialgleichung

$$\Delta\Psi = 0$$

bestimmt werden. Dann ergeben sich die Geschwindigkeitskomponenten u und v aus

$$\frac{\partial\Psi}{\partial y} = u \quad \text{und} \quad -\frac{\partial\Psi}{\partial x} = v.$$

Wir nehmen an, dass auf dem Gebiet Ω ein inkompressibles Fluid simuliert werden soll. Dazu werden wir später in den Simulationsergebnissen einige Eigenschaften erkennen.

Abschließend betrachten wir in diesem Projekt auf Ω die Transportgleichung der Konzentration

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\vec{v}) = D\Delta c,$$

wobei c die Konzentration eines Schadstoffes ist und D ein Diffusionskoeffizient. Auf Γ_1 haben wir für den Schadstoff c die Dirichlet-Randbedingung $c = 1$. Auf Γ_2 und Γ_3 haben homogene Neumann-Randbedingungen, das heißt $\frac{\partial c}{\partial n} = 0$, wobei n der nach außen gerichtete Normalenvektor des Randes ist. Zum Zeitpunkt $t = 0$ hat der Schadstoff die Konzentration $c = 0$ in Ω .

1.1 Lösungsschritte

Wir haben die Problemstellung in drei Schritten bearbeitet. Zunächst haben wir eine räumliche Diskretisierung unseres Gebietes Ω vorgenommen. Anschließend haben wir das Geschwindigkeitsfeld mittels eines Finite-Differenzen Verfahrens bestimmt. Mit dem Geschwindigkeitsfeld konnten wir dann wiederum wieder mit einem Finite Differenzen Verfahren die Schadstoffkonzentration zu verschiedenen Zeitpunkten und mit verschiedenen Diffusionskoeffizienten untersuchen.

2 Räumliche Diskretisierung

Wir wollen uns nun zunächst mit der Diskretisierung von Ω beschäftigen. Da unser Gebiet Ω die Vereinigung von rechteckigen Gebieten ist bietet sich ein uniformes strukturiertes Gitter an, also eines wo es zwischen den Zellen eine spezifische Nachbarschaftsbeziehung gibt, was für unseren späteren Gebrauch vorteilhaft ist. Als Diskretisierungsparameter haben wir $h_x := \frac{1}{N_x}$ und $h_y := \frac{1}{N_y}$ gesetzt, dabei ist h_x der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten in x -Richtung und h_y in y -Richtung.

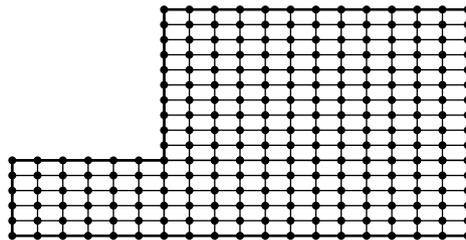


Abbildung 2: Beispieldiskretisierung von Ω für $h_x = 1/3$ und $h_y = 1/5$

Zur späteren Konstruktion der Koeffizientenmatrizen benötigen wir zudem noch eine bijektive Indexfunktion

$$\varphi : \{0, \dots, 6N_x\} \times \{0, \dots, N_y\} \cup \{2N_x, \dots, 6N_x\} \times \{N_y, \dots, 3N_y\} \rightarrow \{1, \dots, (6N_x + 1)(N_y + 1) + 2N_y(4N_x + 1)\}.$$

Wir wollen hier in Abbildung 3 lediglich ein Beispiel für $N_x = 1$ und $N_y = 2$ anführen, die genaue Implementierung befindet sich im Matlab Code.

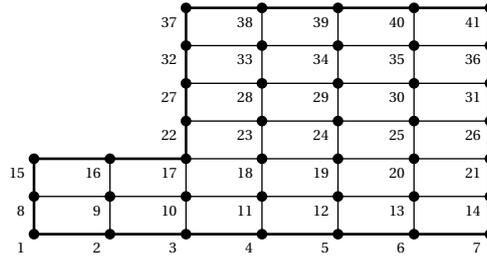


Abbildung 3: Nummerierung der Gitterpunkte unter φ für $N_x = 1$ und $N_y = 2$

Für unsere Berechnungen und Simulationen haben wir im Folgenden als Diskretisierungsparameter $N_x = 32$ und $N_y = 32$ genommen. Diese Werte haben sich bei unseren Experimenten als einen guten Kompromiss zwischen Qualität der Lösung und der benötigten Rechenzeit erwiesen. Wichtig ist festzuhalten, dass die gleichen Diskretisierungsparameter für die zu lösenden Probleme im Abschnitt 3 und 4 gewählt werden müssen.

3 Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes

Kommen wir nun zur Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes \vec{v} . Zur Erinnerung, am Rand Γ_1 ist das parabolische Geschwindigkeitsprofil $\vec{v}(x, y) = (y(1 - y), 0)$ gegeben, am Rand Γ_2 soll $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ und $v = 0$ gelten und am restlichen Rand Γ_3 soll die Wandhaftbedingung $\vec{v} = 0$ gelten. Da für die Geschwindigkeitskomponenten der Zusammenhang $\frac{\partial \Psi}{\partial y} = u$ und $-\frac{\partial \Psi}{\partial x} = v$ gilt, ergibt sich somit folgendes Randwertproblem

$$-\Delta \Psi = 0, \quad \text{in } \Omega \tag{1}$$

$$\Psi(x, 0) = 0, \quad \text{für alle } (x, 0) \in]0, 6[\times \{0\} \tag{2}$$

$$\Psi(0, y) = \int_0^y s(1 - s) ds, \quad \text{für alle } (0, y) \in \Gamma_1 \tag{3}$$

$$\Psi(x, y) = Q, \quad \text{für alle } (x, y) \in \Gamma_3 \setminus (]0, 6[\times \{0\}) \tag{4}$$

$$\Psi(6, y) = \frac{y}{3} Q, \quad \text{für alle } (6, y) \in \Gamma_2, \tag{5}$$

wobei $Q := \int_0^1 (1 - s) ds$.

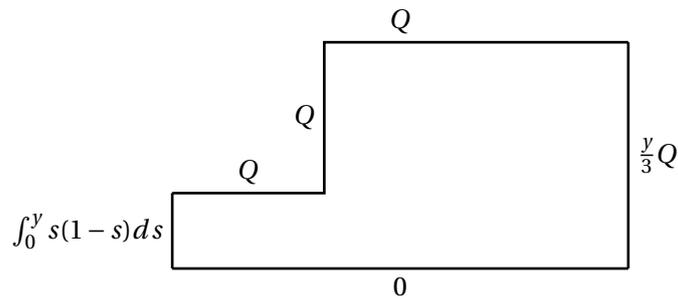


Abbildung 4: Darstellung unseres Gebietes Ω mit den Randbedingungen (2)-(5).

Die Randbedingung (3) folgt aus einer Integration des Geschwindigkeitsprofils, denn es gilt dann für alle $(0, y) \in \Gamma_1$, dass $\Psi_y(0, y) = y(1 - y)$ gilt. Die Kombination von konstanten Dirichlet-Randbedingungen (2) und (4) an Γ_3 und dem parabolischen Geschwindigkeitsprofil gibt uns die Wandhaftbedingung $\vec{v} = 0$ an Γ_3 . An Γ_2 soll u konstant und $v = 0$ sein. Dieses können wir durch die Randbedingung (5), also einem linearen Abfall von Ψ erreichen.

Mit den ausformulierten Randbedingung und unserer Indexfunktion φ ist der Aufbau der Koeffizientenmatrix A und der rechten Seite f leicht. Den Laplaceoperator in der Laplace-Gleichung (1) approximieren wir mit einem zentralen Differenzenoperator zweiter Ordnung. Das einzige noch ungelöste Problem ist die Ecke $(2, 1)$. Dieser Punkt ist formal nicht Teil von $\bar{\Omega}$, jedoch tritt der Punkt in unserer Diskretisierung als ein Gitterpunkt auf. Damit die Matrix vollen Rang hat legen wir den Wert von Ψ an dieser Ecke auf 0 fest. Mit dieser Entscheidung und den Dirichlet-Randbedingungen ist die entstehenden Koeffizientenmatrix eine M-Matrix.

3.1 Resultate

Wir sehen in der nachfolgenden Abbildung eine Visualisierung von der Stromfunktion Ψ und dem daraus abgeleiteten Geschwindigkeitsfeld \vec{v} :

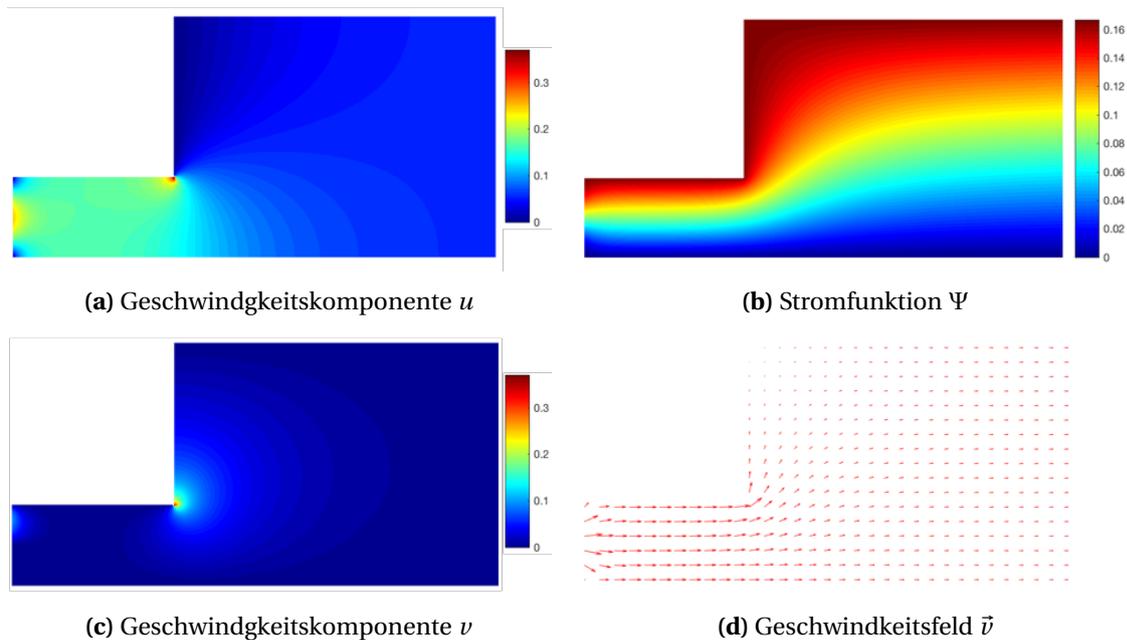


Abbildung 5: Die Ergebnisse für die Stromfunktion Ψ und das daraus abgeleitete Geschwindigkeitsfeld \vec{v}

Auffällig ist, dass die Ecke $(2, 1)$, wegen der unnatürlich gesetzten Bedingung Probleme bereitet. Außerdem ist die Umsetzung der Wandhaftbedingung in den Plots nicht zu erkennen. Diese numerischen Probleme führen zu physikalisch inkorrekten Ergebnissen. Mit einer Verfeinerung des Gitters, speziell am Rand könnten die Probleme behoben werden. Bei einer lokalen Wandverfeinerung müsste man dennoch vorsichtig sein. Ein zu schlechtes Seitenverhältnis h_x/h_y wirkt sich negativ auf die Konvergenzgeschwindigkeit.

4 Lösung Konvektion-Diffusion

Schließlich kommen wir zum Problem der Lösung der Transportgleichung der Konzentration. Für dieses Problem wurde bereits in den Abschnitten zuvor die Vorarbeit geleistet, das Geschwindigkeitsfeld numerisch zu berechnen. Wir haben, wie schon in der Problemstellung angesprochen, nun folgendes Anfangsrandwertproblem:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\vec{v}) = D\Delta c, \quad \text{in } \Omega \times]0, T[\quad (6)$$

$$c = 1, \quad \text{auf } \Gamma_1 \times]0, T[\quad (7)$$

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0, \quad \text{auf } \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \times]0, T[\quad (8)$$

$$c(0, x, y) = 0, \quad \text{in } \Omega \quad (9)$$

Wir wollen dieses ARWP für verschiedene Diffusionskoeffizienten D untersuchen. Da unser Geschwindigkeitsfeld per Konstruktion divergenzfrei ist, was aus der Kontinuitätsgleichung wegen der Rechnung mit einem inkompressiblen Fluid folgt [2], vereinfacht sich (6) zu

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \Delta c.$$

Dies liefert uns folgendes implizites Diskretisierungsschema

$$\begin{aligned} & \frac{c_{ij}^{n+1} - c_{ij}^n}{\tau} + \sigma u_{ij} \frac{c_{i+1,j}^{n+1} - c_{ij}^{n+1}}{\Delta x} + (1 - \sigma) u_{ij} \frac{c_{i,j}^{n+1} - c_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} + \gamma v_{ij} \frac{c_{i,j+1}^{n+1} - c_{ij}^{n+1}}{\Delta y} + (1 - \gamma) v_{ij} \frac{c_{i,j}^{n+1} - c_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \\ & = D(D_x^- D_x^+ c_{ij}^{n+1} + D_y^- D_y^+ c_{ij}^{n+1}) + f_{ij}^n, \end{aligned}$$

mit den Gewichtungparametern $\sigma \in [0, 1]$ und $\gamma \in [0, 1]$. Um eine M-Matrix zu erhalten haben wir uns für das upwind-Schema entschieden, wir setzen also wie in [1]

$$\sigma = \begin{cases} 0 & \text{falls } u_{ij} > 0 \\ 1 & \text{falls } u_{ij} \leq 0 \end{cases} \quad \text{und} \quad \gamma = \begin{cases} 0 & \text{falls } v_{ij} > 0 \\ 1 & \text{falls } v_{ij} \leq 0 \end{cases}.$$

Genauso wie in Abschnitt 3 haben wir bei unser Diskretisierung wieder das Problem mit der Ecke $(2, 1)$, daher betrachten wir nach anfänglich unphysikalischen Ergebnissen diese Stelle als inneren Punkt. Diese Annahme ist zwar nicht realistisch, aber den Wert an diesem Punkt konstant zu setzen (wie für die Stromfunktion getan) würde das gesamte Ergebnis beeinflussen.

Wie gut das entstehende Gleichungssystem zu lösen ist, hängt wesentlich von dem Diffusionskoeffizienten ab. Eine Entwicklung der Konditionszahl in Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten ist in Abbildung 6 zu sehen. Die Konditionszahl scheint quadratisch mit dem Diffusionskoeffizienten zu steigen.

Da die Koeffizientenmatrix sehr dünn besetzt ist, haben wir die Koeffizientenmatrix in MATLAB als eine dünnbesetzte Matrix (sparse matrix) gebildet. Dies reduziert den benötigten Arbeitsspeicher im Vergleich zur Benutzung einer Matrix, die möglicherweise vollbesetzt sein kann, erheblich.

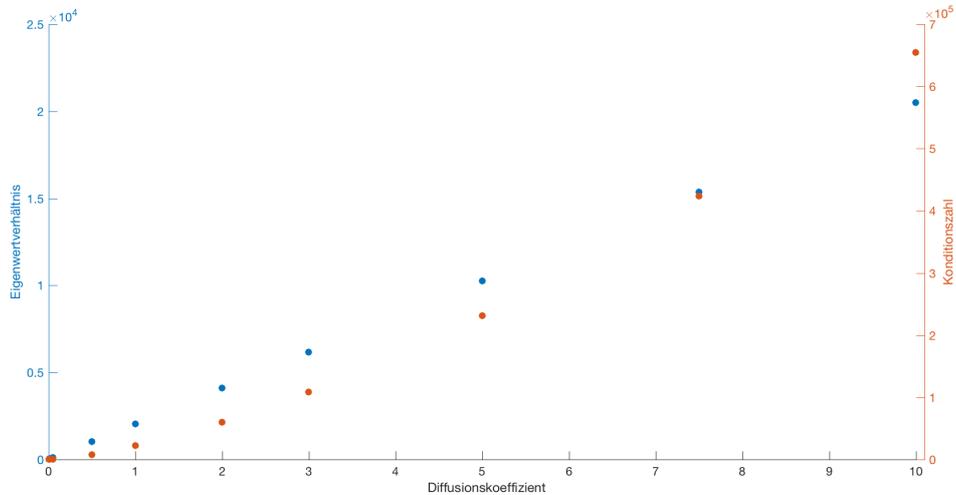


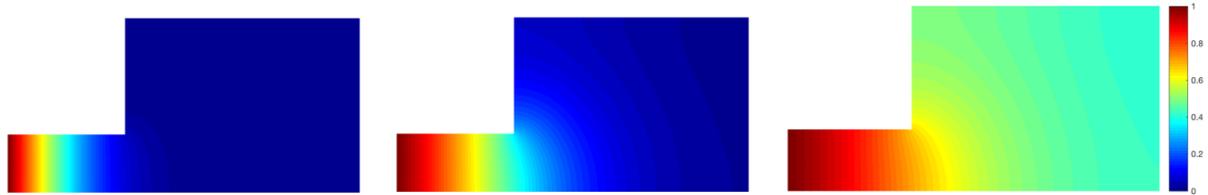
Abbildung 6: Die Korrelation zwischen dem Diffusionskoeffizienten und dem Verhältnis von größtem zu kleinstem Eigenwert und der Konditionszahl der Koeffizientenmatrix.

4.1 Resultate

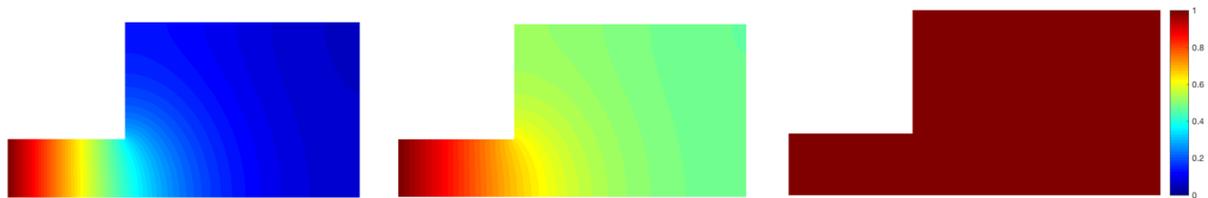
Die Ergebnisse der weiter oben diskutierten Berechnungen für verschiedene Diffusionskoeffizienten und zu verschiedenen Zeitpunkten sehen wir in Abbildung 7. Für einen niedrige Diffusionskoeffizienten von 0,01 verteilt sich der Schadstoff (bzw. die Schadstoffkonzentration) langsam und wellenartig vom Einlass aus, sodass das gesamte Gebiet nach einer gewissen Zeit eine Schadstoffkonzentration von 1 hat. Bei einem Diffusionskoeffizienten von 0,5 verteilt sich der Schadstoff schnell über das gesamte Gebiet, erreicht jedoch nach der Stufe in unseren Experimenten höchstens eine Konzentration von 0,6. Ein hoher Diffusionkoeffizient von 5 führt dazu, dass sich der Schadstoff sehr schnell ausbreitet und in dem Gesamten Gebiete eine Konzentration von 1 herrscht.



(a) Diffusionskoeffizienten von 0,01.



(b) Diffusionskoeffizienten von 0,5.



(c) Diffusionskoeffizienten von 5.

Abbildung 7: Die Ergebnisse für die Lösung unseres Konvektions-Diffusions Problems zu den Zeitpunkten 1, 5 und 30 für verschiedene Diffusionskoeffizienten.

5 Ausblick

In diesem Abschnitt wollen wir uns nun mit möglichen Verbesserungen an den Berechnungen und Simulationen beschäftigen und einen Ausblick für spätere Arbeiten bieten.

In unserem Projekt ist im ersten Teil auffällig gewesen, dass die Wandhaftbedingung nicht dargestellt wurde, was zu unphysikalischen Ergebnissen geführt hat. Um dieses Problem zu beheben würde sich eine Verfeinerung des Netzes anbieten, was auf das gesamte Gebiet gesehen schnell einen nicht vertretbaren Rechenaufwand mit sich bringen würde. Da aber nun im inneren, am linken und am rechten Rand die erwarteten Ergebnisse gut dargestellt werden, würde sich eine Verfeinerung lediglich am Rand Γ_3 anbieten. Um diese umzusetzen, müssten wir allerdings vorsichtig sein. Unsere gewählte Indexfunktion φ könnte nicht ohne aufwändige Anpassungen übernommen werden. Außerdem sollten wir darauf achten in Richtung der Wände zu verfeinern, sodass trotzdem noch jede Zelle feste Nachbarzellen hat. Das heißt wir sollten die Eigenschaft eines strukturierten Netzes nicht verlieren. Ist aufgrund der Strömung oder des Gebietes notwendig ein erheblich größeres System zu lösen, so würde sich anbieten auf iterative Lösungsverfahren (z.B. Gauss-Seidel oder Jacobi) umzusteigen, um

den Rechenaufwand zu minimieren. Unsere Koeffizientenmatrizen sind in beiden Berechnungen M-Matrizen, daher konvergieren iterative Algorithmen zur Berechnung der Gleichungssysteme und wir würden vertretbare Ergebnisse bekommen.

Für das Konvektions-Diffusions Problem könnten wir außerdem Ergebnisse anderer Schemata mit den Ergebnissen des upwind-Schemas vergleichen. Dazu wäre es vorteilhaft sich speziell das exponential-fitting genauer anzuschauen und die Vorteile/ Nachteile mit denen des upwind-fluxes zu vergleichen.

Literatur

- [1] Günter Bärwolff. FV/FD-Methoden zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen. http://page.math.tu-berlin.de/~baerwolf/fvmss17/num_fvfd_ss17.pdf, 2017. [Online; aufgerufen 12. August 2017].
- [2] Helmut E Siekmann and Paul Uwe Thamsen. *Strömungslehre: Grundlagen*. Springer-Verlag, 2013.