

KfK 4697

Mai 1992

Fortgeschrittene Upwind- Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der Konvektions- Diffusionsgleichung

C. Günther

Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Angewandte Thermo- und Fluidodynamik

KfK 4697

**Fortgeschrittene Upwind-Differenzenverfahren zur
numerischen Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung ***

Claus Günther

* von der Fakultät für Maschinenbau
der Universität (TH) Karlsruhe
genehmigte Habilitationsschrift

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit werden neuartige Differenzenverfahren untersucht, die entwickelt werden, um mit Schwierigkeiten fertig zu werden, die bei der numerischen Lösung von Konvektions-Diffusionsproblemen mittels Standard-Differenzenverfahren auftreten. Diese Schwierigkeiten bestehen einerseits in völlig unphysikalischen örtlichen Oszillationen der numerischen Lösungen, andererseits entstehen beim einfachen Upwindverfahren starke Verfälschungen der Lösungen durch zusätzliche künstliche Diffusion („Verschmierung“). Die neuen Näherungen, unter welche auch das 1987 vom Verfasser vorgeschlagene LECUSSO-Verfahren einzuordnen ist, benötigen in den meisten Fällen mehr als drei Stützpunkte in einer Raumdimension, insbesondere liegen mehr Punkte in der Ausströmrichtung. Dies ist im Einklang mit der einleuchtenden Vorstellung, daß der Zustand in einem speziellen Punkt stark beeinflußt wird von Verhältnissen in Punkten, aus denen die Strömung kommt.

Eine zweite, gleichwertige Betrachtungsweise der Upwindverfahren besteht darin, sie als konventionelle Differenzenverfahren anzusehen, denen noch zusätzlich künstliche Diffusivität bzw. Viskosität zugegeben wird. Dieser Punkt wird deutlich herausgearbeitet.

Die vorgestellten Differenzenverfahren werden mittels bekannter und zum Teil neu entwickelter Verfahren theoretisch untersucht, insbesondere mit Blick auf Eigenschaften wie Nichtnegativität und Monotonie, die das Nicht-Auftreten von Oszillationen garantieren und damit über den Rahmen der klassischen Konvergenztheorie („Konsistenz + Stabilität = Konvergenz“) hinausgehen.

In Testrechnungen, die ein zweidimensionales Beispiel mit einer analytischen Lösung verwenden, werden die Differenzenverfahren für weite Bereiche des Parameters Re' , der die Intensität der Strömung angibt, und für verschiedene feine Maschenaufösungen untersucht. Dabei werden die gefundenen theoretischen Ergebnisse bezüglich Fehlerordnung und Oszillationsfreiheit weitgehend bestätigt. Außerdem wird bei diesen Rechnungen das Fehlerverhalten anhand des maximalen örtlichen Fehlers untersucht. Es zeigt sich, daß insbesondere die sogenannten „lokal exakten“ Verfahren, die in einer Dimension vier oder fünf Punkte (bei einheitlicher Strömungsrichtung) verwenden, in ihrer Erhaltungsforms eher günstig liegen und den Standardverfahren überlegen sind, wobei der zusätzliche Rechen- und Programmieraufwand nicht stark ins Gewicht fällt. Zu diesen „besseren“ Me-

thoden gehören auch die vom Verfasser entwickelten Verfahren LECUSSO-C und QUICK-PLUS. Einige Anwendungsrechnungen verdeutlichen dieselbe Tendenz in etwas differenzierter Weise:

Sind die Teilschritte des gesamten rechnerischen Lösungsweges, welche aus der Lösung von Konvektions-Diffusionsproblemen bestehen, keine sensitiven Teilschritte der Gesamtrechnung, so ist die Ergebnisverbesserung durch fortgeschrittene Upwindmethoden nur marginal. Im anderen Falle, wenn die Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichungen einen kritischen Punkt darstellt, sind die Fortschritte im Berechnungsverfahren u.U. so dramatisch wie beim Beispiel der Kármánschen Wirbelstraße, wo LECUSSO-C als einziges der benützten Rechenverfahren der realen Physik sehr nahekommt.

Advanced Upwind-Difference Schemes for the Numerical Solution of the Convection-diffusion-Equation

Summary

This paper discusses some new difference methods developed to overcome difficulties which are encountered if convection dominated convection-diffusion problems are solved using standard difference schemes. On the one hand, unphysical spatial oscillations are met, on the other hand, the classical upwind scheme produces unsatisfactory results by the introduction of too much artificial diffusion. Several new schemes, including the authors LECUSSO-scheme, for the first time published in 1987, involve more than three points in one dimension, the additional points lying in the upwind direction. This is in agreement with the heuristic idea that the situation in a special point is mainly influenced by the conditions prevailing in points where the flow is coming from.

A second, equivalent point of view of the advanced upwind schemes is to interpret them as conventional schemes with some attached artificial diffusion or artificial viscosity. This point of view is stressed in some detail.

The difference schemes are analyzed using some known and partly new developed procedures with special emphasis to nonnegativity or monotony of numerical solutions. These properties make sure that oscillations are avoided, they are beyond the scope of the classical theory of convergence (Lax' Theorem: "consistency + stability = convergence"). Some test calculations are based on a 2D-example with known exact analytical solution. The difference schemes under investigation are tested for large regimes of a convective parameter Re' which is a measure of the intensity of the flow and for a large set of different discretizations. By this, the theoretical results with respect to discretization error and absence of wiggles are confirmed. The test calculations are evaluated using the maximum spatial error as measure of the accuracy. It is shown that especially the conservation form of the so-called 'locally exact' schemes, involving 4 or 5 points in one dimension are very efficient and superior to the standard schemes. The additional work using more points seems to be of minor importance. Among these 'advanced' schemes are the schemes LECUSSO-C and QUICK-PLUS introduced formerly by the present author.

Some calculations for real situations are revealing the following tendency: If there is a solution procedure for the calculation of a thermal or flow problem and the solution of an intrinsic convection-diffusion problem is a critical point in this procedure the use of an advanced upwind scheme is refining the numerical result in such a dramatical way as in the example of the von Karman vortex street. In this flow problem LECUSSO-C among several other schemes is the only one the results of which have some similarity to real physics.

ZUSAMMENFASSUNG
 INHALTSVERZEICHNIS
 BEZEICHNUNGEN
 ABKÜRZUNGEN

1. NUMERISCHE METHODEN DER THERMO- UND FLUIDDYNAMIK	1
1.1 Die Rolle numerischer Methoden in der Thermo- und Fluidodynamik	1
1.2 Der Status von CHT und CFD	3
1.3 Bestandteile einer Berechnungsmethode	6
1.4 Behandlung von Konvektion und Diffusion	8
1.5 Programm	11
2. DIFFERENZENVERFAHREN	12
2.1 Numerische Lösung mittels Differenzenverfahren	12
2.2 Die Standardverfahren CDS, UDS und HDS	14
2.3 Die Schwächen der Standardverfahren	17
2.4 Die Erhaltungsform von Differenzenverfahren	23
2.5 Numerische Tests von Differenzenverfahren	29
2.6 Upwindverfahren bei der Finiten-Element-Methode	34
3. ZUSAMMENSTELLUNG DER DIFFERENZENVERFAHREN, DIE MAN ALS UPWINDVERFAHREN BEZEICHNEN KANN	36
3.0 Einführung	36
3.1 Einseitige Näherungen mit Punkten stromaufwärts	37
3.2 Verfahren von Polynomgenauigkeit mit einem Punkt stromab	40
3.3 Verfahren mit zwei Punkten stromab	43
3.4 Lokal exakte Differenzenverfahren	47
3.5 Weitere Differenzenverfahren	61
3.6 Gesichtspunkte zur systematischen Einordnung der Differenzverfahren	72
3.7 Weitere denkbare Differenzenverfahren	77
3.8 Die Erhaltungsformen zu ASS, LECUSSO, LSUDS und dem Verfahren von Samarski	82
3.9 Lösungsadaptive Differenzenverfahren	87
3.10 Die Differenzenverfahren in zwei und mehr Dimensionen	91
3.11 'False Diffusion' bei mehrdimensionalen Problemen	94
4. DIE DARSTELLUNG VON UPWINDVERFAHREN ALS ZENTRALE DIFFERENZENVERFAHREN MIT ZUSÄTZLICHER KÜNSTLICHER DIFFUSION	95
4.1 Künstliche Diffusion als Hilfsmittel, um instabile Differenzenverfahren stabil zu machen	95
4.2 Der Übergang von CDS zu UDS als Einführung künstlicher Diffusivität	95
4.3 Zusätzliche künstliche Diffusivität ohne zusätzliche Punkte	97
4.4 Zusätzliche Diffusivität mit mehr Punkten	100
4.5 Das Verfahren von Roos	102
4.6 Die lokal exakten und verwandte Verfahren	103
4.7 Künstliche Diffusivität bei Differenzenverfahren in Erhaltungsform	105
4.8 Schlußbemerkungen zur künstlichen Diffusion	107

5. THEORETISCHE ANALYSE VON DIFFERENZENVERFAHREN	109
5.1 Einleitung	109
5.2 Konsistenz, Stabilität, Konvergenz	110
5.3 Konvergenzordnung für betragsgroße Reynoldszahlen	117
5.4 Nichtnegativität, Monotonie und Krümmungsverhalten der numerischen Lösungen	120
5.4.1 Matrixmethoden	122
5.4.2 Charakteristische Polynommethode	126
5.4.3 Anwendung der Matrixmethode auf die bekannten Differenzenverfahren	131
5.4.4 Anwendung der charakteristischen Polynom-Methode	137
5.5 Weiterführung der Analyse von Differenzenverfahren unter allgemeineren Bedingungen	141
5.5.1 Sich ändernde Richtung der Geschwindigkeit	143
5.5.2 Erhaltungsform	145
5.5.3 Zweidimensionale Probleme	151
5.6 Zusammenfassung zur theoretischen Analyse von Differenzenverfahren	154
6. NUMERISCHE TESTS	156
6.1. Die Zielsetzung der numerischen Tests	156
6.2 Das Testbeispiel	157
6.3 Die Spezifikationen der Testrechnungen	161
6.4 Die Ergebnisse der numerischen Tests	162
6.5 Diskussion der Ergebnisse und Gesamtbewertung	186
6.6 Zusammenfassend Bewertung der numerischen Tests	189
7. ANWENDUNGSRECHNUNGEN MIT STANDARD- UND FORTGESCHRITTENEN DIFFERENZENVERFAHREN	190
7.1 Naturkonvektionsströmung in einer seitlich beheizten und gekühlten quadratischen Zelle	191
7.2 Die seitlich beheizte und gekühlte quadratische Zelle, Strömung in einem mit Fluid gefüllten porösen Medium	195
7.3 Ungleichmäßige Beheizung in einer quadratischen Zelle, transiente Strömung in porösem Medium	199
7.4 Die Kármánsche Wirbelstraße	202
7.5 Fortgeschrittene Upwindverfahren für Anwendungsrechnungen	207
8. SCHLUßFOLGERUNGEN	208
LITERATURVERZEICHNIS	211

B E Z E I C H N U N G E N

t	Zeitveränderliche
x, y	Ortsveränderliche
$u, u(x, y)$	Geschwindigkeit, -skomponente
u_0	Geschwindigkeit
$v, v(x, y)$	Geschwindigkeit, -skomponente
ν	Diffusionskonstante
L	Länge
Ω	Gebiet
b	Konstante
h	Höhe
$\phi(x)$	unabhängige Veränderliche
$\tilde{\phi}_i$	gesuchte Werte von ϕ in bestimmten diskreten Punkten
$\hat{\phi}_{i+1/2}$	gesuchte Werte von ϕ in der Mitte zwischen zwei diskreten Punkten
Δx	Größe einer Masche in x-Richtung
N	Anzahl von Maschen in x-Richtung
$Re_{\Delta x}$	Maschen-Reynoldszahl
$Re_{\Delta x, i}$	Maschen-Reynoldszahl
$Re_{\Delta x, i, j}$	Maschen-Reynoldszahl
$Re_{\Delta y, i, j}$	Maschen-Reynoldszahl
ρ, ρ_i, ρ	Kurzschreibweise für $Re_{\Delta x}$ usw.
λ	Parameter
λ_i	Wurzeln eines Polynoms
$\underline{A}, \underline{B}, \underline{C}, D, E$	Konstanten
$\overline{A}, \overline{B}, \overline{C}$	Konstanten
A', B', C'	Konstanten
$L_i(\phi)$	Differenzenoperator, angewandt auf ϕ im Punkte x_i
T, T_0	Temperaturen
α, β	Konstanten
α_i, β_i	Konstanten
θ, ψ	Winkel
Λ, Λ_i	reelle Parameter
i	Index
r, r'	Abkürzungen für $\exp(Re_{\Delta x, i})$
Γ	Diffusionskonstante
π	3.14159.....

ABKÜRZUNGEN

ASS	<i>Verfahren von Allen und Southwell</i>
CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CHT	<i>Computational Heat Transfer</i>
ERRMAX	<i>maximaler ortsabhängiger numerischer Fehler</i>
FAS	<i>Finite Analytic Solution</i>
FDM	<i>Finite Differenzen-Methode</i>
FEM	<i>Finite Element Methode</i>
HDS	<i>Hybrid Differencing Scheme</i>
LUDS	<i>Leonards Upwind Difference Scheme</i>
LSUDS	<i>Leonards Super Upwind Difference Scheme</i>
NBS	<i>Numerical Boundary Scheme</i>
QUICK	<i>Quadratic Upstream Interpolation with....</i>
QUICKE	<i>QUICK-extended</i>
QUICKER	<i>QUICK-Extended Refined</i>
SUPG	<i>Streamline Upwind/Petrov-Galerkin</i>
UDS	<i>Upwind Differencing Scheme</i>
HOT	<i>Higher order terms</i>
$O(x^n)$	<i>Ordnungsangabe</i>
1-d, 2-d	<i>ein-, zweidimensional</i>
n-d	<i>n-dimensional</i>

1. NUMERISCHE METHODEN DER THERMO- UND FLUIDDYNAMIK

1.1 Die Rolle numerischer Methoden in der Thermo- und Fluidodynamik

Die numerische Methoden der Fluidodynamik (engl. "Computational Fluid Dynamics" = CFD) und die entsprechenden Methoden der Thermodynamik (engl. "Computational Heat Transfer" = CHT) beschäftigen sich mit der Lösung fluiddynamischer und thermischer Gleichungen auf Rechenanlagen und mit dem damit verbundenen Einsatz von Computern und Computermethoden. Sie werden benützt für grundlegende Studien, beim Entwurf komplexer Strömungs- und Wärmeübertragungsprobleme, für das Verständnis und Vorhersagen chemischer Wechselwirkungen mit Strömungsvorgängen bei Verbrennung und Antrieb, bei grundlegender und angewandter Forschung über die Natur und die Eigenschaften von Turbulenz und für die Interpretation und Analyse experimenteller Ergebnisse.

Der Fortschritt der Rechenmethoden im vergangenen Jahrzehnt ist einerseits untrennbar mit dem Aufkommen neuer Algorithmen verbunden, welche die kontinuierlichen Gleichungen der Thermo- und Fluidodynamik in diskreter Form ausdrücken und damit in eine sehr große Anzahl von algebraischen oder Differentialgleichungen überführen, und auf der anderen Seite mit der Lösung dieser diskretisierten Gleichungen auf immer schnelleren und mit größeren (schnellen) Speichern ausgerüsteten Superrechenanlagen.

Thermo- und fluiddynamische Systeme können auf drei verschiedene Weisen untersucht werden:

- durch analytische Lösung der grundlegenden Gleichungen oder vereinfachter Formen dieser Gleichungen
- mit CFD bzw. CHT durch die Lösung der diskretisierten Gleichungen auf Rechenanlagen und
- durch experimentelle Beobachtung von realen Strömungsvorgängen, wie sie in der Natur oder in idealisierten Laborsystemen vorkommen.

Da jede dieser Methoden ihre eigenen Stärken und Schwächen hat, sind alle drei Wege aus heutiger Sicht für das Verständnis und Voraussagen der Dynamik von Strömungsvorgängen notwendig.

Im Vergleich mit analytischen Näherungen verlangen CHT und CFD wenig einschränkende Annahmen und liefern für alle Veränderlichen die gesamte Lösung.

Was die Geometrie oder die Verschiedenartigkeit und Abhängigkeit von Materialdaten angeht, können mit numerischen Methoden verhältnismäßig komplexe Vorgänge behandelt werden, ohne daß die benützten Methoden einen übermäßigen Aufwand erfordern. Auf der anderen Seite existieren analytische Lösungen in geschlossener Form, welche die Dynamik eines Systems beschreiben, nur in sehr wenigen Spezialfällen. Daher führt eine analytische Behandlung für praktisch auftretende Strömungsprobleme immer auf Näherungsformeln. Solche nützlichen analytischen Näherungen gibt es z.B. für stationäre Vorgänge, bei denen die Zeitabhängigkeit vernachlässigt werden kann. Andere Näherungen betreffen vereinfachte geometrische Verhältnisse. Gelingt es, Probleme auf eine oder zwei Raumdimensionen zu reduzieren, so kann man mit komplexen Transformationen (konforme Abbildung) und Ähnlichkeitsmethoden arbeiten. Der Wert von Lösungen in geschlossener Form liegt insbesondere darin, daß die Veränderungen in der Lösung in Abhängigkeit von Kontrollparametern explizit zum Ausdruck kommen.

In vielen praktischen Fällen sind analytische Näherungslösungen nicht erhältlich. Insbesondere für viele nichtlineare Strömungsvorgänge, transiente Vorgänge und reale Geometrien muß man sich daher auf Rechnungen und Experimente abstützen. Dies ist speziell beim Entwurf von Fahrzeugen, Flugkörpern und Schiffen der Fall. Verglichen mit Experimenten sind Rechnungen immer kostengünstiger geworden und weniger Einschränkungen unterworfen als früher. Numerische Simulationen haben häufig den zusätzlichen Vorteil gegenüber Experimenten, daß das Messen und Aufnehmen von Daten weder die Strömung noch den Wärmeübertragungsmechanismus stört und damit das, was eigentlich beobachtet werden soll, beeinflusst.

Numerische Lösungen sind heute oft in Genauigkeit und örtlicher oder zeitlicher Auflösung mit Laborexperimenten vergleichbar. Auf der anderen Seite, obwohl Ingenieure oft unzufrieden sind mit experimentellen Resultaten und Bedenken haben, kleine Experimente auf wesentlich größere Verhältnisse zu übertragen, ist ihr Widerstreben verständlich, den Computerergebnissen zu trauen. Selbstverständlich stellt eine Computersimulation nur selten die Verhältnisse in einer realen Welt dar. Die Differenzen zwischen numerischer Simulation, die unseren gegenwärtigen Wissensstand über das Verhalten von Strömungen widerspiegelt, und zwischen realer Welt, wie sie uns in Experimenten entgegentritt, vermittelt uns häufig neue Erkenntnisse über die Vorgänge bei Strömungen.

1.2 Der Status von CHT und CFD

Die Fortschritte in den Rechenmethoden der letzten Jahrzehnte sind sicher zu gleichen Teilen den Herstellern von Rechenanlagen ("hardware"), den Software-Entwicklern und den Leuten, welche die numerischen Algorithmen weiterentwickelt haben, zuzuschreiben und haben das, was heute gegenüber früher berechenbar ist, um Größenordnungen erhöht.

Rechnungen mit Differenzenverfahren, die einige hunderttausend Maschen berücksichtigen und über mehrere Zehntausende von Zeitschritten gehen, sind immer noch teuer, Finite-Element-Methoden (=FEM) finden verstärkt Anklang, weil man mit ihnen die Verhältnisse in allgemeineren Geometrien gut annähern kann. Andererseits entstehen bei der Lösung mit FEM sehr große Matrizen, deren Invertierung nicht mit sogenannten "schnellen Methoden" (Schnelle Fouriertransformation, Schnelle Poissongleichungslöser) möglich ist und daher viel Speicherplatz benötigt und viel Rechenzeit verschlingt. Als Alternative werden in neuerer Zeit vermehrt Spektralmethoden ins Gespräch gebracht, die globale Entwicklungen verwenden und von denen behauptet wird [26], daß sie genauer sind als Differenzenverfahren vergleichbarer Auflösung. Die Spektralmethoden sind jedoch äußerst schwierig für realistische Geometrien zu handhaben, sie verlangen auch mehr Rechenoperationen pro Maschenpunkt als die anderen Verfahren. Insbesondere sind Aufgaben mit schwacher Wechselwirkung zwischen einzelnen Teilbereichen schwer mit Spektralmethoden zu berechnen.

Viele CFD-Probleme werden heutzutage mit Hilfe von Supercomputern, wie den Anlagen der Firmen CRAY, Cyber oder Fujitsu, in Angriff genommen, welche relativ wenige Prozessoren haben, und welche mit Vektorregistern und parallel und synchron arbeitenden Prozessen ("pipelines") arbeiten, um auf ihre beachtliche Rechengeschwindigkeit zu kommen. Diese Computer eignen sich für gewisse stationäre 3-d-Rechnungen und auch transiente 2-d-Rechnungen, für allgemeine transiente 3-d-Probleme sind diese Rechner immer noch zu schwach. Parameterstudien für solche Probleme sind mit diesen Maschinen immer noch viel zu teuer. Andere Rechenanlagenentwicklungen mit vielen Prozessoren (SUPRENUM [125], Connection Machine [19]) sind in der Praxis noch nicht soweit erprobt, daß man ein fundiertes Urteil über ihre Einsatzmöglichkeiten bei CHT und CFD wagen kann.

Neuere Übersichtsartikel zu CFD bzw. CHT stammen von Boris [38] (1989) und Patankar [106] (1989). Einblick in die Einschätzung des Entwicklungsstandes geben auch die Einführungen der seit 1980 erschienen Lehrbücher auf diesem Gebiet. Dazu gehören die Bücher von

Patankar [11] 1980, Baker [2] 1983, Peyret und Taylor [12] 1983, Shih [14] 1984, Andersen, Pletcher und Tannehill [1] 1984, Jaluria und Torrance [8] 1986, Fletcher [4] 1988, Hirsch [6] 1988.

Bestimmte frühere Entwicklungsphasen sind in den Büchern von Gosman et al. [5] 1969, Holt [5] 1977, Noye [10] 1978 und Chow [3] 1979 dokumentiert.

Aus all diesen Darstellungen geht ebenfalls hervor, daß CFD und CHT in den vergangenen Jahren beträchtliche Fortschritte gemacht haben. Wenn man vor zwanzig Jahren die Berechnung einer zweidimensionalen Grenzschicht als das maximal erreichbare Ziel ansah, kann heute direkte numerische Simulation der Turbulenz auf einem Supercomputer versucht werden. Anwendungen wie das Modellieren der Strömung um ein ganzes Flugzeug oder das Nachbilden der Transportprozesse in einer Gasturbine scheinen in greifbare Nähe zu rücken. Trotz dieser optimistischen Sicht besteht noch Bedarf nach wesentlichen Verbesserungen in den numerischen Methoden. Dieser Sachverhalt wird in der Zusammenfassung des zuvor erwähnten Übersichtsartikels von Patankar bestätigt, aus dem folgende Textteile entnommen wurden: "... Whereas many attractive methods have been formulated in recent years, there exists no clear consensus about a preferred method. Careful and controlled evaluations of different methods are required...."

Diese Einschätzung läßt erwarten, daß noch weitere Lösungsmethoden vorgeschlagen werden, und daß auch Veränderungen in der Bewertung der verschiedenen Methoden in Zukunft zu erwarten sind.

Die Ausweitung von CFT und CHT kommt auch in der wachsenden Zahl wissenschaftlicher Zeitschriften zum Ausdruck, welche sich ausschließlich oder zu einem Teil diesen Themen widmen. Nachfolgend sind die zugänglichen Journale, einige mit dem ersten Erscheinungsjahr, zusammengestellt:

AIAA Journal, vol. 15, 1977

Numerical Heat Transfer 1979, seit 1989 zwei Reihen

Computer Methods in Applied Mech. Engineering, 1970

Int. Journal Numer. Methods in Fluids, 1981

Computers and Fluids

Theoretical and Computational Fluid Dynamics 1989

Internat. Journal on Numerical Methods in Engineering
Computational Physics
Computational Mechanics
Annual Review of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer, 1989

1.3 Bestandteile einer Berechnungsmethode

Jede Berechnungsmethode liefert eine mehr oder minder gute Näherungslösung für ein vorgegebenes Problem, welches durch bestimmte Gleichungen, meist partielle Differentialgleichungen, zusammen mit Randbedingungen beschrieben wird. Ein erster Teilschritt der Näherung besteht darin, daß die Werte der abhängigen Veränderlichen wie Temperatur, Geschwindigkeit, Druck usw. in einer bestimmten endlichen Zahl diskreter Punkte gesucht werden. Diese Punkte werden auch Knoten, Stützpunkte, Ortspunkte oder Maschenpunkte genannt. Die gesuchten Werte erfüllen bestimmte algebraische Gleichungen, welche durch Diskretisierung aus den kontinuierlichen Differentialgleichungen, welche den physikalischen Vorgang beschreiben, abgeleitet werden und deren diskretes Analogon sie darstellen.

Ein weiterer Schritt besteht darin, die aufgestellten diskreten Gleichungen zu lösen. Die Genauigkeit (engl. "accuracy") der Berechnungsmethode hängt hauptsächlich vom ersten Teilschritt ab, die Leistungsfähigkeit (engl. "efficiency") der Methode hängt davon ab, ob sich die diskreten Gleichungen mit wenig oder nur mit viel Aufwand lösen lassen.

Bei der Diskretisierung ist das Augenmerk auf eine vernünftige Wahl des Maschennetzes zu richten. Bei Differenzenmethoden (engl. "Finite Difference Methods"=FDM) hat man bisher mit wenigen Ausnahmen Maschengitter mit gleichmäßigen Schrittweiten verwendet. In einigen Fällen hat man bei der Wahl ungleichmäßig großer Schrittweiten die Gleichungen so transformiert, daß man wieder gleichgroße Maschen, jedoch kompliziertere Gleichungen erhält; Hintergrundgedanke bei der Wahl verschieden großer Maschen ist, daß man in der Kernströmung, wo oft verhältnismäßig konstante Werte der gesuchten Funktionen gefunden werden, mit wenig Punkten arbeitet, während man in den Grenzschichten, wo die Funktion ihre Werte stark ändert, eine feinere Auflösung wählt.

1988 enthielt zum ersten Male ein Lehrbuch einige rudimentäre Angaben zu ungleichmäßigen Maschengittern.

Es gibt Gründe dafür, die zuvor genannten Teilschritte einer Berechnungsmethode,

- Aufstellung diskretisierter Gleichungen
- Lösung der diskretisierten Gleichungen,

getrennt zu betrachten. Dies erlaubt es, Näherungsgleichungen zu formulieren, für welche zunächst keine optimale Lösungsmethode zu sehen ist. Dafür spricht auch, daß die Erfahrung gezeigt hat, daß für bestimmte Typen von Differenzgleichungen mit der Zeit immer effizientere Lösungsverfahren gefunden werden.

1.4 Behandlung von Konvektion und Diffusion

Zu den Standardtypen von Differentialgleichungen, die in der Physik immer wieder auftreten, gehört die Konvektions-Diffusionsgleichung. Sie beschreibt den Transport einer Zustandsgröße ϕ in einem strömenden Medium sowohl durch Mitbewegung im Fluid (Konvektion) wie auch die gleichzeitige Veränderung von ϕ durch Diffusion. Geht man von der zeitabhängigen Form der eindimensionalen Gleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u(x) \frac{\partial \phi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

aus, so beschreibt der erste Term die zeitliche Änderung von ϕ , u ist die Geschwindigkeit und der Ausdruck $u \partial \phi / \partial x$ gibt den konvektiven Transport der Größe ϕ wieder, während die rechte Seite die Veränderung durch Diffusion erfasst, ν ist eine Diffusionskonstante. Die Gleichung selbst ist eine parabolische partielle Differentialgleichung. Die zeitunabhängige Version dieser Gleichung

$$Re(x) \frac{d\phi}{dx'} = \frac{d^2 \phi}{dx'^2}$$

in dimensionsloser Form enthält jetzt eine dimensionslose Funktion $Re(x) = u \cdot L / \nu$, die mit einer geeigneten Länge, z.B. der Intervalllänge, gebildet wird und eine Reynoldszahl oder eine Pécletzahl sein kann.

Die Konvektions-Diffusionsgleichung ist oft eine Vereinfachung von Gleichungen, die noch Quellterme, Absorptionsterme oder Ausdrücke enthalten, welche eine chemische Wechselwirkung oder einen anderen physikalischen Vorgang beschreiben. Energiegleichungen oder Gleichungen für die Konzentration einer mit einem flüssigen Medium vollständig mischbaren Stoff sind von diesem Typ. Die Navier-Stokes-Gleichungen unter bestimmten Voraussetzungen (Linearisierung) ordnen sich ebenfalls in dieses Schema ein. Auch die beim k - ε -Modell für turbulente Strömung auftretenden Gleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die Dissipationsrate ε sind von solcher Form.

Es gibt auch weniger bekannte Beispiele. Dazu gehört die magnetohydrodynamische Strömung in einem Rechteckkanal mit einem senkrecht zur Strömungsrichtung angelegten Magnetfeld. Dieses Problem wird durch zwei elliptische partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung für die Fluidgeschwin-

digkeit und die axiale Komponente des Magnetfeldes beschrieben. Nach einigen Umformungen lassen sich die Gleichungen für einfache Randbedingungen in zwei entkoppelte zweidimensionale Konvektions-Diffusionsgleichungen umschreiben, Shih und Kellogg [120].

Die meisten Erfahrungen zur numerischen Lösung konvektiv-diffusiver Gleichungen liegen für Differenzenverfahren vor. Trotzdem stößt man immer wieder auf Schwierigkeiten bei der Aufstellung diskreter Gleichungen, wenn man gute Näherungen für die Konvektions- und Diffusionsterme erhalten will. Da es einleuchtend ist, daß Konvektion ein unsymmetrischer Vorgang ist, d.h. die Verhältnisse stromaufwärts haben einen stärkeren Einfluß auf die Änderungen in einem Punkt als der Zustand stromabwärts, sollten die diskreten Gleichungen diesen Sachverhalt in irgendeiner Weise widerspiegeln. Ansonsten können unphysikalische numerische Effekte auftreten. Es ist jedoch Vorsicht am Platze, da ganz einfache unsymmetrische Differenzenschemata, wie das einfache Upwindverfahren 1. Ordnung (- abgekürzt: UDS) zu beträchtlichen Fehlern bei mehrdimensionalen Fragestellungen führen können.

Da viele diskrete Formulierungen dazu neigen, für starke Strömungen instabil zu werden, ist es wichtig, Näherungen für konvektiv-diffusive Prozesse zu konstruieren, die unter allen Bedingungen stabile Lösungen liefern. Sehr häufig ist es nicht vertretbar oder unmöglich, bei der Verwendung von Standardverfahren die Maschengröße so zu verfeinern, daß die numerischen Fehler auf ein annehmbares Niveau reduziert werden. Dies ist der Grund dafür, daß die Notwendigkeit besteht, Diskretisierungen für konvektiv-diffusive Prozesse zur Verfügung zu haben, die auch für weniger feine Maschennetze stabile und akzeptable Ergebnisse liefern.

Wegen der Nachteile der Standardmethoden wie dem zentralen Differenzenverfahren, dem einfachen Upwindverfahren, dem hybriden Verfahren und dem Patankarschen Potenzgesetzverfahren [11], sind mehrere neue Vorschläge gemacht worden. Einige von diesen bauen auf dem QUICK-Schema von Leonard [25] auf, das von einer diskreten Erhaltungsform ausgeht und Werte der gesuchten Funktion an Zwischenpunkten mit Indizes $i \pm \frac{1}{2}$ u.ä. quadratisch interpoliert. Mehrere neuere Differenzenverfahren verwenden das Konzept von Raithby [113]; bei diesem mehrdimensionalen Konzept werden auch Werte in schräg versetzten Punkten benützt, um den konvektiven Einfluß von stromauf zu erfassen ("Skew Upwind"). Verbesserungen dieses Verfahrens, z.B. von Hassan et al. [70], haben

die ursprünglich negativen Einflußkoeffizienten in Raithbys Ansatz eliminiert; dadurch werden gelegentliche Oszillationen ausgeschaltet. Dennoch, die falsche Diffusion ist weiterhin in abgeschwächter Form vorhanden.

Daneben gibt es eine Reihe weiterer Verfahren, die ähnlich wie QUICK mehr als drei Punkte in einer Raumrichtung verwenden. Dazu gehören (LUDES, LSUDS [33], Kawamura-Kuwahara [80], Roos [115], Gushchin-Shchennikov [68] und das vom Autor vorgeschlagene LECUSSO-Verfahren [61].

Die Entwicklung von entsprechenden Formeln für Finite-Element-Methoden verläuft ähnlich. Erwähnenswert ist hier ein Galerkin-Ansatz von Brooks und Hughes [41], der die falsche Diffusion ausschließt. Diese "Streamline-Upwind-Petrov-Galerkin-Methode" (=SUPG) läßt sich so formulieren, Rice und Schnipke [114], daß keine Oszillationen auftreten.

1.5 Programm

In der vorliegenden Arbeit werden zunächst kurz die Schwierigkeiten erläutert, denen man begegnet, wenn man bei der Lösung konvektiv-diffusiver Probleme die Standard-Differenzenverfahren verwendet. Danach werden die fortgeschrittenen Upwind-Verfahren beschrieben und charakterisiert. Außerdem werden die untersuchten Verfahren noch einmal unter dem Gesichtspunkt künstlicher Diffusivität (engl. "artificial diffusivity", and "artificial viscosity") charakterisiert. In einem weiteren Abschnitt werden die bisher bekannten Methoden zur theoretischen Analyse von Differenzenverfahren in einigen Punkten erweitert und dann benutzt, um entsprechende Aussagen für die zuvor beschriebenen Verfahren zu gewinnen. Vergleichsrechnungen mit einem zweidimensionalen Beispiel für einen konvektiv-diffusiven Vorgang, das eine exakte analytische Lösung besitzt, runden die Untersuchungen ab. Die theoretisch gewonnenen Aussagen werden mit den Rechenergebnissen verglichen, außerdem lassen die Vergleichsrechnungen eine Bewertung der Verfahren untereinander und im Vergleich zu den Standardverfahren zu.

An einigen Beispielen wird demonstriert, wie mit den fortgeschrittenen Differenzenmethoden bessere Rechenergebnisse gewonnen werden können. Man kann die gesamte Darstellung auch als momentane kritische Bestandsaufnahme werten.

Es sollte noch einmal darauf hingewiesen werden, daß hier allein auf die Eigenschaften der Lösung der diskretisierten Gleichungen eingegangen wird und untersucht wird, wie gut deren Lösung der Lösung des kontinuierlichen Problems nahekommt (engl. "accuracy"), und der zweite Hauptschritt einer Berechnungsmethode, die ökonomisch günstige Lösung der diskreten Gleichungen (engl. "efficiency") nicht betrachtet wird. Damit werden Argumente, die bei den Lösungsverfahren für die diskreten Gleichungen eine Rolle spielen, z.B. Diagonaldominanz bestimmter Gleichungsmatrizen, nicht auch in die Diskussion um gute Näherungen eingebracht. Bei den Testrechnungen werden aus diesem Grund die entstehenden linearen Gleichungssysteme mit Standardmethoden gelöst.

2. DIFFERENZENVERFAHREN

2.1 Numerische Lösung mittels Differenzenverfahren

Differenzenverfahren sind eine weithin gebräuchliche Methode zur Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen. Dabei wird ein Randwertproblem, das aus einer oder mehreren Differentialgleichungen mit geeigneten Randbedingungen besteht, in ein System von i.a. nichtlinearen algebraischen Gleichungen überführt. Das grundlegende Konzept dieser Methode besteht in folgendem:

Das Gebiet Ω , in welchem das Problem definiert ist, wird zunächst mit einem Maschennetz (Maschengitter) überdeckt, das aus einer endlichen Zahl von Punkten besteht. Alle Funktionen, die entweder vorgegeben sind oder gesucht werden, werden nun ersetzt durch diskrete Näherungsfunktionen, deren Werte nur in den Maschenpunkten definiert sind. Danach werden die in der Differentialgleichung und in den Randbedingungen vorkommenden Funktionswerte und Ableitungen durch endliche Differenzennäherungen ersetzt, welche aus Linearkombinationen von Werten der diskreten Näherungsfunktion bestehen. Dies bedeutet, daß nur solche Funktionswerte, die auf den Maschenpunkten definiert sind, für die Approximation von Ableitungen benutzt werden.

Bis hierher ist die Beschreibung der Bildung diskreter Näherungsgleichungen auch für Finite-Element-Methoden (= FEM) zutreffend. Bei Differenzenverfahren besteht das Maschengitter in der Regel aus einem verhältnismäßig regelmäßigen Punktemuster, z.B. in einem Rechteck der x - y -Ebene aus den Schnittpunkten von Linien $x = \text{const.}$ und von Linien $y = \text{const.}$ Bei FEM sind wesentlich allgemeinere Punktemuster zugelassen.

In der zuvor beschriebenen Weise wird das ursprüngliche Problem in ein algebraisches Gleichungssystem umgewandelt - dieses wird Differenzenschema genannt - welches linear ist, wenn die Differentialgleichung und die Randbedingungen dies waren.

Der beschriebene Vorgang scheint zunächst ganz einfach zu sein. Zwei Fragen sind jedoch im allgemeinen schwierig zu beantworten, besonders wenn man es mit irregulären Gebieten und komplizierten Randbedingungen zu tun hat:

(I) Wie wird das Maschengitter gewählt?

(II) Welche Differenzennäherung soll man nehmen?

Die nachfolgenden Ausführungen kreisen hauptsächlich um die zweite Frage. Bezüglich der ersten Frage wird immer vorausgesetzt, daß wir es mit äquidistanten Maschengittern zu tun haben.

In vielen Fällen sind die diskreten Gleichungen linear, in anderen Fällen läßt sich die Lösung nichtlinearer Gleichungen auf die sukzessive Lösung einer Folge von linearen Gleichungssystemen reduzieren. Ist die Aufgabenstellung von geringem Umfang (wenig Maschenpunkte), so ist eine Lösung dieser linearen Gleichung mit Standardlösungsverfahren wie Varianten des Gaußschen Eliminationsverfahrens möglich. Für größere Aufgaben ist dies nicht möglich. Oft sind für viele Typen von Differenzgleichungen spezielle Methoden entwickelt worden, z.B. der Thomas-Algorithmus für tridiagonale Gleichungssysteme oder Schnelle direkte Löser für Helmholtzgleichungen in zwei- und dreidimensionalen regelmäßigen Standardgeometrien. Den zuletzt genannten Verfahren ist auch die Multigridmethode zuzuordnen, die in den vergangenen zehn Jahren einen immer noch zunehmenden Zuspruch erfahren hat und mittlerweile auch zur Lösung konvektiv-diffusiver Prozesse eingesetzt wird, z.B. Vanka [127] und Wesseling [130]. Zu den speziell entwickelten Verfahren gehören alle Iterationsverfahren, die in den sechziger Jahren nach dem Aufkommen der Computer ihre stärkste Entwicklungszeit hatten.

Die Erfahrungen mit der Lösung rein diffusiver (diskreter) Gleichungen haben gezeigt, daß es zu einem bestimmten Typ diskreter Gleichungen keine generell optimale Lösungsmethode gibt. Am Anfang standen immer verhältnismäßig rudimentäre Lösungsmethoden, diese wurden mit der Zeit verbessert, neue effektivere Lösungsmethoden kamen mit der Zeit dazu und haben die Vorstellung davon, welches die beste Lösungsmethode für einen bestimmten Typ von Differenzgleichungen sei, immer wieder verändert. Dies legt es nahe, auch bei der Lösung von Konvektions-Diffusionsgleichungen, wie schon im letzten Abschnitt von 1.5 betont wurde, die Bildung von Differenzennäherungen und die dann folgende numerische Lösung der so entstandenen Differenzgleichungen getrennt zu betrachten.

2.2 Die Standardverfahren CDS, UDS und HDS

Zu den Standardverfahren zur Lösung von Konvektions-Diffusionsgleichungen gehören das Zentrale Differenzenverfahren (engl. "Central Differencing Scheme" = CDS), das einfache Upwindverfahren 1. Ordnung (engl., "Upwind Differencing Scheme" = UDS) und eine Mischung aus UDS und CDS, welche hybrides Verfahren (engl. "Hybrid Differencing Scheme" = HDS) genannt wird. Diese Verfahren werden nachfolgend für die eindimensionale stationäre Konvektions-Diffusionsgleichung definiert. Diese Gleichung lautet

$$u(x) \frac{d\phi}{dx} = v \frac{d^2\phi}{dx^2}$$

und sei im Intervall $0 \leq x \leq b$ gegeben. $\phi(0) = \phi_0$ und $\phi(b) = \phi_1$ seien zwei vorgegebene Werte von $\phi(x)$ am Rande. Die Geschwindigkeit $u(x)$ sei stetig, ansonsten vorerst von beliebigem Vorzeichen, v sei eine positive Diffusionskonstante; falls ϕ eine Temperatur ist, handelt es sich bei v um eine Temperaturleitzahl.

Um die obige Gleichung numerisch mit einem Differenzenverfahren zu lösen, definiert man eine Folge äquidistanter Punkte x_i , wobei $x_i = i \cdot \Delta x$, $i = 0, 1, 2, \dots, N$, mit $\Delta x = b/N$, in denen die Näherungswerte $\hat{\phi}(x_i) = \hat{\phi}_i$ für die gesuchte Funktion $\phi(x)$ gesucht werden. Die Unterscheidung zwischen ϕ und $\hat{\phi}$ wird nachfolgend in der Schreibweise nicht mehr berücksichtigt.

Man führt im Falle von CDS die zentralen Näherungen

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

und

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_i = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

unter Vernachlässigung der $O(\Delta x^2)$ -Glieder in die zu lösende Gleichung ein. Der Ausdruck $O(\Delta x^2)$ besagt, daß an dieser Stelle ein Term steht, der sich als Produkt mit dem Faktor Δx^2 und einem weiteren beschränkten Faktor schreiben läßt. Im Falle von Gleichung (2) lautet dies

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=x_i} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{6} \cdot \phi_i'' + HOT$$

mit HOT = Fehlerglieder höherer Ordnung.

Wenn man die Terme der Ordnung $O(\Delta x^2)$ vernachlässigt, erhält man

$$u(x_i) \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} = \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}, \quad i = 1, 2, \dots, N-1$$

und umgeformt,

$$\frac{u(x_i)\Delta x}{\nu} \cdot \frac{1}{2}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) = \phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i. \quad (4)$$

Die Größe

$$Re_{\Delta x, i} = \frac{u(x_i)\Delta x}{\nu}$$

heißt Maschen-Reynoldszahl in Anlehnung an die in der Strömungsmechanik gebräuchliche Reynoldszahl, jedoch hier mit der Schrittweite Δx als typischer Länge gebildet, was die Namensgebung erklärt.

Das Upwindverfahren (UDS) nähert den Ausdruck ϕ_i' auf folgende Weise an:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x},$$

falls $u(x_i) = u_i > 0$,

$$\approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$$

falls $u(x_i) < 0$.

Aus der Taylorreihenentwicklung ist leicht zu ersehen, daß diese Näherung von der Ordnung $O(\Delta x)$ ist.

Das hybride Verfahren (HDS) arbeitet mit CDS, solange $|Re_{\Delta x, i}| \leq 2$, andernfalls wird UDS verwendet. Da CDS für $|Re_{\Delta x, i}| > 2$ versagt, wie nachfolgend gezeigt wird, ist HDS im Gegensatz zu UDS zumindest dort von zweiter Ordnung im Fehlerverhalten, wo die Größe der Maschen-Reynoldszahl dies erlaubt.

Wenn man versucht, den tatsächlichen Ursprung, d.h. den ersten Benutzer, von UDS ausfindig zu machen, indem man in den einschlägigen Lehrbüchern und in der Fachliteratur Hinweise sucht, stößt man auf ein überraschendes Ergebnis:

Es gibt voneinander abweichende Angaben, wo diese Methode zum ersten Male aufgetaucht ist. Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit kann angenommen werden, daß die Angabe von Roache [13] und von Peyrot und Taylor [12] zutrifft, daß schon 1952 in der Gruppe um Richard Courant UDS verwendet wurde [48].

2.3 Die Schwächen der Standardverfahren

Die Schwächen der Standardverfahren sind bekannt. CDS berechnet örtlich oszillierende numerische Lösungen, falls die Maschen-Reynoldszahl im Betrag größer als zwei wird. Das Auftreten von Oszillationen wird nachfolgend noch ausführlich behandelt.

Für große Geschwindigkeiten und/oder kleine Diffusionskonstante ν läßt sich die Maschen-Reynoldszahl nicht durch die Wahl kleinerer Schrittweiten Δx mit vertretbarem Aufwand hinreichend klein machen.

UDS und HDS berechnen für betragsgroße Maschen-Reynoldszahlen oft Lösungen mit inakzeptabel großen Fehlern der Ordnung $O(\Delta x)$.

Wir untersuchen nun das Entstehen der örtlichen Oszillationen bei CDS. Die Differenzgleichung kann mit der Abkürzung $\rho_i = \text{Re}_{\Delta x, i}$ in der Form

$$\begin{aligned}\phi_i &= \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{\rho_i}{2}\right) \phi_{i+1} + \left(1 + \frac{\rho_i}{2}\right) \phi_{i-1} \right] \\ &= \alpha_i \phi_{i+1} + (1 - \alpha_i) \phi_{i-1}\end{aligned}$$

geschrieben werden.

Falls $|\rho_i| \leq 2$, liegt α_i zwischen 0 und 1 und daher liegt ϕ_i zwischen ϕ_{i+1} und ϕ_{i-1} , entweder

$$\phi_{i-1} \leq \phi_i \leq \phi_{i+1}$$

oder

$$\phi_{i-1} \geq \phi_i \geq \phi_{i+1}$$

Gilt nämlich $|\rho_i| \leq 2$ für alle Punkte i , so steigen (oder fallen) die ϕ_i monoton, wie dies in Abbildung 2.3.1 gezeigt wird.

Diese Monotonie ist kennzeichnend für alle Lösungen von Konvektions-Diffusionsgleichungen. Numerische Näherungen, bei denen wegen Nichteinhal-

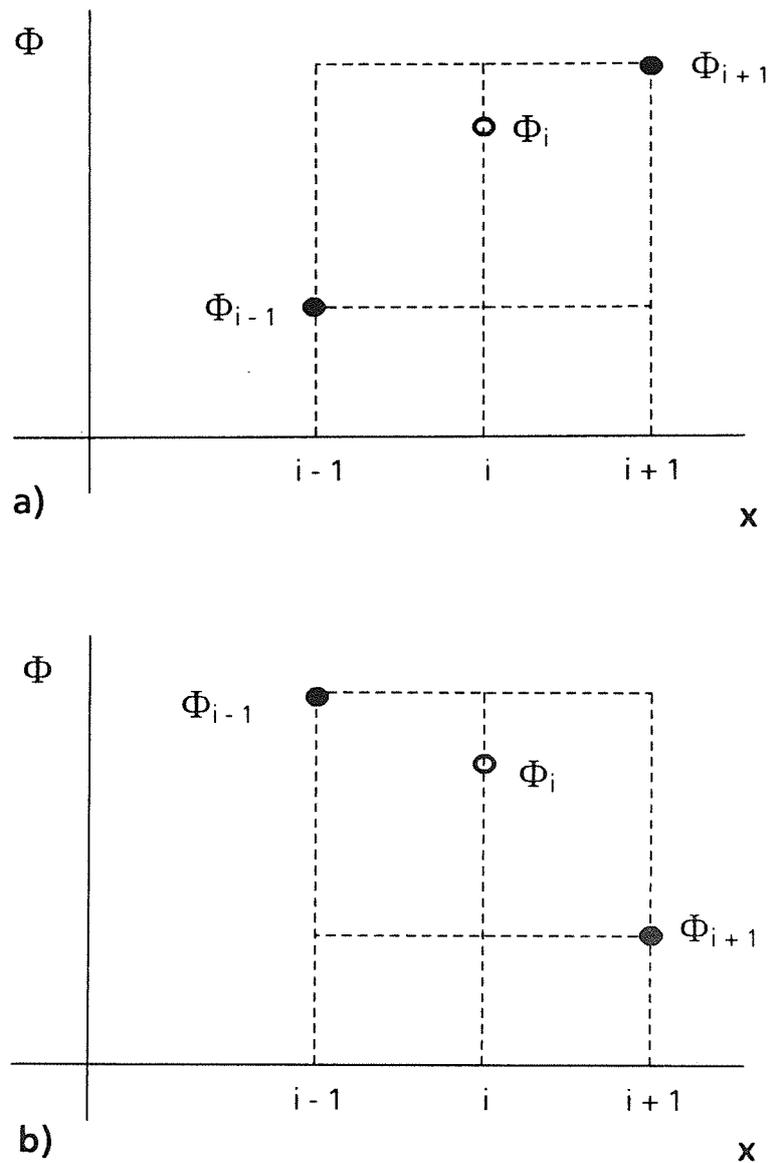


Abb. 2.3.1: Lage von ϕ_i zwischen ϕ_{i+1} und ϕ_{i-1} für eine oszillationsfreie numerische Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung (Prinzipiskizze), a) ϕ monoton steigend, b) monoton fallend

tens der Maschen-Reynoldszahlbedingung $|\rho_i| \leq 2$ eine nichtmonotone Approximation gewonnen wird, sind unphysikalisch und deshalb wertlos. Die nachfolgende Abbildung 2.3.2 zeigt u.a. eine solche numerische Lösung, welche um die Lösung des ebenfalls eingezeichneten kontinuierlichen Problems oszilliert. Oszillationen sind dort groß, wo sich ϕ stark ändert. Wo $\phi \approx \text{const.}$, ist nichts zu sehen. Zur Illustration ist eine ebenfalls oszillierende Lösung eines im Bereich $0 \leq x, y \leq 1$ gegebenen konvektiv-diffusiven Problems bei Verletzung der Maschen-Reynolds-

zahlbedingung in Abbildung 2.3.3 gezeigt, wobei die numerischen Oszillationen alle physikalischen Effekte überwiegen.

Eine weniger anschauliche Analyse der Differenzgleichung zu CDS, auf dem Weg über die allgemeine Lösung einer Differenzgleichung mit konstanten Koeffizienten, zeigt uns das gleiche Verhalten:

Die Differenzgleichung, jetzt konstantes $\rho = \rho_i$ angenommen,

$$\left(1 - \frac{\rho}{2}\right)\phi_{i+1} - 2\phi_i + \left(1 + \frac{\rho}{2}\right)\phi_{i-1} = 0$$

hat die allgemeine Lösung

$$\phi_i = A_1 \cdot \lambda_1^i + B_1 \cdot \lambda_2^i$$

mit sich aus den Randbedingungen ergebenden Konstanten A_1 und B_1 sowie den Werten λ_1 und λ_2 , den Wurzeln des charakteristischen Polynoms

$$\left(1 - \frac{\rho}{2}\right)\lambda^2 - 2\lambda + \left(1 + \frac{\rho}{2}\right) = 0.$$

Man findet $\lambda_1 = 1$ und

$$\lambda_2 = \frac{1 + \frac{\rho}{2}}{1 - \frac{\rho}{2}}.$$

Offensichtlich ist λ_2 negativ für $|\rho| > 2$ und die allgemeine Lösung enthält in diesem Falle einen inhärenten Anteil $B_1 \cdot \lambda_2^i$, der seinen Wert mit i ändert, jedoch mit sich änderndem i einmal addiert und dann wieder abgezogen wird. Das Verhalten der numerischen Lösung in Abbildung 2.3.2 läßt sich formelmäßig so deuten, daß A_1 in den Bereichen $x \leq 0.8$ dominiert. Dieses Phänomen, daß negative Wurzeln des charakteristischen Polynoms die Ursache von Oszillationen sind und damit numerische Näherungslösungen wertlos machen, wird uns später noch bei komplizierteren Differenzgleichungen bei anschaulich nicht einleuchtenden Situationen begegnen und wurde deshalb an dieser Stelle neben der anschaulichen Deutung mit aufgenommen.

Mit der in Abschnitt 2.2 eingeführten Näherung UDS für ϕ_i'

halten der numerischen Lösung in Abbildung 2.3.2 läßt sich formelmäßig so deuten, daß A_1 in den Bereichen $x \leq 0.8$ dominiert. Dieses Phänomen, daß negative Wurzeln des charakteristischen Polynoms die Ursache von Oszillationen sind und damit numerische Näherungslösungen wertlos machen, wird uns später noch bei komplizierteren Differenzgleichungen bei anschaulich nicht einleuchtenden Situationen begegnen und wurde deshalb an dieser Stelle neben der anschaulichen Deutung mit aufgenommen.

Mit der in Abschnitt 2.2 eingeführten Näherung UDS für ϕ_i'

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}, \text{ falls } u(x_i) = u_i > 0,$$

$$\approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \text{ falls } u_i < 0,$$

und der zentralen Näherungsformel zweiter Ordnung für ϕ_i'' erhält man

$$Re_{\Delta x, i} (\phi_i - \phi_{i-1}) = \phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i, \text{ falls } Re_{\Delta x, i} > 0$$

oder mit dem künstlichen Diffusionsterm auch auf der rechten Seite

$$\frac{Re_{\Delta x, i}}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) = \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right) (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i),$$

was in der weiteren Schreibweise

$$\frac{Re_{\Delta x, i}}{2 \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right)} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) = (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$$

deutlich macht, daß UDS aussieht wie CDS mit einer effektiven Maschen-Reynoldszahl

$$\frac{Re_{\Delta x, i}}{\left(1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right)},$$

1. Schreibweise mit einseitiger Approximation von ϕ_i' :

$$Re_{\Delta x,i}(\phi_i - \phi_{i-1}) = \phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i$$

($u_i > 0$)

2. Schreibweise mit künstlicher Diffusivität und zentraler Approximation von ϕ_i' :

$$\frac{Re_{\Delta x,i}}{2}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) = \left(1 + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}\right)(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$$

künstliche Diffusivität

3. Schreibweise mit zentraler Approximation von ϕ_i' und reduzierter Maschen-Reynoldszahl

$$\frac{Re_{\Delta x,i}}{1 + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}} \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} = \phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i$$

Tab. 2.3.1: Schreibweisen von UDS

Die Situation mit UDS und CDS ist in Abbildung 2.3.2 für ein einfaches 1-d-Problem einer Gleichung $Re(x) \cdot \phi' = \phi''$ mit konstantem $Re(x) = Re_0 = 50$ und einer gleichmäßigen Schrittweite $\Delta x = 0.1$, das entspricht $Re_{\Delta x} = 5$, dargestellt. Die numerische Lösung mit CDS ist wegen der Oszillationen völlig unbrauchbar, UDS zeigt eine beträchtliche Abweichung von der exakten Lösung.

Die Schwäche von UDS wird auch oft beim zeitabhängigen Auflösen anfänglich vorgegebener starker Gradienten oder gar von Treppenfunktionen als Anfangsbedingung deutlich gemacht. Es wird gezeigt, daß die in der zweiten Schreibweise herausgestellte künstliche Diffusivität die steilen Gradienten viel zu schnell abflacht ("verschmiert"). Aus der dritten Schreibweise von Tabelle 2.3.1 läßt sich ersehen, daß bei UDS für $u_i > 0$ eine Gleichung gelöst wird, welche die effektive Maschen-Reynoldszahl

$$Re_{\Delta x,eff} = \frac{Re_{\Delta x,i}}{1 + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}}$$

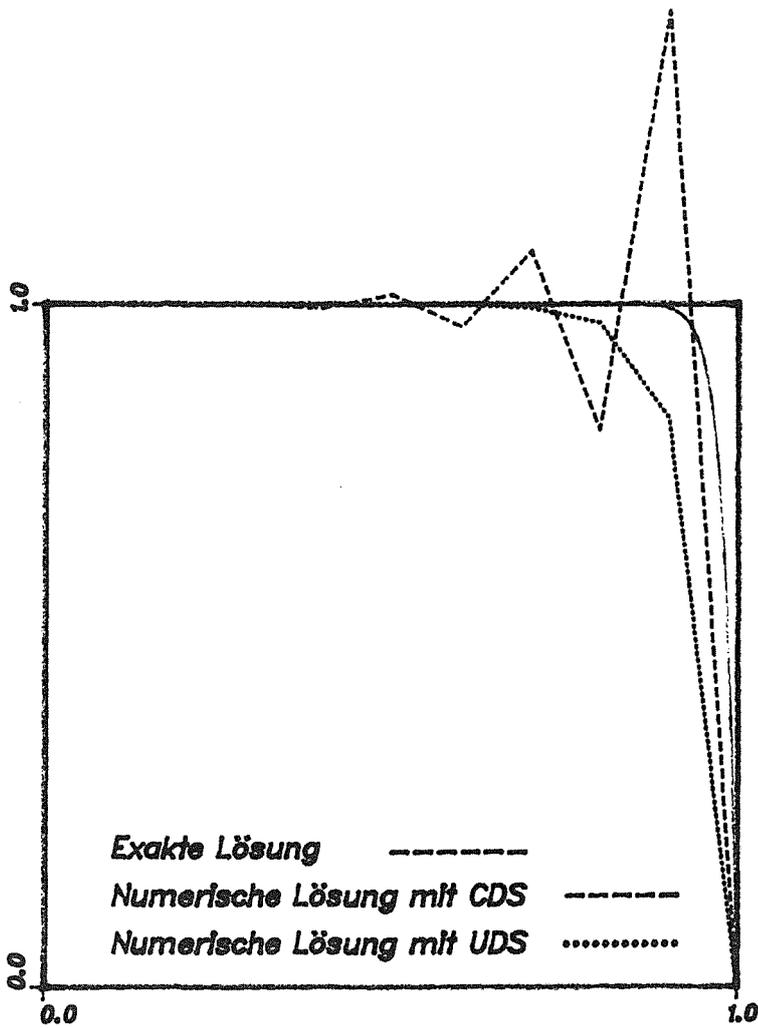


Abb. 2.3.2: Eindimensionales Beispiel. Lösung $Re_0 \phi' = \phi''$, $\phi(0) = 1$, $\phi(1) = 0$, $Re_0 = 50$, $\Delta x = 0.1$. Exakte Lösung und zwei numerische Lösungen mit Standardverfahren.

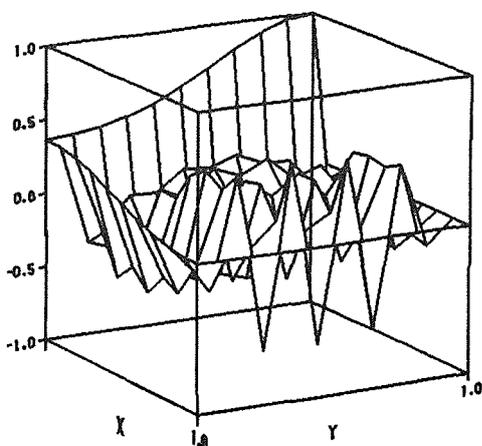


Abb. 2.3.3: 3-d Darstellung einer zweidimensionalen oszillierenden numerischen Lösung, Lösungsmethode CDS. Testbeispiel aus Kapitel 6 mit 11·11 Punkten, $Re' = 5000$.

hat, die nicht größer als 2 wird und damit für große $Re_{\Delta x, i}$ schlechte numerische Ergebnisse liefert.

2.4 Die Erhaltungsform von Differenzenverfahren

Bei der Beschreibung konvektiv-diffusiver Vorgänge geht man häufig nicht von

$$u(x) \frac{d\phi}{dx}$$

als konvektivem Transportterm aus, sondern von

$$\frac{d(u(x)\phi)}{dx}$$

Dieser Ansatz, von dem man sagt, er habe die Erhaltungsform, der eigentlich nur bei mehrdimensionalen Formulierungen seine Berechtigung hat, hat eine entsprechende Formulierung in diskreter Form, d.h. für Differenzgleichungen, und ermöglicht in vielen Fällen bessere numerische Ergebnisse als mit der erstgenannten Formulierung, der sogenannten Konvektionsform oder Divergenzform oder Nichterhaltungsform. Von den meisten später bei Vergleichsrechnungen untersuchten Differenzenverfahren wird neben der konvektiven Form auch die entsprechende Erhaltungsform miteinbezogen.

Natürlich sind in einer Dimension

$$u \frac{d\phi}{dx}$$

und

$$\frac{d(u\phi)}{dx}$$

nicht gleichwertig. Falls jedoch bei einer inkompressiblen Strömung in zweidimensionalen rechtwinkligen Koordinaten die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

erfüllt ist, folgt

$$\frac{\partial(u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\phi)}{\partial y} = u \frac{d\phi}{dx} + v \frac{\partial\phi}{\partial y} + \phi \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)$$

und die beiden Darstellungsformen sind äquivalent.

Beschränkt man sich wieder auf eine Raumdimension, um die diskreten Formulierungen anzugeben, so hat die konvektive Form der Differenzgleichung die Gestalt

$$u_i \frac{\hat{\phi}_{i+1/2} - \hat{\phi}_{i-1/2}}{\Delta x} - v \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

mit geeignet zu definierenden Zwischenwerten $\hat{\phi}_{i+1/2}$ und $\hat{\phi}_{i-1/2}$, während die Erhaltungform die Darstellung

$$\frac{u_{i+1/2} \hat{\phi}_{i+1/2} - u_{i-1/2} \hat{\phi}_{i-1/2}}{\Delta x} - v \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

hat. Hier sind $u_{i+1/2}$ und $u_{i-1/2}$ die bei den Koordinaten $x_{i+1/2} = x_i + \Delta x/2$ und $x_{i-1/2} = x_i - \Delta x/2$ als bekannt vorausgesetzten Werte der Geschwindigkeitskomponente u . Bei CDS ist $\hat{\phi}_{i+1/2} = 1/2 (\phi_{i+1} + \phi_i)$, $\hat{\phi}_{i-1/2} = 1/2 (\phi_i + \phi_{i-1})$, so daß bei der Konvektionsform wieder der konvektive Term

$$u_i \frac{\frac{1}{2} (\phi_{i+1} + \phi_i) - \frac{1}{2} (\phi_i + \phi_{i-1})}{\Delta x} = u_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x}$$

auftaucht, während CDS in Erhaltungform (= CDS - C) während des Rechnens die Berechnung von $\hat{\phi}_{i+1/2}$ durchführen muß. Bei der Erhaltungform der Differenzgleichungen ist gesichert, daß entsprechende Transferraten gleich sind, z.B. der konvektive Transfer vom Punkt i nach Punkt $i+1$ in der Gleichung zum Punkt i ist

$$\frac{u_{i+1/2} \hat{\phi}_{i+1/2}}{\Delta x},$$

der entsprechende Wert in der Gleichung zum Punkt $i+1$ ist

$$\frac{-u_{(i+1)-1/2} \hat{\phi}_{(i+1)-1/2}}{\Delta x} = -\frac{u_{i+1/2} \hat{\phi}_{i+1/2}}{\Delta x}$$

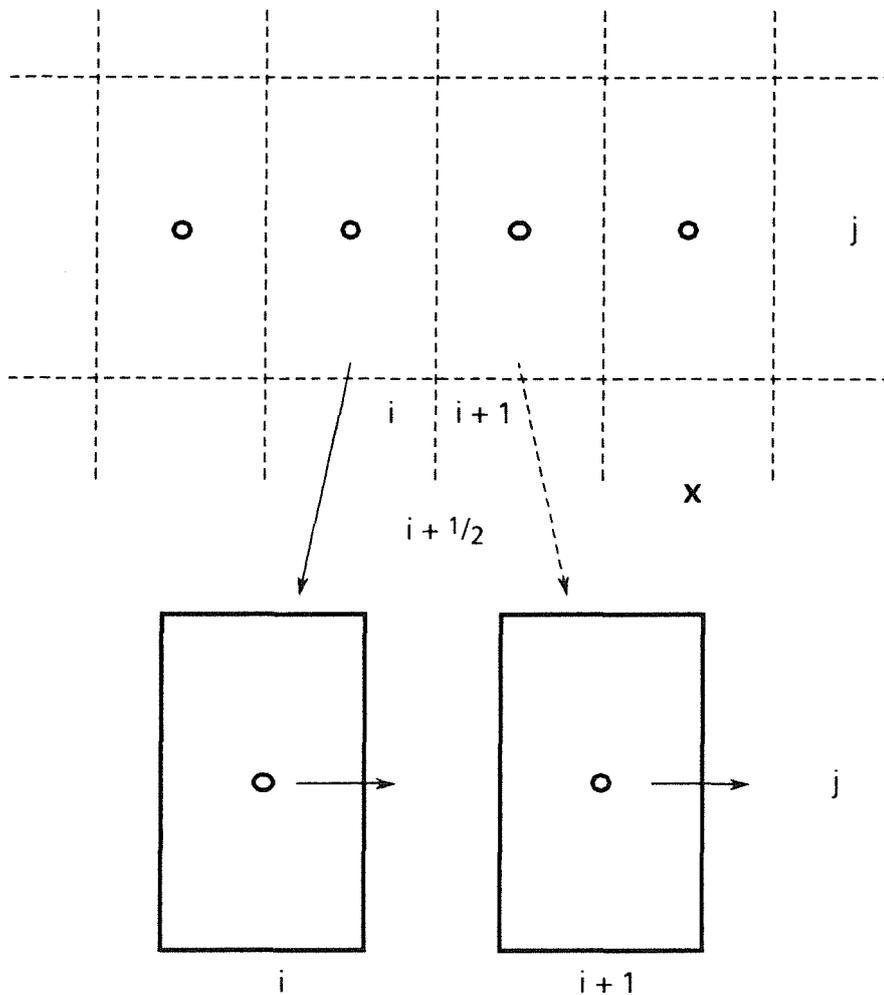


Abb. 2.4.1: Grundprinzip der Differenzenverfahren in Erhaltungsform. Der konvektive Transfer von Masche (i, j) nach Masche $(i+1, j)$ tritt als Gewinnterm in Masche $(i+1, j)$ und als Verlustterm in Masche (i, j) auf, bzw. umgekehrt (Prinzipskizze)

Somit können keine künstlichen zusätzlichen Quellen oder Senken entstehen wie bei Differenzenverfahren in Konvektionsform. Dieser Sachverhalt, die Sicherstellung konsistenter Transferraten, ist in Abbildung 2.4.1 erläutert.

Wie sich unter verhältnismäßig allgemeinen Voraussetzungen aus der Konvektionsform eines Differenzenverfahrens die entsprechende Erhaltungsform entwickeln läßt, wird nachfolgend gezeigt.

Wir nehmen an, wir hätten eine Näherung

$$u \frac{d\phi}{dx} \approx L_i(\phi) = u_i \{A \phi_{i+1} + B \phi_i + C \phi_{i-1} + D \phi_{i-2}\}$$

in konvektiver Form in unserer Gleichung und diese Näherung gelte exakt für eine konstante Funktion ϕ , d.h. für eine konstante Funktion liefert auch die Näherung den Wert

$$\frac{d\phi}{dx} = 0 \text{ .}$$

Da viele Differenzennäherungen für Polynome bis zu einer bestimmten Ordnung exakt sind, ist diese Forderung die einfachste Form einer solchen Näherung.

Die letzte Bedingung hat zur Folge, daß

$$A + B + C + D = 0 \text{ .}$$

Nun läßt sich $L_i(\phi)$

$$L_i(\phi) = A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1} + D\phi_{i-2}$$

umformen zu

$$A(\phi_{i+1} - \phi_i) + (A+B)(\phi_i - \phi_{i-1}) + (A+B+C)(\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) + (A+B+C+D)\phi_{i-2}$$

Weil $A + B + C + D = 0$, fällt der letzte Term weg und $L_i(\phi)$ läßt sich unter der genannten Voraussetzung als Summe von Differenzen benachbarter ϕ -Werte schreiben

$$L_i(\phi) = \bar{A}(\phi_{i+1} - \phi_i) + \bar{B}(\phi_i - \phi_{i-1}) + \bar{C}(\phi_{i-1} - \phi_{i-2})$$

mit $\bar{A} = A, \bar{B} = A + B, \bar{C} = A + B + C$.

Definiert man nun

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \bar{A}\phi_{i+1} + \bar{B}\phi_i + \bar{C}\phi_{i-1},$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \bar{A}\phi_i + \bar{B}\phi_{i-1} + \bar{C}\phi_{i-2},$$

so hat man die Interpolationsformel zur Berechnung der $\hat{\phi}_{i+1/2}$ und $\hat{\phi}_{i-1/2}$, welche in der Differenzgleichung in Erhaltungsform auftreten.

Offensichtlich würde die Definition von $\hat{\phi}_{i+1/2}$ und $\hat{\phi}_{i-1/2}$ entsprechend verlaufen, wenn die Näherungsformel noch mehr Punkte umfaßt.

Dies sieht am Beispiel eines Verfahrens mit dem Namen LUSD mit Basispunkten x_i, x_{i-1}, x_{i-2} und x_{i-3} folgendermaßen aus: Dort ist

$$u \frac{d\phi}{dx} \Big|_i = u_i \frac{\{11\phi_i - 18\phi_{i-1} + 9\phi_{i-2} - 2\phi_{i-3}\}}{6\Delta x},$$

die geschweifte Klammer läßt sich schreiben als

$$\{11(\phi_i - \phi_{i-1}) - 7(\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) + 2(\phi_{i-2} - \phi_{i-3})\}$$

und die entsprechende Erhaltungsform von LUDS lautet

$$\frac{d(u\phi)}{dx} = \frac{u_{i+1/2}\{11\phi_i - 7\phi_{i-1} + 2\phi_{i-2}\} - u_{i-1/2}\{11\phi_{i-1} - 7\phi_{i-2} + 2\phi_{i-3}\}}{6\Delta x}.$$

Dieser Zusammenhang läßt sich immer herstellen unabhängig davon, ob die gesamte Gleichung noch Quellterme, Adsorptionsterme und dergleichen enthält. Bei den lokal exakten und verwandten Verfahren (Allen-Southwell, Samarski, LECUSSO, LSUDS) sind die Koeffizienten A , B , C und D von u_i bzw. von $Re_{\Delta x, i}$ abhängig. In diesem Falle sollte man

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \bar{A}^+ \phi_{i+1} + \bar{B}^+ \phi_i + \bar{C}^+ \phi_{i-1}$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \bar{A}^- \phi_i + \bar{B}^- \phi_{i-1} + \bar{C}^- \phi_{i-2}$$

setzen, wobei jetzt die \bar{A}^+ , usw. zwar nach der gleichen Formel wie bisher mit $u_{i+1/2}$, aber \bar{A}^- mit $u_{i-1/2}$ gebildet werden, um zu gewährleisten, daß der Transfer ($i \rightarrow i+1$) in der Gleichung zum Punkt i übereinstimmt mit dem entsprechenden Wert in der Gleichung zum Punkt $i+1$ ($i+1 \leftarrow i$).

Von vielen Verfahren sind sowohl die Konvektionsform als auch die Erhaltungsform geläufige Verfahren. Bei Allen-Southwell gibt es das entsprechende Verfahren in Erhaltungsform, verbunden mit einer implizierten Form der Quellterme, es ist das Schema von El-Mistikawy-Werle [55].

2.5 Numerische Tests von Differenzenverfahren

Um ein Urteil über die Qualität der großen Zahl der bisher vorgeschlagenen Differenzenverfahren zur Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung zu erhalten, sind vergleichende Untersuchungen notwendig. Dies ist zunächst im Rahmen theoretischer Analysen möglich, bei denen die Fehlerordnung, Oszillationsfreiheit, Monotonie und andere Eigenschaften für einzelne Verfahren untersucht werden. Auf diesen Komplex wird in der vorliegenden Arbeit in Kapitel 5 ausführlich eingegangen. Auf der anderen Seite liegt es nahe, Vergleichsrechnungen mit verschiedenen Verfahren an ausgewählten Problemen durchzuführen und deren Ergebnisse zu bewerten. Es ist daher nicht verwunderlich, daß die Anzahl der Veröffentlichungen über solche Vergleichsrechnungen einen beträchtlichen Umfang erreicht hat.

Die Standardverfahren (CDS, UDS, HDS) und einige fortgeschrittene Verfahren (ASS, QUICK) sind immer wieder getestet worden. Oft beschränken sich die numerischen Tests auf einfache eindimensionale Probleme.

Von den neueren Verfahren ist das Differenzschema von Kawamura-Kuwahara von seinen Autoren und einigen japanischen Gruppen verwendet worden, ein Vergleich mit anderen Methoden an einem Beispiel ist nicht bekannt. LUDS und LSUDS wurden von Barrett [33] für ein eindimensionales Beispiel und mit einem problematischen zweidimensionalen Beispiel numerisch getestet. Weitere Tests dieser beiden Verfahren liegen für eine andere eindimensionale Fragestellung vor [109]. Auch für das Verfahren von Samarski [119] und das Schema von Gushchin und Shchennikov [26] sind außer den numerischen Tests des Autors in [64] keine Vergleichsrechnungen bekannt. Entsprechendes läßt sich für einige mehr am Rande liegende Differenzenverfahren wie z.B. das Verfahren von Roos [26] oder die Finite Analytic Solution (= FAS) von Chen et al. [43] feststellen.

Von den Vierpunktverfahren hat das Schema von Agarwal [26] selten Eingang in numerische Tests gefunden, das Dreipunktschema von Atias et al. [32], manchmal als Upwindverfahren 2. Ordnung bezeichnet, findet vermehrt Eingang in numerische Vergleiche, z.B. [127]. Einzig das QUICK-Verfahren von Leonard [85] konnte es häufig erreichen, in Vergleichsrechnungen mituntersucht zu werden, vielleicht wegen der zielstrebigen Werbung für dieses Verfahren [84] - [99]. Diese Tendenz ist erhalten geblieben, obgleich sich auch dieses Verfahren als nicht frei von örtlichen Oszillationen herausgestellt hat. Dies kommt in Beiträgen von Han

et al. [69], Leschziner [100], Maekawa und Muramatsu [104], Patel et al. [109], [110] sowie Pollard und Sin [111] deutlich zum Ausdruck. Außerdem mußten mit der Zeit wegen Konvergenzschwierigkeiten verbesserte Lösungsalgorithmen für dieses Verfahren (QUICKE [111], QUICKER [111]) in die Tests miteinbezogen werden.

Leider sind die in den einzelnen Untersuchungen getroffenen Schlußfolgerungen nicht einheitlich, teilweise widersprechen sie sich. Wegen der wenig überzeugenden Aussagekraft der gefundenen Ergebnisse wurden immer wieder neue numerische Tests durchgeführt. Vergleichende Bewertungen solcher Vergleichsrechnungen finden sich bei Vanka [126] und bei Patanakar [106]. Als wesentlichster Punkt all dieser Untersuchungen kann festgehalten werden, was schon in dem Zitat aus [106] am Ende von 1.2 enthalten ist: Die Vergleichsrechnungen mit Modellproblemen haben keine einheitliche Meinung darüber erbracht, welches Differenzschema zur numerischen Approximation konvektiv-diffusiver Prozesse am besten geeignet ist. Daneben haben sich trotz aller Meinungsunterschiede bei den numerischen Tests einige Erfahrungen herauskristallisiert:

- CDS berechnet oszillierende Lösungen beim Verletzen gewisser Maschen-Reynoldszahlbedingungen und liefert in diesem Fall wertlose Ergebnisse.
- UDS bleibt für alle Maschen-Reynoldszahlen stabil, für betragsgroße Maschen-Reynoldszahlen treten beträchtliche Abweichungen von der Lösung des kontinuierlichen Problems auf.
- die Erhaltungsformen der Differenzenverfahren zeigen in der Regel bessere numerische Ergebnisse.

Die ersten beiden Punkte sind in Abschnitt 2.3 ausführlich erläutert worden.

Mit der Untersuchung von Beier et al. [34] wurde ein erster Schritt in Richtung auf belastbare numerische Tests von Differenzenverfahren begonnen, welche der Autor mit seinem Bericht [64] fortgesetzt hat, wobei er unter Benutzung des Beispiels von Beier et al. seine Untersuchungen auf einen größeren Parameterbereich (von Re), auf mehr Diskretisierungen und eine wesentliche größere Zahl insbesondere neuerer Verfahren ausgedehnt hat.

Es folgen noch einige weitere Bemerkungen zu Testrechnungen. Kritischer Punkt aller Testrechnungen ist die Auswahl geeigneter Beispiele. Diese sollten eigentlich folgende Voraussetzungen erfüllen:

1. Sie sollten eine gängige, vertraute physikalische Situation beschreiben.
2. Sie sollten nicht zu einfach und nicht zu kompliziert sein.
3. Es sollte eine sichere Vergleichsmöglichkeit mit einer korrekten Lösung bestehen. Dies kann eine exakte analytische Lösung sein oder das Ergebnis einer Berechnung mit einer sehr feinen Diskretisierung und einer gesicherten Rechenmethode.

In den meisten Fällen wurde bei Testrechnungen auch die eindimensionale Konvektions-Diffusionsgleichung gelöst. Sie eignet sich besonders dafür, theoretisch erarbeitete Aussagen für bestimmte Differenzenverfahren zu verifizieren. Schon bei der Untersuchung von Erhaltungsformen von Differenzenverfahren entstehen jedoch Schwierigkeiten, weil es in einer Dimension keine Äquivalenz von Erhaltungsform und Konvektionsform gibt. In einer Raumdimension sind die Gleichungen $\text{Re}(x) \phi' - \phi'' = 0$ und $(\text{Re}(x) \phi)' - \phi'' = 0$ verschieden. Eine eindimensionale inkompressible Kontinuitätsgleichung $\text{Re}'(x) = 0$ macht beide Gleichungen trivialerweise identisch. Das ändert sich erst in zwei Raumdimensionen, wo sich die kontinuierlichen Erhaltungs- und Konvektionsformen durch ein Vielfaches der Kontinuitätsgleichung unterscheiden, wie schon erwähnt wurde.

Deshalb kann erst in zwei Raumdimensionen das Wechselspiel zwischen Konvektions-Diffusionsgleichung und Kontinuitätsgleichung in diskreter Form studiert werden, wenn man mit Erhaltungsformen von Differenzenverfahren arbeitet. Dieser Gesichtspunkt spricht für die Verwendung eines zumindest zweidimensionalen Testbeispiels.

Zur Bedingung des "nicht zu einfach und nicht zu kompliziert" wäre hinzuzufügen, daß sowohl das Runchal-Problem [116] der sich drehenden Scheibe mit Wärmequelle im Zentrum des sphärischen Koordinatensystems, siehe Abbildung 2.5.1, wie auch das zweidimensionale Beispiel aus Barrett zu einfach sind. Im erstgenannten Beispiel wird die Strömung umgelenkt - sie verläuft auf Kreisbahnen - die Wärme bewegt sich aber immer senkrecht zur Strömung allein durch Wärmeleitung, es gibt keine thermische Grenzschichten, d.h. es fließt nicht von der Seite Wärme in die Strömung, wird dort konvektiv weitertransportiert und vielleicht noch irgendwo durch einen Diffusionsvorgang aus der Strömung entnommen usw. Testbeispiele sollten Grenzschichten beinhalten, insbesondere wegen deren Bedeutung für praktische Probleme, weil dort als typische Situationen stark wechselnde Geschwindigkeitsfelder und große Gradienten auftreten.

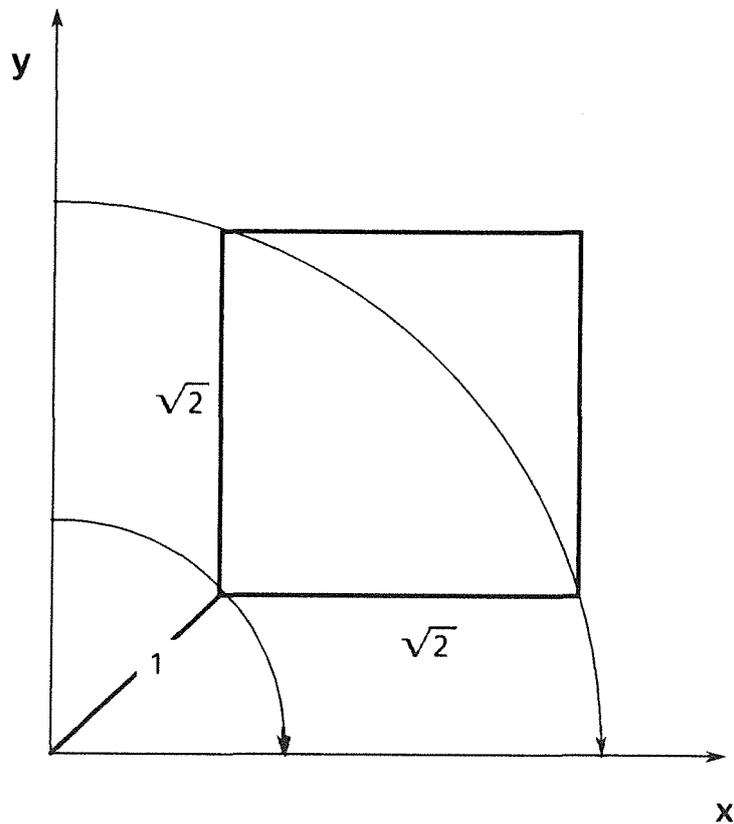


Abb. 2.5.1: Darstellung des quadratischen Lösungsgebiets des Problems von Runchal. Punktquelle im Koordinatenursprung. Isothermen sind Kreise um den Ursprung.

Das von Barrett [33] angegebene Beispiel löst

$$\Gamma \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + v_o \left(\cos \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} + \sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0$$

numerisch mit mehreren Verfahren, insbesondere den von ihm vorgeschlagenen LUDS und LSUDS. Dieses Beispiel hat Lösungen

$$\begin{aligned} \phi &= \exp\{\alpha x + \beta y\}, \\ \alpha &= 0.5 v_o(\cos \theta + \cos \psi), \quad \beta = 0.5 v_o(\sin \theta + \sin \psi), \end{aligned}$$

mit frei wählbarem ψ ; es lassen sich weitere Lösungen durch Linearkombinationen solcher Lösungen mit verschiedenen ψ bilden.

Die angegebene Funktion $\phi(x,y)$ ist eine eindimensionale exponentielle Lösung. Man kann durch Linearkombinationen solcher Funktionen komplizierte Lösungen $\phi(x,y)$ generieren und durch die Vorgabe dieser Lösung am Rande die entsprechende numerische Lösung berechnen lassen. Andererseits hat man immer nur eine einheitliche Strömungsrichtung und auch Intensität der Strömung, so daß die festgelegte Lösung zwar größere und geringere Gradienten besitzt, diese haben jedoch nichts mit einer sich ändernden Strömung zu tun und sind daher nicht einfach verständlich. Diese Eigenschaften des Beispiels von Barrett stehen somit im Widerspruch zu zwei eingangs genannten Voraussetzungen für Testbeispiele.

Einige numerische Tests lösen einfache Strömungsprobleme, bei denen neben Momentengleichungen und Kontinuitätsgleichung auch noch eine Druckgleichung oder eine Wirbeltransportgleichung gelöst werden müssen. In solchen Fällen ist es sehr schwierig, Fehler des Differenzenverfahrens von Fehlern der zusätzlichen Gleichungen und Inkonsistenzen in der Behandlung der Randbedingungen zu trennen, bzw. deren Wechselspiel zu übersehen.

2.6 Upwindverfahren bei der Finiten-Element-Methode

Die Versagensfälle, welche beim zentralen Differenzenverfahren für große Maschen-Reynoldszahlen in Form von unphysikalischen Oszillationen auftreten, haben ihre entsprechenden Gegenstücke bei FEM-Methoden. Dies ist nicht verwunderlich, weil die Galerkin-FEM-Methode bei bestimmten Elementen zu einer Art von Differenzennäherung mit zentralen Differenzen führt. Zunächst bietet sich als Weg an, Oszillationen durch Verfeinerungen des Elementnetzes in den Gebieten mit vorherrschender Konvektion zu verhindern. Falls dies wegen zu großem Aufwandes nicht möglich ist, muß etwas wie eine Upwind-Methode eingeführt werden. Die Interpretation der einfachen Upwindmethode UDS als Hinzunahme von künstlicher Diffusion zu CDS hat bei den FEM-Methoden angeregt, ähnliches zu tun und Diffusionsterme zu vergrößern, z.B. Hughes und Brooks, 1979 [75].

Im Rahmen einer FEM-Formulierung können konvektive Terme mit Upwind-Charakter auf verschiedene Arten entwickelt werden. In den ersten Ansätzen wurden modifizierte Gewichtsfunktionen eingeführt, um den Upwindeffekt zu realisieren. Dies sieht im einzelnen so aus, daß das Element, das, vom Knoten aus gesehen, stromauf liegt, mehr Gewicht erhält als das stromab liegende. Diese Methoden gehen auf Christie et al. [44] und Heinrich et al. [71] zurück.

Spätere Vorschläge basierten auf der Formulierung eines verbesserten Variationsprinzips. Da mit den genannten Methoden bei mehrdimensionalen Problemen wie bei den Differenzenverfahren 'crosswind-diffusion' auftreten kann (siehe Abschnitt 3.11), d.h. es tritt übermäßige Diffusion in die Richtung senkrecht zur Strömungsrichtung auf, richtete sich das Interesse auf verbesserte Upwind-FEM-Methoden.

Mit der Entwicklung der 'streamline-upwind/Petrov-Galerkin' (=SUPG)-Methode [76] wurde ein Teilschritt in diese Richtung getan. Bei dieser Methode wird zusätzlich Diffusivität (oder Viskosität) so eingebracht, daß sie nur in Strömungsrichtung wirkt. Dahinter stand die Idee, Raithby's [113] 'skew-upwind differencing' auf FEM zu übertragen. Diese Entwicklung hat gezeigt, daß FEM-Upwind-Methoden, die mit SUPG gebildet werden, weniger Schwierigkeiten mit zuviel künstlicher Diffusion und mit 'crosswind diffusion' haben.

Eine ähnliche Idee wurde von Gresho et al. [60] eingeführt. Sie beließen die Gewichtsfunktionen in ihrer ursprünglichen Form, führten jedoch einen zusätzlichen künstlichen Diffusionsausdruck, die sogenannte ausgleichende Tensor-Diffusivity (engl. "balancing tensor diffusivity"), ein, ebenfalls, um zusätzliche Diffusion nur in Strömungsrichtung einzubringen.

Darstellungen zu diesem Thema findet man z.B. in den Originalarbeiten von T. Hughes und seiner Gruppe [76] und in einigen Arbeiten von Donea [53], [54].

3. ZUSAMMENSTELLUNG DER DIFFERENZENVERFAHREN, DIE MAN ALS UPWINDVERFAHREN BEZEICHNEN KANN

3.0 Einführung

Im vorliegenden Kapitel werden hauptsächlich alle aus der Literatur bekannten Verfahren vorgestellt, die man als Upwindverfahren bezeichnen kann. In den ersten drei Teilabschnitten werden polynomiale Näherungen behandelt. Die Unterscheidung wird danach getroffen, wieviele Punkte in der Differenzennäherung stromab liegen. In Teil Abschnitt 3.4 werden lokal exakte und verwandte Differenzenverfahren zusammengestellt. Abschnitt 3.5 beschreibt Verfahren, die sich nicht in das Schema der Abschnitte 3.1 - 3.4 einordnen lassen. In 3.6 werden weitere Gesichtspunkte behandelt, nach denen man die Verfahren systematisch einteilen kann. Diese Betrachtung gibt den Anstoß dazu, in 3.7 auf weitere, bisher nicht vorgeschlagene Differenzenverfahren hinzuweisen. In 3.8 werden die Erhaltungsformen einiger Verfahren angegeben, während in 3.9 eine andere Klasse von Differenzenverfahren vorgestellt wird, bei denen entweder transient oder iterativ die Koeffizienten der Differenzengleichung in Abhängigkeit von der Lösung des zurückliegenden Zeitschritts oder von einer provisorisch berechneten Lösung modifiziert werden. Die Anwendung der vorgestellten Differenzenverfahren bei mehrdimensionalen Problemen behandelt 3.10 und danach in 3.11 das nur bei höherdimensionalen Fragestellungen auftretende Problem mit der "crosswind diffusion", auch "false diffusion" genannt.

Ausgangspunkt bei den nachfolgend beschriebenen Differenzenverfahren ist immer, wo nicht ausdrücklich etwas anderes angenommen wird, die eindimensionale Konvektions-Diffusionsgleichung. Es wird jeweils ein äquidistantes Gitter von Punkten x_i , $x_i = i \cdot \Delta x$, $i = 0, 1, \dots$ vorausgesetzt. Für die nicht bekannte Lösung $\phi(x)$ werden, wie schon in Kapitel 2, in den Punkten x_i Näherungswerte $\hat{\phi}(x_i) = \hat{\phi}_i$ gesucht. (Die Kennzeichnung der Näherungswerte in der Schreibweise wird im folgenden weggelassen).

3.1 Einseitige Näherungen mit Punkten stromaufwärts

a) Das einfachste bekannte Upwindverfahren ist das schon vorgestellte Upwindverfahren 1. Ordnung (UDS), manchmal auch als "donor cell-Methode" bezeichnet. Bei diesem Verfahren zieht man zur Approximation von $d\phi/dx$ in der Gleichung

$$u \frac{d\phi}{dx} - \nu \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0$$

oder in verwandten Gleichungen den Basispunkt x_i und von den Nachbarpunkten x_{i+1} und x_{i-1} denjenigen mit heran, aus dessen Richtung die Strömung kommt, d.h. man wählt

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}, \text{ falls } u_i > 0$$

und

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \text{ falls } u_i \leq 0.$$

Diese Näherung ist bekanntlich $O(\Delta x)$, wie aus der Differenz der Reihenentwicklungen von ϕ_i und ϕ_{i-1} für den ersten angegebenen Ausdruck zu ersehen ist.

$$\phi_i = \phi_i$$

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta x \cdot \phi_i' + \frac{\Delta x^2}{2} \cdot \phi_i'' - \dots$$

$$\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \phi_i' - \frac{\Delta x}{2} \cdot \phi_i'' + \dots$$

d. h. die Differenz zwischen dem gesuchten Wert ϕ_i' und der dafür verwendeten Näherung

$$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \right)$$

hat neben Beiträgen höherer Ordnung in Δx den Wert

$$\frac{\Delta x}{2} \cdot \phi_i''.$$

Er setzt sich damit aus dem Produkt Δx und einer beschränkten Funktion, hier $\phi_i''/2$, zusammen.

b) Läßt man zu, daß auch die Punkte x_{i+2} bzw. x_{i-2} zur Approximation mitbenutzt werden, so kann man eine einseitige Dreipunktnäherung für $d\phi/dx$ gewinnen, welche die Ordnung $O(\Delta x^2)$ besitzt. Die Formel lautet:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{1}{2\Delta x} \left\{ 3\phi_i - 4\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\} \quad \text{für } u_i \geq 0.$$

und

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{1}{2\Delta x} \left\{ -3\phi_i + 4\phi_{i+1} - \phi_{i+2} \right\} \quad \text{für } u_i < 0.$$

Der Vorschlag für diese Näherung geht auf Price et al. [112] zurück, sie wurde bei 2-d Problemen erstmals von Atias et al. [32] angewendet. Explizite und implizite transiente Differenzenschemata mit dieser einseitigen Näherungsform für ϕ_i' wurden von Noye [105] vorgeschlagen.

Die entsprechende Näherung unter Einbeziehung eines vierten Punktes, entweder x_{i+3} oder x_{i-3} , führt auf eine Näherung der Ordnung $O(\Delta x^3)$, für $u_i \geq 0$ lautet die Näherung

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx \frac{1}{6\Delta x} \left\{ 11\phi_i - 18\phi_{i-1} + 9\phi_{i-2} - 2\phi_{i-3} \right\}.$$

Diese Näherung zusammen mit der konventionellen Näherung

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_i \approx \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}$$

für die zweite Ableitung in der Konvektions-Diffusionsgleichung wurde 1982 von Barrett [33] unter der Bezeichnung LUDS (=Leonards Upwind Difference Scheme) vorgeschlagen.

Mathematisch gesprochen, sind diese Näherungsformeln einseitige diskrete Näherungen für ϕ_i' mit ℓ Punkten, welche für Polynome vom Grade $\leq \ell - 1$ den Wert

von ϕ_i' exakt wiedergeben. Sie werden daher auch als polynomiale Näherungen bezeichnet. Diesen Sachverhalt zeigt auch eine Zusammenstellung der drei Formeln für $u_i \geq 0$ mit führendem Fehlerglied:

$$\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \phi_i' - \frac{\Delta x}{2} \phi_i'' + \dots$$

$$\frac{1}{2\Delta x} \left\{ 3\phi_i - 4\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\} = \phi_i' - \frac{\Delta x^2}{3} \phi_i''' + \dots$$

$$\frac{1}{6\Delta x} \left\{ 11\phi_i - 18\phi_{i-1} + 9\phi_{i-2} - 2\phi_{i-3} \right\} = \phi_i' - \frac{\Delta x^3}{4} \phi_i^{IV} + \dots$$

Die Reihe der Formeln ließe sich leicht fortsetzen, jedoch ist man bei einseitigen Näherungen bisher im Rahmen der hier angegebenen Formeln geblieben.

Es sollte noch folgendes vermerkt werden:

- Zu gegebener Punktezahl haben die Formeln dieses Abschnittes immer die höchstmögliche Polynomgenauigkeit.
- Die Vorzeichen der Koeffizienten der Formeln besitzen immer alternierende Vorzeichen
- Rechnungen mit diesen Formeln und der üblichen Dreipunktnäherung für die Diffusionsterme haben außer bei Berechnung von unstetigen Vorgängen, die nicht mit solchen Näherungen angegangen werden sollten, nicht zu örtlichen Oszillationen geführt.

3.2 Verfahren von Polynomgenauigkeit mit einem Punkt stromab

Im einfachsten Fall nichteinseitiger Näherungen kann man annehmen, daß ein Punkt stromab benützt wird, und daß die Formel zur Näherung von ϕ_i' den maximal möglichen Polynomgenauigkeitsgrad ℓ besitzt und damit auf $(\ell + 1)$ Punkte zurückgreift.

a) $\ell = 1$:

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad \text{für } u_i \geq 0$$

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad \text{für } u_i \leq 0$$

Diese Formel ist das Gegenstück zum Upwindverfahren 1. Ordnung und ihre Verwendung erzeugt für $|\text{Re}_{\Delta x, i}| > 1$ unphysikalische örtliche Oszillationen bei der numerischen Berechnung stationärer Lösungen. Sie führt in diesem Falle bei transienten Rechnungen zu numerischer Instabilität.

Wegen $|\text{Re}_{\Delta x, i}| \leq 1$ und $O(\Delta x)$ ist sie nicht zu empfehlen.

b) $\ell = 2$:

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Hier handelt es sich um das zentrale Differenzenverfahren (CDS), dessen Eigenschaften schon beschrieben wurden. Bei der Lösung von Konvektions-Diffusionsgleichungen versagt diese Näherung für $|\text{Re}_{\Delta x, i}| > 2$, wie schon in 2.3 dargestellt.

c) $\ell = 3$:

$$\phi_i' \approx \frac{1}{6\Delta x} (2\phi_{i+1} + 3\phi_i - 6\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) + O(\Delta x^3) \quad \text{für } u_i \geq 0$$

und die entsprechend gespiegelte Formel für $u_i < 0$.

Diese Formel ist von mehreren Autoren (Leonard [87], Agarwal [29]) vorgeschlagen worden und auch schon bei Testrechnungen geprüft worden. Die Analyse zeigt, daß die kritische Grenze, unterhalb der akzeptable numerische Lösungen erhalten werden, bei $|\text{Re}_{\Delta x, i}| = 3$ liegt.

d) $\ell = 4$:

Die entsprechende Formel lautet für $u_i \geq 0$

$$\phi_i' \approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ 3\phi_{i+1} + 10\phi_i - 18\phi_{i-1} + 6\phi_{i-2} - \phi_{i-3} \right\} + O(\Delta x^4) ,$$

sie wurde bisher nicht verwendet.

Es gibt auch Differenzennäherungen für ϕ_i' , welche zu vorgegebener Punktezahl nicht die maximale Polynomordnung besitzen. Dazu zählt eine Dreipunktnäherung vom Grade Eins, die sich als Linearkombination von UDS und CDS auffassen läßt in der Form, daß die Koeffizienten der gesamten Näherung für die Konvektions-Diffusionsgleichung auf jeden Fall alternierende Vorzeichen besitzen ("upwind-weighted scheme", siehe Peyret und Taylor [12], p. 43).

Wesentlich bekannter ist das sogenannte QUICK-Verfahren von Leonard [85]. Dieses Verfahren geht ursprünglich von einer Formulierung des konvektiven Anteils der Konvektions-Diffusionsgleichung in Erhaltungsform aus. Während CDS in Erhaltungsform (= CDS-C) die Gestalt

$$\frac{u_{i+1/2}\hat{\phi}_{i+1/2} - u_{i-1/2}\hat{\phi}_{i-1/2}}{\Delta x} - v \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

mit den linearen Näherungen

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i) = \phi_{i+1/2} + \frac{\Delta x^2}{4} \phi_i'' + \dots$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1})$$

besitzt, hat Leonard für positive Geschwindigkeiten die parabolischen Näherungen

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{3}{8}\phi_{i+1} + \frac{3}{4}\phi_i - \frac{1}{8}\phi_{i-1},$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \frac{3}{8}\phi_i + \frac{3}{4}\phi_{i-1} - \frac{1}{8}\phi_{i-2},$$

eingeführt. Hier gilt

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \phi_{i+1/2} + \frac{\Delta x^3}{48} \cdot \phi_i''' + \dots$$

Geht man zur konvektiven Form über, d.h. setzt man $u_{i+1/2} = u_{i-1/2} = u_i$, so bleibt für $u_i > 0$.

$$\frac{u_i}{\Delta x} \left[\frac{3}{8} \phi_{i+1} + \frac{3}{8} \phi_i - \frac{7}{8} \phi_{i-1} + \frac{1}{8} \phi_{i-2} \right] - \frac{v}{\Delta x^2} (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0.$$

Da die allgemeine Form einer Vierpunktnäherung von der Ordnung 2 an ϕ_i mit den vier Stützpunkten x_{i+1} , x_i , x_{i-1} , x_{i-2} die Form

$$\phi_i' \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \phi_{i+1} + 3\lambda \phi_i - \left(3\lambda + \frac{1}{2} \right) \phi_{i-1} + \lambda \phi_{i-2} \right]$$

hat, wie später bei der Herleitung des LECUSSO-Verfahrens gezeigt wird, verwendet das QUICK-Verfahren diese Näherung mit dem festen Parameterwert $\lambda = 1/8$.

Die allgemeine Näherung (mit nicht festgelegtem λ) besitzt ein führendes Fehlerglied der Gestalt

$$\Delta x^2 \left\{ \left(\frac{1}{6} - \lambda \right) \phi_i''' \right\},$$

so erhält man für $\lambda = 1/6$ eine Näherung der Ordnung $O(\Delta x^3)$, wie schon erläutert.

3.3 Verfahren mit zwei Punkten stromab

Läßt man die Einschränkung fallen, daß nur ein Punkt stromab benützt wird, so ist mit Recht zu vermuten, daß in dem Falle, daß man maximal mögliche Polynomgenauigkeit verlangt, gegenüber dem vorigen Abschnitt noch weniger geeignete Differenzenverfahren entstehen. Wir betrachten das Beispiel $\ell = 4$ mit den Stützpunkten $i+2, i+1, i, i-1, i-2$. Man findet unmittelbar

$$\phi'_i \approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ -\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\},$$

die Ähnlichkeit mit der zentralen Formel legt nahe anzunehmen, daß diese Formel kaum besser ist als jene. Dennoch wurde sie in der jüngsten Vergangenheit zusammen mit einer Fünfpunktnäherung für den Diffusionsterm verwendet, Saitoh und Hirose [118], 1987.

Ein Weg, brauchbare Differenzenverfahren mit symmetrischen Punktmustern, jedoch nichtsymmetrischen Koeffizientenmustern zu finden, besteht darin, nicht die maximal mögliche Polynomgenauigkeit zu fordern. Dafür gibt es zwei Beispiele mit dem zuvor erwähnten Fünf-Punktemuster. Im einen Falle bedient man sich einer Differenz vierter Ordnung mit dem gleichen Punktmuster,

$$\nabla_i^4 \phi = \phi_{i+2} - 4\phi_{i+1} + 6\phi_i - 4\phi_{i-1} + \phi_{i-2}$$

und addiert $(0.25/\Delta x) \nabla_i^4 \phi$ für $u_i \geq 0$ als sogenannte künstliche Diffusion zur obigen Näherung für ϕ'_i und erhält

$$\phi'_i \approx \frac{1}{16\Delta x} \left\{ \phi_{i+2} - 2\phi_{i+1} + 9\phi_i - 10\phi_{i-1} + 2\phi_{i-2} \right\}.$$

Diese Näherung ist exakt für Polynome vom Grad ≤ 3 .

Beachtet man, daß

$$\nabla_i^4 \phi = \Delta x^4 \left\{ \phi_i^{IV} + O(\Delta x^2) \right\},$$

so hat man in die Näherungsgleichung

$$\frac{u_i}{12\Delta x} \left\{ -\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\} - \frac{v}{\Delta x^2} (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0,$$

welche sich mit den führenden Fehlergliedern in der Form

$$u_i (\phi_i' + \Delta x^4 \cdot \phi_i^V + \dots) - v (\phi_i'' + \frac{\Delta x^2}{12} \cdot \phi_i'' + \dots) = 0$$

schreiben läßt, noch einen Term $1/4 \Delta x^3 \{ \phi_i^{IV} + O(\Delta x^2) \}$ aufgenommen, der von niedrigerer Ordnung ist als das führende Fehlerglied bei der Näherung des Diffusionsgliedes. Diese Methode, welche 1984 von Kawamura und Kuwahara [80] vorgeschlagen wurde, zeigt die Aufnahme künstlicher Diffusivität der Ordnung vier, um eine günstige Form der Koeffizienten der Differenzgleichung zu erreichen. Die obige modifizierte Näherungsformel zeigt wieder Koeffizienten mit alternierenden Vorzeichen. Es ist soviel künstliche Diffusivität vierter Ordnung hinzugefügt - die Autoren haben dazu keine Erklärung gegeben -, daß diese Formel wie nachfolgende Darstellung zeigt, von der Ordnung $O(\Delta x^3)$ ist und alternierende Koeffizientenvorzeichen aufweist:

$$\begin{aligned} \phi_i' &\approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ -\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\} + \frac{1}{12\Delta x} \left\{ 3\phi_{i+2} - 12\phi_{i+1} + 18\phi_i - 12\phi_{i-1} + 3\phi_{i-2} \right\} \\ &= \frac{1}{12\Delta x} \left\{ 2\phi_{i+2} - 4\phi_{i+1} + 18\phi_i - 20\phi_{i-1} + 4\phi_{i-2} \right\} \end{aligned}$$

Würde man eine Näherungsformel maximaler Ordnung verlangen, welche die Punkte mit Koordianten x_{i+2} , x_{i+1} , x_i , x_{i-1} , x_{i-2} umfaßt, so würde man auf die schon eingangs in diesem Abschnitt erwähnte Näherung

$$\phi_i' \approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ -\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\}$$

stoßen. Diese Näherung ist von der Ordnung $O(\Delta x^4)$, sie ist ein Analogon zur zentralen Differenzenapproximation CDS von ϕ_i' von höherer Ordnung und besitzt auch all deren Nachteile. Wie beim Übergang von CDS zu UDS durch Hinzunahme künstlicher Diffusion der Ordnung der ursprünglichen Formel erhält man eine Näherung für ϕ_i' mit denselben Punkten, welche jetzt von der erniedrigten Ordnung $O(\Delta x^3)$ ist.

Ein weiterer Vorschlag, eine Fünf-Punkt-Formel der Ordnung $O(\Delta x^2)$, stammt von Roos [115]. Es läßt sich, außer in den Randpunkten, schreiben als

$$\frac{u_i}{\Delta x} \left\{ \alpha_1 \phi_{i-2} + \alpha_2 \phi_{i-1} + \alpha_3 \phi_i + \alpha_4 \phi_{i+1} + \alpha_5 \phi_{i+2} \right\} - v \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0,$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1/4 - 1/8\alpha + 3/8\beta \\ \alpha_2 &= -\beta \\ \alpha_3 &= 3/4(\alpha + \beta) \\ \alpha_4 &= -\alpha \\ \alpha_5 &= 1/4 + 3/8\alpha - 1/8\beta, \end{aligned}$$

für α und β sind bestimmte Werte aus relativ kleinen Bereichen der (α, β) -Ebene zu wählen, damit das Verfahren "invers-isoton" (Definition dieses Begriffs in 5.4.1) ist.

Schreibt man die geschweifte Klammer als

$$\begin{aligned} \{ \dots \} &= \frac{1}{4}(\phi_{i+2} - \phi_{i-2}) + \alpha \left(\frac{3}{8}\phi_{i+2} - \phi_{i+1} + \frac{3}{4}\phi_i - \frac{1}{8}\phi_{i-2} \right) \\ &+ \beta \left(-\frac{1}{8}\phi_{i+2} + \frac{3}{4}\phi_i - \phi_{i-1} + \frac{3}{8}\phi_{i-2} \right), \end{aligned}$$

so ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \{ \dots \} &= \phi_i' + 2\Delta x^2 \phi_i''' + \alpha \Delta x^2 \left(\frac{3}{8} \nabla_{i+1/2}^3 \phi + \frac{1}{8} \nabla_{i-1/2}^3 \phi \right) \\ &+ \beta \Delta x^2 \left(\frac{3}{8} \nabla_{i-1/2}^3 \phi + \frac{1}{8} \nabla_{i+1/2}^3 \phi \right) + \dots, \end{aligned}$$

woraus die Ordnung $O(\Delta x^2)$ zu ersehen ist. Gleichzeitig erkennt man, daß verschiedene Terme mit Diffusivität der Ordnung drei zu einer zentralen Näherung hinzugefügt werden.

Der vorstehende Teil dieses Kapitels hat neben einigen Verfahren mit Maschen-Reynoldszahlbeschränkungen (CDS, Agarwal, ...) Verfahren beschrieben, die keiner solchen Beschränkung unterliegen. Dies waren einerseits einseitige Näherungen mit $\ell + 1$ Punkten vom Polynomgenauigkeitsgrad ℓ oder andererseits Näherungen mit $\ell + 1$ Punkten und zunächst der eine Bestandteil auch von Polynomge-

nauigkeit ℓ , dieses jedoch vermehrt um einen festen Betrag künstlicher Diffusion der Ordnung ℓ oder $\ell - 1$, so daß die gesamte Differenzenformel dann die Ordnung $\ell - 1$ bzw. $\ell - 2$ hat.

Die im nächsten Abschnitt beschriebenen Verfahren unterliegen dem gleichen Bildungsgesetz, jedoch wird ein angepaßter Betrag künstlicher Diffusion irgendeiner geeigneten Ordnung zur ursprünglichen Formel hinzugefügt. Es stellt sich heraus, daß Anpassung über einen von der örtlichen Maschen-Reynoldszahl $Re_{\Delta x, j}$ abhängigen Faktor geschieht.

3.4 Lokal exakte Differenzenverfahren

Natürlich sind die Koeffizienten in der Differenzengleichung (UDS)

$$Re_{\Delta x, i}(\phi_i - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0$$

mit i veränderlich, da $Re_{\Delta x, i}$ mit i seinen Wert ändern kann. Andererseits beinhaltet die Gleichung wie alle bisher vorgestellten Näherungen starre Approximationen der Form

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$$

und

$$\phi_i'' \approx \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}.$$

Einige Verfahren benutzen Näherungen, in denen entweder ϕ_i' oder ϕ_i'' nicht mit einer einheitlichen Formel approximiert wird. Dies wird nachfolgend am Beispiel des von Allen und Southwell [30] stammenden Verfahrens (ASS) erläutert, das später noch einmal von Il'in [77] und von Spalding [121] in die Diskussion gebracht wurde.

ASS:

Verlangt man, daß in der Dreipunktnäherung

$$\left(Re(x) \frac{d\phi}{dx} - \frac{d^2}{dx^2} \right) \Big|_i \approx A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1}$$

Gleichheit besteht für die Funktionen

$$\begin{aligned} \phi &= 1, \\ \phi &= x \quad \text{und} \\ \phi &= e^{\rho_i x} \quad \text{mit } \rho_i = Re_i = Re(x_i), \end{aligned}$$

so findet man für die Koeffizienten A, B und C die Werte:

$$A = \frac{\rho_i}{2\Delta x} - \frac{1}{\Delta x^2} \frac{\rho_i \Delta x}{2} \coth \frac{\rho_i \Delta x}{2}$$

$$B = \frac{2}{\Delta x^2} \frac{\rho_i \Delta x}{2} \coth \frac{\rho_i \Delta x}{2}$$

$$C = -\frac{\rho_i}{2\Delta x} - \frac{1}{\Delta x^2} \frac{\rho_i \Delta x}{2} \coth \frac{\rho_i \Delta x}{2}.$$

Diese Koeffizienten ergeben sich als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\phi = 1: \quad A + B + C = 0$$

$$\phi = x: \quad A(x_i + \Delta x) + Bx_i + C(x_i - \Delta x) = \rho$$

$$\phi = e^{\rho_i x}: \quad Ae^{\rho_i(x_i + \Delta x)} + Be^{\rho_i x_i} + Ce^{\rho_i(x_i - \Delta x)} = 0,$$

welches nach einigen Vereinfachungen die Form

$$A + B + C = 0$$

$$A - C = \frac{\rho_i}{\Delta x}$$

$$Ae^{-\rho_i \Delta x} + B + Ce^{-\rho_i \Delta x} = 0$$

annimmt.

Die Differenzgleichung für ASS lautet damit (Form 1) in dimensionsgebundener Form

$$\frac{\rho_i \Delta x}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - \frac{\rho_i \Delta x}{2} \coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0$$

oder (Form 2)

$$\frac{\rho_i \Delta x}{2} \left[\left(1 - 2 \coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - 1 \right) \phi_{i+1} + 4 \left(\coth \left(\frac{\rho_i \Delta x}{2} \right) - 1 \right) \phi_i \right. \\ \left. - \left(1 + 2 \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} \right) \right) \phi_{i-1} - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) \right] = 0.$$

Die zweite Form läßt eine Deutung zu, bei der ϕ_i ' auf eine adaptive Weise mit von $\rho_i \Delta x$ abhängigen Koeffizienten näherungsweise berechnet wird, die erste gleichwertige Form läßt die Deutung zu, daß die tatsächlich vorhandene Diffusion

$$\frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}$$

um den Faktor

$$Y_i = \frac{\rho_i \cdot \Delta x}{2} \coth \frac{\rho_i \cdot \Delta x}{2} > 1 \quad .$$

verstärkt wird. Den mit dieser Näherung hinzugekommenen Diffusionsanteil

$$(Y_i - 1) \cdot \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}$$

nennt man "künstliche (oder numerische) Diffusivität" (engl. "artificial diffusivity" oder "artificial viscosity"). Dies wird in Kapitel 4 ausführlich erläutert.

Zu ASS ist noch festzustellen: Da $x \coth x > 1$ für $x \neq 0$, haben die Koeffizienten A, B und C immer alternierendes Vorzeichen. Da für kleine x

$$x \coth x = 1 + \frac{x^2}{3} + O(x^4),$$

läßt sich ASS auch folgendermaßen schreiben:

$$\rho_i \left\{ \phi_i' + \frac{\Delta x^2}{6} \cdot \phi_i''' + \dots \right\} - \left(1 + \frac{\rho_i^2 \cdot \Delta x^2}{12} + \dots \right) \left(\phi_i'' + \frac{\Delta x^2}{12} \cdot \phi_i^{IV} + \dots \right) = 0.$$

Dies verdeutlicht, daß ASS von der formalen Ordnung $O(\Delta x^2)$ ist.

Verfahren, welche $\phi = e^{\rho_i x}$ mit $\rho_i = \text{Re}(x_i)$ im Intervall $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ exakt integrieren, falls $\text{Re}(x)$ in diesem Intervall konstant $= \rho_i$ ist und die Werte von ϕ_i und ϕ_{i+1} und ϕ_{i-1} bekannt sind, heißen lokal exakt. Wäre $\text{Re}(x)$ im ganzen Intervall konstant, so würde ein lokal exaktes Verfahren die korrekte Lösung berechnen.

Verfahren von Samarski:

Ein ASS verwandtes Differenzenschema ist das Verfahren von Samarski [119]. Dieses Verfahren hat ein γ_i der Form

$$\gamma_i = 1 + \frac{\left(\frac{\rho_i \Delta x}{2}\right)^2}{1 + \left|\frac{\rho_i \Delta x}{2}\right|}.$$

Diese Formel verdeutlicht schon, daß

$$\gamma_i = 1 + O(\Delta x^2),$$

d.h. dieses Verfahren ist von zweiter Ordnung in Δx . Außerdem unterscheidet sich dieses γ_i für große $|\rho_i \Delta x|$ wenig von

$$\gamma_i = 1 + \frac{\rho_i \cdot \Delta x}{2}$$

von UDS, wie z.B. in Tabelle 2.3.1 angegeben.

Auch dieses Verfahren hat bezüglich des Vorzeichens alternierende Koeffizienten. Es ist nicht bekannt, für welche Funktionen $\phi = g(x)$ außer $\phi = 1$ und $\phi = x$ dieses Verfahren exakt ist. Es gibt eine Erklärung dafür, wie man sich dieses Verfahren entstanden denken kann (siehe Veldhuizen [128]):

Ausgangspunkt der Überlegung ist UDS, hier für $u_i > 0$:

$$\text{Re}_{\Delta x, i}(\phi_i - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0.$$

Bekanntlich ist der konvektive Term $O(\Delta x)$, da

$$\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \phi_i' - \frac{\Delta x}{2} \phi_i'' + O(\Delta x^2).$$

Um nun durch eine Änderung doch noch ein Verfahren der Ordnung $O(\Delta x^2)$ zu erhalten, kann man links einen Term hinzunehmen, so daß rechts der Summand $(\Delta x/2)\phi_i''$ noch wegfällt. Schreibt man dies jetzt

$$Re_{\Delta x, i} \left\{ (\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{\Delta x^2}{2} \phi_i'' \right\} - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0,$$

so ist diese Näherung von der Ordnung $O(\Delta x^2)$. Ersetzt man ϕ_i'' durch $Re_i \phi_i'$ und setzt noch einmal

$$\phi_i' = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x),$$

so verbleibt bis auf Glieder der Ordnung $O(\Delta x^2)$

$$Re_{\Delta x, i} \left\{ (\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{Re_i}{2} \cdot \Delta x (\phi_i - \phi_{i-1}) \right\} - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0.$$

Dies ist die bei ASS Form 1 entsprechende Schreibweise:

$$Re_{\Delta x, i} \cdot \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right) \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

für das Samarski-Verfahren.

LECUSSO:

Das vom Autor vorgeschlagene LECUSSO-Verfahren [61]–[67] nähert ϕ_i' im Punkt x_i an in der Form

$$\phi_i' = \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=x_i} \approx \frac{1}{\Delta x} (C_1 \phi_{i+1} + C_2 \phi_i + C_3 \phi_{i-1} + C_4 \phi_{i-2}),$$

wobei angenommen wird, daß $u_i > 0$ in dieser Näherungsformel.

Die Forderung, daß diese Näherung exakt gilt, sofern ϕ in dieser Gleichung ein Polynom höchstens 2. Ordnung ist, entspricht drei Bedingungen an die vier Koeffizienten C_i , $i=1, \dots, 4$. Diese Bedingungen entstehen dadurch, daß man $\phi \equiv 1$, $\phi = x$ und $\phi = x^2$ in die Näherungsformel einsetzt. Dies ergibt

$$\begin{aligned}
\text{für } \phi \equiv 1: & \quad 0 = C_1 + C_2 + C_3 + C_4 \\
\text{für } \phi = x: & \quad 1 = 1/\Delta x \{C_1 x_{i+1} + C_2 x_i + C_3 x_{i-1} + C_4 x_{i-2}\} \\
\text{für } \phi = x^2: & \quad 2x_i = 1/\Delta x \{C_1 x_{i+1}^2 + C_2 x_i^2 + C_3 x_{i-1}^2 + C_4 x_{i-2}^2\}.
\end{aligned}$$

Dies sind drei Bedingungen für die vier Koeffizienten C_j . Nimmt man C_4 als frei wählbaren Parameter $C_4 = \Lambda$, so erhält man

$$C_1 = \frac{1}{2} - \Lambda, C_2 = 3\Lambda, C_3 = -(3\Lambda + \frac{1}{2}), C_4 = \Lambda$$

und

$$\phi_i' \approx \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right) \phi_{i+1} + 3\Lambda \phi_i - \left(3\Lambda + \frac{1}{2} \right) \phi_{i-1} + \Lambda \phi_{i-2} \right\}$$

oder nach Umordnen

$$\phi_i' \approx \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} + \Lambda (-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) \right).$$

Diese Näherung für ϕ_i' ist von zweiter Ordnung, wie man aus den Beziehungen

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \right) = \phi_i' + \frac{\Delta x^2}{6} \phi_i''' + \dots$$

und

$$(-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) = -\Delta x^3 \cdot \phi_i''' + \dots$$

ersehen kann.

Mit Einschluß des führenden Fehlergliedes hat man

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} + \Lambda (-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) \right) = \phi_i' + \left(\frac{1}{6} - \Lambda \right) \Delta x^2 \phi_i''' + \dots$$

Man kann hier ein festes Λ wählen, wie dies von einigen Autoren getan wurde. Diese Verfahren wurden schon zuvor behandelt. $\Lambda = 1/8$ ergibt das QUICK-Verfahren von Leonard, $\Lambda = 1/6$ führt auf die Methode von Agarwal, die von dritter Ordnung ist. Für $\Lambda = 1/2$ findet man ein von Atias et al. vorgeschlagenes Verfahren, während $\Lambda = 0$ CDS entspricht.

Approximiert man die Ableitung zweiter Ordnung in der Form

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} \approx \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2},$$

so hat man zunächst

$$\frac{u_i}{\Delta x} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} + \Lambda(-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) \right) - \frac{v}{\Delta x^2} (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0$$

und nach Multiplikation mit $\Delta x^2/v$

$$\begin{aligned} & \left[1 - Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right) \right] \phi_{i+1} - \left[2 + 3\Lambda \cdot Re_{\Delta x, i} \right] \phi_i + \\ & + \left[1 + Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} + 3\Lambda \right) \right] \phi_{i-1} - \Lambda \cdot Re_{\Delta x, i} \cdot \phi_{i-2} = 0. \end{aligned}$$

Für die Entwicklung des LECUSSO-Verfahrens waren mehrere Dinge von Bedeutung:

1. Die Erfahrungen mit dem Versagen von CDS und anderer Verfahren in der Vergangenheit einschließlich der Forderung nach positiven Einfluß-Koeffizienten, Forsythe und Wasow [16], legten nahe, Λ so zu wählen, daß der Koeffizient von ϕ_{i+1} in obiger Näherung unbedingt nichtnegativ sein müsse. Dies bedeutet, daß

$$1 - Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right) \geq 0,$$

oder

$$\Lambda \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}}$$

sein sollte.

Diese Bedingung kann für festes Λ nur für $\Lambda = 1/2$ für alle $Re_{\Delta x, i}$ erfüllt werden. In Anlehnung an die Verfahren von Allen-Southwell und Samarski ist es nur ein kleiner Schritt zu einem Λ , das von $Re_{\Delta x, i}$ abhängt. Die einfachste Möglichkeit wäre, für $Re_{\Delta x, i} > 2$

$$\Lambda = \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}}$$

zu setzen.

Ähnlich wie beim von Allen-Southwell vorgeschlagenen Verfahren ist eine geschicktere Wahl von Λ möglich. Man hat zunächst zu beachten, daß $\phi(x) = e^{\text{Re}_0 \cdot x}$ eine Lösung von $\phi'' - \text{Re}_0 \cdot \phi' = 0$ mit konstantem $\text{Re}(x) = \text{Re}_0$ darstellt.

Für das LECUSSO-Verfahren wird $\Lambda = \Lambda_i$ im Punkte x_i so gewählt, daß das Verfahren lokal exakt ist, d.h. die Differenzgleichung würde die exakte Lösung $\phi(x) = e^{\text{Re}_i \cdot x}$ liefern, wenn $\text{Re}(x)$ im gesamten Bereich den Wert Re_i hätte. Dies gibt die Möglichkeit, Λ_i durch Einsetzen von $\phi(x) = e^{\text{Re}_i \cdot x}$ in die Differenzgleichung zu bestimmen.

Es ist

$$\Lambda_i = \frac{(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) - \frac{\text{Re}_{\Delta x, i}}{2}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1})}{\text{Re}_{\Delta x, i}(-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2})}$$

und mit $\phi_{i+1} = e^{\text{Re}_i(x_i + \Delta x)}$, $\phi_i = e^{\text{Re}_i x_i}$, usw. erhält man mit der Abkürzung $r = e^{\text{Re}_{\Delta x, i}}$

$$\Lambda_i = \frac{r}{\text{Re}_{\Delta x, i}} \cdot \frac{\frac{1}{2} \text{Re}_{\Delta x, i}(r+1) - (r-1)}{(r-1)^2}$$

oder, etwas umgeformt,

$$\Lambda_i = \frac{1}{2} \cdot \frac{r(r+1)}{(r-1)^2} - \frac{1}{\text{Re}_{\Delta x, i}} \cdot \frac{r}{r-1}$$

Eine weitere Schreibweise ergibt sich mit $r' = e^{-\text{Re}_{\Delta x, i}}$ zu

$$\Lambda_i = \frac{1}{\text{Re}_{\Delta x, i}} \cdot \frac{\frac{1}{2} \text{Re}_{\Delta x, i}(1+r') - (1-r')}{(r'-1)^2}$$

Das LECUSSO-Verfahren stellt die Verbindung zwischen Upwind-Vierpunktformeln mit starren Koeffizienten wie Leonard- oder Agarwal-Verfahren und dem lokal exakten Verfahren von Allen-Southwell dar.

Die Schreibweise

$$\Lambda_i = \frac{1}{2} \cdot \frac{1+r'}{(1-r')^2} - \frac{1}{Re_{\Delta x,i}} \cdot \frac{1}{(1-r')}, r' = e^{-Re_{\Delta x,i}}$$

ermöglicht schnell den Nachweis, daß der kritische Koeffizient von ϕ_{i+1} in dieser Gleichung positiv ist.

Er hat den Wert

$$\begin{aligned} & 1 - Re_{\Delta x,i} (1/2 - \Lambda_i) = \\ & 1 + Re_{\Delta x,i} \left(\frac{1}{2} \frac{1+r'}{(1-r')^2} - \frac{1}{Re_{\Delta x,i}} \frac{1}{(1-r')} - \frac{1}{2} \right) = \\ & = \frac{(1-r')^2 + \frac{1}{2} Re_{\Delta x,i} (1+r') - (1-r') - \frac{1}{2} (1-r')^2 Re_{\Delta x,i}}{(1-r')^2} \\ & = \frac{(1-2r'+r'^2-1+r') + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2} (1+r'-1+2r'+r'^2)}{(1-r')^2} \\ & = \frac{-r'+r'^2 + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2} [3r'-r'^2]}{(1-r')^2} \\ & = \frac{r'}{(1-r')^2} \left[Re_{\Delta x,i} + \left(\frac{Re_{\Delta x,i}}{2} - 1 \right) (1-r') \right], \end{aligned}$$

und dieses ist für alle $Re_{\Delta x,i} > 2$ positiv. Für $Re_{\Delta x,i} \leq 2$ erfolgt ein entsprechender Nachweis mit Reihenentwicklungen.

Das LECUSSO-Verfahren für $Re_i < 0$ sieht folgendermaßen aus:

$$\phi_i' = \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \right) + \Lambda_i (\phi_{i-1} - 3\phi_i + 3\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) \right]$$

Man findet für Λ_i

$$\Lambda_i = \frac{1}{(-Re_{\Delta x, i})} \frac{(-\frac{1}{2}Re_{\Delta x, i})(1+r') - (1-r')}{(1-r')^2},$$

mit $r' = e^{Re_i \cdot \Delta x}$, so daß man außer für $Re_i = 0$ die Formel

$$\Lambda_i = \frac{1}{|Re_{\Delta x, i}|} \frac{\frac{1}{2}|Re_{\Delta x, i}|(1+r') - (1-r')}{(1-r')^2}$$

mit $r' = e^{-|Re_{\Delta x, i}|}$ verwenden kann, wobei

$$\dot{\phi}_i \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \right) + \Lambda_i (-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) \right] \quad \text{für } Re_i > 0$$

$$\dot{\phi}_i \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \right) + \Lambda_i (\phi_{i-1} - 3\phi_i + 3\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) \right] \quad \text{für } Re_i < 0.$$

Für $Re_i = 0$ ergibt sich $\Lambda_i = 1/12$.

$$Re_i \cdot \text{Näherung für } \dot{\phi}_i - \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

$$\dot{\phi}_i \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \right) + \Lambda_i (-\phi_{i+1} + 3\phi_i - 3\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) \right] \quad \text{für } Re_i > 0,$$

$$\dot{\phi}_i \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \right) + \Lambda_i (\phi_{i-1} - 3\phi_i + 3\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) \right] \quad \text{für } Re_i < 0,$$

$$\Lambda_i = \frac{1}{|Re_{\Delta x, i}|} \cdot \frac{\frac{1}{2}|Re_{\Delta x, i}|(1+r') - (1-r')}{(1-r')^2}$$

mit $r' = \exp\{-|Re_{\Delta x, i}|\}$.

Tab. 3.1: LECUSSO-Verfahren

Die Interpretation von LECUSSO als simples CDS-Verfahren, ergänzt durch einen bestimmten Betrag künstlicher Diffusion, läßt folgende Deutung zu: Die Ordnung der hinzugefügten künstlichen Diffusivität ist drei und daher wird die Ordnung des Basisverfahrens, hier ist das CDS, durch die Hinzunahme künstlicher Diffusivität nicht herabgesetzt, im Gegensatz zum gewöhnlichen Upwind-Verfahren 1. Ordnung (siehe Kapitel 4 über künstliche Diffusivität). Da die Konvektions-Diffusionsgleichung physikalische Diffusivität der Ordnung zwei beinhaltet, scheint es plausibel, künstliche Diffusivität nur von der Ordnung drei oder höher zuzulassen. Durch die Forderung, daß LECUSSO lokal exakt ist, wird dann der Betrag der künstlichen Diffusivität durch die Wahl von Λ_i festgelegt.

Insofern ist das LECUSSO-Verfahren optimal, als die Form der hinzugefügten künstlichen Diffusivität proportional zu einer Differenz 3. Ordnung und damit von der Ordnung drei ist und so die Gesamtordnung zwei des Verfahrens nicht zerstört.

Verwandt mit LECUSSO ist ein von Braga [39], [40] vorgeschlagenes Verfahren, das

$$\Lambda = \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}}$$

wählt, um die Ungleichung

$$\Lambda \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}}$$

zu erfüllen.

LSUDS (Leonards Super Upwind Difference Scheme) [33]:

Für LSUDS lautet die Differenzennäherung ($Re_i > 0$):

$$\left(Re(x_i) \frac{d\phi}{dx} - \frac{d^2\phi}{dx^2} \right) \Big|_i \approx A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1} + D\phi_{i-2} + E\phi_{i-3}$$

oder

$$\approx A'\phi_{i+1} + B'\phi_i + C'\phi_{i-1} + D'\phi_{i-2} + E'\phi_{i-3} - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i).$$

Die A', B', C', D' und E' sind so gewählt, daß

$$\operatorname{Re}(x_i) \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx A'\phi_{i+1} + B'\phi_i + C'\phi_{i-1} + D'\phi_{i-2} + E'\phi_{i-3}$$

exakt gilt, falls ϕ ein Polynom in x höchstens vom Grade 3 ist. Weiterhin wird verlangt, daß die Gesamtapproximation lokal exakt und damit für $\phi = \exp(\operatorname{Re}_i \cdot x)$ exakt ist. Man hat daher bei LSUDS die Besonderheit, daß die Approximation des konvektiven Terms von der Fehlerordnung $O(\Delta x^3)$ ist, während die Näherung

$$\frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}$$

für den diffusiven Teil der Gleichung nur die Ordnung $O(\Delta x^2)$ besitzt.

Die expliziten Ausdrücke für die A', ... E' ergeben sich folgendermaßen: Da die Näherung für

$$\operatorname{Re}(x_i) \cdot \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i$$

exakt ist für Polynome vom Grade ≤ 3 (5 Parameter A', B', ..., E' und vier Bedingungen: ein freier Parameter) kann sie als Linearkombination des Agarwalschen Verfahrens und von LUDS aufgefaßt werden. Dies heißt, die allgemeine Näherung heißt ($\operatorname{Re}(x_i) > 0$)

$$\alpha \cdot [\text{Agarwal}] + (1 - \alpha) \cdot \text{LUDS} - \sqrt{\frac{(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)}{\Delta x^2}} = 0,$$

oder ausgeschrieben,

$$\frac{u_i}{\Delta x} \left\{ \alpha \cdot \left[\frac{1}{3}\phi_{i+1} + \frac{1}{2}\phi_i - \phi_{i-1} + \frac{1}{6}\phi_{i-2} \right] + (1 - \alpha) \left[\frac{11}{6}\phi_i - \frac{18}{6}\phi_{i-1} + \frac{9}{6}\phi_{i-2} - \frac{2}{6}\phi_{i-3} \right] \right\} - \sqrt{\frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}} = 0.$$

Da α so gewählt sein soll, daß Gleichheit besteht für $\phi = e^{\rho_i x}$, $\rho_i = \operatorname{Re}(x_i)$, erhält man mit $q = \rho_i \cdot \Delta x$

$$\alpha = \frac{6e^q - (12 + 11\rho_i) + (16 + 18\rho)e^{-q} - 9\rho e^{-2q} + 2\rho e^{-3q}}{2\rho_i(e^q - 4 + 6e^{-q} - 4e^{-2q} + e^{-3q})}$$

oder

$$\alpha = \frac{+6 - (11\rho + 6)e^{-q} + 7\rho e^{-2q} - 2\rho e^{-3q}}{2\rho_i(1 - e^{-q})^3}$$

NONAME:

Von den in der Literatur bisher nicht vorgeschlagenen Differenzenverfahren wurde das Verfahren, welches 5 Punkte mit den Indizes $i+2, \dots, i-2$ benützt und für die Funktionen $\phi = \{1, x, x^2, \exp(\text{Re}_i x), x \cdot \exp(\text{Re}_i x)\}$ exakt ist, in die numerischen Tests einbezogen. Daher wird die zugehörige Differenzgleichung formelmäßig angegeben. Sie lautet

$$[A\phi_{i+2} + B\phi_{i+1} + C\phi_i + D\phi_{i-1} + E\phi_{i-2}] = 0$$

mit $\rho = \text{Re}_i$, $c = \exp(\rho \cdot \Delta x)$ und

$$A = \frac{(\rho - 2)c^4 - (2\rho - 8)c^3 - 12c^2 + (2\rho + 8)c - (\rho + 2)}{2(c-1)^6}$$

$$B = \frac{(2\rho - 2)c^5 - 6(\rho - 1)^4 + (8\rho - 4)c^3 - (8\rho + 4)c^2 + (6\rho + 6)c - 2\rho - 2}{(c-1)^6}$$

$$C = \frac{(3\rho - 2)c^6 - 6\rho c^5 + (3\rho + 18)c^4 - 32c^3 - (3\rho - 18)c^2 + 6\rho c - 3\rho - 2}{2(c-1)^6}$$

$$D = - \frac{(2\rho - 2)c^6 + (-6\rho + 6)c^5 + (8\rho - 4)c^4 + (-8\rho - 4)c^3 + (6\rho + 6)c^2 - (2\rho + 2)0}{(c-1)^6}$$

$$E = \frac{(\rho - 2)c^6 + (-2\rho + 8)c^5 - 12c^4 + (2\rho + 8)c^3 - (\rho + 2)c^2}{2(c-1)^6}$$

Ein weiteres exponentielles Verfahren in Erhaltungsform wurde von Berger [35] vorgeschlagen. Es wurde in Günther [64] mit untersucht. Da die Testergebnisse

nicht so gut sind im Vergleich zu anderen Verfahren ähnlicher Bauart, wird hier auf eine ausführliche Beschreibung verzichtet.

3.5 Weitere Differenzenverfahren

Es gibt mehrere Differenzenverfahren, die sich nicht in die in den vorstehenden Abschnitten beschriebenen Klassen einordnen lassen. Dazu gehören

- Verfahren wie Skew Upwind von Raithby [113], das von vorneherein für zwei oder mehr Dimensionen formuliert ist,
- das Verfahren von Gushchin und Shchennikov [68],
- Verfahren wie FAS [43], welche auch in 2-d eine Art lokal angepaßten Neun-Punkte-Differenzenstern verwenden,
- die OCI-Verfahren (OCI = engl. "Operator compact implicit"), Berger et al. [36].

Skew upwind

Dieses Verfahren ist von Grunde auf mehrdimensional. Es werden im Gegensatz zu UDS und CDS in 2-d auch schräg benachbarte Punkte, z.B. mit Index $(i+1, j+1)$, in die konvektive Näherung miteingebaut. Diese Art der Näherung scheint auch plausibel, wenn die Strömung in einem Winkel von etwa 45° zu den Koordinatenachsen verläuft. Dieses Verfahren ist so formuliert, daß es nicht frei von gelegentlichen Oszillationen ist. Einige neuere Bearbeiter haben das Konzept von Raithby [113] so weiterentwickelt, daß die Oszillationen nicht mehr auftauchen, z.B. Hassan et al. [57] oder Patel et al. [108]. Andererseits zeigt sich bei diesen Verfahren, daß die an anderer Stelle angesprochene "falsche Diffusion" in gedämpfter Form noch vorhanden ist.

Die schlechten Erfahrungen früherer Autoren, z.B. Hassan et al. [57], welche Skew Upwind numerisch getestet haben, waren der Anlaß, dieses einmal zeitweilig angesehene Verfahren nicht weiter zu untersuchen. Die Details zu diesem Verfahren sind in Raithby [113] angegeben.

Verfahren von Gushchin und Shchennikov

Die eindimensionale Form des Verfahrens von Gushchin und Shchennikov lautet [68]:

$$u_{i-1/2} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} - \frac{\nu}{2} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i - \phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{\Delta x^2} = 0 \quad \text{für } u_{i-1/2} \geq 0$$

und

$$u_{i+1/2} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \frac{\nu}{2} \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1} - \phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad \text{für } u_{i+1/2} \leq 0.$$

Es müssen jeweils die Maschen-Reynoldszahlen

$$Re_{\Delta x, i+1/2} = \frac{u_{i+1/2} \cdot \Delta x}{\nu}$$

im Betrag $\geq 1/2$ sein.

- a) Da sich die beiden unterschiedenen Fälle dem ersten Augenschein nach nicht ergänzen, ist eine Erklärung dazu notwendig. Es kann sowohl $u_{i-1/2} > 0$, $u_{i+1/2} < 0$ als auch $u_{i-1/2} < 0$, $u_{i+1/2} > 0$ gelten. Im erstgenannten Fall hätte man für den Punkt x_i zwei Gleichungen, im zweiten Fall keine Gleichung. Da das Verfahren verlangt, daß die zugehörige Maschen-Reynoldszahl, hier entweder

$$\frac{u_{i+1/2} \cdot \Delta x}{\nu}$$

oder

$$\frac{u_{i-1/2} \cdot \Delta x}{2},$$

im Betrag größer oder gleich $1/2$ ist und andernfalls CDS verwendet wird, kann man annehmen, daß bei der geschilderten Situation, einem Vorzeichenwechsel von u in der Nähe des Punktes x_i , auf jeden Fall CDS verwendet wird und damit zum Punkt x_i eine Gleichung besteht.

- b) Bemerkenswert bei diesem Verfahren ist auf jeden Fall, daß dieses Verfahren eine Reynoldszahlbeschränkung nach unten hat.
- c) Bei einer Verwendung dieses Verfahrens benutzt man plausiblerweise für $|Re_{\Delta x, i-1/2}| < a$ mit $1/2 \leq a \leq 2$ das zentrale Differenzverfahren CDS. Dies hat jedoch bei praktischen Anwendungen den Nachteil, daß man sowohl Geschwindigkeiten u_i zu ganzzahligen Indizes wie auch zu halbzahligen Indizes, — für $u_{i-1/2}$ —, benötigt. Diese Komplikation spricht gegen eine Verwendung dieses Verfahrens in praktischen Rechnungen.

- d) Die Ordnung des Verfahrens ist $O(\Delta x^2)$. Dies leuchtet unmittelbar ein, wenn man die Differenzgleichung als Näherung im Punkte $x_{i-1/2}$ auffaßt. Es ist einerseits

$$u \cdot \phi' \Big|_{i-1/2} = u_{i-1/2} \cdot \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

und wegen

$$\phi_i'' = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

$$\phi_{i-1}'' = \frac{\phi_i + \phi_{i-2} - 2\phi_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

sowie

$$\phi_{i-1/2}'' = \frac{1}{2} (\phi_i'' + \phi_{i-1}'') + O(\Delta x^2)$$

gilt auch

$$\phi_{i-1/2}'' = \frac{1}{2} \frac{\phi_{i+1} - \phi_i - \phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2).$$

- e) Dieses Verfahren benützt vier Stützpunkte und zeigt keine alternierende Eigenschaft der Koeffizienten der Differenzgleichung, wie man aus der Schreibweise (für $u_{i-1/2} > 0$)

$$-\phi_{i+1} + (2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2} + 1) \phi_i - (2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2} - 1) \phi_{i-1} - \phi_{i-2} = 0$$

ersieht. Die Bedingung $\operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2} \geq 1/2$ stellt sicher, daß das Vorzeichen des Koeffizienten von ϕ_{i-1} entgegengesetzt ist zum Vorzeichen des Koeffizienten von ϕ_i .

So wie das Verfahren von Gushchin und Shchennikov als symmetrische Differenzgleichung um den Punkt $x_{i-1/2}$ für $u_{i-1/2} > 0$ aufgefaßt werden kann, läßt sich für $u_{i-1/2, j-1/2} > 0$ und $v_{i-1/2, j-1/2} > 0$ eine 2-d-Variante als symmetrische Form um den Punkt mit den Koordinaten $x = x_{i-1/2}$ und $y = y_{j-1/2}$ bilden. Dies ergibt für $\Delta x = \Delta y$

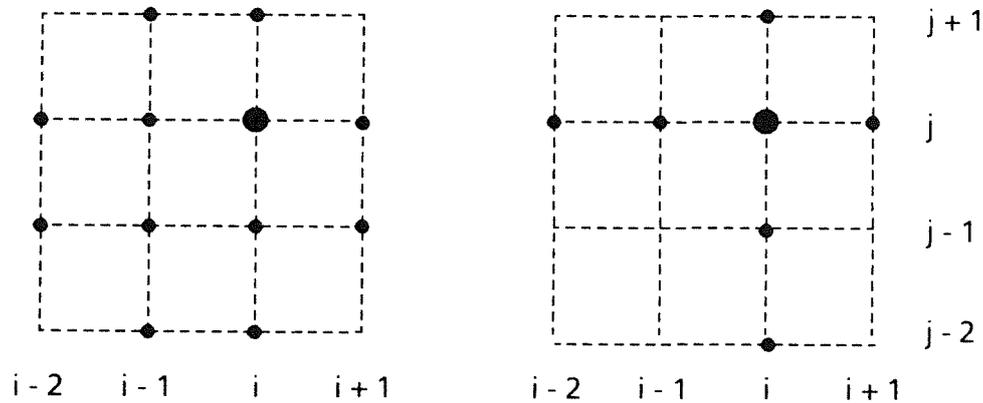


Abb. 3.5.1 Punktemuster der beiden zweidimensionalen Verallgemeinerungen des Verfahrens von Gushchin-Shchennikov

$$2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2, j-1/2} \cdot [\phi_{i, j-1/2} - \phi_{i-1, j-1/2}] + 2 \operatorname{Re}_{\Delta y, i-1/2, j-1/2} [\phi_{i-1/2, j} - \phi_{i-1/2, j-1}]$$

$$- (\phi_{i+1/2, j-1/2} - 2\phi_{i-1/2, j-1/2} + \phi_{i-3/2, j-1/2}) - (\phi_{i-1/2, j+1/2} - 2\phi_{i-1/2, j-1/2} + \phi_{i-1/2, j-3/2}) = 0,$$

wobei die Werte mit den halbzahlige Indizes durch arithmetische Mittelung zu bilden sind, z.B. $\phi_{i, j-1/2} = 1/2 (\phi_{i, j} + \phi_{i, j-1})$, usw. Setzt man alle Werte in Punkten mit ganzen Indizes ein, so erhält man mit Koeffizienten $\neq 0$ in den 12 gekennzeichneten Punkten in der Abbildung 3.5.1.

$$\begin{aligned} & - \phi_{i+1, j} + \\ & \phi_{i, j} (1 + 2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2, j-1/2} + 1 + 2 \operatorname{Re}_{\Delta y, i-1/2, j-1/2}) + \\ & \phi_{i-1, j} (1 - 2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2, j-1/2} + 1 + 2 \operatorname{Re}_{\Delta y, i-1/2, j-1/2}) \\ & - \phi_{i-2, j} \\ & - \phi_{i+1, j-1} \\ & + \phi_{i-1, j-1} (+ 1 + 2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2, j-1/2} + 1 - 2 \operatorname{Re}_{\Delta y, i-1/2, j-1/2}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \phi_{i-1,j-1} (+ 1 - 2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2, j-1/2} + 1 - 2 \operatorname{Re}_{\Delta y, i-1/2, j-1/2}) \\
& - \phi_{i-2, j-1} \\
& - \phi_{i, j+1} \\
& - \phi_{i-1, j+1} \\
& - \phi_{i, j-2} \\
& - \phi_{i-1, j-2} = 0.
\end{aligned}$$

Aus dieser Darstellung ist zu erkennen, daß der Koeffizient von $\phi_{i,j}$ positiv und fast alle übrigen Koeffizienten für $\operatorname{Re}_{\Delta x/\Delta y, i-1/2, j-1/2} > 1/2$ negativ sind mit zwei Ausnahmen: Sowohl das Vorzeichen von $\phi_{i-1,j}$ als auch das Vorzeichen $\phi_{i,j-1}$ kann positiv werden. Da es sich dabei um Koeffizienten zu Punkten handelt, die dem zentralen Punkt (x_i, y_i) direkt benachbart sind, ist zu erwarten, daß diese 2-d-Verallgemeinerung des Verfahrens von Gushchin und Shchennikov nicht frei von örtlichen Oszillationen ist.

Als Alternative bietet sich an, mit $u_{i-1/2,j}$ und $v_{i,j-1/2}$ (alle Geschwindigkeitskomponenten \geq vorausgesetzt) einfach eine Addition (Superposition) der jeweiligen eindimensionalen Differenzenausdrücke zu verwenden, wie dies in Abschnitt 3.10 für allgemeine Differenzenverfahren beschrieben wird. Dies ergibt

$$\begin{aligned}
& 2 \operatorname{Re}_{\Delta x, i-1/2, j} [\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}] + 2 \operatorname{Re}_{\Delta y, i, j-1/2} [\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}] - \\
& - [\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j} - \phi_{i-1,j} + \phi_{i-2,j}] - [\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j} - \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j-2}] = 0,
\end{aligned}$$

wobei hier ein Differenzenstern mit insgesamt nur sieben Punkten auftaucht.

Finite Analytic Method

Methoden, die ähnlich dem Verfahren von Allen-Southwell von einer Art lokal exakter Lösung der Differentialgleichung ausgehen, gibt es mehrere. Zu diesen gehört die "Finite Analytic Method", die von Chen et al. [43] entwickelt wurde und in 2-d einen Neunpunktstern mit lokal berechneten Koeffizienten benützt. Diese Differenzgleichungen liefern stabile und genaue Ergebnisse, sie sind je-

doch schwierig zu programmieren und für Produktionsrechnungen zu aufwendig, siehe z.B. Patankar [106] oder Günther [64].

OCI-Verfahren

Zu den fortgeschrittenen Methoden zur Lösung von Konvektions-Diffusionsgleichungen mittels Differenzenverfahren gehören die Schemata, die im englischsprachigen Raum als "operator compact implicit" (= OCI) bezeichnet werden. Eine systematische Darstellung bis etwa 1980 ist in dem Buch von HIRSCH [6], Abschnitt 4.3, enthalten. Der Grundgedanke ist nachfolgend beschrieben: Es sei der Einfachheit halber eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung mit einem Quellterm $g(x)$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = g(x)$$

gegeben. Um diese DGL statt mit einem Verfahren zweiter Ordnung mit einem expliziten Verfahren der Ordnung vier zu lösen, würde man auf herkömmliche Weise die bekannte Näherung zweiter Ordnung

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_i = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

durch eine explizite symmetrische 5-Punkt-Näherung der Form

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} \approx \frac{1}{12\Delta x^2} \left\{ \phi_{i+2} - 16\phi_{i+1} + 30\phi_i - 16\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\} + O(\Delta x^4)$$

ersetzen, wo dies möglich ist. Das entsprechende OCI-Verfahren würde nun nicht die Gleichung

$$\frac{1}{12} (\phi_{i+2} - 16\phi_{i+1} + 30\phi_i - 16\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) = g_i$$

lösen, sondern

$$\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} = \frac{1}{12} (g_{i+1} + 10g_i + g_{i-1}),$$

von der gezeigt werden kann, daß sie ebenfalls von der Ordnung $O(\Delta x^4)$ ist. In dem hier gewählten sehr einfachen Beispiel ist der rechnerische Aufwand zur Lösung der OCI-Gleichung weniger aufwendig, da nach der Multiplikation des Vektors mit Komponenten g_i mit der Tridiagonalmatrix $(1/12, \underline{10/12}, 1/12)$ nur ein Tridiagonalsystem gelöst werden muß. Im allgemeinen verlangen die OCI-Näherungen, wenn sie bei komplexeren Problemen verwendet werden, einen wesentlich größeren Rechenaufwand. Teilweise bestehen bei mehrdimensionalen Fragestellungen Unklarheiten über die Art des Rechenganges.

Im Falle einer Gleichung erster Ordnung

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i = g(x)$$

ist die Näherung zweiter Ordnung bekanntlich

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2).$$

Die explizite symmetrische Näherung 4. Ordnung lautet

$$\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{1}{6} (g_{i-1} + 4g_i + g_{i+1}).$$

Natürlich sind die beiden beschriebenen impliziten Beispiele einfach gewählt, um die Grundidee zu erläutern.

Um die Schwierigkeiten bei praktischen Problemen zu verdeutlichen, schreiben wir die obige OCI-Näherung für ϕ''_i noch einmal in der Form

$$V\phi = B \cdot g.$$

mit $V = (+ 1/\Delta x^2, \underline{- 2/\Delta x^2}, 1/\Delta x^2)$, $B = (1/12, \underline{10/12}, 1/12)$, Matrixelemente am Rande mit Indizes 0 oder $n + 1$ sollen den Wert Null haben.

Die explizite Schreibweise

$$B^{-1}V\phi = g$$

macht deutlich, daß die Matrix B^{-1} und damit auch der explizite Operator $B^{-1}V$ voll besetzt ist. Zunächst sind die Matrizen V als M-Matrix und B^{-1} nicht-negativ, von mehr theoretischem Interesse ist die Form von B^{-1} und von $B^{-1}V$. Wenn wir einmal annehmen, daß diese Differenzgleichung keine Oszillationen erzeugt wie das Gleichungssystem für das explizite Einzelpunktverfahren, so ist bemerkenswert, daß B^{-1} und $B^{-1}V$ Matrizen sind, deren Diagonalen alternierende Vorzeichen haben, d.h. die Hauptdiagonale ist positiv, die beiden Nebendiagonalen sind negativ usw.

Die zuvor angesprochenen Schwierigkeiten treten z.B. auf, wenn mehrdimensionale Probleme mit dieser Methode gelöst werden sollen. Bisher konnten diese Schwierigkeiten (nur) teilweise umgangen werden, indem man mit "fractional time-step"-Methoden [28] gearbeitet hat, bei denen die Aufgabe in eine Folge eindimensionaler Teilaufgaben umgewandelt wird.

Wird diese Methode im Eindimensionalen auf eine Konvektions-Diffusionsgleichung angewendet, so findet man ähnlich wie bei CDS eine Maschen-Reynoldszahlbeschränkung, deren Verletzung auf oszillierende Lösungen [45] führt. Ähnlich dem Verfahren z.B. von Samarski, welches $O(\Delta x^2)$ ist, lassen sich besser angepasste Differenzgleichungen vom OCI-Typ der Ordnung $O(\Delta x^4)$ bilden, die für Maschen-Reynoldszahlen jeglicher Größe Lösungen ohne Oszillationen bringen [36].

Das Verfahren von Lorenz [103], das von ähnlicher Bauart ist, kann folgendermaßen formuliert werden ($\rho = \text{Re}_{\Delta x, i/2}$):

$$\frac{v}{\Delta x^2} \left\{ -\rho \coth\left(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i\right) + \rho\left(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}\right) \right\} =$$

$$\beta_{-}(\rho)g_{i-1} + \beta_0(\rho)g_i + \beta_{+}(\rho)g_{i+1}$$

mit

$$\beta_{-}(\rho) = \frac{\frac{1}{2} \left(\coth \rho - \frac{1}{\rho} \right)}{1 - e^{-2\rho}}, \quad \beta_{+}(\rho) = e^{-2\rho} \beta_{-}(\rho)$$

$$\beta_0(\rho) = 1 - \beta_{-}(\rho) - \beta_{+}(\rho).$$

Ebenso gibt es ein dem Schema von Allen-Southwell entsprechendes Schema vom exponentiellen Typ, Leventhal [101]. Die erwähnten Schemata sind alle in Konvektionsform.

Das der Näherung nach Atias et al. [32]

$$\frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right\} = g_i$$

entsprechende OCI-Schema der Ordnung $O(\Delta x^2)$ für die Gleichung $\phi' = g$ ist nach Hirsh und Ferguson [73]

$$\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \frac{1}{2} (g_i + g_{i-1}).$$

Setzt man $D^- \phi_i = (\phi_i - \phi_{i-1})/\Delta x$, so läßt sich das Verfahren von Atias et al. schreiben als

$$\left(1 + \frac{\Delta x}{2} D^- \right) D^- \phi_i = g_i,$$

während das OCI-Schema die Form

$$D^- \phi_i = \left(1 - \frac{\Delta x}{2} D^- \right) g_i$$

annimmt, wobei sich der rechts stehende Operator für genügend kleine Δx als abgebrochene Inverse von $(1 - \Delta x/2 D^-)$ auffassen läßt,

$$\left(1 - \frac{\Delta x}{2} D^- \right)^{-1} = \left(1 + \frac{\Delta x}{2} D^- + \dots \right).$$

Wäre diese Reihe auf der rechten Seite nach dem zweiten Summanden abgebrochen, wären beide Verfahren identisch.

Wendet man die OCI-Näherung auf die Konvektions-Diffusionsgleichung $Re\phi' = \phi''$ an, so ergibt sich

$$Re_i \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \frac{1}{2} \left(\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{\Delta x^2} \right),$$

was beinahe das Verfahren von Gushchin-Shchennikov darstellt, nur steht hier Re_i statt $Re_{i-1/2}$.

Wird die Gleichung $(1 - \Delta x/2 D^-)^{-1} D^- \phi_i = 0$ voll ausgeschrieben, so erhält man

$$\frac{1}{\Delta x} \left\{ 2\phi_i - 4\phi_{i-1} + 4\phi_{i-2} - \dots \pm 4\phi_0 \right\} = g_i.$$

Die links stehende einseitige Näherung für ϕ_i' stellt, wie schon bei anderen Beispielen angetroffen, ein Schema mit alternierenden Koeffizientenvorzeichen dar. Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß die OCI-Verfahren die Möglichkeit bieten, durch implizite Behandlung eines vorhandenen Quellterms in einer Differentialgleichung eine höhere Fehlerordnung in Δx zu erreichen. Für die Konvektions-Diffusionsgleichung sind OCI-Verfahren der Ordnung $O(\Delta x^4)$ ohne Maschen-Reynoldszahlbedingung vorgeschlagen worden, diese sind jedoch für mehrdimensionale Problemstellungen schwierig zu programmieren. Das OCI-Verfahren von Berger et al. [36] wurde in numerische Testrechnungen nach dem Erscheinen von [64] aufgenommen und hat gute Ergebnisse gebracht. Zum dafür benutzten Lösungsverfahren ist anzumerken, daß dessen Verwendung bei Produktionsrechnungen nicht vertretbar wäre. Dies sei nachfolgend kurz beschrieben. Für beide Koordinatenrichtungen wurde durch Matrixinversion die explizite Form des entsprechenden Operators (mit voll besetzter Matrix) bestimmt und in die 2-d Formulierung eingesetzt. In der Schreibweise dieses Abschnitts wurde jeweils aus $V_x \phi = B_x g_x$ und $V_y \psi = B_y g_y$ die Matrizen $B_x^{-1} V_x$ und $B_y^{-1} V_y$ berechnet und dann das 2-d-Problem

$$(B_x^{-1} V_x + B_y^{-1} V_y) \phi = g$$

numerisch gelöst. Um den Rechenaufwand in vernünftigen Grenzen zu halten, wurden diese Rechnungen nur für Diskretisierungen von 11·11 Punkten durchgeführt.

3.6 Gesichtspunkte zur systematischen Einordnung der Differenzverfahren

Nachfolgend werden die verschiedenen Ansätze bei der Formulierung von Differenzennäherungen für die Konvektions-Diffusionsgleichung zusammengestellt. Anlaß dazu ist, daß die in den vorigen Abschnitten beschriebenen, aus der Literatur bekannten Verfahren nach verschiedenen Gesichtspunkten geordnet werden können. Dazu gehören beispielsweise die Fehlerordnungen und die Punktmuster.

- A) Kennzeichen einer jeden Differenzennäherung ist, daß ein Differentialausdruck $D(\phi)$ für die Funktion $\phi(x)$ in einem Punkt x_i als gewichtete Summe von Funktionswerten in x_i und benachbarten Punkten angenähert wird. In den einfachsten Fällen werden jeweils getrennte Näherungen für ϕ_i' und für ϕ_i'' verwendet. Es gibt jedoch auch gemeinsame Ansätze, d.h. es wird der Differentialausdruck $(\text{Re}(x) \cdot \phi' - \phi'')_i$ als gewichtete Summe von Funktionswerten z.B. der Form $A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1}$ angenähert, wobei noch offen ist, ob die Koeffizienten A, B und C auf einfache oder komplizierte Weise von $\text{Re}(x)$ (im Punkte x_i oder auch in anderen Punkten) abhängen.
- B) Die Anschauung läßt vermuten, daß Näherungen umso besser sind, je aufwendiger sie sind. Daher scheint es plausibel, daß Näherungen mit der gleichen Approximationsidee, z.B. für möglichst viele Polynome exakt zu sein, und mehr Punkten auch genauer sein müßten. Daneben spielt die Lage der Punkte eine wichtige Rolle. Entsprechend der Grundidee der Upwindverfahren liegt die Mehrzahl der in den Näherungen involvierten Punkte stromaufwärts. In den vorgestellten Verfahren liegen maximal drei Punkte auf der Seite des Basispunktes x_i , aus welcher die Strömung kommt. Handelt es sich um symmetrische Punktmuster mit Differenzenschema ohne Maschen-Reynoldszahlbeschränkung, so liegt das Schwergewicht der Koeffizienten bei den Punkten stromaufwärts. Für teilweise implizite Verfahren ist diese Betrachtung in der entsprechenden expliziten Formulierung durchzuführen. Die nachfolgende Tabelle faßt die Punktemuster der vorgestellten 1-d Differenzverfahren zusammen. Die Punktemuster sind gekennzeichnet durch eine Folge von Punkten, bei denen dem Punkt x_i ein schwarz gezeichneter Kreis ● zugeordnet ist, während die involvierten Nachbarpunkte durch ein o-Symbol charakterisiert sind. Es treten bei der Approximation von ϕ_i' folgende Punktemuster auf ($u_i > 0$). Bei der Approximation von ϕ_i'' soll immer die Näherung der Form

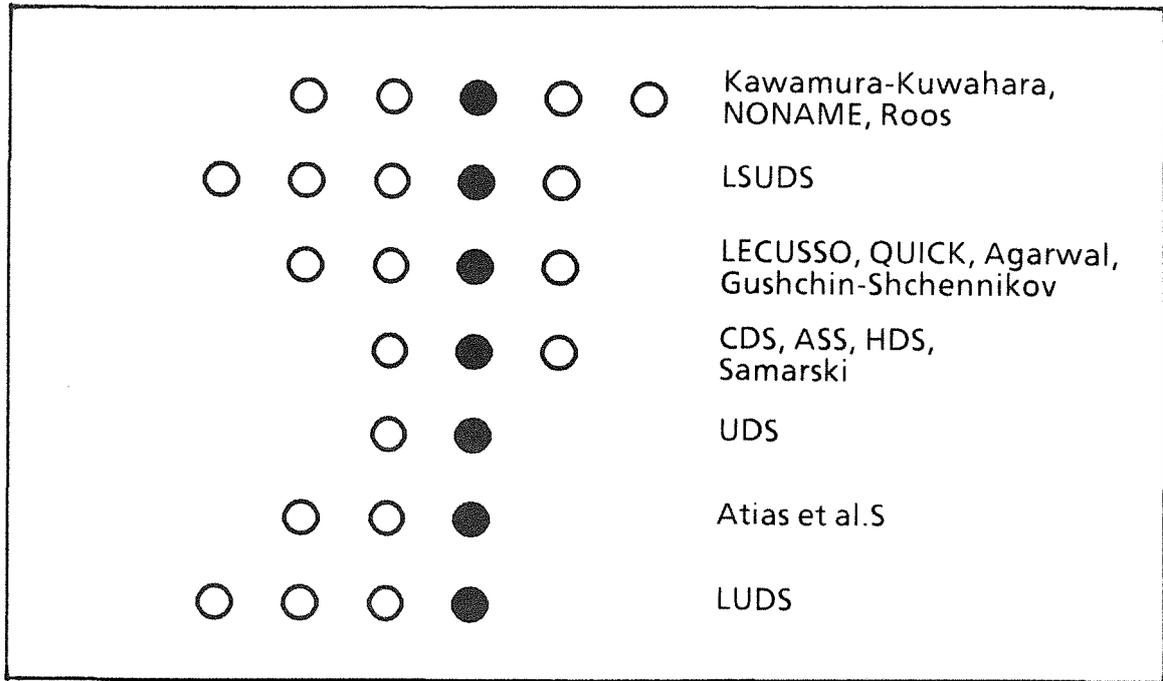
$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

verwendet werden. Die nachfolgende Grafik zeigt die vorgestellten Punktemuster in zwei Variationen. Bei der ersten Tabelle sind die Muster nach der Anzahl der involvierten Punkte geordnet:

			○ ●			UDS
			○ ● ○			CDS, ASS, HDS, Samarski
		○ ○ ●				Atias et al.5
		○ ○ ● ○				LECUSSO, QUICK, Agarwal, Gushchin-Shchennikov
○ ○ ○ ●						LUDS
	○ ○ ● ○ ○					Kawamura-Kuwahara, NONAME, Roos
○ ○ ○ ● ○						LSUDS

Tab. 3.6.1: Eindimensionale Punktemuster der Differenzennäherungen, geordnet nach der Anzahl der Punkte.

Bei der zweiten Tabelle sind die Punktemuster nach der Anzahl der Punkte stromabwärts geordnet.



Tab. 3.6.2: Eindimensionale Punktemuster der Differenzennäherungen, nach der Anzahl der Punkte stromabwärts geordnet.

- C) Ein weiteres Ordnungsmerkmal der Näherungen ist die formale Fehlerordnung. Grob kann festgestellt werden, daß diese Ordnung mit der Anzahl der bei der Näherung eingeschlossenen Punkte steigt. Viele Näherungsformeln besitzen nicht die maximale formale Fehlerordnung, die mit der Anzahl der Punkte erreichbar wäre. Die nachfolgende Tabelle gibt die formalen Ordnungen der in Abschnitt 3.1–3.4 vorgestellten Differenzenverfahren (Approximation von $d\phi/dx|_i$) an:

UDS, HDS		$O(\Delta x)$
CDS, ASS, Samarski, LECUSSO, Atias et al., QUICK, Roos Gushchin-Shchennikov	}	$O(\Delta x^2)$
LUDS, LSUDS, Kawamura-Kuwahara Agarwal.	}	$O(\Delta x^3)$
Generalized OCI		$O(\Delta x^4)$

Es darf nicht übersehen werden, daß die formale Fehlerordnung eine Eigenschaft darstellt, die nur für kleine Δx eine wesentliche Rolle spielt. Die Frage der Kleinheit ist dann noch im Zusammenhang mit der Größe von $Re(x)$ zu sehen. Dabei ist darauf zu achten, daß die diskretisierten Gleichungen so dimensionslos gemacht werden können, daß die Fehler abhängig von

$\text{Re}(\mathbf{x}) \cdot \Delta \mathbf{x}^2$ bzw. einer Funktion dieser Größe angesehen werden können, wie dies im Abschnitt über Testrechnungen getan wird.

Es gibt nur das OCI-Verfahren als Differenzenschema der Ordnung $O(\Delta x^4)$ ohne Maschen-Reynoldszahlbeschränkung. Das normale polynomiale Verfahren der Ordnung vier besitzt eine solche Beschränkung. Es ist zur Zeit noch kein dem OCI entsprechendes explizites Fünfpunktverfahren vom Grad vier ohne Maschen-Reynoldszahlbedingung entwickelt worden.

- D1) Vielen Verfahren liegt eine Polynomnäherung möglichst hoher Ordnung zugrunde. Dies sei am Beispiel von LUDS verdeutlicht: Das Interpolationspolynom 3. Ordnung $p_3(\mathbf{x})$ für die (differenzierbare) Funktion $\phi(\mathbf{x})$, deren Werte in den vier Punkten $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_{i-1}, \mathbf{x}_{i-2}, \mathbf{x}_{i-3}$ gegeben und mit $\phi_i, \phi_{i-1}, \phi_{i-2}$ und ϕ_{i-3} bezeichnet seien, hat mit der normierten Koordinate

$$t = \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}}$$

die Gestalt

$$\begin{aligned} p_3(t) = & + \frac{1}{6} (\phi_{i-3} - 3\phi_{i-2} + 3\phi_{i-1} - \phi_i) t^3 + \\ & (-\frac{1}{2} \phi_{i-3} + 2\phi_{i-2} - \frac{5}{2} \phi_{i-1} + \phi_i) t^2 + \\ & (\frac{1}{3} \phi_{i-3} - \frac{3}{2} \phi_{i-2} + 3\phi_{i-1} - \frac{11}{6} \phi_i) t + \phi_i. \end{aligned}$$

Damit wird

$$\left. \frac{dp_3}{dt} \right|_i = \frac{11}{6} \phi_i - \frac{18}{6} \phi_{i-1} + \frac{9}{6} \phi_{i-2} - \frac{2}{6} \phi_{i-3}$$

und

$$\frac{d\phi}{dx} \approx \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{11}{6} \phi_i - \frac{18}{6} \phi_{i-1} + \frac{9}{6} \phi_{i-2} - \frac{2}{6} \phi_{i-3} \right\}$$

Dieses Konzept trifft auf CDS, UDS, Agarwal, Atias et al. sowie LUDS zu.

- D2) Bei den Verfahren, welche mehr Punkte benützen, als ihre Näherungsordnung eigentlich verlangt, steht in der Regel ein freier Parameter zur Verfügung, der in verschiedener Weise festgelegt werden kann:
- α) Die Näherung soll für eine weitere Funktion, die kein Polynom ist, exakt sein (LECUSSO, LSUDS, ASS).
 - β) Die Näherung soll keiner Maschen-Reynoldszahlbeschränkung unterliegen (Kawamura-Kuwahara, Roos).
 - γ) Die $\phi_{i+1/2}$ und $\phi_{i-1/2}$ sollen parabolisch interpoliert werden (QUICK).
 - δ) Zentrale Näherungen bezüglich der Koordinate $(x_i + x_{i-1})/2$ (Gushchin-Shchennikov).
- D3) Wenn die zusätzliche Funktion, für welche die Näherung exakt ist, $\phi = \exp\{Re_j x\}$ ist, nennt man das Näherungsverfahren lokal exakt. Die Bevorzugung dieser Funktion rührt daher, daß das Verfahren die exakte Lösung liefern würde, falls Re_j im ganzen Intervall den gleichen konstanten Wert $Re_j = Re_0$ hätte.

So wie ASS und das Verfahren von Samarski gibt es noch andere verwandte Dreipunktverfahren der Ordnung $O(\Delta x^2)$, Stoyan [123], Dennis und Hudson [49]; eine entsprechende Erhöhung der Ordnung für lokal exakte Verfahren mit mehr als drei Punkten (LECUSSO, LSUDS) findet nicht statt.

3.7 Weitere denkbare Differenzenverfahren

Die Darstellung der untersuchten Differenzenverfahren und die dabei zu Tage getretenen Konzepte lassen vermuten, daß es noch manche denkbaren, jedoch bisher nicht vorgeschlagenen Varianten gibt. Man stößt auf solche Varianten, wenn man bestimmte Ansätze auf höhere Ordnungen oder andere Punktmuster überträgt. Nachfolgend werden ganz unsystematisch einige solche Beispiele angegeben.

- a) Die Näherung von Atias et al. basiert darauf, für $u_i > 0$ ϕ_i' durch einen Ansatz

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \approx A\phi_i + B\phi_{i-1} + C\phi_{i-2}$$

anzunähern, der für $\phi = \{1, x, x^2\}$ exakt ist, ϕ_i'' wird dabei in der Regel konventionell mit der symmetrischen $O(\Delta x^2)$ -Näherung behandelt, welche die Punkte x_{i+1} , x_i und x_{i-1} involviert. Man kann natürlich auch den Ansatz

$$\left(Re \cdot \frac{d\phi}{dx} - \frac{d^2\phi}{dx^2} \right) \Big|_i \approx A\phi_i + B\phi_{i-1} + C\phi_{i-2}$$

machen, und Übereinstimmung von rechter und linker Seite für $\phi = \{1, x, x^2\}$ fordern. Die Lösung folgt aus unserer allgemeinen Vierpunktnäherung der Ordnung $O(\Delta x^2)$:

$$Re_{\Delta x, i} \left[\left(\frac{1}{2} - \Lambda \right) \phi_{i+1} + 3\Lambda\phi - \left(3\Lambda + \frac{1}{2} \right) \phi_{i-1} + \Lambda\phi_{i-2} \right] \\ - \left(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i \right) = 0$$

Setzt man hier den Koeffizient $Re_i (1/2 - \Lambda) - 1$ von ϕ_{i+1} zu Null, so hat man das gewünschte Verfahren, das gelegentlich auch schon SCUP (= Simple Consistent UPwind) genannt wurde und durch

$$\Delta_i = \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}}$$

charakterisiert wird. In diesem Beispiel stößt man mit dem Ansatz auf das von Braga [39] vorgeschlagene Verfahren.

- b) Es scheint denkbar, zum symmetrischen Punktmuster des Kawamura-Kuwahara-Verfahrens eine lokal exakte Version zu entwickeln, welche die Ordnung $O(\Delta x^3)$ hat. Jedenfalls liegt es nahe, nicht einen konstanten Betrag künstlicher Diffusivität hinzuzufügen, sondern diesen Betrag anzupassen, wobei diese Anpassung auf mehrere Arten geschehen kann. Ein solches Verfahren wäre z.B. das in 3.4 eingeführte Verfahren NONAME.
- c) Man kann in Variation des LSUDS-Verfahrens, welches für den konvektiven Teil des Punktemusters $\circ\bullet\circ\circ\circ$ für $u_i > 0$ und $\circ\bullet\circ$ für den diffusiven Anteil verwendet, ein Verfahren entwerfen, das auch für den diffusiven Term das Muster $\circ\bullet\circ\circ\circ$ bzw. je nach dem Vorzeichen von u_i , $\circ\circ\circ\bullet\circ$ verwendet. Man kann dann wieder wie bei LSUDS α so bestimmen, daß

$$Re_{\Delta x, i} \left[\alpha \cdot \underset{\circ\bullet\circ\circ}{\text{Agarwal}} + (1 - \alpha) \underset{\bullet\circ\circ\circ}{\text{LU DS}} \right] - \underset{\circ\bullet\circ\circ\circ}{\text{Diffusionsterm}} = 0$$

für $\phi = \exp \{Re_{\Delta x, i} \cdot x\}$. Dieses Verfahren ergibt sich auch, wenn man das Muster $\circ\circ\circ\bullet\circ$ für $u_i > 0$, bzw. $\circ\bullet\circ\circ\circ$ für $u_i < 0$ vorgibt und jeweils Exaktheit der Formel für die Funktionen $\phi = \{1, x, x^2, x^3, e^{\rho x}\}$, $\rho = Re_{\Delta x, i}$ fordert. Es zeigt sich, daß dieses Differenzenschema identisch mit LSUDS ist.

- d) Das von Samarski stammende Verfahren läßt in einer bestimmten Richtung Verallgemeinerungen zu. Bedenkt man, daß sich die Verfahren von Allen-Southwell und Samarski schreiben lassen als

$$\frac{Re_{\Delta x, i}}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - \gamma_i (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0$$

mit $\gamma_i = 1 + O(\Delta x^2)$, jedoch γ_i so gewählt, daß die Alternanteneigenschaft der Differenzengleichung auch für größere $Re_{\Delta x, i}$ gewahrt bleibt, so bietet sich folgender Gedanke an: Man nähert sowohl ϕ_i' als auch ϕ_i'' durch eine zentrale Fünfpunktformel vom Grad 4 an, d.h.

$$\phi_i' \approx \frac{1}{12} (-\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) + O(\Delta x^4)$$

$$\phi_i'' \approx \frac{1}{12}(\phi_{i+2} - 16\phi_{i+1} + 30\phi_i - 16\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) + O(\Delta x^4),$$

setzt die Näherungen ein und verbindet sie in der Form

$$Re_{\Delta x, i}(-\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) - \gamma_i(\phi_{i+2} - 16\phi_{i+1} + 30\phi_i - 16\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) = 0,$$

wobei $\gamma_i = 1 + O(\Delta x^4)$ für kleine Δx und für große $Re_{\Delta x, i}$ die Alternanteneigenschaft für alle Koeffizienten oder zumindest für die drei zentralen Glieder sichert. Man kann z.B. mit $\rho = |Re_{\Delta x, i}|$

$$\gamma_i = \frac{\rho^4 + \rho^3 + \rho^2 + \rho + 1}{\rho^3 + \rho^2 + \rho + 1} = \rho + \frac{1}{\rho^3 + \rho^2 + \rho + 1} = 1 + \frac{\rho^4}{\rho^3 + \rho^2 + \rho + 1}$$

setzen. Mit diesem γ_i würde dieses Verfahren die obigen Forderungen erfüllen und von der Ordnung $O(\Delta x^4)$ sein. Dieses hier angegebene Verfahren ist nicht zu empfehlen, da es nicht für $\rho \rightarrow \infty$ zu einer einseitigen Näherung wird. Hinter den Versuchen, das Samarski-Verfahren der Ordnung $O(\Delta x^2)$ zu verallgemeinern, steht der Wunsch, oszillationsfreie Fünfpunktverfahren der Ordnung $O(\Delta x^4)$ zu konstruieren.

Man kann für das Samarski-Verfahren auch Verallgemeinerungen entwickeln, die den in Abschnitt 3.4 vorgestellten Gedanken weiterführen. Wir erläutern hier nur grob den Ansatz.

Die Differenzgleichung laute

$$Re_{\Delta x, i} \left\{ \frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right\} = \text{Diffusionsterm},$$

mit $Re_{\Delta x, i} > 0$. Der geklammerte Teil der linken Seite der Gleichung stellt den Ansatz von Atias et al. für ϕ_i' dar, der die Ordnung $O(\Delta x^2)$ hat und frei von Oszillationen ist. Für das Fehlerverhalten der linken Seite hat man mit zwei mitgenommenen Fehlergliedern

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right) = \phi_i' - \frac{\Delta x^2}{3} \phi_i''' + \frac{\Delta x^3}{4} \phi_i'''' + O(\Delta x^4).$$

Mit den Gleichungen

$$\phi''' = (Re' + Re^2) \phi'$$

und

$$\phi'''' = (Re'' + 3Re \cdot Re' + Re^3) \phi',$$

welche sich durch Ableiten von $Re\phi' = \phi''$ und Ersetzen ergeben, z.B. $\phi''' = Re\phi'' + Re'\phi' = Re(Re\phi') + Re'\phi'$, erhält man zunächst

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right) + \frac{\Delta x^2}{3} (Re' + Re^2) \phi_i' \\ - \frac{\Delta x^3}{4} (Re'' + 3Re \cdot Re' + Re^3) \phi_i' = \phi_i' + O(\Delta x^4). \end{aligned}$$

Ersetzt man die ϕ_i' auf der linken Seite im zweiten und dritten Summanden auch durch

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right),$$

so bleibt die Fehlerordnung erhalten und wir haben die Näherung

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right) \left\{ 1 + \frac{\Delta x^2}{3} (Re' + Re^2) - \frac{\Delta x^3}{4} (Re'' + 3Re \cdot Re' + Re^3) \right\} = \phi_i' + O(\Delta x^4),$$

welche in die gesamte Gleichung eingesetzt wird. Bei einer Approximation des Diffusionsterms von der Ordnung $O(\Delta x^4)$ wäre das Gesamtverfahren auch $O(\Delta x^4)$. Der Ableitungsterm Re' müsste zu diesem Zweck mindestens von der Ordnung 2 angenähert werden, die Ableitung Re'' bräuchte nur $O(\Delta x)$ angenähert zu werden.

- e) Man kann versuchen, den Gedankengang, der zum Differenzenschema von Kawamura-Kuwahara führt, das die Indizes $i-2$ bis $i+2$ verwendet, auf die

Indizes $i-3$ bis $i+1$ zu übertragen, $u_i > 0$ vorausgesetzt. Die entsprechende polynomiale Näherung 4. Ordnung für ϕ_i' auf den Punkten $x_{i-3}, x_{i-2}, \dots, x_{i+1}$ ist

$$\phi_i' \approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ 3\phi_{i+1} + 10\phi_i - 18\phi_{i-1} + 6\phi_{i-2} - \phi_{i-3} \right\} + O(\Delta x^4),$$

kritisch ist der positive Koeffizient von ϕ_{i+1} . Subtrahiert man

$$\frac{1}{4\Delta x} \nabla_{i-1}^4 \phi = \frac{1}{12\Delta x} \left\{ 3\phi_{i+1} - 12\phi_i + 18\phi_{i-1} - 12\phi_{i-2} + 3\phi_{i-3} \right\},$$

so findet man als $O(\Delta x^3)$ -Näherung für ϕ_i'

$$\phi_i' \approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ 22\phi_i - 36\phi_{i-1} + 18\phi_{i-2} - 4\phi_{i-3} \right\},$$

die schon bekannten Näherung LUDS. Damit führt diese Überlegung auch auf eine schon bekannte Formel.

- f) Es sind neben den in Abschnitt 3.5 dargestellten Versionen des Differenzenverfahrens von Gushchin-Shchennikov noch weitere Varianten denkbar, deren Details hier nicht dargestellt werden.
- g) Die Ansätze des 'Skew upwind' sind bisher praktisch nur als Verallgemeinerung von UDS praktiziert worden. Man könnte den Gedanken auf andere Verfahren übertragen. So ist beispielsweise unklar, wie ein 'Skew upwind-scheme' höherer Ordnung aussehen könnte.

Aus diesen ziemlich unsystematisch zusammengestellten Beispielen läßt sich mit Recht der Eindruck gewinnen, daß sich der gesamte Bereich der Differenzennäherungen für konvektiv-diffusive Vorgänge noch in der Entwicklung befindet und noch keinen Abschluß gefunden hat.

3.8 Die Erhaltungsformen zu ASS, LECUSSO, LSUDS und dem Verfahren von Samarski

Der Vollständigkeit halber werden in diesem Teilabschnitt die Erhaltungsformen zu den Differenzenverfahren ASS, LECUSSO, LSUDS und dem Verfahren von Samarski angegeben. Diese Erhaltungsformen können auf dem in 2.4 beschriebenen Weg gewonnen werden. Außerdem wird noch ein mit LECUSSO-C sehr eng verwandetes Verfahren, das QUICK-PLUS-Verfahren, vorgestellt.

Die zweite Formulierung von ASS war

$$\frac{\rho_i \Delta x}{2} \left[\left(1 - 2 \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \right) \phi_{i+1} + 4 \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \phi_i - \left(1 + 2 \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \right) \phi_{i-1} \right] - \text{Diffusionsterm} = 0$$

In Form von Differenzen benachbarter ϕ_i hat dies die Gestalt

$$\rho_i \Delta x \left\{ \left[\frac{1}{2} - \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \right] (\phi_{i+1} - \phi_i) + \left[\frac{1}{2} + \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \right] (\phi_i - \phi_{i-1}) \right\} - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0.$$

Dies bedeutet

$$\rho_i \Delta x (\hat{\phi}_{i+1/2} - \hat{\phi}_{i-1/2}) - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0$$

mit

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \left(\frac{1}{2} - \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \right) \phi_{i+1} + \left(\frac{1}{2} + \left(\coth \frac{\rho_i \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_i \Delta x} \right) \right) \phi_i$$

und entsprechender Formel für $\hat{\phi}_{i-1/2}$.

Damit gelangt man, wenn man a)

$$\rho_i \Delta x (\hat{\phi}_{i+1/2} - \hat{\phi}_{i-1/2})$$

formal durch

$$\Delta x \left(\rho_{i+1/2} \hat{\Phi}_{i+1/2} - \rho_{i-1/2} \hat{\Phi}_{i-1/2} \right)$$

ersetzt und b) in der Formel für $\rho_{i+1/2}$ ρ_i durch $\rho_{i+1/2}$, bei $\phi_{i-1/2}$ ρ_i durch $\rho_{i-1/2}$ ersetzt zur Gleichung

$$\begin{aligned} & \rho_{i+1/2} \cdot \Delta x \cdot \left\{ \left[\frac{1}{2} - \left(\coth \frac{\rho_{i+1/2} \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_{i+1/2} \Delta x} \right) \right] \Phi_{i+1} + \right. \\ & \left. \left[\frac{1}{2} + \left(\coth \frac{\rho_{i+1/2} \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_{i+1/2} \Delta x} \right) \right] \Phi_i \right\} \\ & - \rho_{i-1/2} \cdot \Delta x \cdot \left\{ \left[\frac{1}{2} - \left(\coth \frac{\rho_{i-1/2} \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_{i-1/2} \Delta x} \right) \right] \Phi_i + \right. \\ & \left. \left[\frac{1}{2} + \left(\coth \frac{\rho_{i-1/2} \Delta x}{2} - \frac{1}{\rho_{i-1/2} \Delta x} \right) \right] \Phi_{i-1} \right\} - \left(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1} - 2\Phi_i \right) = 0 \end{aligned}$$

Diese Differenzengleichung stellt die Erhaltungsform zum Verfahren von Allen-Southwell dar. Es gibt das Verfahren von El-Mistikawy-Werle [55], das beim Nichtvorhandensein von Quelltermen mit ASS-C identisch ist. Sind Quellterme in der Gleichung mitenthalten, so beinhaltet das Verfahren von El-Mistikawy-Werle noch eine implizite Behandlung des Quellterms, um die Fehlerordnung $O(\Delta x^4)$ zu erreichen.

LECUSSO-C hat die Form [65]

$$\Delta x \left(\rho_{i+1/2} \hat{\Phi}_{i+1/2} - \rho_{i-1/2} \hat{\Phi}_{i-1/2} \right) - \left(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1} - 2\Phi_i \right) = 0;$$

dabei ist

$$\hat{\Phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(\Phi_{i+1} + \Phi_i \right) - \Lambda_{i+1/2} \left(\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1} - 2\Phi_i \right),$$

falls $\rho_{i+1/2} \geq 0$,

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\phi_{i+1} + \phi_i) - \Lambda_{i+1/2} (\phi_{i+2} + \phi_i - 2\phi_{i+1}),$$

falls $\rho_{i+1/2} < 0$.

$\Lambda_{i+1/2}$ wird nach der Formel

$$\Lambda_{i+1/2} = \frac{1}{\rho_{i+1/2} \Delta x} \cdot \frac{0,5\rho_{i+1/2} \cdot \Delta x (r_{i+1/2} + 1) + (r_{i+1/2} - 1)}{(1 - r_{i+1/2})^2}$$

mit $r_{i+1/2} = \exp(-\rho_{i+1/2} \cdot \Delta x)$ berechnet.

In der Formel für $\hat{\phi}_{i-1/2}$ sind alle auftretenden Indizes um den Wert 1 vermindert.

Das QUICK-PLUS-Verfahren stellt eine Modifikation von LECUSSO-C dar. Die Gleichung ($u_{i+1/2} > 0$)

$$\hat{\phi}_{i+1/2} \approx A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1}$$

wird nicht formal aus der Konvektionsform von LECUSSO hergeleitet. Vielmehr wird verlangt, daß A, B und C so bestimmt werden, daß obige Näherung für die Funktionen $\phi = 1$, $\phi = x$, $\phi = \exp(\rho_{i+1/2}x)$ exakt erfüllt ist. Diese Bedingungen führen mit $\rho = \rho_{i+1/2}$ auf

$$A = \frac{e^{\rho/2} - 1 + \frac{1}{2}(e^{-\rho} - 1)}{e^{\rho} + e^{-\rho} - 2}$$

$$B = \frac{\frac{3}{2}e^{\rho} + \frac{1}{2}e^{-\rho} - 2e^{\rho/2}}{e^{\rho} + e^{-\rho} - 2}$$

$$C = \frac{e^{\rho/2} - 1 - \frac{1}{2}(e^{\rho} - 1)}{e^{\rho} + e^{-\rho} - 2}$$

Für $\rho \rightarrow 0$ erhält man (mit der de l'Hôpitalschen Regel) $A = 3/8$, $B = 3/4$ und $C = -1/8$, d.h. hier geht das Verfahren in das QUICK-Schema über. Für $\rho \rightarrow \infty$ findet man $A = 0$, $B = 3/2$, $C = -1/2$, die Erhaltungsform des Verfahrens von Atias et al..

Man kann auch für LECUSSO-C die Koeffizienten A, B und C in

$$\hat{\phi}_{i+1/2} \approx A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1}$$

berechnen. Die Koeffizienten A, B und C sind in etwas modifizierter Form in Tabelle 3.8.1 für LECUSSO-C und QUICK-PLUS zusammengestellt.

	LECUSSO-C	QUICK-PLUS
A	$\frac{\frac{1}{2}(e^{-2\rho} - 3e^{-\rho}) + \frac{1}{\rho}(1 - e^{-\rho})}{(e^{-\rho} - 1)^2}$	$\frac{\frac{1}{2}(e^{-2\rho} - 3e^{-\rho}) + e^{-\frac{\rho}{2}}}{(e^{-\rho} - 1)^2}$
B	$\frac{\frac{1}{2}(e^{-2\rho} + 3) - \frac{2}{\rho}(1 - e^{-\rho})}{(e^{-\rho} - 1)^2}$	$\frac{\frac{1}{2}(e^{-2\rho} + 3) - 2e^{-\frac{\rho}{2}}}{(e^{-\rho} - 1)^2}$
C	$\frac{\frac{1}{2}(-e^{-\rho} - 1) + \frac{1}{\rho}(1 - e^{-\rho})}{(e^{-\rho} - 1)^2}$	$\frac{\frac{1}{2}(-e^{-\rho} - 1) + e^{-\frac{\rho}{2}}}{(e^{-\rho} - 1)^2}$

Tab. 3.8.1: Die Koeffizienten A, B und C von LECUSSO-C und QUICK-PLUS in der Näherung $\hat{\phi}_{i+1/2} \approx A\phi_{i+1} + B\phi_i + C\phi_{i-1}$ mit $\rho = \text{Re}\Delta_{\Delta x, i+1/2} > 0$.

Die Schreibweise der Tabelle macht deutlich, daß die beiden Verfahren einen gemeinsamen Anteil haben und sich in einem zweiten Teil, einer Differenz zweiter Ordnung, wenig unterscheiden. Für kleine ρ stimmen die ersten beiden Reihenglieder des jeweiligen zweiten Teils,

$$\frac{1}{\rho}(1 - e^{-\rho}) = 1 - \frac{\rho}{2} + \frac{\rho^2}{6} - \dots$$

und

$$e^{-\frac{\rho}{2}} = 1 - \frac{\rho}{2} + \frac{\rho^2}{8} - \dots$$

überein.

Für LSUDS-C ergibt sich nach dem gleichen Schema

$$\hat{\Phi}_{i+1/2} = \alpha_{i+1/2} \left(\frac{2}{6} \Phi_{i+1} + \frac{5}{6} \Phi_i - \frac{1}{6} \Phi_{i-1} \right) + (1 - \alpha_{i+1/2}) \left(\frac{11}{6} \Phi_i - \frac{7}{6} \Phi_{i-1} + \frac{2}{6} \Phi_{i-2} \right)$$

mit

$$\alpha_{i+1/2} = \frac{6 - (6 + 11\rho_{i+1/2})r_{i+1/2} + 7\rho_{i+1/2}r_{i+1/2}^2 - 2\rho_{i+1/2}r_{i+1/2}^3}{2\rho_{i+1/2}(1 - r_{i+1/2})^2},$$

wobei hier $\rho_{i+1/2} = \text{Re}_{\Delta x, i+1/2}$ und $r_{i+1/2} = \exp(-\rho_{i+1/2})$.

Beim Samarski-Verfahren in Erhaltungsform hat man

$$\hat{\Phi}_{i+1/2} = \left[\frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2} \frac{1}{1 + \left(\frac{\rho_{i+1/2}}{2}\right)^2} - \frac{1}{\rho_{i+1/2}} \right) \right] \Phi_{i+1} +$$

$$\left[\frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} \frac{1}{1 + \left(\frac{\rho_{i+1/2}}{2}\right)^2} - \frac{1}{\rho_{i+1/2}} \right) \right] \Phi_i.$$

3.9 Lösungsadaptive Differenzenverfahren

Die bisher vorgestellten Differenzenverfahren hatten die Eigenschaft, daß mit der Kenntnis der Reynoldszahl die Koeffizienten der Differenzgleichung in deterministischer Weise festgelegt sind. Dabei kann die Näherung für ϕ_i' starr sein oder noch in einfacher oder komplizierter Weise von der zugehörigen Maschen-Reynoldszahl $Re_{\Delta x,i}$ abhängen. Im einfachsten Fall, bei HDS, legt der Absolutbetrag von $Re_{\Delta x,i}$ fest, ob UDS oder CDS gewählt wird. Bei den lokal-exakten und verwandten Verfahren ist die Abhängigkeit von $Re_{\Delta x,i}$ komplizierter. Aber immer sind die Koeffizienten der Differenzgleichung durch die Parameter der ursprünglichen Konvektions-Diffusionsgleichung festgelegt.

Von diesem bisherigen Schema weichen die nachfolgend aufgeführten Schemata ab. Es wird entweder

- ein Parameter in einem parameterabhängigen Schema gewählt (z.B. CCCT),
- eine Linearkombination zweier Verfahren benutzt oder
- von zwei oder mehr Berechnungsvorschriften eine bestimmte ausgewählt.

Diese Auswahl geschieht in Abhängigkeit von einem Probeschritt der Berechnung des gesuchten Funktionswertes. Bei einer transienten Rechnung wird bei dieser Auswahl der Funktionswert vom zurückliegenden Zeitschritt zugrunde gelegt. Falls dieser Berechnungsvorgang ein nicht akzeptables Ergebnis bringt, wird der gesamte Ablauf wiederholt. So entsteht ein iteratives Berechnungsverfahren. Man kann das Vorgehen bei diesem Verfahren auch so umreißen: Diese Differenzenschemata vermeiden oszillierende numerische Lösungen, versuchen aber andererseits, die durch Upwindverfahren eingebrachte künstliche Diffusivität auf ein Mindestmaß zu reduzieren. Da sich die Koeffizienten der Differenzgleichung in Abhängigkeit von einem provisorisch berechneten Lösungswert noch ändern können, werden diese Differenzenverfahren hier "lösungsadaptive Verfahren" genannt. Es gibt für diese Schemata keine allgemein akzeptierte Bezeichnung. Beispiele dafür sind FCT (= engl. "Flux Correct Transport") [37], bei dem nach einem heuristischen System ("flux limiter") eine Linearkombination von UDS und CDS gewählt wird. Im allgemeinen Falle wird immer ein gemittelter Wert aus einem oszillationsfreien Differenzenverfahren niedriger Ordnung und einem nicht oszillationsfreien Verfahren höherer Ordnung genommen. Bei FRAM [42] wird die Einhaltung von (oberer Index kennzeichnet den Zeitschritt)

$$\phi_{i-1}^n \leq \phi_i^{n+1} \leq \phi_{i+1}^n$$

oder einer ähnlichen Monotonieforderung geprüft, und, falls diese verletzt ist, ein nochmaliger Berechnungsschritt mit mehr künstlicher Diffusivität vorgenommen. Die beschriebenen Verfahren sind in vieler Hinsicht verwandt zu Verfahren mit 'flux limiter' und sogenannte "TVD"-schemes ("TVD=Total variation diminishing"), die entwickelt wurden, um Stoßwellen und Unstetigkeiten bei kompressiblen Strömungen berechnen zu können.

Hintergrund dieser und einiger anderer Verfahren ist die Beobachtung, die auch in Abbildung 1.3.2 zum Ausdruck kommt, daß längst nicht überall, wo eine Maschen-Reynoldszahlbedingung verletzt ist, die numerische Lösung oszillieren muß. In Bereichen fern von Grenzschichten, oft als Kernströmung (engl. "core flow" oder "bulk flow") bezeichnet, ändert ϕ seinen Wert wenig. Diese nahezu konstanten Werte von ϕ werden von allen Differenzenverfahren korrekt wiedergegeben. Erst in Bereichen mit starken Wertänderungen von ϕ treten die Oszillationen merklich in Erscheinung. Dort schalten die hier beschriebenen Verfahren auf das stabile Verfahren mit geringerer Ordnung um.

Eine nicht vollständige Zusammenstellung solcher lösungsadaptiven Schemata enthält die Tabelle 3.9.1.

Ein verhältnismäßig neues Verfahren, CCCT (Curvature-Compensated Convective Transport) genannt, stammt von Gaskell und Lau [57]–[59]. Die Formel zur Berechnung von $\hat{\phi}_{i+1/2}$ in diesem erhaltungstreuen Verfahren lautet für $u_{i+1/2} \geq 0$

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \left(\frac{3}{8} - \alpha_i\right)\phi_{i+1} + \left(\frac{3}{4} + 2\alpha_i\right)\phi_i - \left(\alpha_i + \frac{1}{8}\right)\phi_{i-1}$$

und ist nach der Ersetzung von α_i durch $\lambda_i - 1/8$ gleichbedeutend mit der Formel von LECUSSO-C

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \left(\frac{1}{2} - \lambda_{i+1/2}\right)\phi_{i+1} + \left(\frac{1}{2} + 2\lambda_{i+1/2}\right)\phi_i - \lambda_{i+1/2}\phi_{i-1}.$$

Das α_i des Verfahrens von Gaskell und Lau wird durch eine Art implizite Definition festgelegt, die nachfolgend angegeben wird und ein iteratives Anpassen von α_i verlangt. Hier scheint die explizite formelmäßige Vorgabe des Parameters α_i bzw.

$\lambda_{i+1/2}$ der elegantere und weniger aufwendige Weg zu sein, wie das bei LECUSSO-C getan wird.

Es folgt nun die Beschreibung der Prozedur, wie bei CCCT der Wert von α_i bestimmt wird. Es ist [57]

$$\alpha_i = \frac{\hat{\phi}_{i+1/2}' - \frac{3}{2}(2\phi_i + 1)}{2\phi_i - 1},$$

wobei jetzt $\hat{\phi}_{i+1/2}'$ einen unbekanntem normalisierten Wert darstellt. Die Normalisierung ist definiert nach der Formel

$$\phi_K = \frac{\phi_K - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}.$$

$$\hat{\phi}_{i+1/2}' = \begin{cases} 0, & \text{falls } \phi_i \in (-0.5, 0). \text{ Dann ist} & \alpha \in (0, 3/8) \\ 3\phi_i, & \text{falls } \phi_i \in (0, 1/6). & \alpha \in (0, 3/8) \\ 1, & \text{falls } \phi_i \in (5/6, 1) & \alpha \in (-1/8, 0) \\ \phi_i, & \text{falls } \phi_i \in (1, 3/2) & \alpha \in (-1/8, 0) \\ 3/8(2\phi_i + 1), & \text{falls } \phi_i \in (-\infty, -1/2) \cup [1/6, 5/6] \cup (3/2, \infty), & \alpha = 0. \end{cases}$$

Hier entspricht $\alpha = 0$ dem QUICK-Verfahren, $\alpha = -1/8$ ist CDS, $\alpha = 3/8$ entspricht dem Schema von Atias et al..

Damit das Verfahren arbeitet, muß ϕ_{i-1} bekannt sein, bevor $\hat{\phi}_{i+1/2}'$ oder α_i bestimmt werden können. Für nichttransiente Berechnungen verlangt dieser Algorithmus eine iterative Behandlung, weil Werte berechnet werden, von denen schon eine Kenntnis vorhanden sein soll.

Offensichtlich liegt die eigentliche Stärke des Verfahrens von Gaskell und Lau darin, steile Gradienten und selbst Sprungfunktionen bei transienten Rechnungen ohne Über- und Unterschwingen zu berechnen.

Von den lösungsadaptiven Verfahren sind einige CCCT mehr oder minder ähnlich. Dazu gehören die in Tabelle 3.9.1 aufgeführten EULER-QUICK[93] und MODIFIED EXQUISITE [104]. Auf die ausführliche Erläuterung aller Verfahren von Tabelle 3.9.1 soll hier verzichtet werden. Es sollte aber noch darauf hingewiesen

Titel	Genauere Bezeichnung	Autor(en), Referenz	Weitere Hinweise
FCT	Flux Corrected Transport	Boris u. Book 1973, JCP 11, [37]	Linearkombination eines gröberen und eines feineren Verfahrens
FRAM	Filter Remedy and Methodology	Chapman, [42] 1981, JCP 44	z.B. QUICK-FRAM
EULER-QUICK	QUICK = Quadratic Upstream Interpolation with Cubic Kinematic	Leonard, [93] 1983	QUICK, wo möglich, andernfalls ASS oder UDS
CONDIF	Controlled Numerical Diffusion with Internal Feedback	Runchal, [117] 1987, IJNME 24	CDS oder UDS, UDS, falls sich Extrema bilden
LODA	Local Oscillation-Damping Algorithm	Zhu u. Leschziner 1988, CMAME 67, [132]	QUICK und UDS
CCCT (SMART)	Curvature Compensated Convective Transport, Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport	Gaskell u. Lau 1988, IJNMF 8, [57]	stark verwandt mit LECUSSO-C
MODIFIED EXQUISIT		Maekawa u. Muramatsu 1986, [104]	ähnlich EULER-QUICK
U L T R A - SHARP	Universal limiter for tight resolution and accuracy-simple high accuracy resolution program	Leonard, [98] 1989	ähnlich wie CCCT(SMART) und LECUSSO-C

Tab. 3.9.1: Tabelle einiger lösungsadaptiver Differenzenschemata

werden, daß alle Verfahren dieser Klasse außer FCT erst nach 1980 vorgeschlagen wurden.

Leicht einsehbar ist, daß die lösungsadaptiven Verfahren einer theoretischen Analyse schwerer zugänglich sind als die in 3.1 bis 3.5 vorgestellten Verfahren. Um einen groben Vergleich zwischen beiden Klassen zu erhalten, wird in Kapitel 6 über Vergleichsrechnungen mit LECUSSO-C und QUICK-C auf der einen Seite und CCCT und EULER-QUICK auf der anderen Seite berichtet.

3.10 Die Differenzenverfahren in zwei und mehr Dimensionen

Der Übergang von einer zu zwei Raumdimensionen ist für die meisten Differenzverfahren unproblematisch. Die eindimensionale Methode wird dabei koordinatenweise auf die zwei Raumdimensionen übertragen. Auf die Verfahren, bei denen diese Übertragung nicht eindeutig möglich ist, wird später eingegangen.

Die 2-d-Formulierung wird am Beispiel von LECUSSO erläutert. In 1-d hat man ($Re_{x,i} > 0$)

$$\frac{Re_{\Delta x,i}}{\Delta x^2} \left[\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} - \Lambda_i (\phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) \right] - \frac{(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)}{\Delta x^2} = 0$$

mit

$$\Lambda_i = \frac{\frac{1}{2} Re_{\Delta x,i} (1 + \rho) - (1 - \rho)}{Re_{\Delta x,i} (1 - \rho)^2}, \quad \rho = \exp(-Re_{\Delta x,i})$$

Die 2-d-Formulierung setzt sich aus zwei Ausdrücken der bei der 1-d-Gleichung auftretenden Form zusammen ($Re_{x,i,j} > 0, Re_{y,i,j} > 0$).

$$\begin{aligned} & \frac{Re_{\Delta x,i,j}}{\Delta x^2} \left[\frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2} - \Lambda_{x,i,j} (\phi_{i+1j} - 3\phi_{ij} + 3\phi_{i-1j} - \phi_{i-2j}) \right] \\ & \frac{Re_{\Delta y,i,j}}{\Delta y^2} \left[\frac{\phi_{ij+1} - \phi_{ij-1}}{2} - \Lambda_{y,i,j} (\phi_{ij+1} - 3\phi_{ij} + 3\phi_{ij-1} - \phi_{ij-2}) \right] \\ & - \frac{(\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j} - 2\phi_{ij})}{\Delta x^2} - \frac{(\phi_{ij+1} + \phi_{ij-1} - 2\phi_{ij})}{\Delta y^2} = 0, \end{aligned}$$

$\Lambda_{x,i,j}$ wird mit $Re_{\Delta x,i,j}$ nach obiger Formel gebildet, $\Lambda_{y,i,j}$ wird mit $Re_{\Delta y,i,j}$ berechnet.

Zu den Verfahren, deren Übertragung vom Ein- ins Zweidimensionale nicht offensichtlich ist, gehört das Verfahren von Gushchin-Shchennikov. Dieses wurde schon bei der Beschreibung des eindimensionalen Verfahrens in 3.5 erläutert.

Das zweite Verfahren, welches einer besonderen Betrachtung bedarf, ist das Verfahren von Samarski. Für dieses Verfahren haben wir im Eindimensionalen die beiden gleichwertigen Schreibweisen

$$a) \quad u_i \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right) \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}$$

und

$$b) \quad u_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} = \nu \left(1 + \frac{\left(\frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right)^2}{1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2}} \right) \left(\frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} \right).$$

Um von a) nach b) zu gelangen, muß a) durch $(1 + Re_{\Delta x, i}/2)$ geteilt werden und dann, um einen zentralen Differenzterm 1. Ordnung zu erhalten, $(Re_i/2\Delta x)$ $(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$ auf die rechte Seite gebracht werden. Wegen dieser auftretenden Division sind 2-d-Verallgemeinerungen von a) und von b) verschieden. Man findet die Versionen

$$a') \quad u_{ij} \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, ij}}{2} \right) \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1j}}{\Delta x} + v_{ij} \left(1 + \frac{Re_{\Delta y, ij}}{2} \right) \frac{\phi_{ij} - \phi_{ij-1}}{\Delta y} =$$

$$\nu \left(\frac{\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j} - 2\phi_{ij}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{ij+1} + \phi_{ij-1} - 2\phi_{ij}}{\Delta y^2} \right)$$

und

$$b') \quad u_{ij} \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2\Delta x} + v_{ij} \frac{\phi_{ij+1} - \phi_{ij-1}}{2\Delta y} =$$

$$\nu \left\{ \left(1 + \frac{\left(\frac{Re_{\Delta x, ij}}{2} \right)^2}{1 + \frac{Re_{\Delta x, ij}}{2}} \right) \left(\frac{\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j} - 2\phi_{ij}}{\Delta x^2} \right) + \left(1 + \frac{\left(\frac{Re_{\Delta y, ij}}{2} \right)^2}{1 + \frac{Re_{\Delta y, ij}}{2}} \right) \left(\frac{\phi_{ij+1} + \phi_{ij-1} - 2\phi_{ij}}{\Delta y^2} \right) \right\},$$

die nicht ineinander überführbar sind.

Bei den numerischen Testrechnungen wurden beide 2-d-Varianten des Verfahrens von Gushchin-Shchennikov untersucht. Von den 2-d-Varianten des Samarski-Differenzenschemas wurde die Variante b') getestet.

3.11 'False Diffusion' bei mehrdimensionalen Problemen

An dieser Stelle muß angesprochen werden, daß die künstliche Diffusion bei zwei- und mehrdimensionalen Fragestellungen Probleme mit sich bringt. Wir erläutern dies am einfachen Upwind-Verfahren 1. Ordnung in 2-d. Die Gleichung lautet in der Darstellung mit zentralen Differenzen und zusätzlicher künstlicher Diffusion:

$$u_{ij} \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2\Delta x} - v \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, ij}}{2} \right) \frac{\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j} - 2\phi_{ij}}{\Delta x^2} + v_{ij} \frac{\phi_{ij+1} - \phi_{ij-1}}{2\Delta y} - v \left(1 + \frac{Re_{\Delta y, ij}}{2} \right) \frac{\phi_{ij+1} + \phi_{ij-1} - 2\phi_{ij}}{\Delta y^2} = 0 .$$

Falls der Geschwindigkeitsvektor parallel zur x-Achse ist, d.h. $Re_{\Delta y, ij} = 0$, $Re_{\Delta x, ij} \neq 0$, ist die Diffusion stark anisotrop, genauer gesagt, durch die künstliche Diffusion wird die Diffusion in x-Richtung verstärkt. Dieser Sachverhalt charakterisiert die plausible Vorstellung, daß die künstliche Diffusivität nur dort (- in Strömungsrichtung -) eingebracht wird, wo sie notwendig ist. Falls der Geschwindigkeitsvektor nicht achsenparallel ist, wird in beiden Koordinatenrichtungen Diffusivität hinzugefügt, so daß auch senkrecht zur Strömungsrichtung die Diffusion in physikalisch nicht gerechtfertigter Weise vergrößert wird. Dieser Vorgang wird beispielsweise beschrieben in Patankar [11], 1980, Abschnitt 5.6, False Diffusion, p. 105-109. Dieser Effekt der Verstärkung der Diffusion in die Richtung senkrecht zur Geschwindigkeitsbewegung kann bei allen Upwind-Verfahren auftreten. Als besonders wichtig muß hier festgestellt werden, daß das Ergebnis der Berechnung tatsächlich von der Lage des Koordiantensystem abhängt, weil je nach Lage des Geschwindigkeitsvektors zum Koordiantenkreuz die künstliche Diffusivität entweder in einem Grenzfall anisotrop bei Parallelität von Geschwindigkeitsvektor und Koordinatenachse oder im anderen Grenzfall, der Geschwindigkeitsvektor liegt auf einer Winkelhalbierenden, isotrop eingebracht wird. Es wäre daher interessant, koordinatenunabhängige Upwind-Verfahren zu konstruieren. Dieser Gedanke liegt dem Skew-upwind-Verfahren von Raithby [113] und späteren Verbesserungen dieses Verfahrens zu Grund.

4. DIE DARSTELLUNG VON UPWINDVERFAHREN ALS ZENTRALE DIFFERENZENVERFAHREN MIT ZUSÄTZLICHER KÜNSTLICHER DIFFUSION

4.1 Künstliche Diffusion als Hilfsmittel, um instabile Differenzenverfahren stabil zu machen

Es wurde schon mehrfach die Formulierung gebraucht, daß bestimmte Differenzenverfahren künstliche numerische Diffusivität enthalten. Dies hängt damit zusammen, daß sich die Verwendung gewisser Upwind-Differenzenverfahren neben der zuvor beschriebenen Betrachtungsweise als mehr oder minder einseitige Approximation von ϕ_i' und einer Standardapproximation von ϕ_i'' auch anders auffassen läßt. Man kann diese Verfahren als Modifikationen bekannter Standardverfahren auffassen, welche für zu große Maschen-Reynoldszahlen ortsabhängige Oszillationen ("wiggles") aufweisen und denen daher zusätzliche künstliche, physikalisch eigentlich nicht gerechtfertigte Diffusivität hinzugefügt wird, um diese örtlichen Oszillationen zu verhindern.

4.2 Der Übergang von CDS zu UDS als Einführung künstlicher Diffusivität

Die zuvor erwähnte zweifache Betrachtungsweise wird nachfolgend am Beispiel des Upwindverfahrens 1. Ordnung (UDS) erläutert. Dieser Sachverhalt ist auch schon in Abschnitt 2.3 beschrieben. Geht man von CDS zu UDS über, so ersetzt man die Differenzengleichung für CDS

$$u_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2 \Delta x} - \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

durch

$$u_i \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} - \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0 \quad ,$$

wobei vorausgesetzt sei, daß $u_i > 0$.

Man kann sich die Entstehung der zweiten Gleichung aus der ersten so vorstellen, daß bei der ersten Gleichung vom ersten Term noch

$$u_i \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{2 \Delta x}$$

abgezogen wurde. Zieht man diesen Wert vom zweiten Term ab und beläßt den ersten Term in der ursprünglichen Form, so hat jetzt die zweite Gleichung die Form

$$u_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2 \Delta x} - \left(\nu + \frac{u_i \Delta x}{2} \right) \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

oder

$$u_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2 \Delta x} - \nu \left(1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} \right) \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

in welcher der konvektive Term weiter durch eine zentrale Differenz angenähert wird, andererseits wird die Diffusionskonstante ν von Gleichung (1) durch eine Konstante $\nu (1 + (Re_{\Delta x, i})/2)$ ersetzt, welche als zusätzliche künstliche Diffusion $\nu ((Re_{\Delta x, i})/2)$ enthält. Es wurde schon erwähnt, daß bei diesem Übergang von CDS zu UDS die Ordnung des Verfahrens von $O(\Delta x^2)$ auf $O(\Delta x)$ reduziert wird.

Die Interpretation mit zusätzlicher künstlicher Diffusivität wird von einigen Autoren, z.B. Donea [53] nicht akzeptiert. Sie argumentieren vor allem mit Hinweis auf die lokal exakten Verfahren dahingehend, daß CDS zu wenig Diffusivität besitze („underdiffusive“) und die lokal exakten Verfahren wie ASS das korrekte Maß von Diffusivität beinhalten würden. Dem widerspricht, daß bei ASS und verwandten Verfahren die 'crosswind diffusion', die unphysikalische Diffusion senkrecht zur Strömungsrichtung, für große $Re_{\Delta x}$ ebenfalls beträchtlich ist.

Mit den beiden vorstehenden gleichwertigen Darstellungen von UDS wird deutlich, daß Ersetzung symmetrischer Näherungen für ϕ_i' durch einseitige Formeln einerseits und die Hinzunahme künstlicher Diffusivität zwei verschiedene Betrachtungsweisen des gleichen Sachverhalts sind.

4.3 Zusätzliche künstliche Diffusivität ohne zusätzliche Punkte

Die für den Übergang von CDS zu UDS gegebene Interpretation als Einführung künstlicher Diffusivität läßt sich ohne Schwierigkeiten auf Upwindverfahren höherer Ordnung übertragen. Es ist leicht festzustellen, inwieweit man sich diese entstanden denken kann aus einem Verfahren mit symmetrischer Näherung von ϕ_i' und der Hinzunahme von künstlicher Diffusivität der Ordnung zwei oder höherer Ordnung. Diese künstlichen Diffusivitäten in diskreter Form sind von der Form $\alpha \nabla_j^k \phi$, wobei k und j so gewählt sind, daß die ursprünglich involvierten Punkte in der Menge der in $\nabla_j^k \phi$ auftretenden Punkte enthalten sind. Wenn dann α hinreichend groß gewählt wird, weist der so neugebildete Differenzenausdruck einschließlich der künstlichen Diffusivität alternierende Koeffizientenvorzeichen auf. Diese Eigenschaft ist, wie in Kapitel 5 beschrieben, eine notwendige Bedingung dafür, daß keine ortsabhängigen Oszillationen auftreten.

n			
2	<p>CDS</p> <p>○ ● ○</p> <p>$O(\Delta x^2)$</p>	<p>$- ((Re_{\Delta x,i})/2)(\nabla_i^2 \phi)$ →</p> <p>○ ● ○</p> <p>$O(\Delta x)$</p>	<p>UDS</p> <p>○ ●</p> <p>$O(\Delta x)$</p>
3	<p>Agarwal</p> <p>○ ○ ● ○</p> <p>$O(\Delta x^3)$</p>	<p>$- ((Re_{\Delta x,i})/3)(\nabla_i^{3-1/2} \phi)$ →</p> <p>○ ○ ● ○</p> <p>$O(\Delta x^2)$</p>	<p>Atias et al.</p> <p>○ ○ ●</p> <p>$O(\Delta x^2)$</p>
4	<p>Formel P4</p> <p>○ ○ ○ ● ○</p> <p>$O(\Delta x^4)$</p>	<p>$- ((Re_{\Delta x,i})/3)(\nabla_i^{4-1} \phi)$ →</p> <p>○ ○ ○ ● ○</p> <p>$O(\Delta x^3)$</p>	<p>LUDS</p> <p>○ ○ ○ ●</p> <p>$O(\Delta x^3)$</p>

Tab. 4.3.1: Entstehung von einseitigen, invers-isotonen Differenzenverfahren der Polynomordnung $n-1$ mit n Punkten (rechte Spalte) zur Approximation von ϕ_i' aus nicht-invers-isotonen Verfahren der Ordnung n mit $n+1$ Punkten (linke Spalte) durch Hinzufügen eines Diffusionsterms der Ordnung n auf der vorgegebenen Punktmenge
 Formel P4 bedeutet:
 $\phi_i' \approx 1/(12\Delta x)(3\phi_{i+1} + 10\phi_i - 18\phi_{i-1} + 6\phi_{i-2} - \phi_{i-3})$.

Beispiele für die Bildung einseitiger Näherungen aus nichteinseitigen Formeln enthält Tabelle 4.3.1. Sie zeigt die Entstehung von einseitigen, invers-isotonen Verfahren der Polynomordnung $n - 1$ und n Punkten (rechte Spalte) aus nicht-invers-isotonen Verfahren der Ordnung n mit $n + 1$ Punkten (linke Spalte) durch Hinzufügen eines Diffusionsterms der Ordnung n (auf der rechten Seite bzw. subtrahieren auf der linken Seite) auf der vorgegebenen Punktmenge. Das nicht-invers-isotone Verfahren hat jeweils genau einen Punkt stromabwärts (Definition von Invers-Isotonie in 5.4.1).

Die unter $n = 4$ in der linken Spalte stehende Näherung P4 lautet

$$\frac{d\phi}{dx} \Big|_i \approx \frac{1}{12\Delta x} (3\phi_{i+1} + 10\phi_i - 18\phi_{i-1} + 6\phi_{i-2} - \phi_{i-3}).$$

Der Fall $n = 3$ dieser Tabelle

Agarwal	–	$((\text{Re}_{\Delta x, i})/3)(\nabla_{i-1/2} \phi)$	=	Atias et al.
○ ○ ● ○		○ ○ ● ○		○ ○ ●

lautet ausgeschrieben:

$$\text{Re}_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{3} \phi_{i+1} + \frac{1}{2} \phi_i - \phi_{i-1} + \frac{1}{6} \phi_{i-2} \right) = \left(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i \right)$$

physikalische Diffusion

$$- \frac{\text{Re}_{\Delta x, i}}{3} \left(\phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2} \right)$$

$$\text{Re}_{\Delta x, i} \left(\frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right) = \left(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i \right).$$

In der linken und der rechten Spalte bedeutet die Abkürzung $O(\Delta x^k)$:

Formel = $\phi_i' + O(\Delta x^k)$,

in der mittleren Spalte:

Ausdruck = $O(\Delta x^k)$.

Die Tabelle zeigt in der linken Spalte eine Differenzennäherung zur Approximation von ϕ_i' mit $n+1$ Punkten (- CDS als 3-Punktverfahren angesehen -), welche einen Punkt stromab verwendet und für Polynome vom Grade n exakt ist ($O(\Delta x^n)$). Diese Verfahren sind nicht frei von örtlichen Oszillationen, für $n=3$ finden wir die Näherung von Agarwal, für $n=4$ die Formel P4 ($u_i > 0$).

Bei diesen beiden letztgenannten Formeln wird jeweils ein Diffusionsterm der Ordnung n hinzugefügt, $((Re_{\Delta x,i})/n) \cdot (\nabla_{i+1-n/2}^n \phi)$, jeweils an einer geeigneten Zwischenstelle gewählt,

$$n = 3: \frac{Re_{\Delta x,i}}{3} (\phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) = \frac{Re_{\Delta x,i}}{3} \nabla_{i-\frac{1}{2}}^3 \phi$$

$$n = 4: \frac{Re_{\Delta x,i}}{4} (\phi_{i+1} - 4\phi_i + 6\phi_{i-1} - 4\phi_{i-2} + \phi_{i-3}) = \frac{Re_{\Delta x,i}}{4} \nabla_{i-1}^4 \phi,$$

um daraus eine einseitige Approximation mit einem Punkt weniger und der Ordnung $O(\Delta x^{n-1})$, welche nicht zu örtlichen Oszillationen führt, zu erhalten. Man kann sich für $n=3$ das Näherungsverfahren von Atias et al., für $n=4$ das Schema LUDS von Barrett so entstanden denken. Um eine ähnliche Feststellung wie beim Übergang von CDS zu UDS herzustellen, läßt sich sagen, daß das Verfahren von Atias et al. eigentlich das Verfahren von Agarwal ist, vermehrt um die künstliche numerische Diffusivität $((Re_{\Delta x,i})/3) \cdot (\nabla_{i-\frac{1}{2}}^3 \phi)$.

4.4 Zusätzliche Diffusivität mit mehr Punkten

Falls man durch das Hinzufügen von künstlicher Diffusivität die Konvergenzordnung $O(\Delta x^n)$ nicht verlieren möchte, muß man bei $(n+1)$ -Punkt-Näherungen der Ordnung n für ϕ_i' einen geeigneten Diffusionsterm der Ordnung $\geq n+1$ hinzufügen, was in jedem Fall (außer bei $n=2$) zu mehr Punkten führt.

Die beiden ersten Beispiele von Tabelle 4.4.1 für $n=2$ und $n=3$ enthalten wieder in der ersten Spalte die nicht oszillationsfreien Näherungen von Tabelle 4.3.1 und führen auf die Formeln von Atias et al. ($n=2$) und von Kawamura und Kuwahara ($n=3$). Zeile 3 zeigt eine ähnliche Verknüpfung des Verfahrens von Agarwal mit LUDS.

Ergänzend kann angemerkt werden, daß aus der symmetrischen Näherungsformel 4. Ordnung für ϕ_i' ,

$$Q4: \phi_i' \approx \frac{1}{12\Delta x} \left\{ -\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\}$$

durch Hinzufügen von $\frac{1}{4} \nabla^4_i \phi$ die Näherung von Kawamura und Kuwahara entsteht. Dies sieht in Symbolschreibweise folgendermaßen aus:

$$\begin{array}{ccc}
 (\text{Re}_{\Delta x, i}) \cdot Q4 - (\text{Re}_{\Delta x, i})/4)(\nabla^4_i \phi) & = & \text{Kawamura / Kuwahara.} \\
 \begin{array}{ccc}
 \circ \circ \bullet \circ \circ & \circ \circ \bullet \circ \circ & \circ \circ \bullet \circ \circ \\
 O(\Delta x^4) & O(\Delta x^3) & O(\Delta x^3)
 \end{array}
 \end{array}$$

n			
2	CDS  $O(\Delta x^2)$	$-\left(\frac{\text{Re}_{\Delta x,i}}{2}\right)(\nabla_i^3)$ →  $O(\Delta x^2)$	Atias et al.  $O(\Delta x^2)$
3	Agarwal  $O(\Delta x^3)$	$-\left(\frac{\text{Re}_{\Delta x,i}}{6}\right)(\nabla_i^4)$ →  $O(\Delta x^3)$	Kawamura/Kuwahara  $O(\Delta x^3)$
oder 3	Agarwal  $O(\Delta x^3)$	$-\left(\frac{\text{Re}_{\Delta x,i}}{3}\right)(\nabla_{i-1}^4)$ →  $O(\Delta x^3)$	LUDS  $O(\Delta x^3)$

Tab. 4.4.1: Entstehung von invers-isotonen Verfahren der Ordnung n mit $\geq n+1$ Punkten (rechte Spalte) aus nicht-invers-isotonen Verfahren der Ordnung n (linke Spalte) mit n Punkten durch Hinzufügen eines Diffusionsterms der Ordnung $n+1$ mit $n+2$ Punkten (mittlere Spalte).

4.5 Das Verfahren von Roos

Das inverse-isotone Verfahren von Roos [115] läßt sich mit Ausnahme der Randpunkte beschreiben als:

$$u_i \frac{1}{\Delta x} \left\{ \alpha_1 \phi_{i-2} + \alpha_2 \phi_{i-1} + \alpha_3 \phi_i + \alpha_4 \phi_{i+1} + \alpha_5 \phi_{i+2} \right\} - \sqrt{\frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2}} = 0$$

mit:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1/4 - 1/8 \alpha + 3/8 \beta \\ \alpha_2 &= -\beta \\ \alpha_3 &= 3/4 (\alpha + \beta) \\ \alpha_4 &= -\alpha \\ \alpha_5 &= 1/4 + 3/8 \alpha - 1/8 \beta . \end{aligned}$$

Für α und β sind bestimmte zulässige Werte einzusetzen. Umformung ergibt für die Klammer

$$\left\{ \quad \right\} = \frac{1}{4} (\phi_{i+2} - \phi_{i-2}) + \alpha \left(\frac{3}{8} \phi_{i+2} - \phi_{i+1} + \frac{3}{4} \phi_i - \frac{1}{8} \phi_{i-2} \right) + \beta \left(\frac{3}{8} \phi_{i-2} + \dots \right)$$

Der Koeffizient von α in dieser Darstellung erlaubt die Zerlegung

$$\begin{aligned} & \frac{3}{8} \phi_{i+2} - \phi_{i+1} + \frac{3}{4} \phi_i - \frac{1}{8} \phi_{i-2} \\ &= \frac{3}{8} (\phi_{i+2} - 3\phi_{i+1} + 3\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{1}{8} (\phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) \\ &= \frac{3}{8} \nabla^3_{i+\frac{1}{2}} \phi + \frac{1}{8} \nabla^3_{i-\frac{1}{2}} \phi . \end{aligned}$$

Da der Koeffizient von β entsprechend den Wert $1/8 \nabla^3_{i+1/2} \phi + 3/8 \nabla^3_{i-1/2} \phi$ hat, ist zu erkennen, daß zur Basisformel

$$\phi'_i = \frac{1}{4\Delta x} (\phi_{i+2} - \phi_{i-2}) + O(\Delta x^2)$$

zwei Diffusionsterme dritter Ordnung hinzugefügt sind, daß die Ordnung $O(\Delta x^2)$ erhalten bleibt. Die Werte α und β werden so ausgewählt, daß das Verfahren invers-isoton ist.

4.6 Die lokal exakten und verwandte Verfahren

In den bisher angeführten Beispielen wurde zu den problematischen (= nicht invers-isotonen = nicht oszillationsfreien) Verfahren jeweils, vom Faktor $Re_{\Delta x, i}$ abgesehen, ein fester Betrag numerischer Diffusion zur physikalischen Diffusion hinzugefügt, um ein verändertes, von Oszillationen freies Verfahren zu erhalten. Dieser feste Betrag ist so bemessen, daß er die günstige Eigenschaft der Näherungsformel behält, alternierende Koeffizientenvorzeichen für alle zulässigen $Re_{\Delta x, i}$ zu gewährleisten, auch für $Re_{\Delta x, i} \rightarrow \infty$. Eine Zwischenstellung nehmen die in Tabelle 4.6.1 in der mittleren Spalte aufgeführten Verfahren von Allen-Southwell ($n=2$), LECUSSO ($n=3$) und LSUDS ($n=4$) ein. Der Koeffizient der zugefügten numerischen Diffusion ist ortsabhängig variabel gewählt, nichtlinear abhängig von $Re_{\Delta x, i}$, so daß das entstehende Verfahren die gleiche Punktezahl und die gleiche Fehlerordnung wie die nicht-invers-isotonen Verfahren der linken Spalte aufweisen, jedoch invers-isoton sind. Dies kann für $n=3$ symbolisch zum Ausdruck gebracht werden:

$$\begin{array}{ccc}
 \text{Agarwal} - \lambda_i \cdot Re_{\Delta x, i} \cdot \nabla^3_{i-1/2} \phi & = & \text{LECUSSO} \\
 \begin{array}{ccc} \circ & \circ & \bullet & \circ \end{array} & & \begin{array}{ccc} \circ & \circ & \bullet & \circ \end{array} & & \begin{array}{ccc} \circ & \circ & \bullet & \circ \end{array} \\
 O(\Delta x^3) & & O(\Delta x^2) & & O(\Delta x^2)
 \end{array}$$

$$\lambda_i = \frac{e^\rho}{\rho} \cdot \frac{\frac{\rho}{2} (e^\rho + 1) - (e^\rho - 1)}{(e^\rho - 1)^2}, \quad \rho = Re_{\Delta x, i}$$

Bekanntlich sind die Verfahren von Allen-Southwell, LECUSSO und LSUDS sogenannte „lokal exakte“ Verfahren. Es gibt für $n=2$ ein weiteres verwandtes Verfahren, nicht lokal exakt, welches sich in Tabelle 4.6.1 statt Allen-Southwell einsetzen ließe, das Verfahren von Samarski. Es benützt 3 Punkte

n			
2	CDS  $O(\Delta x^2)$	Allen-Southwell  $O(\Delta x^2)$	 UDS  $O(\Delta x)$
3	Agarwal  $O(\Delta x^3)$	LECUSSO  $O(\Delta x^2)$	 Atias et al.  $O(\Delta x^2)$
4	P4  $O(\Delta x^4)$	LSUDS  $O(\Delta x^3)$	 LUDS  $O(\Delta x^3)$

Tab. 4.6.1: Der Übergang von nicht invers-isotonen Differenzenverfahren zu lokal exakten und zu einseitigen Verfahren.

P4: $\phi_i' \doteq 1/12\Delta x (3\phi_{i+1} + 10\phi_i - 18\phi_{i-1} + 6\phi_{i-2} - \phi_{i-3})$ ($u_i > 0$)

und ist ebenfalls $O(\Delta x^2)$. Es kann in der Form

$$u_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} - v \left(1 + \frac{\left(\frac{Re_{\Delta x, i}}{2}\right)^2}{1 + \frac{Re_{\Delta x, i}}{2}} \right) \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

$$\phi_i' + O(\Delta x^2) \quad 1 + O(\Delta x^2) \quad \phi_i'' + O(\Delta x^2)$$

geschrieben werden.

Man kann sich weitere Verfahren vorstellen, z.B. solche mit dem Verfahren von Kawamura-Kuwahara verwandte, jedoch mit adaptiv angepaßter künstlicher Diffusivität analog dem lokal exakten Verfahren oder vom Typ des Samarskischen Differenzenverfahrens. Einige solche denkbare, bisher in der Literatur nicht vorkommende Verfahren sind in Abschnitt 3.7 aufgeführt.

4.7 Künstliche Diffusivität bei Differenzenverfahren in Erhaltungsform

Die vorstehenden Betrachtungen über künstliche numerische Diffusion beschränken sich auf Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung in Konvektionsform. Entsprechende Interpretationen lassen sich für die Erhaltungsformen der angeführten Differenzgleichungen machen. Dies wird am Beispiel von CDS-C verdeutlicht. In 1-d lautet CDS-C

$$\frac{u_{i+1/2} \hat{\phi}_{i+1/2} - u_{i-1/2} \hat{\phi}_{i-1/2}}{\Delta x} - \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

mit $\hat{\phi}_{i+1/2} = 1/2(\phi_{i+1} + \phi_i)$, $\hat{\phi}_{i-1/2} = 1/2(\phi_i + \phi_{i-1})$.

Die Gleichung für CDS-C

$$\frac{u_{i+1/2} (\phi_{i+1} + \phi_i) - u_{i-1/2} (\phi_i + \phi_{i-1})}{2\Delta x} - \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

unterscheidet sich von UDS-C (für $u_{i\pm 1/2} \geq 0$)

$$\frac{u_{i+1/2} \phi_i - u_{i-1/2} \phi_{i-1}}{\Delta x} - \nu \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta x^2} = 0$$

durch den Term

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{u_{i+1/2} (\phi_{i+1} - \phi_i) - u_{i-1/2} (\phi_i - \phi_{i-1})}{\Delta x} = \frac{\Delta x}{2} \frac{u_{i+1/2} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \right) - u_{i-1/2} \left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x},$$

was eine diskrete Näherung für einen analytischen Ausdruck der Form

$$- \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{d}{dx} \left(u \frac{d\phi}{dx} \right)$$

darstellt und daher als diffusiver Effekt mit ortsabhängiger Diffusivität $u(x) \cdot \Delta x / 2$ aufgefaßt werden kann. Der Faktor $\Delta x / 2$ muß hier unabhängig als Vorfaktor angesehen werden. Falls bei anderen Verfahren die $\hat{\phi}_{i\pm 1/2}$ eine komplizierte Form haben, z.B. bei LECUSSO-C

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i) - \Lambda^+(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i),$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1}) - \Lambda^-(\phi_i + \phi_{i-2} - 2\phi_{i-1}),$$

unterscheidet sich dies von CDS-C durch

$$\frac{u_{i+1/2} \Lambda^+(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) - u_{i-1/2} \Lambda^-(\phi_i + \phi_{i-2} - 2\phi_{i-1})}{\Delta x},$$

dies entspricht einem kontinuierlichen Term der Form

$$\Delta x^2 \cdot \frac{d}{dx} \left(u \Lambda \frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)$$

mit einer ortsabhängigen Funktion $u(\mathbf{x}) \cdot \Lambda(\mathbf{x}) = u \cdot \Lambda$.

4.8 Schlußbemerkungen zur künstlichen Diffusion

Das Konzept der künstlichen Diffusivität bzw. künstlichen Viskosität, wie diese Größe bei der Aufnahme in Impulsgleichungen genannt wird, läßt sich bis zu Richtmyer und Morton [23] (1964) zurückverfolgen. Diese Idee wurde häufig bei der Berechnung reibungsloser Strömungen verwendet. Mittlerweile hat die Beschreibung dieser Technik Eingang in die neueren Lehrbücher gefunden, z.B. Peyret und Taylor [12], 1983 oder Hirsch [6], 1988. Dabei wird immer wieder an speziellen Beispielen erläutert, welcher Teil einer Differenzgleichung als künstliche Diffusivität anzusehen ist. Eine systematische Behandlung des Gegenstandes steht noch aus. Als vorläufiges Resultat des Autors mag angesehen werden, daß es sinnvoll ist, nicht einen konstanten Wert künstlicher Diffusivität zu verwenden, sondern einen flexibel angepaßten Betrag derselben in die anderenfalls nicht stabilen Gleichungen einzuführen, wie dies insbesondere die lokal exakten Differenzenverfahren tun. Dieser Weg wurde insbesondere bei dem vom Autor entwickelten LECUSSO-Verfahren eingeschlagen.

Zusammenfassend kann man feststellen, daß die vielfältigen Verfahren künstliche Diffusion entweder zweiter, dritter und/oder vierter Ordnung benutzen. In einigen Fällen wird ein fester Betrag dieser zusätzlichen Diffusion verwendet, ein variabler, vom Ort und der zugehörigen Maschen-Reynoldszahl abhängiger Wert künstlicher Diffusion wird bei manchen Verfahren hinzugefügt, wobei der genaue Wert entweder formelmäßig oder in einem 'trial and error'-Prozeß festgelegt wird. In jedem Falle beinhalten diese künstlichen Diffusionsterme den Faktor Δx , so daß sie für immer feiner werdende Maschennetze wirkungslos werden. Ein optimales Verfahren bezüglich Ordnung und Größe der künstlichen Diffusion gibt es nicht, da mit steigender Ordnung der Zusatz-Diffusion der rechnerische Aufwand ansteigt. Bei kompressiblem Medium hängt die Beurteilung des Verfahrens auch davon ab, wie gut das Verfahren Unstetigkeiten (Sprünge) numerisch annähern kann. Unstetigkeiten können auch als Anfangsbedingung bei transienten Konvektions-Diffusions-Problemen auftreten. Die numerische Rechnung zeigt dann auch für Differenzenverfahren, die nach unserer Bezeichnungsweise frei von örtlichen Oszillationen sind, eine gewisse Zeit Über- und Unterschwingungen nahe der Unstetigkeit, bis Diffusion die Unstetigkeit verschmiert hat und/oder bis man sich genügend der stationären Lösung genähert hat.

Bei der Analyse von Rechenverfahren wurde in den vergangenen Jahren herausgefunden, daß einige Methoden, welche das Upwind- oder das Hybridverfahren

verwenden, ein folgenschweres Fehlverhalten aufweisen können. Handelt es sich um turbulente Strömungen, so werden ausgeklügelte und teure Turbulenzmodelle benutzt, um turbulente Transportgrößen zu berechnen ('eddy transport'). Bei starken Strömungen, bei deren Berechnung z.B. UDS verwendet wird, erzeugt das Rechenverfahren soviel künstliche Viskosität, daß die zuvor berechnete turbulente Viskosität dagegen vernachlässigbar ist und damit ignoriert wird. Ein diesbezüglicher Hinweis findet sich z.B. bei Leonard [98]. Zur Behebung dieser Schwierigkeit zeichnet sich noch kein Ausweg ab.

5. THEORETISCHE ANALYSE VON DIFFERENZENVERFAHREN

5.1 Einleitung

Im vorliegenden Abschnitt werden die theoretischen Eigenschaften der in Kapitel 3 vorgestellten Differenzennäherungen untersucht. Ein besonderes Schwergewicht liegt dabei auf Verfahren, welche mehr als drei Punkte in einer Raumdimension verwenden. Der Abschnitt läßt sich grob in zwei Teilbereiche unterteilen, die nachfolgend kurz umrissen werden.

- a) Zunächst werden die Fehler der Näherungen behandelt. Diese Betrachtung geht aus vom lokalen Abbruchfehler der Näherungen; wenn er verschwindend klein wird für immer kleiner werdende Maschenweiten, spricht man von "Konsistenz des Verfahrens" in der Ausdrucksweise der Lösungsverfahren für partielle Differentialgleichungen - und untersucht dann die Fortpflanzung einzelner Fehler und das Zusammenwirken der einzelnen Fehler ("Stabilität des Verfahrens"). Konsistenz und Stabilität sind die Voraussetzungen für die "Konvergenz" eines Verfahrens, d.h. die Fehler der Näherungslösungen werden für unbeschränkt wachsende Verfeinerung der Schrittweiten Δt und Δx gegen Null ebenfalls immer kleiner und konvergieren gegen Null.
- b) Neben dem Wunsch nach einer guten Konvergenz eines Verfahrens ist man oft daran interessiert, daß die berechnete Näherungslösung Eigenschaften besitzt, wie sie die kontinuierliche Lösung eines Konvektions-Diffusions-Problems aufweist. Dies sind beispielsweise Nichtnegativität, Monotonie oder Krümmungsverhalten einer Lösung. Hintergrund dieser Forderung ist, daß bei vielen in der Vergangenheit benützten Rechenverfahren unerwünschte und physikalisch nicht sinnvolle ortsabhängige Oszillationen aufgetreten sind. Es werden Bedingungen für einfache Formen von Differenzengleichungen angegeben, die die genannten Eigenschaften für eine numerische Lösung sicherstellen.

5.2 Konsistenz, Stabilität, Konvergenz

Die grundlegenden Begriffe der klassischen Analyse von Differenzennäherungen gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen sind Konsistenz, Stabilität und Konvergenz.

Eine Differenzennäherung für einen Differentialoperator wird konsistent genannt, wenn die Näherung für beliebige Verfeinerung den Wert des Differentialquotienten annimmt. Meist läßt sich die Differenz zwischen Näherung und Ausgangsausdruck formelmäßig als Funktion von Schrittweiten und höheren Ableitungen angeben, aus denen unmittelbar zu ersehen ist, ob Konsistenz vorliegt.

Wir verdeutlichen dies an zwei Differenzennäherungen für die erste Ableitung einer Funktion $\phi(x)$ im Punkte x_i , wobei $\phi_i = \phi(x_i)$ sei. Die eine Näherung sei

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x}$$

die zweite

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$$

Wegen

$$\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} = \phi_i' + \frac{\Delta x^2}{6} \cdot \phi_i''' + O(\Delta x^4) ,$$

bzw. wegen

$$\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \phi_i' - \frac{\Delta x}{2} \cdot \phi_i'' + O(\Delta x^2) ,$$

ist die Konsistenz der Differenzennäherungen für $\Delta x \rightarrow 0$ gewährleistet.

In diesem Sinne sind alle hier vorgestellten Näherungen konsistente Näherungen.

Der Begriff der Stabilität wird fast ausschließlich im Zusammenhang mit transienten Problemen für partielle Differentialgleichungen verwendet. Es soll verhindert werden, daß auftretende Fehler (Abbruchfehler, Rundungsfehler, ...) unbeschränkt anwachsen können, wenn über die Zeit weitergerechnet wird. Eine relativ allgemeine Definition von Stabilität, die auf Lax und Richtmyer [83] (1956) zurückgeht und von Richtmyer und Morton [23] (1967) entwickelt wurde, stützt

sich auf das zeitabhängige Verhalten der numerischen Lösung. Dieses Stabilitätskriterium verlangt, daß keine Komponente des anfangs vorgegebenen Zustands unbeschränkt wachsen darf.

Wenn sich alle Unbekannten, die Werte ϕ_i^n , für alle Maschenpunkte i und alle diskreten Zeitpunkte $k \cdot \Delta t$, $k = 1, 2, \dots$, in einen Vektor ψ^n , der zum Zeitpunkt $n \cdot \Delta t$ definiert sei, zusammenfassen lassen, ist

$$\psi^n = \begin{pmatrix} \phi_1^n \\ \vdots \\ \phi_{i-1}^n \\ \phi_i^n \\ \phi_{i+1}^n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Als Funktion dieses zeitabhängigen Vektors ψ^n kann das Differenzenverfahren in Matrixform geschrieben werden als

$$\psi^{n+1} = C \cdot \psi^n$$

mit einer Matrix C , welche sowohl vom Zeitschritt Δt als auch von der Maschenweite Δx abhängt.

Dies soll an einem Beispiel erläutert werden. Es ist schon gezeigt worden, daß für FTCS

$$C = \begin{pmatrix} 1 - 2d & d + c/2 & & & & & \\ d - c/2 & 1 - 2d & d + c/2 & & & & \\ & d - c/2 & 1 - 2d & d + c/2 & & & \\ & & d - c/2 & 1 - 2d & d + c/2 & & \\ & & & d - c/2 & 1 - 2d & d + c/2 & \\ & & & & d - c/2 & 1 - 2d & d + c/2 \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$= (d - c/2, \underline{1 - 2d}, d + c/2).$$

Damit ψ^n beschränkt bleibt, muß die Folge der Matrixprodukte C^n beschränkt bleiben, d.h. es muß die Norm von C^n

$$\|C^n\| < K$$

für $0 < \Delta t < \tau$ und $0 \leq n \cdot \Delta t \leq T$ beschränkt bleiben für feste Werte von τ und T und alle n . T ist die untersuchte Zeitdauer. Die obige Ungleichung beinhaltet auch die Einführung einer geeigneten Matrizennorm.

Es gibt mehrere Verfahren, um die Stabilität einer Differenzgleichung zu prüfen. Die bekannteste und gebräuchlichste ist die auf von Neumann zurückgehende Methode, die mit einer Fourierlegung des Fehlers des Differenzenverfahrens arbeitet. Die Fouriersche Methode zur Untersuchung der Stabilität nimmt an, daß sich die Lösung $\phi(x,t)$ von

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - v \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0$$

schreiben läßt als

$$\phi(x,t) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} g_j(t) e^{ikx}$$

bzw. die Lösung der Differenzgleichung als

$$\phi(x,t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} g_k(t) e^{ikx}$$

für alle k , wobei $i = \sqrt{-1}$.

Wenn Stabilität vorliegt, darf während des Rechengangs kein einzelner Summand aus dieser Summe unbeschränkt anwachsen bzw. jeder Term dieser Summe muß beschränkt bleiben. Setzt man einen solchen Ausdruck in die Differenzgleichung ein, - dies wird hier einmal für FTCS getan -,

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n + \frac{c}{2} (\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) + d (\phi_{j+1}^n + \phi_{j-1}^n - 2\phi_j^n),$$

mit $c = u(\Delta t/\Delta x)$, $d = (v \cdot \Delta t)/(\Delta x^2)$, so erhält man

$$g_k(t^{n+1}) e^{ikx_j} = g_k(t^n) \left[e^{ikx_j} + \frac{c}{2} (e^{ik(x_j+\Delta x)} - e^{ik(x_j-\Delta x)}) + d \dots \right]$$

und der Anfachungsfaktor G ist

$$G = \frac{g_k(t^{n+1})}{g_k(t^n)} = \left(1 + \frac{c}{2} (e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}) + d(e^{ik\Delta y} + e^{-ik\Delta x} - 2) \right)$$

bzw.

$$G = 1 - ic \sin \Delta x + 2d(\cos k\Delta x - 1)$$

Dieser Faktor läßt sich in einer komplexen Zahlenebene als komplexe Zahl darstellen, wird der Parameter $k \cdot \Delta x$ variiert, so beschreibt der Punkt dazu eine Ellipse mit den Halbachsen $2d$ und c mit Mittelpunkt in $(1 - 2d, 0)$. Die Bedingung für Stabilität ist, daß die Ellipse im Einheitskreis liegt, dies bedeutet, daß $|G| \leq 1$ und dies ist gleichbedeutend damit, daß numerische Stabilität vorliegt.

Daneben gibt es noch die Matrixmethode, welche den Einfluß von Randbedingungen auf das Stabilitätsverhalten von Differenzenverfahren berücksichtigt und einige weitere, zum Teil heuristische Verfahren wie die Methode von Hirt (1968) [109]. Als wesentliche Bedingungen für stabiles Verhalten von Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung ergeben sich in irgendeiner Form

1) eine Courantzahlbedingung

und

2) ein Diffusionskriterium.

Diese beiden Kriterien ergeben sich daraus, daß $|G| \leq 1$ sein muß. Die erste Bedingung, auch CFL-Kriterium genannt, nach Courant, Friedrichs und Levy [47], verlangt eine Beschränkung des Betrages der Courantzahl

$$c = u \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Die genaue Form des Kriteriums hängt von der Dimensionalität des Problems, der Geometrie sowie der Form des Differenzenverfahrens ab. Für UDS muß $|c| \leq 1$ sein.

Die Einhaltung der zweiten Bedingung ist nur bei expliziten Differenzenverfahren notwendig. Im Falle von FTCS, wenn

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

mittels

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{c_i}{2} (\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n) + d (\phi_{i+1}^n + \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n)$$

gelöst wird,

$$c_i = u_i \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad d = \frac{\nu \cdot \Delta t}{\Delta x^2}$$

lautet diese Bedingung

$$d = \frac{\nu \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

Diese letztgenannte Bedingung ist oft sehr einschneidend, da bei Verfeinerungen des örtlichen Maschennetzes auch der Zeitschritt Δt verkleinert werden muß und damit der rechnerische Aufwand stark ansteigt. Bei Halbierung von Δx muß Δt auf ein Viertel zurückgenommen werden, um d gleichgroß zu halten. Bei manchen Differenzenverfahren tritt noch eine weitere Stabilitätsbedingung auf. Damit das Verfahren stabil bleibt, muß eine sogenannte Maschen-Reynoldszahlbedingung eingehalten werden.

Für CDS findet man als Stabilitätsbedingung

$$\left| Re_{\Delta x, i} \right| \leq \frac{2}{c}$$

siehe z.B. Hindsmarsh et al. [72].

Von den untersuchten Differenzenverfahren gibt es für das Verfahren von Agarwal und Leonards QUICK-Verfahren ähnliche Beschränkungen. Diese für CDS gegebene Bedingung sichert tatsächlich numerische Stabilität, man weiß jedoch schon lange, daß vernünftige (d.h. oszillationsfreie) numerische Lösungen nur für $|Re_{\Delta x, i}| \leq 2$ zu erhalten sind, siehe auch dazu Hindsmarsh et al. [72].

Die numerische Lösung ϕ_i^n sollte sich für feiner werdende Diskretisierungen immer mehr der exakten Lösung des kontinuierlichen Problems annähern und dann, wenn Maschenweite Δx und Zeitschritt $\Delta t \rightarrow 0$ gehen, in diese Lösung übergehen. Falls dies für ein Differenzenverfahren gesichert ist, nennt man das Verfahren konvergent.

Der Zusammenhang zwischen Konsistenz, Stabilität und Konvergenz ist in dem grundlegenden Äquivalenzsatz von Lax [83] (1956) enthalten. Dieser Satz besagt:

Für ein korrekt gestelltes Anfangswertproblem und eine konsistente diskrete Approximation ist Stabilität der Approximation eine notwendige und hinreichende Bedingung für Konvergenz.

Ausführlichere Aussagen zum Zusammenhang zwischen Konsistenz, Stabilität und Konvergenz benutzen in starkem Maße die Ordnung, mit der die Abbruchfehler sowie die Ordnung des Gesamtfehlers mit der Schrittweite Δx gegen Null gehen, Ansorge und Geiger [31].

Die Schwäche des Konzepts von Konsistenz, Stabilität und Konvergenz liegt darin, daß Stabilität jeweils für ganz bestimmte oder eine bestimmte Diskretisierung festgestellt werden, welche dann auch ein stabiles Rechenverfahren sichert, während Konsistenz und Konvergenz Eigenschaften sind, die für hinreichend feine Diskretisierungen gesichert sein müssen. Für die Bewertung der Güte einer Berechnung mit einer fest gewählten Diskretisierung sind Konvergenzaussagen wenig hilfreich. Das Vorliegen eines stabilen Verfahrens allein garantiert noch keine vernünftige Rechenergebnisse.

Man kann die in Abschnitt 5.4 folgenden Erläuterungen um Nichtnegativität, Monotonie usw. auch so ansehen, daß eine Art Konsistenz Eigenschaft oder Konsistenzbedingung für bestimmte feste Diskretisierungen festgestellt werden soll.

Der für transiente Probleme entwickelte Stabilitätsbegriff bringt den Fehler der numerischen Näherung mit dem Abbruchfehler in den einzelnen Punkten zu den jeweiligen Zeitpunkten in Zusammenhang und soll sicherstellen, daß nicht relativ kleine Fehler an einer Stelle (bestimmter Ort und bestimmte Zeit) an einer anderen Stelle gravierende Fehler erzeugen. Diese Betrachtungsweise ist auch bei zeitunabhängigen Fragestellungen sinnvoll. Dann heißt es, den Einfluß der lokalen Approximationen auf das Gesamtfehlerverhalten zu untersuchen. Diese weniger gebräuchliche Betrachtungsweise besagt am Beispiel von CDS, daß der lokale Abbruchfehler, das Grundelement der Konsistenz, die formale Ordnung $O(\Delta x^2)$ besitzt, und damit Konsistenz vorliegt, daß aber das Zusammenwirken der einzelnen örtlichen Fehler für nicht genügend kleine Schrittweite Δx zu einer unakzeptablen, physikalisch sinnlosen numerischen Lösung führt.

Man kann die beschriebenen Zusammenhänge zwischen Konsistenz, Stabilität und Konvergenz formelmäßig auf folgende Weise ausdrücken: Es sei (in einem jetzt nicht näher beschriebenen mathematischen Raum) $A \cdot x = b$ die zu lösende Gleichung, A sei der Operator, x die Unbekannte, b die gegebene rechte Seite, die Näherungsgleichung sei $A_h x_h = b$ mit dem diskreten Operator A_h und der gesuchten Lösung x_h , $h = \Delta x$ als Kennzeichen für die diskretisierten Größen. Man kann nicht die gefundene Näherungslösung, deren Wert nur in einzelnen Punkten bekannt ist, in die kontinuierliche Gleichung einsetzen, um zu prüfen, wie gut sie die ursprüngliche Gleichung erfüllt. Man kann aber die exakte Lösung, die jetzt auch x heißen soll, in die Näherungsgleichung einsetzen; dann gibt die Größe $d_1 := A_h x - b$ ein Maß für die Güte der Näherung A_h . Man nennt diesen Wert "Abbruchfehler" (engl. "truncation error"). Auch die Schreibweise $(A_h - A)x = d_1$ ist gleichwertig: Subtrahiert man

$$\begin{aligned} A_h x - b &= d_1 \\ A_h x_h - b &= 0, \\ \hline A_h(x - x_h) &= d_1 = (A_h - A)x, \end{aligned}$$

so erhält man für den Fehler der numerischen Lösung (engl. "discretization error")

$$\underbrace{x - x_h}_{\text{Fehler}} = \underbrace{(A_h)^{-1} \cdot d_1}_{\text{Abbruchfehler}} = \underbrace{(A_h)^{-1} (A_h - A)x}_{\text{Stabilität Konsistenz}} .$$

Diese Gleichung zeigt, daß Fehler und Abbruchfehler über das Inverse der Matrix A_h unserer Näherungsgleichung in Verbindung stehen. Diese Inverse ist das Maß für die Stabilität des Differenzenverfahrens. Je kleiner in irgendeinem Sinne A_h^{-1} bei gleichem Abbruchfehler für ein Differenzenverfahren ist, desto kleiner wird der Fehler der Näherung.

Günstig sind Verfahren, bei den $(A_h)^{-1} \geq 0$, weil dies gleichbedeutend damit ist, daß das Verfahren die in 5.4.1 beschriebene Eigenschaft der Invers-Isotonie besitzt.

5.3 Konvergenzordnung für betragsgroße Reynoldszahlen

Zu den wichtigen Eigenschaften von Differenzengleichungen ohne Maschen-Reynoldszahlbeschränkung gehört ihr Verhalten für $|\text{Re}_{\Delta x}| \rightarrow \infty$. Einige Verfahren haben in diesem Falle eine schwächere Fehlerordnung als für endliche $\text{Re}_{\Delta x}$, siehe z. B. Kellogg und Tsan [81].

Die Konvektions-Diffusionsgleichung

$$\text{Re}(x)\phi' - \phi'' = 0$$

wird hier ausnahmsweise, wie häufig bei mathematischen Untersuchungen, in der Form als Störungsproblem

$$\varepsilon\phi'' + b\phi' = 0$$

mit kleinem ε geschrieben mit

$$\varepsilon = \frac{1}{\max_{x \in [0,1]} |\text{Re}(x)|}, \quad b = \frac{\text{Re}(x)}{\max_{x \in [0,1]} |\text{Re}(x)|},$$

Für $|\text{Re}_{\Delta x}| \rightarrow \infty$, d.h. für $\varepsilon \rightarrow 0$ erhält man die "reduzierte Gleichung" $\phi' = 0$. Da diese reduzierte Gleichung eine Differentialgleichung erster Ordnung ist und damit eine andere Ordnung als die ursprüngliche Konvektions-Diffusionsgleichung hat, kann eine der beiden Randbedingungen für die ursprünglich vorliegende Gleichung von der Lösung der reduzierten Gleichung nicht erfüllt werden. Man bezeichnet diese Aufgabe deshalb als "singuläres Störungsproblem".

Bei den Differenzennäherungen mit festen Koeffizienten liegt entweder eine Maschen-Reynoldszahlbeschränkung vor, dann ist die Frage nach dem Verhalten für $\varepsilon \rightarrow 0$ nicht sinnvoll, oder die Konvergenzordnung des Verfahrens gilt auch für $\varepsilon \rightarrow 0$.

Interessant wird die Frage der Veränderung der Konvergenzordnung für die lokal exakten und den mit ihnen verwandten Verfahren wie ASS, Samarski, LECUSSO und LSUDS.

Es zeigt sich, daß ASS und das Verfahren von Samarski, welche für festes $\varepsilon > 0$ von der Fehlerordnung $O(\Delta x^2)$ sind, im Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ in Verfahren der Ordnung $O(\Delta x)$ übergehen. Sie gehen für $\varepsilon \rightarrow 0$ in UDS über.

Entsprechende Überlegungen sind für die OCI-Verfahren durchgeführt worden. In [36] wird gezeigt, daß jene Verfahren für $\varepsilon=0$ von der Ordnung $O(\Delta x^4)$ sind, für $\varepsilon \rightarrow 0$ gehen sie in Verfahren der Ordnung $O(\Delta x^2)$ über. Das Problem der Konvergenz und der gleichförmigen Konvergenz von Differenzenverfahren unabhängig vom Wert von ε ist mit dem Kenntnisstand bis etwa 1980 in dem Buch von Doolan et al. [15] behandelt.

Man kann unabhängig von der Erniedrigung der Konvergenzordnung für $\varepsilon \rightarrow 0$ die Frage nach der Gestalt des Differenzenverfahrens für $\varepsilon \rightarrow 0$ stellen. LECUSSO geht für $\varepsilon \rightarrow 0$ in das Verfahren von Atias et al. über, LSUDS hat als Grenzform für $\varepsilon \rightarrow 0$ LUDS. Das Verfahren NONAME (Indizes $i+2$ bis $i-2$, exakt für die Funktionen $\{1, x, x^2, e^{\rho x}, x e^{\rho x}\}$ mit $\rho = 1/\varepsilon$) geht für $\varepsilon \rightarrow 0$ jeweils in die seitengerechte Form des Verfahrens von Atias et al. über.

Das Verfahren, welches die Punkte mit den Indizes $i+2$ bis $i-2$ nützt und exakt ist für die Funktionen $\{1, x, x^2, e^3, e^{\rho x}\}$, hat als Grenzform für $\varepsilon \rightarrow 0$ das Verfahren von Agarwal. Dieses Verfahren ist bekanntlich für große $|\rho|$ oszillierend und damit wertlos. Wir skizzieren hier kurz den Gedankengang, wie man dies nachweist;

Es soll $\phi_i' \doteq A\phi_{i+2} + B\phi_{i+1} + C\phi_i + D\phi_{i-1} + E\phi_{i-2}$ sein, wobei die A, B, C, D und E aus den Gleichungen

$$\begin{array}{rcccccccc}
 A & + & B & + & C & + & D & + & E & = & 0 \\
 2A & + & B & + & & & -D & - & 2E & = & \rho' \\
 4A & + & B & & & & +D & + & 4E & = & -2 \\
 8A & + & B & & & & -D & - & 8E & = & 0 \\
 e^{2\rho'}A & + & e^{\rho'}B & & & & -e^{-\rho'}D & - & e^{-2\rho'}E & = & 0
 \end{array}$$

($\rho' = \rho\Delta x$) bestimmt werden. Die letzte Gleichung macht nach Multiplikation mit $e^{-2\rho'}$ deutlich,

$$A + e^{-\rho'}B - e^{-3\rho'}D - e^{-4\rho'}E = 0 \quad ,$$

daß A Null wird für $|\rho| \rightarrow \infty$. Da dann die letzte Gleichung erfüllt ist und wegfällt, verbleiben die oberen vier Gleichungen, darin $A=0$ gesetzt, die genau die Bedingungen an die Koeffizienten des Agarwal-Verfahrens darstellen.

5.4 Nichtnegativität, Monotonie und Krümmungsverhalten der numerischen Lösungen

Die Gleichung

$$\operatorname{Re}(x)\phi' - \phi'' = 0$$

läßt sich formal integrieren, die Lösung lautet

$$\phi(x) = C_1 + C_2 \int_0^x e^{\int_0^{x'} \operatorname{Re}(x'') dx''} dx' .$$

Sind für das Intervall $0 \leq x \leq 1$ die Randwerte $\phi(0) = \phi_l$ und $\phi(1) = \phi_r$, so ist

$$\phi(x) = \phi_l + (\phi_r - \phi_l) \frac{\int_0^x e^{\int_0^{x'} \operatorname{Re}(x'') dx''} dx'}{\int_0^1 e^{\int_0^{x'} \operatorname{Re}(x'') dx''} dx'} =: \phi_l - (\phi_r - \phi_l) \alpha(x).$$

Zunächst ist klar, daß $\phi(x) \geq 0$, falls $\phi_l \geq 0$ und $\phi_r \geq 0$, da ja

$$\phi(x) = (1 - \alpha(x)) \phi_l + \alpha(x) \cdot \phi_r ,$$

und damit hat $\phi'(x)$ im ganzen Intervall das Vorzeichen von $\phi_l - \phi_r$. Eine entsprechende Feststellung trifft auf $\phi''(x)$ zu, falls $\operatorname{Re}(x)$ im Intervall ein einheitliches Vorzeichen hat. Dann hat $\phi(x)$ auch keine Wendepunkte.

Es wäre wichtig, wenn die für die Lösung des kontinuierlichen Problems gezeigten Eigenschaften auch gesichert wären, wenn das Problem mit einem Differenzenverfahren numerisch gelöst wird. Zunächst wäre zu demonstrieren, daß $\phi_j \geq 0$ für alle j , falls $\phi_l, \phi_r \geq 0$. Entsprechende Eigenschaften des Differenzenverfahrens wären für die Differenzen $\nabla_{j-1/2} \phi = (\phi_j - \phi_{j-1})$ und, falls $\operatorname{Re}(x)$ das Vorzeichen nicht wechselt, auch für $\nabla^2_j \phi = \phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}$ zu zeigen. Es ist sofort einzusehen, daß monotonen Verhalten der ϕ_j , d.h. $\nabla_{j-1/2} \phi$ hat ein einheitliches Vorzeichen, sichert, daß entweder $\phi_l \leq \phi_j \leq \phi_r$ oder $\phi_l \geq \phi_j \geq \phi_r$ für alle j . Falls dann $\phi_l, \phi_r \geq 0$ sind, ist damit auch gezeigt, daß alle $\phi_j \geq 0$.

Diese Nachweise wie Monotonie der ϕ_j sind deshalb von beträchtlicher Bedeutung, weil sie eine hinreichende Bedingung dafür sind, daß ortsabhängige Oszillationen für die Lösung der zugehörigen Differenzgleichung ausgeschlossen werden können!

5.4.1 Matrixmethoden

Die Ungleichungen $\phi_l \leq \phi_j \leq \phi_r$ bzw. $\phi_l \geq \phi_j \geq \phi_r$ beinhalten für beliebige ϕ_l und ϕ_r eine andere anschauliche Sprechweise für "Oszillationsfreiheit", die besagt, daß solche Differenzgleichungen einem sogenannten (hier: diskreten) "Maximumprinzip" genügen. Dieses Prinzip sichert, daß bei elliptischen Aufgabenstellungen die Extrema der Lösungen nur auf dem Rand liegen können.

Die Nachweise, daß die ϕ_j , $\phi_j - \phi_{j-1}$ und auch die $\nabla^2_j \phi$ unter gewissen Umständen nichtnegativ sind, können in manchen Fällen direkt geführt werden. Dies sei am Beispiel von CDS erläutert:

Wir nehmen an, es sei $|\text{Re}_{\Delta x, i}| \leq 2$ für alle i . Das Differenzgleichungssystem lautet dann mit $\rho_i = \frac{1}{2} \text{Re}_{\Delta x, i}$:

$$\begin{array}{rcl}
 2\phi_1 - (1 - \rho_1) \phi_2 & & = (1 + \rho_1)\phi_1 \\
 -(1 + \rho_2) \phi_1 + 2\phi_2 - (1 + \rho_2) \phi_3 & & = 0 \\
 -(1 + \rho_3) \phi_2 + 2\phi_3 - (1 - \rho_3) \phi_4 & & = 0 \\
 & \cdot & = (1 - \rho_{N-1})\phi_r
 \end{array}$$

Es soll $\phi_l, \phi_r \geq 0$ sein. Falls $\phi_l = \phi_r = 0$, sind alle $\phi_j = 0$. Diesen Fall schließen wir aus und verlangen, daß zumindest einer der beiden Werte ϕ_l und ϕ_r positiv sein soll.

Schreiben wir das Gleichungssystem in Matrix- und Vektornotierung

$$A\phi = \underline{b} \quad .$$

wobei \underline{b} der Vektor der rechten Seite, so läßt sich die Koeffizientenmatrix in Kurzschreibweise in der Form

$$A = \{-(1 + \rho_j), \underline{2}, -((1 - \rho_j))\}$$

darstellen. Diese Matrix ist eine reelle, irreduzibel diagonaldominante Matrix mit nichtpositiven Außerdiagonalelementen ($a_{i,j} \leq 0$ mit $i \neq j$) und positiven Hauptdiagonalelementen ($a_{i,i} > 0$ für alle i). Daher ist $A^{-1} > 0$, siehe Varga [25], p. 85, Korollar 1. A ist daher auch eine M -Matrix. Eine M -Matrix ist so definiert, daß sie Elemente $a_{i,j} \leq 0$ für $i \neq j$ hat, nichtsingulär ist und außerdem $A^{-1} \geq 0$ ist. Mit $A^{-1} \geq 0$ gelingt es zu zeigen, weil auch $\underline{b} \geq 0$, daß $\underline{\phi} = A^{-1} \underline{b} \geq 0$.

Eine Matrix der eben beschriebenen Form, d.h. eine reelle (n,n) -Matrix B heißt invers-isoton (oder von monotoner Art), wenn B invertierbar ist und alle Elemente B^{-1} nichtnegativ sind. Solche Matrizen besitzen zahlreiche Anwendung in der numerischen Mathematik, z.B. Collatz [46].

Ein Schwergewicht unserer Untersuchungen liegt bei Differenzennäherungen, die in 1-d mehr als drei Punkte verwenden oder bei denen bei dreien zwei auf einer Seite des zentralen Stützpunktes liegen. In diesen Fällen ist A fast immer (Ausnahme: Verfahren von Gushchin-Shchennikov) keine Matrix mit Koeffizienten $a_{i,j} \leq 0$ außerhalb der Hauptdiagonalen. In einigen Fällen kann man zeigen, daß sich A als Produkt von zwei Matrizen der oben beschriebenen Form schreiben läßt als $A = B \cdot C$, und weil $B^{-1} \geq 0$ und $C^{-1} \geq 0$, gilt auch

$$A^{-1} = (B \cdot C)^{-1} = C^{-1} \cdot B^{-1} \geq 0 .$$

Ein einfaches Beispiel für eine solche Zerlegung, - das erste, bei dem ein solcher Nachweis geführt wurde, Varga [118], - ist die Fünf-Punkt-Differenzennäherung der Ordnung $O(\Delta x^4)$ für die 1-d-Diffusionsgleichung,

$$\left. \frac{d^2 \phi}{dx^2} \right|_i \approx \frac{1}{12 \Delta x^2} \left\{ \phi_{i+2} - 16 \phi_{i+1} + 30 \phi_i - 16 \phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right\} ,$$

Die Matrix des Differenzengleichungssystems kann bis auf den vor der Klammer stehenden Faktor $1/12 \Delta x^2$ geschrieben werden als $(1, -16, \underline{30}, -16, 1)$ und läßt sich zerlegen als

$(1, -16, \underline{30}, -16, 1) = (-1, \underline{2}, -1)(-1, \underline{14}, -1)$. Beide Teilmatrizen haben offensichtlich ein nichtnegatives Inverses.

Allgemeine Sätze über Matrizen, die bei der Anwendung von Differenzenverfahren entstehen und sich als Produkt von M -Matrizen schreiben lassen, stammen von Lorenz [102].

Um nun unter den gleichen Voraussetzungen für die Differenzen $(\phi_i - \phi_{i-1})$ ein einheitliches Vorzeichen zu beweisen, schreibt man die Differenzengleichungen in Form von ersten Differenzen. Dies sieht bei CDS folgendermaßen aus:

$$(\rho_i + 1)(\phi_{i+1} - \phi_i) - (1 - \rho_i)(\phi_i - \phi_{i-1}) = 0 \quad .$$

Die Matrix $(0, 1 + \rho_i, -1 + \rho_i)$ dieses Gleichungssystems für die $(\phi_{i+1} - \phi_i)$ ist wieder von der Form wie zuvor A, bzw. hier hat man einfach die Rekursionsformel

$$(\phi_{i+1} - \phi_i) = \frac{1 - \rho_i}{1 + \rho_i} (\phi_i - \phi_{i-1}) \quad ,$$

mit $\phi_1 - \phi_0 \geq 0$, so daß alle $\phi_{i+1} - \phi_i \geq 0$, solange $|\rho_i| < 1$, was vorausgesetzt wurde. Das "Krümmungsverhalten" ergibt sich hier bei CDS nahezu von selbst. Es ist

$$\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1} = \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1})$$

und damit hat $\Delta_i^2 \phi = \phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}$ nur ein Vorzeichen:

Die Darstellung einer Differenzennäherung für die Konvektions-Diffusionsgleichung in der Form erster Differenzen mit benachbarten Indizes ist unter relativ allgemeinen Bedingungen möglich. Dies wurde in Abschnitt 2.4 bei der Definition der Erhaltungsform eines Differenzenverfahrens schon gezeigt.

Im Falle allgemeiner Differenzengleichungen ist der Nachweis korrekten Krümmungsverhaltens,

$$\text{d.h. } \phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1} \geq 0, \text{ falls es möglich ist,}$$

für Aufgaben mit $Re(x) \geq 0$ in $[0,1]$ nicht immer auf der Hand liegend und muß für den speziellen Einzelfall erbracht werden.

Wo der Nachweis der Monotonie nicht aus der Matrix des Gleichungssystems für die $(\phi_j - \phi_{j-1})$ herleitbar ist, kann folgendermaßen argumentiert werden, falls

$$\text{a) } \phi_l \text{ und } \phi_r \geq 0, |\phi_l| + |\phi_r| > 0 \text{ und}$$

b) die Matrix A in $A\phi = \underline{b}$ eine M-Matrix ist.

Es sei der Einfachheit halber $\phi_l < \phi_r$. Dann ist auf jeden Fall $\phi_1 \geq \phi_l$, weil alle ϕ_j zwischen ϕ_l und ϕ_r liegen (Nichtnegativität). Wir betrachten dann $\phi_{1,\text{neu}} = \phi_l$ als gegebenen Randwert im Punkte $x = x_1$ für das neue, verkleinerte Intervall $[x_1, 1]$, streichen die Gleichung für ϕ_1 und beschränken uns auf das restliche Gleichungssystem für $j = 2, 3, \dots, N-1$. Offensichtlich läßt sich auch für die Matrix A_r des reduzierten Problems zeigen, daß $A_r^{-1} \geq 0$, der neue Rechte-Seite-Vektor \underline{b}_r ist auch ≥ 0 , so daß zunächst $\phi_j \geq \phi_l$ für $j \geq 2$ und damit auch $\phi_2 \geq \phi_1$. Dieser Schritt läßt sich nacheinander für alle j durchführen und sichert, daß $\phi_{j+1} \geq \phi_j$, für alle j . Wir nennen diesen Nachweis den "schrittweisen Monotonienachweis".

Diese Argumentation ist nur für Konvektions-Diffusionsgleichungen möglich. Falls Absorption in der Gleichung mitenthalten ist, gelten solche Aussagen nicht.

5.4.2 Charakteristische Polynommethode

Wir untersuchen nun, welche Aussagen über das Auftreten von Oszillationen mit Hilfe des charakteristischen Polynoms einer linearen Differenzgleichung mit konstanten Koeffizienten zu erzielen sind.

Wir haben schon gezeigt, daß die Näherung CDS mit zentralen Differenzen in 1-d auf eine akzeptable numerische Lösung, frei von örtlichen Oszillationen, führt, wenn in der Differenzgleichung

$$\left(1 - \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}\right)\phi_{i+1} - 2\phi_i + \left(1 + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}\right)\phi_{i-1} = 0$$

die Koeffizienten von ϕ_{j+1} und ϕ_{j-1} ein anderes Vorzeichen besitzen als der Koeffizient von ϕ_j . Dies ist gleichbedeutend mit der Einhaltung der Maschen-Reynoldszahlbedingung $|Re_{\Delta x,i}| \leq 2$.

Nachfolgend zeigen wir nun, daß bei Differenzenapproximationen für die 1-d Konvektions-Diffusionsgleichung mit mehr als drei Punkten die Vorzeichen der auftretenden Koeffizienten ebenfalls abwechselnd positiv und negativ sein müssen, um Oszillationen zu vermeiden. Es gibt viele Beispiele, die diesen Sachverhalt bestätigen. Im Hinblick auf den Koeffizienten zum ersten stromauf liegenden diskreten Punkt ist dieser Sachverhalt auch von Tao und Sparrow [124] festgestellt worden.

Wir nehmen nun an, daß die Differenzgleichung

$$A\phi_{i+2} + B\phi_{i+1} + C\phi_i + D\phi_{i-1} + E\phi_{i-2} = 0$$

lautet und daß sich die Koeffizienten A, B,... für einen gewissen Bereich von Indizes i nicht ändern. Die Beschränkung auf die Indizes zwischen i+2 und i-2 ist nicht wesentlich! Dann läßt sich die allgemeine Lösung der Differenzgleichung in der Form

$$\phi_i = \alpha \cdot \lambda_1^i + \beta \cdot \lambda_2^i + \gamma \cdot \lambda_3^i + \delta \cdot \lambda_4^i$$

schreiben, wobei $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ die Wurzeln des zugehörigen charakteristischen Polynoms

$$P(\lambda) = A\lambda^4 + B\lambda^3 + C\lambda^2 + D\lambda + E = 0$$

sind. Falls $A+B+C+D+E = 0$, ist $P(1)=0$ und damit hat eines der λ_k den Wert 1. Wenn keines der λ_k einen negativen Wert hat, kann ausgeschlossen werden, daß in dem betrachteten Bereich eine Lösung ϕ_i mit der Wellenlänge Δx oszilliert. Dieses Argument wurde bei ähnlichen Analysen schon gelegentlich verwendet, Ciment et al. [45].

Damit stellt sich die Frage nach der Art der Nullstellen des charakteristischen Polynoms und danach, welche Bedingungen an die Koeffizienten des Polynoms negative Wurzeln ausschließen.

Solche Aussagen erlaubt die Cartesische Zeichenregel, die besagt: Die Zahl der negativen reellen Wurzeln eines reellen Polynoms ist gleich der Anzahl der Vorzeichenfolgen (=Gegenteil von Vorzeichenwechsel) in der Reihe seiner Koeffizienten oder bleibt um eine gerade Zahl hinter ihr zurück, z.B. [27] Willers, p. 291. Falls die charakteristische Gleichung nur Vorzeichenwechsel zeigt, gibt es keine negativen λ_k und damit keine Oszillationen mit der Wellenlänge Δx . Oszillationen mit größeren Wellenlängen sind damit nicht ausgeschlossen, da noch Paare konjugiert komplexer Wurzeln auftreten können. Diese Schwankungen mit größerer Wellenlänge sind jedoch weniger bedenklich, von ihnen ist in der Literatur auch bisher nicht berichtet worden.

Wir veranschaulichen diesen Sachverhalt, die Notwendigkeit der Vorzeichenwechsel in den Koeffizienten des charakteristischen Polynoms, an unserem Beispiel mit fünf von Null verschiedene Koeffizienten A,B,C,D und E.

$$\begin{aligned} P(\lambda) &= A(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_3)(\lambda - \lambda_4) \\ &= A[\lambda^4 - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4)\lambda^3 + (\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_1\lambda_4 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_2\lambda_4 + \lambda_3\lambda_4)\lambda^2 \\ &\quad - (\lambda_1\lambda_2\lambda_3 + \lambda_1\lambda_2\lambda_4 + \lambda_1\lambda_3\lambda_4 + \lambda_2\lambda_3\lambda_4)\lambda + \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4] = 0 \end{aligned}$$

Falls alle $\lambda_k > 0$ sind, A sei auch >0 , haben die Koeffizienten von $P(\lambda)$ und damit die Koeffizienten der ursprünglichen Differenzengleichung alternierende Vorzeichen, d.h. es ist o.B.d. $A>0$, $C>0$, $E>0$ und $B<0$, $D<0$. Diese alternierenden Vorzeichen sind eine notwendige Bedingung für positive Wurzeln λ_k von $P(\lambda)$. Falls diese Bedingung nicht erfüllt ist und außerdem bekannt ist, daß die λ_k reell sind, sind ortsabhängige Oszillationen nicht auszuschließen.

Mit Hinblick auf Approximationen von ϕ_i' allein, wie sie bei transienten reibungsfreien Problemen häufig auftreten, wo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

für irgendetwelche Anfangs- und Randbedingungen numerisch gelöst werden, kann folgendes festgestellt werden:

1.

Approximationen von ϕ_i' mit n (äquidistanten) Punkten von maximaler Polynomgenauigkeit $n-1$ erfüllen die alternierende Vorzeichenregel genau dann, wenn die Punkte außer x_i auf einer Seite liegen. Dies verdeutlichen die bekannten Beispiele aus 3.1:

$$n = 1 \text{ UDS}, \quad \phi_i' \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$$

$$n = 2 \text{ Atias et al.} \quad \phi_i' \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{3}{2} \phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right]$$

$$n = 3 \text{ LUDS} \quad \phi_i' \approx \frac{1}{6\Delta x} \left[11\phi_i - 18\phi_{i-1} + 9\phi_{i-2} - 2\phi_{i-3} \right];$$

Ein allgemeiner Beweis dieser Feststellung ist leicht möglich, soll hier aber unterbleiben. An Beispielen, die einen Punkt auf der Gegenseite beinhalten, kann man ersehen, daß in diesem Fall die Vorzeichenbedingung nicht gegeben ist.

$$n=2 \text{ (CDS)} \quad \phi_i' \approx \frac{1}{2\Delta x} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1})$$

$$n=3 \text{ (Agarwal)} \quad \phi_i' \approx \frac{1}{6\Delta x} \left[2\phi_{i+1} + 3\phi_i - 6\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \right]$$

$$n=4 \quad \phi_i' \approx \frac{1}{12\Delta x} \left[3\phi_{i+1} + 10\phi_i - 18\phi_{i-1} + 6\phi_{i-2} - \phi_{i-3} \right].$$

2.

Läßt man mehr als n Punkte zu, um die Polynomgenauigkeit $n-1$ zu erreichen, so kann die alternierende Vorzeichenregel bei beliebiger Lage der Punkte erreicht werden. Ist $G(\phi)$ eine beliebige Näherung für ϕ_i' der Ordnung $n-1$ mit n oder $n+1$ benachbarten Punkten, - d.h. beliebige Vorzeichen treten auf -, mit Punkten

$x_{i-k}, x_{i-k+1}, \dots, x_i, \dots, x_{i+n-k+1}$, so kann eine modifizierte Näherung

$$G'(\phi) = G(\phi) - \lambda \frac{1}{\Delta x} \nabla^n \phi$$

gefunden werden, die von der Ordnung $O(\Delta x^{n-1})$ ist und die alternierende Vorzeichenregel erfüllt. Dies ist zu erreichen, indem λ genügend groß gewählt wird, da $\Delta^n \phi_i$ alternierende Vorzeichen hat und $O(\Delta x^n)$ ist.

Beispiel: $n=3$: $G(\phi) = \text{CDS}$, CDS erfüllt die Vorzeichenregel nicht.

$$\nabla^3_{i-1/2} \phi = \phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2}.$$

$$G'(\phi) = G(\phi) - \lambda \frac{1}{\Delta x} \nabla^3_{i-1/2} \phi = \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \phi_{i+1} + 3\lambda \phi_i - \left(3\lambda + \frac{1}{2} \right) \phi_{i-1} + \lambda \phi_{i-2} \right],$$

Für $\lambda \geq \frac{1}{2}$ erhält man eine Vierpunktnäherung der Ordnung $O(\Delta x^2)$ für ϕ_i' mit streng alternierenden Vorzeichen. -

Die symmetrischen Näherungen für ϕ_i'' der geraden Ordnung n mit $n+1$ Punkten besitzen alternierende Vorzeichen. Die Beispiele für $n=2$ und $n=4$ sind

$$\phi_i'' \approx \frac{1}{\Delta x^2} (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$$

und

$$\phi_i'' \approx \frac{1}{12\Delta x^2} \left\{ -\phi_{i+2} + 16\phi_{i+1} - 30\phi_i + 16\phi_{i-1} - \phi_{i-2} \right\},$$

Verletzungen der Regel alternierender Vorzeichen ergeben sich erst bei Näherungen für ϕ_i'' mit unsymmetrischem Punktemuster höherer Ordnung, z.B.

$$\phi_i'' \approx \frac{1}{12\Delta x^2} \left\{ -11\phi_{i+1} + 20\phi_i - 6\phi_{i-1} - 4\phi_{i-2} + \phi_{i-3} \right\} - \frac{1}{12} \Delta x^3 \phi_i^V + \dots$$

Man kann den Sachverhalt mit den charakteristischen Polynomen noch strenger fassen. Zunächst seien wieder konstante Koeffizienten in einer Vierpunkt-Differenzgleichung vorausgesetzt. Dann ist, wie schon gezeigt,

$$\phi_i = \alpha \lambda_1^i + \beta \lambda_2^i + \gamma \lambda_3^i.$$

Wenn die λ_j , $j = 1, 2, 3$, positiv (und verschieden) sind, kann die für diskrete Werte von i definierte Funktion ϕ_i durch eine hinreichend oft stetig differenzierbare kontinuierliche Funktion

$$\phi(x) = \alpha\lambda_1^x + \beta\lambda_2^x + \gamma\lambda_3^x$$

ergänzt werden, welche immer reell ist und für ganzzahlige Werte $x = i$ mit ϕ_i übereinstimmt. Man kann zeigen, daß $\phi(x)$ höchstens zwei Nullstellen und $\phi'(x)$ höchstens eine Nullstelle hat und damit nicht über einen größeren Bereich oszillieren kann.

Einige Bemerkungen zum Schluß grenzen die beiden Untersuchungsmethoden, die Anwendung der Theorie der M-Matrizen und die Analyse mit Hilfe charakteristischer Polynome, gegeneinander ab.

- 1) Invers-isotonie der Matrix eines Differenzgleichungssystems ist eine hinreichende Bedingung dafür, daß keine unphysikalischen örtlichen Oszillationen auftreten. Alternierende Koeffizienten einer 1-d Differenznäherung sind eine notwendige Bedingung für Oszillationsfreiheit.
- 2) Es gibt Verfahren wie CDS für $|\operatorname{Re}_{\Delta x, i}| > 2$, QUICK für $|\operatorname{Re}_{\Delta x, i}| > 8/3$ und Agarwals Methode für $|\operatorname{Re}_{\Delta x, i}| > 3$, die weder für die eine Methode noch für die andere die Voraussetzungen erfüllen, z.B. daß die Koeffizienten abwechselndes Vorzeichen besitzen. Diese Verfahren errechnen in diesem Falle oszillatorische Lösungen, wie einfache Beispielsrechnungen zeigen.
- 3) Es gibt eines unter den bekannten Verfahren mit nichtnegativer inverser Matrix A^{-1} , dessen Koeffizienten nicht die Alternanteneigenschaft besitzen, das Verfahren von Gushchin und Shchennikov!
- 4) Das Schema von Kawamura-Kuwahara besitzt alternierende Koeffizienten, obwohl die zugehörige Koeffizientenmatrix, wie man an Beispielen zeigen kann, kein nichtnegatives Inverses hat.

Es sind also Verfahren mit alternierenden Koeffizienten und Verfahren mit Invers-Isotonie verschiedene Dinge und es sollte noch geklärt werden, welches die schwächsten notwendigen und hinreichenden Bedingungen sind, die sicherstellen, daß ortsabhängige Oszillationen nicht auftreten können.

5.4.3 Anwendung der Matrixmethode auf die bekannten Differenzenverfahren

Wir prüfen nun nach, ob für die in Kapitel 3 vorgestellten Differenzenverfahren die Matrix A des Differenzengleichungssystems invers-isoton ist, d.h. ob A invertierbar ist und $A^{-1} \geq 0$ ist.

Da sich alle untersuchten Verfahren in der Form

$$\sum_j B_{kj}(\phi_j - \phi_{j-1}) = g_k, \quad k=1, \dots$$

schreiben lassen, was in Matrixform

$$B \cdot T \cdot \phi = g$$

entspricht mit $B = (B_{kj})$ und $T = (-1, \underline{1}, 0)$, wird die Matrix B auf Invers-Isotonie untersucht.

Da $T^{-1} = (1, \dots, 1, \underline{1}, 0, \dots, 0) \geq 0$ und $A = B \cdot T$, ist $A^{-1} \geq 0$, falls $B^{-1} \geq 0$. Außerdem sichert $B^{-1} \geq 0$, daß die $(\phi_j - \phi_{j-1}) \geq 0$.

Die Ergebnisse sind in nachfolgender Tabelle zusammengefaßt. Dazu ist im einzelnen noch festzustellen:

1. Für das Verfahren von Kawamura-Kuwahara ist kein Invers-Isotonie-Nachweis möglich. Invertiert man A oder B für größere Beispiele, so zeigt sich, daß A^{-1} und B^{-1} negative Elemente enthalten.
2. Beim Verfahren von Gushchin-Shchemikov ist A eine irreduzibel-diagonal-dominante M-Matrix, B nicht. Für dieses Verfahren muß der Nachweis, daß $(\phi_j - \phi_{j-1})$ eines Vorzeichens ist, mit dem "schrittweisen Monotonienachweis" geführt werden.
3. Für LUDS gibt es keinen Beweis, daß $A^{-1} \geq 0$. Beschränkt man sich auf den konvektiven Teil allein, d.h. es geht um $(\underline{11}, -18, 9, -2)^{-1}$, so ergaben Rechnungen mit verschiedenster Ordnung der Matrix, daß die Inverse jeweils ≥ 0 war. Andererseits ist $(\underline{11}, -18, 9, -2) = (\underline{11}, -7, 2) \cdot (\underline{1}, -1)$, oder umgekehrt, jedoch hatten in den Beispielen die Elemente von $(\underline{11}, -7, 2)^{-1}$ kein einheitliches Vorzeichen.

	A	B
CDS	falls $ \operatorname{Re}_{\Delta x, i} \leq 2$	falls $ \operatorname{Re}_{\Delta x, i} \leq 2$
UDS	ja	ja
Allen-Southwell	ja	ja
QUICK	falls $ \operatorname{Re}_{\Delta x, i} \leq 8/3$	falls $ \operatorname{Re}_{\Delta x, i} \leq 8/3$
Agarwal [Third order upwind]	falls $ \operatorname{Re}_{\Delta x, i} \leq 3$	falls $ \operatorname{Re}_{\Delta x, i} \leq 3$
Atias et al. [Second order upwind]	ja	ja
LECUSSO	ja	ja
LUDS	ja (keine M-Matrix, kein Beweis)	nein
Kawamura und Kuwahara	nein	nein
Gushchin und Shchennikov	ja	nein
LSUDS	nein	nein

Tab. 5.4.3.1: Invers-isotones Verhalten der Koeffizientenmatrizen A und B

4. Für LSUDS ist kein allgemeingültiges Ergebnis möglich.. Geht man für $\operatorname{Re}_i > 0$ von der Darstellungsformel

$$\text{LSUDS} = \alpha \cdot \text{Agarwal} + (1 - \alpha) \text{LUDS}$$

aus, so findet man, daß die Koeffizienten von ϕ_{i-1} und ϕ_{i-2} (bis auf den Faktor Re_i) gleichzeitig negativ sind für $9/8 < \alpha < 12/8$. Man sieht dies aus:

$$\phi'(\text{Agarwal}) = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{1}{3} \phi_{i+1} + \frac{1}{2} - \phi_i - \phi_{i-1} + \frac{1}{6} \phi_{i-2} \right]$$

$$\phi'(\text{LUDS}) = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{11}{6} \phi_i - \frac{18}{6} \phi_{i-1} + \frac{9}{6} \phi_{i-2} - \frac{2}{6} \phi_{i-3} \right]$$

$$\phi'(\text{LSUDS}) = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{\alpha}{3} \phi_{i+1} + \left(\frac{\alpha}{2} + (1 - \alpha) \cdot \frac{11}{6} \right) \phi_i - \right]$$

$$- \left(\alpha + (1 - \alpha) 3 \right) \phi_{i-1} + \left(\frac{\alpha}{6} + (1 - \alpha) \cdot \frac{9}{6} \right) \phi_{i-2} - (1 - \alpha) \frac{2}{6} \phi_{i-3}$$

Diese Formel enthält mehrere kritische Koeffizienten, welche der Alternantereigenschaften unter gewissen Umständen nicht genügen. Der eine gehört zu ϕ_{i+1} , von dem man hoffen kann, daß ihn der diffusive Term, der hier weggelassen wurde, ausgleicht. Der zweite kritische Term ist zu ϕ_{i-2} , er kann negativ werden, obwohl er nach dem Prinzip der alternierenden Vorzeichen der Koeffizienten positiv sein sollte. Dieser Koeffizient hat den Wert

$$\frac{\alpha}{6} + (1-\alpha) \cdot \frac{9}{6} = \frac{3}{2} - \frac{8}{6}\alpha$$

und ist negativ für $\alpha > 9/8$.

5. Für die Vierpunktformeln von der Ordnung $O(\Delta x^2)$ mit Indizes $i+1$ bis $i-2$ [CDS, QUICK, Agarwal, LECUSSO, Atias et al.] hat man die Darstellung

$$\begin{aligned} & - \left[1 - Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right) \right] \phi_{i+1} + \left[2 + 3 \cdot Re_{\Delta x, i} \cdot \Lambda \right] \phi_i + \\ & - \left[1 + Re_{\Delta x, i} \left(3\Lambda + \frac{1}{2} \right) \right] \phi_{i-1} + Re_{\Delta x, i} \cdot \Lambda \cdot \phi_{i-2} = 0 \end{aligned}$$

und in Schreibweise mit Differenzen $(\phi_i - \phi_{i-1})$

$$\begin{aligned} & \left[-1 + Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right) \right] (\phi_{i+1} - \phi_i) + \left[1 + Re_{\Delta x, i} \left(2\Lambda + \frac{1}{2} \right) \right] (\phi_i - \phi_{i-1}) \\ & - \Lambda Re_{\Delta x, i} (\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) = 0. \end{aligned}$$

Hier hat die Matrix

$$A = \left(-1 + Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right), \underline{2 + 3 Re_{\Delta x, i} \cdot \Lambda}, -1 - Re_{\Delta x, i} \left(3\Lambda + \frac{1}{2} \right), \Lambda Re_{\Delta x, i} \right)$$

einen kritischen Wert, den ersten, die Matrix B,

$$B = \left(-1 + Re_{\Delta x, i} \left(\frac{1}{2} - \Lambda \right), \underline{1 + Re_{\Delta x, i} \left(2\Lambda + \frac{1}{2} \right)}, -\Lambda Re_{\Delta x, i} \right),$$

hat denselben kritischen Wert. Mit $\Lambda = 1/2$ ist das Verfahren von Atias et al. so beschaffen, daß dieser Koeffizient den Wert -1 hat und damit negativ ist. Auch für LECUSSO wurde schon gezeigt, daß

$$\Lambda > \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}},$$

was gleichbedeutend damit ist, daß der Wert der Nebendiagonale $(-1 + Re_{\Delta x, i}(1/2 - \Lambda))$ negativ bleibt. Für $\Lambda = 0$ (CDS), $\Lambda = 1/8$ (QUICK) und $\Lambda = 1/6$ (Agarwal) ergeben sich die in Tabelle 5.3.3.1 angegebenen Maschen-Reynoldszahlbeschränkungen.

Nachdem zunächst die Nichtnegativität der ϕ_i und der ersten Differenzen $(\phi_i - \phi_{i-1})$ behandelt wurde, stellt sich die Frage, inwieweit bestimmte Differenzenverfahren auch das monotone Verhalten der $(\phi_i - \phi_{i-1})$ in Anlehnung an die Lösung des kontinuierlichen Problems korrekt wiedergeben. Dies wurde für CDS schon kurz angesprochen. Da

$$\phi_i - \phi_{i-1} \geq \phi_{i-1} - \phi_{i-2}$$

gleichwertig ist mit

$$\nabla_{i-1}^2 \phi = \phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2} \geq 0,$$

läuft die Frage darauf hinaus, für $\nabla_{i-1}^2 \phi$ bei bestimmten Verfahren diesen Nachweis führen zu können.

Bei CDS lautet die Differenzgleichung

$$(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) = \frac{Re_{\Delta x, i}}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}),$$

bei UDS ($Re_{\Delta x, i} \geq 0$)

$$(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) = Re_{\Delta x, i} (\phi_i - \phi_{i-1}),$$

womit für CDS im Falle $|Re_{\Delta x, i}| \leq 2$ und für UDS ohne Einschränkung an $Re_{\Delta x, i}$ $\nabla_i^2 \phi$ das gleiche Vorzeichen wie der rechts stehende Ausdruck hat und damit wie dieser sein Vorzeichen nicht ändert. Entsprechend einfach zeigt sich die Krümmung eines Vorzeichens für das Verfahren von Allen-Southwell. Weniger offen-

sichtlich verläuft der Nachweis für das LECUSSO-Verfahren. Für $Re_{\Delta x,i} > 0$ lautet die Differenzenformel

$$(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) = \nabla_i^2 \phi = Re_{\Delta x,i} \left[\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} - \Lambda(\phi_{i+1} - 3\phi_i + 3\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) \right]$$

und etwas umgeschrieben

$$\nabla_i^2 \phi = Re_{\Delta x,i} \left[\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} - \Lambda(\nabla_i^2 \phi - \nabla_{i-1}^2 \phi) \right].$$

Wir nehmen nun neben $Re_{\Delta x,i} > 0$ noch an, daß

- a) $\phi(0) = \phi_\ell = 0$, $\phi(1) = \phi_r = 1$, und
- b) Λ nach der Formel für das LECUSSO-Verfahren berechnet wurde.

Damit ist $\phi_i \geq 0$ und $\phi_i - \phi_{i-1} \geq 0$ für alle $i \geq 1$. Die Differenzengleichung kann dann umgeschrieben werden zu

$$\nabla_i^2 \phi (1 + \Lambda Re_{\Delta x,i}) = Re_{\Delta x,i} \left[\frac{1}{2} (\phi_{i+1} - \phi_i) + \frac{1}{2} (\phi_i - \phi_{i-1}) + \Lambda \cdot \nabla_{i-1}^2 \phi \right],$$

sodaß $\nabla_i^2 \phi \geq 0$, falls $\nabla_{i-1}^2 \phi \geq 0$ war. Andererseits hat man im Punkt x_1 nebst dem linken Randpunkt entweder UDS oder CDS, weshalb dort $\nabla_i^2 \phi \geq 0$.

Damit ergibt sich rekursiv für alle $i > 1$ $\nabla_i^2 \phi \geq 0$. Der entsprechende Gedankengang verläuft für Atias et al. in der gleichen Weise, ebenso für (CDS), Agarwal und QUICK innerhalb der zulässigen Maschen-Reynoldszahlbereiche.

Für LUDS hat man ($Re_{\Delta x,i} > 0$)

$$Re_{\Delta x,i} \left\{ \frac{2}{3} (\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{1}{3} (\phi_{i-2} - \phi_{i-3}) + \frac{7}{6} \Delta^2 \phi_{i-1} \right\} = \Delta^2 \phi_i.$$

Da man am linken Rand einfachere Näherungen mit weniger Punkten verwenden muß, z.B. UDS für $i=1$ und Atias et al. für $i=2$, hat man $\nabla_1^2 \phi \geq 0$, $\nabla_2^2 \phi \geq 0$ und damit auch hier eine nichtnegative Krümmung.

Für LSUDS, Kawamura-Kuwahara und Gushchin-Shchennikov ist noch keine Aussage über Krümmung eines Vorzeichens unter sinnvollen Randbedingungen bekannt.

CDS	ja	innerhalb der zulässigen Maschen-Reynoldszahl
UDS	ja	
HDS	ja	
ASS	ja	
LECUSSO	ja	
Atias et al.	ja	
LUDS	ja	
Agarwal	ja	} innerhalb der zulässigen Maschen-Reynoldszahlen
QUICK	ja	

Tab. 5.4.3.2: Differenzenverfahren mit Nachweis einheitlicher diskreter Krümmung

5.4.4 Anwendung der charakteristischen Polynom-Methode

Wir streifen kurz die Dreipunkt-Differenzenverfahren. Es wurde schon gezeigt, daß bei CDS neben $\lambda_1 = 1$ noch die Wurzel

$$\lambda_2 = \frac{1 + \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}}{1 - \frac{Re_{\Delta x,i}}{2}}$$

auftritt, die für $|Re_{\Delta x,i}| = 2$ ihr Vorzeichen wechselt, damit für $|Re_{\Delta x,i}| > 2$ ein negatives λ_2 hat und deshalb für $|Re_{\Delta x,i}| > 2$ wertlos wird. Für UDS ist

$$\lambda_2 = 1 + |Re_{\Delta x,i}| > 0,$$

für das Verfahren von Allen-Southwell ergibt sich

$$\lambda_2 = \frac{\coth \frac{Re_{\Delta x,i}}{2} + 1}{\coth \frac{Re_{\Delta x,i}}{2} - 1},$$

in beiden Fällen ist λ_2 für beliebige Werte von $Re_{\Delta x,i}$ positiv.

Für die Vierpunktformeln findet man ($Re_{\Delta x,i} > 0$)

$$\lambda_{2,3} = \frac{1 + (2\Lambda + \frac{1}{2})Re_{\Delta x,i} \pm \sqrt{\left[1 + (2\Lambda + \frac{1}{2})Re_{\Delta x,i}\right]^2 - 4\Lambda Re_{\Delta x,i} \left[1 + (\Lambda - \frac{1}{2})Re_{\Delta x,i}\right]}}{2 \left[1 + (\Lambda - \frac{1}{2})Re_{\Delta x,i}\right]}$$

Es sind $\lambda_{2,3} \geq 0$, wenn der subtrahierte Beitrag unter dem Wurzelzeichen positiv ist, d.h.

$$4\Lambda \cdot Re_{\Delta x,i} \left[1 + (\Lambda - \frac{1}{2})Re_{\Delta x,i}\right] > 0.$$

Dieser Ausdruck tritt auch im Nenner auf.

Daß der gesamte Ausdruck unter der Wurzel positiv bleibt, ist leicht zu zeigen. Wegen $Re_{\Delta x,i} > 0$ und $0 \leq \Lambda \leq 0.5$ reduziert sich die Forderung darauf, daß

$$1 + (\Lambda - \frac{1}{2}) Re_{\Delta x, i} \geq, \text{ d.h. } \Lambda \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{Re_{\Delta x, i}}.$$

Da für LECUSSO und Atias et al. diese Ungleichung immer gilt, sind hier λ_2 und λ_3 immer positiv. Für Agarwal und QUICK gilt dies nur, falls die schon mehrfach genannten Schranken für die Maschen-Reynoldszahlen eingehalten werden.

Für das Verfahren von Gushchin und Shchennikov erhält man

$$\lambda_{2,3} = Re_{\Delta x, i} \pm \sqrt{Re_{\Delta x, i}^2 + 1},$$

damit ergibt sich eine kleine negative Wurzel, die für größer werdende $Re_{\Delta x, i}$ allerdings immer kleiner wird.

Bei Kawamura-Kuwahara ergibt sich nach Abspaltung des Faktors $(\lambda - \lambda_1) = (\lambda - 1)$ aus dem charakteristischen Polynom für λ_2 , λ_3 und λ_4 die Gleichung

$$\lambda^3 - \lambda^2 + 8\lambda - 2 = 0,$$

wobei nur der konvektive Teil der Gleichung ($Re_{\Delta x, i} \rightarrow \infty$) berücksichtigt wurde. Diese Gleichung hat eine reelle positive Nullstelle λ_2 , $\lambda_2 \approx 1/4$, die beiden übrigen Wurzeln λ_3 und λ_4 sind komplex konjugiert, $\lambda_3^2 \approx \lambda_4^2 \approx -1$.

Für LUDS hat das durch $(\lambda - \lambda_1) = (\lambda - 1)$ geteilte charakteristische Polynom die Form

$$\lambda^3 - (1 + \frac{11}{6} Re_{\Delta x, i}) \lambda^2 + \frac{7}{6} \cdot Re_{\Delta x, i} \cdot \lambda - \frac{1}{3} Re_{\Delta x, i} = 0.$$

In der Näherung $Re_{\Delta x, i} \rightarrow \infty$ (- es wandert eine Nullstelle gegen Unendlich -) verbleibt

$$11\lambda^2 - 7\lambda + 2 = 0,$$

diese Gleichung hat zwei konjugiert komplexe Wurzeln λ_3 , λ_4 ,

$$\lambda_{3,4} = \frac{7 \pm \sqrt{-39}}{2 \cdot 11}$$

wobei etwa λ_3^4 negativ reell und damit Oszillationen der Wellenlänge $4\Delta x$ für große $\text{Re}_{\Delta x, i}$ möglich wären.

Wegen $\text{LSUDS} \rightarrow \text{LUDS}$ für $\text{Re}_{\Delta x, i} \rightarrow \infty$, verhält sich LSUDS für große $\text{Re}_{\Delta x, i}$ ähnlich wie LUDS.

CDS		$\lambda_2 = \frac{1+\rho/2}{1-\rho/2}$
UDS	<i>alternierende Koeffizienten</i>	$\lambda_2 = 1+\rho$, für $\rho < 0$ $\lambda_2 = \frac{1}{1+ \rho }$ für $\rho > 0$
HDS		wie CDS bzw. UDS
ASS	<i>alternierende Koeffizienten</i>	$\lambda_2 = \frac{\frac{\rho}{2} \coth \frac{\rho}{2} + \frac{\rho}{2}}{\frac{\rho}{2} \coth \frac{\rho}{2} - \frac{\rho}{2}} = \frac{\coth \frac{\rho}{2} + 1}{\coth \frac{\rho}{2} - 1}$
Samarski	<i>alternierende Koeffizienten</i>	$\lambda_2 = 1/2 \rho^2 + \rho + 1$
QUICK	$\Lambda = 1/8$	$\lambda_{2,3} = \frac{1 + (2\Lambda + 1/2)\rho \pm \sqrt{(1 + (2\Lambda + 1/2)\rho)^2 - G1}}{2(1 + (\Lambda - 1/2)\rho)}$ $G1 = 4\Lambda\rho \left[1 + (\Lambda - 1/2)\rho \right]$
Agarwal	$\Lambda = 1/6$	
Atias	$\Lambda = 1/2$	
LECUSSO	Λ	
LUDS	<i>alternierende Koeffizienten</i>	$\lambda_{2,3} = \frac{7 \pm \sqrt{-39}}{2 \cdot 11}$
LSUDS		siehe Text
Kawamura-Kuwahara	<i>alternierende Koeffizienten</i>	$\lambda_2 \approx 1/4, \lambda_{3,4} \approx \frac{3}{8} \pm \sqrt{\left(\frac{3}{8}\right)^2 - 8}$
Gushchin-Shchennikov		$\lambda_{2,3} = \rho \pm \sqrt{\rho^2 + 1}$

Tab. 5.4.4.1 Tabelle zur Anwendung der charakteristischen Polynommethode, angegeben sind die Wurzeln des charakteristischen Polynoms außer $\lambda_1 = 1 \cdot (\rho = \text{Re}_{\Delta x, i})$

5.5 Weiterführung der Analyse von Differenzenverfahren unter allgemeineren Bedingungen

Die im vorliegenden Kapitel durchgeführten Analysen haben sich immer auf den am einfachsten zu behandelnden Fall beschränkt, auf die eindimensionale Formulierung der Konvektions-Diffusionsgleichung in konvektiver Form. Auch wurde nahezu immer vorausgesetzt, daß die Geschwindigkeit ihr Vorzeichen nicht ändert. Man kann versuchen, diese Einschränkungen schrittweise aufzuheben und zu prüfen, inwieweit sich bestimmte Aussagen unter den allgemeineren Voraussetzungen immer noch beweisen lassen. Ein solches schrittweises Übergehen zu anderen, i.a. schwierigeren Voraussetzungen ist in der nachfolgenden schematischen Abbildung angedeutet. $u > 0$ ist ein Symbol dafür, daß die Geschwindigkeit ihr Vorzeichen nicht ändert, $u \geq 0$ entspricht einem Geschwindigkeitsfeld, das sein Vorzeichen ändern kann.

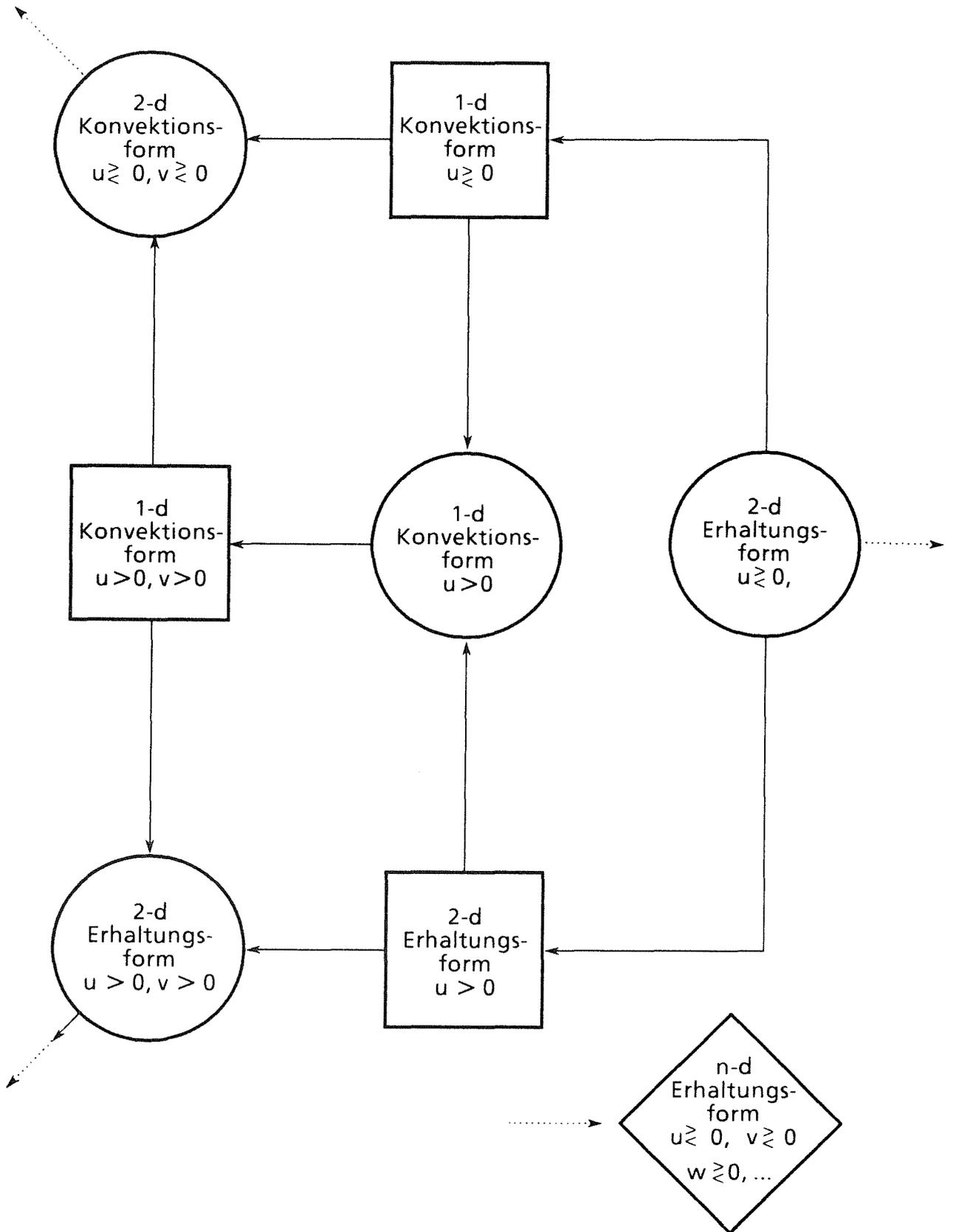


Abb. 5.5.1: Übergang zu allgemeineren Aufgabenstellungen. Im Zentrum steht das einfachste Problem, die eindimensionale (1-d) Konvektions-Diffusionsgleichung mit Geschwindigkeit eines Vorzeichens. Nach außen hin nimmt die Komplexität der Problemstellung in Pfeilrichtung zu. Das allgemeinste Problem (rechts unten) ist dreidimensional, in Erhaltungform, mit beliebig variierenden Geschwindigkeitskomponenten. Die symbolische Schreibweise $u \gtrless 0$ besagt, daß u sein Vorzeichen ändern kann.

5.5.1 Sich ändernde Richtung der Geschwindigkeit

- a) Für die zentralen Dreipunktverfahren (Indizes $i+1, i, i-1$) und das Verfahren von Gushchin-Shchennikov gibt es hier keine Schwierigkeiten. Die auftretenden Matrizen sind in der Hauptdiagonale positiv, außerhalb nichtpositiv und auch hier diagonaldominant. Damit gilt auch hier das Maximumsprinzip. Dafür sei ein Beispiel gegeben. Beim konvektiven Teil von UDS gibt es sowohl Zeilen der Form $\{-(1-\rho_i), \underline{2+\rho_i}, -1\}$ als auch $\{-1, \underline{2+|\rho_k|}, -(1+|\rho_k|)\}$.

Alle Aussagen, deren Beweis auf einer Produktaufspaltung einer Matrix basierten, gelten nicht mehr.

- b) Für die zentralen Dreipunktverfahren lassen sich Aussagen bezüglich $(\phi_i - \phi_{i-1})$ mit Rekursionsformeln erzielen. Dies sieht am Beispiel UDS folgendermaßen aus:

$$\rho_i = Re_{\Delta x, i} > 0: \phi_{i+1} - \phi_i = (1 + \rho_i)(\phi_i - \phi_{i-1})$$

$$\rho_i = Re_{\Delta x, i} < 0: \phi_{i+1} - \phi_i = \frac{1}{1 + |\rho_i|} (\phi_i - \phi_{i-1}).$$

Falls $\phi_1 - \phi_0 > 0$, läßt sich rekursiv für alle i $\phi_i - \phi_{i-1} > 0$ unabhängig vom Vorzeichen vom jeweiligen ρ_i zeigen. Die Schwierigkeit bei wechselndem Vorzeichen soll noch am Verfahren von Atias et al. erläutert werden. Es seien $\rho_1, \rho_2 < 0, \rho_3, \rho_4, \dots > 0$. Dann gilt

$$\rho_1 \left(-\frac{3}{2}\phi_1 + 2\phi_2 - \frac{1}{2}\phi_3 \right) - (\phi_2 - \phi_0 - 2\phi_1) = 0$$

$$\rho_2 \left(-\frac{3}{2}\phi_2 + 2\phi_3 - \frac{1}{2}\phi_4 \right) - (\phi_3 + \phi_1 - 2\phi_2) = 0$$

$$\rho_3 \left(\frac{3}{2}\phi_3 - 2\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_4 \right) - (\phi_4 + \phi_2 - 2\phi_3) = 0$$

$$\rho_4 \left(\frac{3}{2}\phi_4 - 2\phi_3 + \frac{1}{2}\phi_2 \right) - (\phi_5 + \phi_3 - 2\phi_4) = 0$$

Umschreiben in Form von Differenzen $(\phi_i - \phi_{i-1})$ und Beschränkung auf den konvektiven Anteil (entspricht großen $|\rho_i|$) ergibt

$$\rho_1 = \left(\frac{3}{2}(\phi_2 - \phi_1) - \frac{1}{2}(\phi_3 - \phi_2) \right) + \dots = 0$$

$$\rho_2 = \left(\frac{3}{2}(\phi_3 - \phi_2) - \frac{1}{2}(\phi_4 - \phi_3) \right) + \dots = 0$$

$$\rho_3 = \left(\frac{3}{2}(\phi_3 - \phi_2) - \frac{1}{2}(\phi_2 - \phi_1) \right) - \dots = 0$$

$$\rho_4 = \left(\frac{3}{2}(\phi_4 - \phi_3) - \frac{1}{2}(\phi_3 - \phi_2) \right) - \dots = 0$$

•
•
•

Der entsprechende linke obere Teil der zugehörigen Matrix hat die Form

$$\begin{array}{cccc} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} & 0 \end{array}$$

und es ist nicht zu sehen, wie eine Aussage über die Struktur der Matrix in der Weise möglich ist, daß wir eine Information über die Vorzeichen von $(\phi_i - \phi_{i-1})$ erhalten können. Diese Feststellung ist hier unabhängig davon zu sehen, daß sich in dem gewählten Beispiel die Differenzgleichungen u.U. widersprechen können!

- c) Die Feststellungen mit Hilfe des charakteristischen Polynoms gelten in den Bereichen eines Vorzeichens, da sich diese, streng genommen, eigentlich immer nur auf einen Punkt beziehen (Annahme: Koeffizienten der Differenzgleichung ändern sich lokal nicht).

5.5.2 Erhaltungsform

a) Es wurde schon bei der Definition der Erhaltungsform darauf hingewiesen, daß deren Benützung nahezu ausschließlich bei zweidimensionalen Problemstellungen im Zusammenwirken mit einer Kontinuitätsgleichung sinnvoll ist. Da der Nachweis von Strukturaussagen bezüglich numerischer Lösungen für mehrdimensionale Probleme sehr schwierig ist, besteht hier ein sehr eingeschränkter Kenntnisstand.

Wir weisen noch auf einige wichtige Punkte hin: Auch Differenzgleichungen in Erhaltungsform haben Schwächen, hier im Zusammenhang mit Änderungen der Geschwindigkeitsrichtung.

Beispiel : Bei UDS-C erzeugen die Differenzgleichungen die Matrix

$$\left\{ \left(-1 - \frac{1}{2}(\rho_{i-1/2} + |\rho_{i-1/2}|), \underline{2 + \frac{1}{2}(|\rho_{i+1/2}| + \rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2} - |\rho_{i-1/2}|)}, -1 + \frac{1}{2}(\rho_{i+1/2} - |\rho_{i+1/2}|) \right) \right\}.$$

Falls $\rho_{i+1/2} > 0, \rho_{i-1/2} > 0$, gilt

$$\phi_i = \frac{1}{2} \left[(1 + \rho_{i-1/2})\phi_{i-1} + (1 + |\rho_{i+1/2}|)\phi_{i+1} \right],$$

bei $\rho_{i+1/2} > 0, \rho_{i-1/2} < 0$.

$$\phi_i = \frac{1}{2 + \rho_{i+1/2} + |\rho_{i-1/2}|} (\phi_{i-1} + \phi_{i+1}).$$

Es ist offensichtlich, daß die erste Gleichung dem Beweis eines Maximumprinzips entgegensteht, da für nichtnegative ϕ_i sein kann, daß $\phi_i > \max(\phi_{i+1}, \phi_{i-1})$.

b) Bei eindimensionaler Formulierung der Erhaltungsformen von Differenzenverfahren ergeben sich modifizierte Bedingungen dafür, daß keine Oszillationen auftreten. Dies ist bei den Dreipunktverfahren unmittelbar einzusehen. Zunächst ist UDS-C, die Erhaltungsform zu UDS, frei von einer Maschen-Reynoldszahlenbedingung. Das gleiche gilt für verschiedene Verfahren in Erhaltungsform, die mit dem Verfahren von Allen-Southwell verwandt sind. CDS-C läßt sich mit

$$\rho_+ = Re_{\Delta x, i+1/2}, \quad \rho_- = Re_{\Delta x, i-1/2}$$

schreiben als

$$\phi_{i+1} \left(-1 + \frac{\rho_+}{2}\right) + \left(2 + \frac{\rho_+}{2} - \frac{\rho_-}{2}\right) \phi_i + \left(-1 - \frac{\rho_-}{2}\right) \phi_{i-1} = 0.$$

Da nach unserer Vorzeichenregel der Koeffizient von $\phi_i \geq 0$ sein soll, die übrigen beiden Koeffizienten jedoch ≤ 0 , erhält man mit

$$|\rho_+| \leq 2, \quad |\rho_-| \leq 2$$

für beide Maschen-Reynoldszahlen die Schranke 2 für deren Absolutbetrag, dazu noch die neuartige Forderung

$$4 + \rho_+ - \rho_- \geq 0.$$

Diese Bedingung kann nur verletzt werden, wenn mindestens eine der beiden Maschen-Reynoldszahlbedingungen verletzt ist.

- c) Bei den Verfahren der Klasse QUICK, Agarwal, LECUSSO, Atias et al. gelten zunächst ähnliche Feststellungen wie bei CDS-C. Die allgemeine Formel lautet für $\rho_+, \rho_- \geq 0$, vgl. Abbildung 5.5.2.1a).

$$\rho_+ \hat{\phi}_{i+1/2} - \rho_- \hat{\phi}_{i-1/2} - (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) = 0$$

mit

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i) - \Lambda_+(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1}) - \Lambda_-(\phi_i + \phi_{i-2} - 2\phi_{i-1}),$$

Ausgeschrieben hat man

$$\begin{aligned} \phi_{i+1} \left[\rho_+ \left(\frac{1}{2} - \Lambda_+ \right) - 1 \right] + \phi_i \left[\rho_+ \left(2\Lambda_+ + \frac{1}{2} \right) - \rho_- \left(\frac{1}{2} - \Lambda_- \right) + 2 \right] \\ + \phi_{i-1} \left[-\rho_+ \Lambda_+ - \rho_- \left(2\Lambda_- + \frac{1}{2} \right) - 1 \right] + \rho_- \Lambda_- \phi_{i-2} = 0. \end{aligned}$$

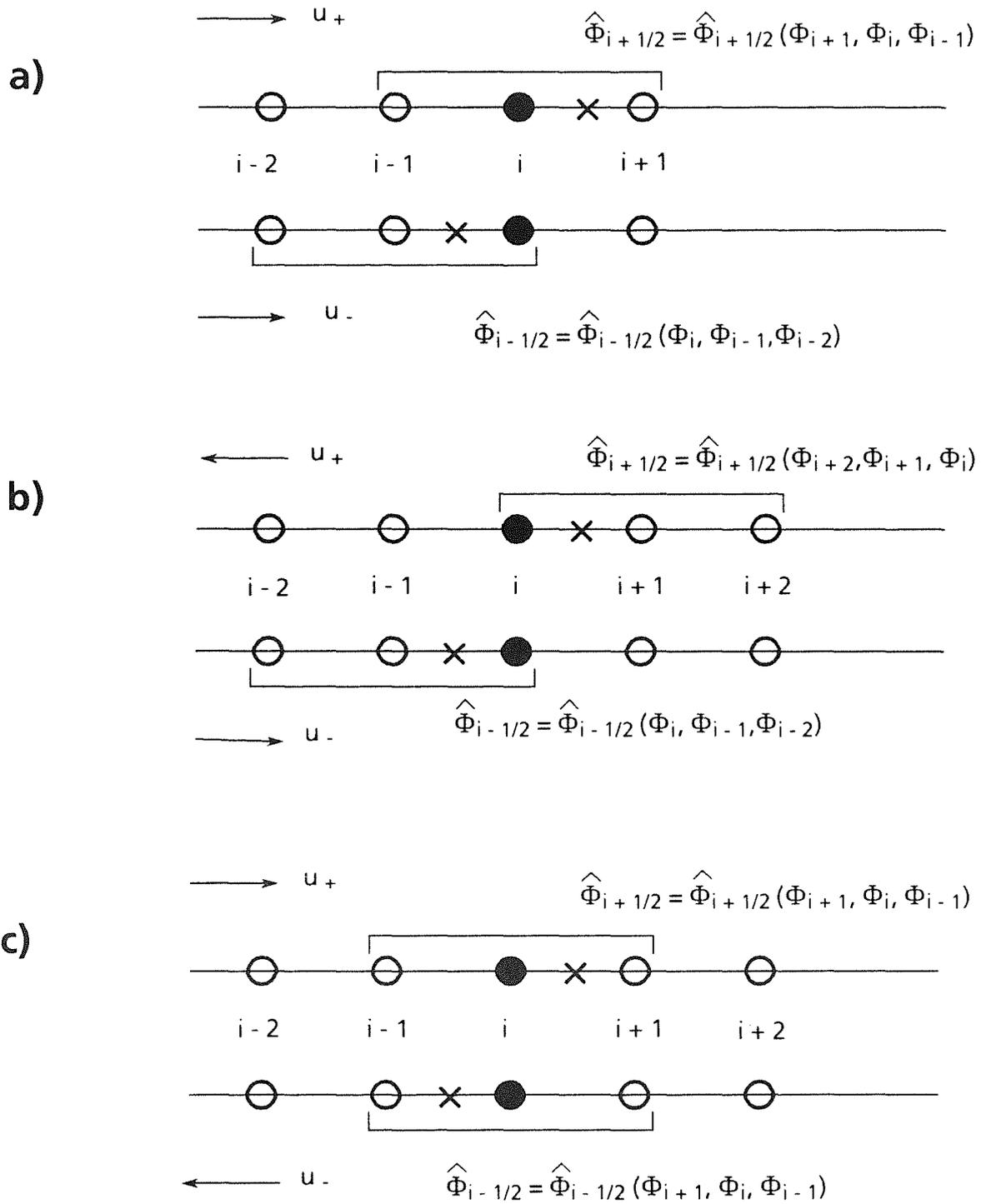


Abb. 5.5.2.1 Bei LECUSSO-C involvierte Punkte
 a) Standardfall: u_+ und u_- gleichgerichtet > 0
 b) Fall $u_+ < 0, u_- > 0$
 c) Fall $u_+ > 0, u_- < 0$.

Dies ergibt wegen der Vorzeichenbedingung bei fest gewählten Λ_+ (z.B. $\Lambda_+ = 1/8$ für QUICK) die Maschen-Reynoldszahlbedingung

$$\rho_+ \leq \frac{1}{\frac{1}{2} - \Lambda_+},$$

falls Λ_+ so gewählt werden soll, daß bei gegebener Maschen-Reynoldszahl ρ_+ Oszillationen nicht auftreten sollen, muß

$$\Lambda_+ \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{\rho_+}$$

sein. Daneben muß der Koeffizient von ϕ_i nicht negativ sein, d.h.

$$2 + \rho_+ (2\Lambda_+ + \frac{1}{2}) - \rho_- (\frac{1}{2} - \Lambda_-) \geq 0.$$

Entsprechende Formeln gelten für $\rho_+, \rho_- < 0$.

- d) Wenn $\rho_+ < 0, \rho_- > 0$, involviert die gesamte Differenzgleichung fünf Punkte. Es ändert sich gegenüber der zuvor getroffenen Definitionen $\hat{\phi}_{i+1/2}$, dies hat jetzt die Form, siehe Abbildung 5.5.2.1b).

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i) - \Lambda_+(\phi_{i+2} + \phi_i - 2\phi_{i+1})$$

und die Differenzgleichung lautet

$$\begin{aligned} & \phi_{i+2}(-\rho_+ \Lambda_+) + \phi_{i+1} \left(\left(\frac{1}{2} + 2\Lambda_+ \right) \rho_+ - 1 \right) \\ & + \phi_i \left[\left(\frac{1}{2} - \Lambda_+ \right) \rho_+ - \left(\frac{1}{2} - \Lambda_- \right) \rho_- + 2 \right] \\ & + \phi_{i-1} \left[-\rho_- (2\Lambda_- + \frac{1}{2}) - 1 \right] + \rho_- \cdot \Lambda_- \cdot \phi_{i-2} = 0. \end{aligned}$$

Hier ist wegen $-1/12 \leq \Lambda_{\pm} \leq 1/2$ nur der Koeffizient zu ϕ_i kritisch, d.h. er enthält Summanden mit unterschiedlichem Vorzeichen. Man erkennt jedoch, daß mit den schon zuvor gefundenen Bedingungen

$$|\rho_+|(\frac{1}{2} - \Lambda_+) \leq 1, \quad \rho_-(\frac{1}{2} - \Lambda_-) \leq 1,$$

dieser Koeffizient positiv bleibt.

Der Vollständigkeit halber nehmen wir von dieser Formelgruppe noch den Fall $\rho_+ > 0, \rho_- < 0$ auf. Hier sind $\hat{\phi}_{i+1/2}$ und $\hat{\phi}_{i-1/2}$ folgendermaßen definiert (Abbildung 5.5.2.1c):

$$\hat{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i) - \Lambda_+(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$$

$$\hat{\phi}_{i-1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1}) - \Lambda_-(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)$$

Dies führt zur Dreipunktformel

$$\begin{aligned} & \phi_{i+1} \left[\rho_+ \left(\frac{1}{2} - \Lambda_+ \right) + \rho_- \Lambda_- - 1 \right] + \phi_i \left[\rho_+ \left(\frac{1}{2} + 2\Lambda_+ \right) + 2 \right] + \\ & + \phi_{i-1} \left[-\Lambda_+ \rho_+ - \rho_- \left(\frac{1}{2} - \Lambda_- \right) - 1 \right] = 0. \end{aligned}$$

Es läßt sich wieder zeigen, daß die Bedingungen

$$|\rho_-|(\frac{1}{2} - \Lambda_-) \leq 1, \quad \rho_+(\frac{1}{2} - \Lambda_+) \leq 1$$

ausreichen um sicherzustellen, daß die Vorzeichenregel eingehalten wird.

Bei vielen Verfahren (Gushchin-Shchennikov, Kawamura-Kuwahara, LUDS, LSUDS, auch Atias et al. und Agarwal) ist nur die konvektive Form der Differenzengleichung eingeführt worden. Von einigen Formen hat der Verfasser die entsprechende Erhaltungsform nach dem in Abschnitt 2.4 beschriebenen Verfahren erzeugt (LUDS, LSUDS, Atias et al., Agarwal) und diese bei Vergleichsrechnungen untersucht. Allgemein ist zu sagen, daß wie bei den ausführlich aufgeführten Verfahren entsprechende Koeffizientenbedingungen, z.B. Maschen-Reynoldszahlbedingungen, auftreten, in einzelnen Fällen gibt es zusätzliche Bedingungen wie die neuartige Forderung

$$4 + \rho_+ - \rho_- \geq 0$$

bei CDS-C.

- e) Die Übertragung der Methoden, die sich charakteristischer Polynome bedienen, auf Differenzennäherungen in Erhaltungsform trifft auf einige Schwierigkeiten. In einzelnen Fällen ist die Formulierung von Bedingungen für das Vermeiden von Oszillationen möglich.

5.5.3 Zweidimensionale Probleme

Wir behandeln hier die zweidimensionale Problemstellung als einfachsten Fall mehrdimensionaler Fragestellungen. Die 2-d Konvektions-Diffusionsgleichung

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \nu \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) = 0$$

läßt sich schreiben als

$$\left(u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) + \left(v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) = 0 ,$$

wobei bei den in Klammern stehenden Summanden jeweils nur Effekte in eine der beiden Raumrichtungen berücksichtigt sind. Es wird immer - mit einer Ausnahme - angenommen, daß bei einer Methode in 2-d jeweils die entsprechende eindimensionale Methode auf den zugehörigen 1-d-Teilsummanden der obigen Gleichung angewendet wird. Die Ausnahme bildet eine Variante des Verfahrens von Gushchin und Shchennikov (siehe 3.5).

Damit werden aus den Verfahren, die in 1-d drei Punkte benützen, Fünf-Punkt-Verfahren in 2-d. Weitere Anmerkungen zur Bildung von 2-d-Versionen der Differenzenverfahren befinden sich im Abschnitt 3.10.

Zielsetzung unserer Überlegungen ist, wieder sicherzustellen, daß die untersuchten Differenzenverfahren keine unphysikalischen ortsabhängigen Oszillationen entstehen lassen. Für einige Verfahren, die Fünf-Punkt-Verfahren und Gushchin-Shchennikov, läßt sich $\phi_{i,j} \geq 0$ zeigen, falls die vorgegebenen $\phi_{i,j}$ auf dem Rand ≥ 0 . Monotonieeigenschaften nachzuweisen, ist direkt nicht möglich. Man kann natürlich so argumentieren, daß man annimmt, $\phi(x,y)$ sei in y -Richtung konstant. Dann läßt sich eine bedingt lokale Aussage über Monotonie bezüglich x machen. Das gleiche Argument gilt auch, wenn man mit Hilfe eines charakteristischen Polynoms argumentieren will, welches von Grund auf schon eine stark lokale Betrachtungsweise darstellt.

Für alle Differenzenverfahren, auch diejenigen, welche in 1-d mehr als drei Punkte involvieren, läßt sich bei transienten Rechnungen mit einem Kunstgriff zu-

nächst eine Produktaufspaltung des Rechengangs erreichen. Man kann dann in Produktform $\phi_{ij} \geq 0$ nachweisen. Es handelt sich dabei um eine Form der Mehrschrittverfahren (engl. "fractional time step"), die auf Yanenko [28] zurückgeht und z.B. auch in Ciment et al. [45] verwendet wurde.

Dies wird nachfolgend für LECUSSO erläutert. Es sei

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \left(u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) + \left(v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) = 0$$

numerisch mittels LECUSSO zu lösen. Nach der eingangs beschriebenen Vorgehensweise werden beide Summanden in Klammern separat approximiert, so daß wir bei geeignetem definiertem Maschennetz

$$\begin{aligned} \phi_{ij}^{n+1} = & \phi_{ij}^n - \Delta t \left[\frac{u_{ij}}{\Delta x} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \Lambda_x \right) \phi_{i+1j}^n + 3\Lambda_x \phi_{ij}^n - \left(3\Lambda_x + \frac{1}{2} \right) \phi_{i-1j}^n + \Lambda_x \phi_{i-2j}^n \right\} \right. \\ & + \frac{v_{ij}}{\Delta y} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \Lambda_y \right) \phi_{ij+1}^n + 3\Lambda_y \phi_{ij}^n - \left(3\Lambda_y + \frac{1}{2} \right) \phi_{ij-1}^n + \Lambda_y \phi_{ij-2}^n \right\} \\ & \left. + \frac{\nu}{\Delta x^2} \left(\phi_{i+1j}^n + \phi_{i-1j}^n - 2\phi_{ij}^n \right) + \frac{\nu}{\Delta y^2} \left(\phi_{ij+1}^n + \phi_{ij-1}^n - 2\phi_{ij}^n \right) \right] \end{aligned}$$

erhalten, wobei vorausgesetzt wurde, daß $u_{ij} \geq 0$ und $v_{ij} \geq 0$. Die Λ_x und Λ_y seien jeweils mit der zugehörigen Maschen-Reynoldszahl

$$Re_{\Delta x, ij} = \frac{u_{ij} \cdot \Delta x}{\nu}, \text{ bzw. } Re_{\Delta y, ij} = \frac{v_{ij} \cdot \Delta y}{\nu}$$

berechnet werden entsprechend der bei 1-d-LECUSSO angegebenen Formel. Ein Mehrschrittverfahren, mit drei Schritten, wo im ersten der konvektive Transport in x-Richtung, im zweiten Schritt der konvektive Transport in y-Richtung und im dritten der gesamte diffusive Prozess behandelt wird, sieht folgendermaßen aus:

$$\bar{\phi}_{ij}^{n+1} = \phi_{ij}^u - c_{x,ij} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \Lambda_x \right) \phi_{i+1,j}^n + 3\Lambda_x \phi_{ij}^n - \left(3\Lambda_x + \frac{1}{2} \right) \phi_{i-1,j}^n + \Lambda_x \phi_{i-2,j}^n \right\}$$

$$\bar{\bar{\phi}}_{ij}^{n+1} = \bar{\phi}_{ij}^{n+1} - c_{y,ij} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \Lambda_y \right) \bar{\phi}_{i,j+1}^{n+1} + 3\Lambda_y \bar{\phi}_{ij}^{n+1} - \left(3\Lambda_y + \frac{1}{2} \right) \bar{\phi}_{i,j-1}^{n+1} + \Lambda_y \bar{\phi}_{i,j-2}^{n+1} \right\}$$

und

$$\phi_{ij}^{n+1} = \bar{\bar{\phi}}_{ij}^{n+1} + d_x \left(\bar{\bar{\phi}}_{i+1,j}^{n+1} + \bar{\bar{\phi}}_{i-1,j}^{n+1} - 2\bar{\bar{\phi}}_{ij}^{n+1} \right) + d_y \left(\bar{\bar{\phi}}_{i,j+1}^{n+1} + \bar{\bar{\phi}}_{i,j-1}^{n+1} - 2\bar{\bar{\phi}}_{ij}^{n+1} \right).$$

mit den Courantzahlen

$$c_{x,ij} = u_{ij} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad c_{y,ij} = v_{ij} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta y} \quad \text{und} \quad d_x = \frac{\mathbf{v} \cdot \Delta t}{\Delta x^2}, \quad d_y = \frac{\mathbf{v}' \cdot \Delta t}{\Delta y^2}.$$

Diese Berechnungsvorschrift unterscheidet sich von der ursprünglichen nur dadurch, daß noch zusätzliche Glieder der Ordnungen Δt^2 entstehen, wenn man die drei Vorschriften ineinander einsetzt. Für Berechnungen mit kleinen Δt sind beide Rechenverfahren gleichwertig, da das ursprüngliche als einfaches explizites Verfahren von der Ordnung $O(\Delta t)$ ist und der Unterschied der beiden Verfahren von mindestens der Ordnung $O(\Delta t^2)$ ist.

Wichtig für die Analyse des zweiten Verfahrens ist, daß die Aufspaltung in 1-d Teilschritte bestimmte Beweisführungen wie z.B. $\phi_{ij} \geq 0$ unter bestimmten Randbedingungen zuläßt.

5.6 Zusammenfassung zur theoretischen Analyse von Differenzenverfahren

Das vorliegende Kapitel gibt einen Abriß des Kenntnisstandes der theoretischen Analyse von Differenzenverfahren, welche bei der numerischen Lösung von Konvektions-Diffusionsproblemen angewendet werden. Auch einige neue Gedankengänge sind in die Darstellung miteingeflossen, z.B. der Vorschlag, neben der Nichtnegativität numerischer Näherungslösungen auch deren Steigung und Krümmung in die Untersuchung einzubeziehen. Daneben ist die charakteristische Polynom-Methode bisher immer nur auf einzelne Verfahren angewendet worden.

Der Teil der Analyse von Differenzgleichungen, der sich mit der Konvergenz der Lösungen von diskreten Gleichungen gegen die Lösungen der (eigentlich interessierenden) zugehörigen kontinuierlichen Probleme befaßt, basiert auf den Begriffen Konsistenz und Stabilität einer Differenznäherung. Für diesen im vorliegenden Kapitel zuerst dargestellten Teilkomplex hat man einen befriedigenden Kenntnisstand, der in vielen Monographien über die numerische Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen beschrieben ist. Der unbefriedigende Teil der "Gleichung"

$$\text{Konsistenz} + \text{Stabilität} = \text{Konvergenz}$$

besteht darin, daß Konvergenz und Konsistenz eine Eigenschaft darstellen, die das Verhalten einer Näherung für $\Delta x \rightarrow 0$ beschreiben, während sich Stabilität nur auf eine bestimmte, durch die Wahl eines festen Wertes von Δx (hier als Symbol für alle örtlichen und zeitlichen Schrittweiten gebraucht) festgelegte Diskretisierung bezieht. Der Schwachpunkt der Konvergenztheorie liegt daher darin, daß er nichts darüber sagt, ob eine bestimmte Diskretisierung ein physikalisch sinnvolles Ergebnis liefert. Die beiden Ansätze, die diesem Mißstand abhelfen, werden in diesem Kapitel erläutert. Es sind dies einerseits Matrixmethoden, mit denen unter bestimmten Voraussetzungen gezeigt werden kann, daß ein Lösungsvektor, ein Vektor von benachbarten Differenzen, nicht negativ ist. Diese Aussagen sind gleichwertig damit, daß für die numerische Lösung ein Maximumprinzip erfüllt ist. Dies sichert, daß keine inneren Maxima und Minima auftreten können und damit auch numerisch verursachte Oszillationen nicht auftreten können. Der zweite Weg besteht darin, mit Hilfe charakteristischer Polynome von 1-d-Differenzgleichungen mit konstanten Koeffizienten zu zeigen, daß höchstens

$n-1$ -Extrema auftreten können, wenn die Differenzengleichung jeweils n Punkte enthält. Damit ist die Zahl möglicher Extrema beschränkt und regelmäßige Oszillationen sind ausgeschlossen. Mit diesen Methoden, die bisher in vielen Fällen nur für 1-d Probleme ausgearbeitet wurden, lassen sich gute numerische Methoden von schlechten Methoden unterscheiden und Erfahrungen mit Differenzengleichungen verstehen.

Insgesamt ist der Wissensstand eher als gering einzustufen. Die für Differenzenverfahren für eindimensionale Konvektions-Diffusionsgleichungen in Konvektionsform bei nicht wechselnder Strömungsrichtung erzielbaren Ergebnisse lassen sich, sofern das heute absehbar ist, nur selten auf komplexere Fragestellungen übertragen.

Es gibt eine beträchtliche Zahl von Büchern über Differenzengleichungen, beginnend mit dem bekannten Standardwerk von Milne-Thomson [22] aus dem Jahre 1933, von denen manche auf Differenzenverfahren zur Lösung von Differentialgleichungen eingehen. Meist stellen sie das Grundwissen über Differenzengleichungen dar und gehen in ihren Darlegungen nicht über lineare Gleichungen und lineare Differenzengleichungen mit konstanten Koeffizienten hinaus.

Andere Bücher wie die von Richtmyer und Morton [23], Godunov und Rjabenki [17], Henrici [18] und Samarski [24] behandeln Differenzenverfahren. Dabei steht neben der Vorstellung der Differenzenverfahren selbst meist die numerische Stabilität zusammen mit der Konvergenz im Mittelpunkt der Darstellung, bei Samarski wird auch das "Maximumprinzip" für diskrete elliptische Probleme angesprochen.

Eine ausführliche Bibliographie (Bücher) zum Thema Differenzengleichungen enthält das 1987 erschienene Buch von Lakshmikantham und Trigante [21].

6. NUMERISCHE TESTS

6.1 Die Zielsetzung der numerischen Tests

Die nachfolgend beschriebenen numerischen Tests haben zwei Ziele. Das eine besteht darin, die beschriebenen Differenzenverfahren zu vergleichen und deutlich zu machen, welche Verfahren bei gleicher Diskretisierung bessere oder schlechtere Ergebnisse liefern. Ein weiteres Ziel besteht darin, die im Rahmen der theoretischen Analyse gewonnenen Aussagen über Eigenschaften der Differenzenverfahren durch Rechnungen zu überprüfen und gegebenenfalls zu bestätigen. Mit dem Vergleich der verschiedenen Verfahren ergeben sich Aussagen darüber, welche Verfahren die günstigsten Approximationseigenschaften besitzen und mit welchem zusätzlichen Aufwand für ein spezielles verbessertes Verfahren eine spezifizierte höhere Genauigkeit erreicht werden kann. Daneben ergeben solche numerischen Tests auch Hinweise darauf, wo offene Fragen sind und welche Detailprobleme noch untersucht werden müssen.

6.2 Das Testbeispiel

Für die Vergleichsrechnungen wird ein zweidimensionales Beispiel gewählt, das auf Beier et al. [34] zurückgeht und eine exakte analytische Lösung besitzt. Bei dem Beispiel wird auf dem Bereich $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ der x - y -Ebene eine Konvektions-Diffusionsgleichung für ein vorgegebenes Strömungsfeld und eine bestimmte Kombination von Randbedingungen numerisch gelöst. Wir nehmen an, es sei eine Energiegleichung, die gesuchte Funktion $T(x,y)$ sei die Temperatur. Bei der vorgegebenen Strömung handelt es sich um eine Potentialströmung, die umgelenkt wird und deren Beitrag unterschiedlich große Werte annimmt. Die thermischen Randbedingungen sind so gestellt, daß vornehmlich in einem bestimmten Randbereich die Wärme durch Wärmeleitung in den betrachteten Bereich eintritt, danach durch Konvektion weitertransportiert wird und aus dem System austritt. Die Intensität der Strömung wird durch eine modifizierte Reynoldszahl Re' charakterisiert, die bei der hier gewählten Art der Parameter ungefähr der größten auftretenden Reynoldszahl konventioneller Definition entspricht.

Dies sieht im einzelnen folgendermaßen aus. Im Bereich $0 \leq x < \infty$, $0 \leq y \leq h$ ist eine Strömung vorgegeben in der Form

$$u(x,y) = \frac{u_0 \cdot \pi}{2} \sinh\left(\frac{\pi x}{h}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi y}{h}\right)$$

$$v(x,y) = \frac{-u_0 \cdot \pi}{2} \cosh\left(\frac{\pi x}{h}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi y}{h}\right)$$

welche in Abbildung 6.2.1 gezeigt wird und offensichtlich die Kontinuitätsgleichung erfüllt. Gesucht wird die Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung in stationärer Form

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \Gamma \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$$

für die Funktion $T(x,y)$, welche folgenden Randbedingungen genügen soll:

- a) Es soll $T(x,y) = T_\infty = 0$ sein für $x \rightarrow +\infty$ und alle y .
- b) Es sei $\partial T / \partial y = 0$ längs $y = h$.
- c) $T(x,y)$ soll längs des linken Randes mit abnehmenden y und dann längs des unteren Randes mit steigendem x exponentiell mit der Ortskoordinate abnehmen. Der Exponent dieses Abfalles sei λ . Dann lautet dies formelmäßig

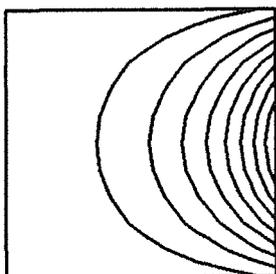


Abb. 6.2.1: Vorgegebene Strömungsform (Stromlinien) des Testbeispiels.

$$T(0,y) = T_0 e^{-\lambda(h-y)} \quad \text{für } 0 \leq y \leq h$$

und

$$T(x,0) = T_0 e^{-\lambda(h+x)} \quad \text{für } 0 \leq x \leq +\infty.$$

Die analytische Lösung dieses Problems ist ausführlich in Beier et al. [34] beschrieben. Die Lösung macht Gebrauch von der Darstellung mit Hilfe komplexer Veränderlicher und benutzt eine Form der Gaußschen Fehlerfunktion mit komplexem Argument. Diese Funktion ERFC ist in einer der heute verfügbaren FORTRAN-Programmbibliotheken, der HARWELL-Library verfügbar, so daß die Berechnung der exakten Lösung des Problems keine Schwierigkeiten bereitet.

Die in Beier et al. angegebene geschlossene Lösung wird hier so verwendet, daß wir uns bei den Rechnungen und bei der Darstellung exakter Lösungen des Problems auf das Quadrat $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$ beschränken, d.h. $h \equiv 1$.

Um dies tun zu können, wird bei den numerischen Tests bei $x=1$ jeweils der Wert der analytischen Lösung als Randbedingung vorgegeben. Der Einfachheit halber wird dies auch am oberen Rand ($y=1$) getan. Es zeigt sich, daß die Ergebnisse der numerischen Tests nahezu nicht von der Wahl dieser oberen Randbedingungen abhängen.

Man stellt leicht fest, daß die Geschwindigkeit, d.h. ihr Absolutbetrag, mit abnehmendem x abnimmt. Dies ist von Interesse, weil man manchmal die repräsentativen (d.h. effektiven) Maschen-Reynoldszahlen und nicht die maximalen Maschen-Reynoldszahlen kennen möchte. Man kann grob sagen, daß die maximale Ge-

schwindigkeit bei $x=1$ auftritt, bei $x=3/4$ nur noch die halbe Maximalgeschwindigkeit, bei $x=1/2$ nur noch ein Viertel und das für kleinere x eine weitere Abnahme des Absolutbetrags der Geschwindigkeit bis zu etwa einem Zehntel der Maximalgeschwindigkeit festzustellen ist.

Die analytische Lösung des Problems hängt einerseits von der modifizierten Reynolds-Zahl $Re' = u_0/(\Gamma \cdot \lambda)$ ab, andererseits von Γ und λ . Hier wird $\Gamma = \lambda = 1$ gewählt, so daß dann als zu variierender Parameter $Re' = u_0$ übrigbleibt. Höhenlinien der exakten Lösung mit $\Gamma = \lambda = 1$ zeigt Abbildung 6.2.2 für $Re' = 20, 50, 200, 400, 1000, 3000, 5000$. In Abbildung 6.2.3 sind dreidimensionale Plots für die Werte $Re' = 50, 400$ und 5000 enthalten.

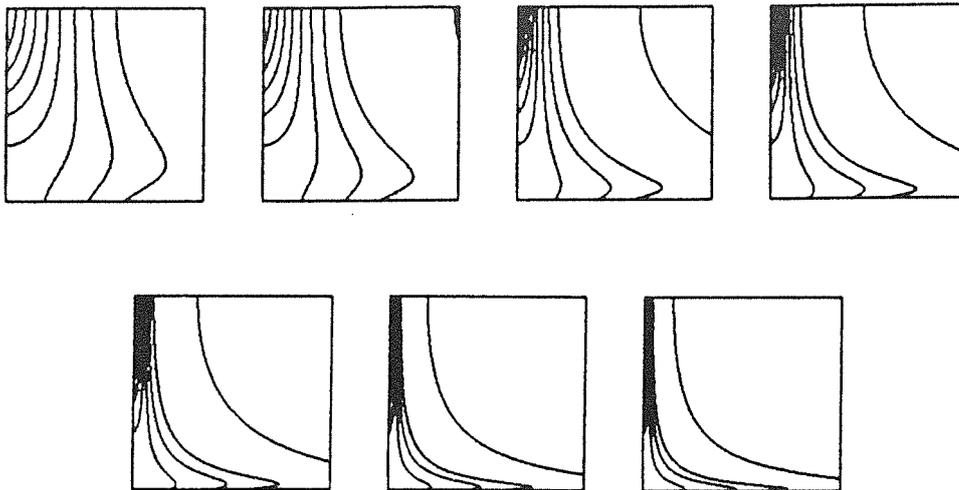


Abb. 6.2.2: Exakte Lösung des Testbeispiels für Reynoldszahlen $Re' = 20, 50, 200, 400, 1000, 3000, 5000$ für $\Gamma = \lambda = 1$. Die Abbildung zeigt äquidistante Isothermen.

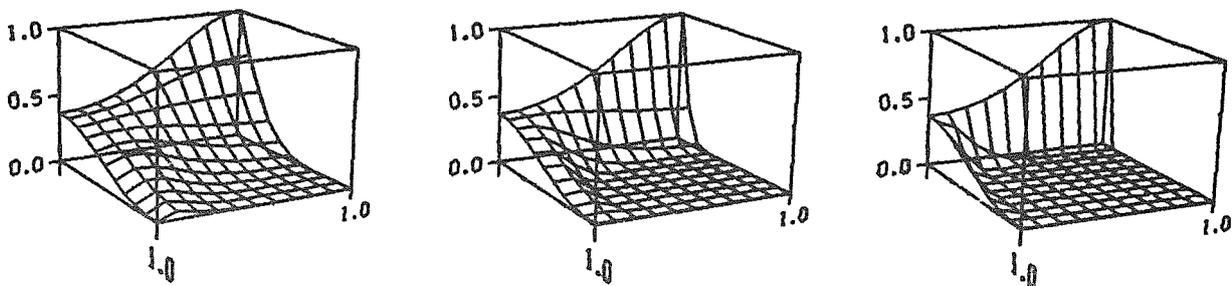


Abb. 6.2.3: Dreidimensionale Darstellung der exakten Lösung des Testbeispiels für $Re' = 50, 400, 5000$ für $\Gamma = \lambda = 1$.

Bei dem zu Testzwecken gewählten Beispiel mit den Parameterwerten $\lambda \equiv 1$ und $\Gamma \equiv 1$ zeigen die exakten Lösungen des Problems, daß für Anwachsen des Parameters Re' Bereiche mit Grenzschichtcharakter auftreten.

6.3 Die Spezifikationen der Testrechnungen

Ein Großteil der in Kapitel 3 vorgestellten Differenzenverfahren, welche in Kapitel 5 theoretisch untersucht werden, sind im Rahmen numerischer Testrechnungen geprüft worden, welche in einem ausführlichen Bericht [34] des Verfassers dokumentiert sind. In jenem Bericht wird das schon vorgestellte zweidimensionale Beispiel mit bekannter analytischer Lösung übernommen und für bestimmte Parameterwerte mit zahlreichen Differenzenverfahren numerisch gelöst. Diese Rechnungen überdecken einen weiten Bereich der modifizierten Reynoldszahl Re' , $20 \leq Re' \leq 5000$, es werden diskrete Maschengitter von 11·11, 21·21 und 31·31 Punkten benützt. Als Maß für die Güte eines Verfahrens wird in jenem Bericht sowohl der ortsabhängige wie auch der maximale ortsabhängige Fehler der numerischen Lösung angegeben.

Mittlerweile sind diese Testrechnungen weitergeführt worden und das Verfahren von Kawamura-Kuwahara [80] (mit verschiedenen NBS), eine zweite zweidimensionale Variante des Verfahrens von Gushkhin-Shchennikov sowie zwei OCI-Verfahren, das verallgemeinerte OCI-Verfahren von Ciment et al. [45] sowie eine OCI-Variante von Lorenz [103] numerisch getestet worden. Von den noch nicht in der offenen Literatur behandelten Differenzenschemata ist das in Kapitel 3 erwähnte Verfahren NONAME, das die Punkte mit den Indizes $i + 2$ bis $i - 2$ benutzt und für die Funktionen $\phi = \{1, x, x^2, \exp(Re \cdot x), x \cdot \exp(Re \cdot x)\}$ exakt ist, mit in den Test aufgenommen. Für diese zusätzlich getesteten Differenzenverfahren werden nur die Maschengitter mit 11·11 Punkten verwendet. Der Grund dafür liegt darin, daß die Methode zur Lösung der OCI-Gleichungen sehr aufwendig und unökonomisch ist und für feinere Schrittweiten nur mit unverträglich hohem Rechenzeitaufwand möglich gewesen wäre.

Wie schon in 6.2 vermerkt wurde, beschränken sich die Rechnungen auf den Bereich $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$, die in der Beschreibung des Problems auftretenden Parameter Γ und λ erhalten jeweils den Wert 1.

Die Wahl von Re' zwischen 20 und 5000 entspricht bei $\Delta x = \Delta y = 0.1$ (je 11 Punkte in x- und y-Richtung) einem Bereich maximaler Maschen-Reynoldszahlen zwischen 2 und 500, bei $\Delta x = \Delta y = 1/30$ liegt das maximale $Re_{\Delta x, i}$ zwischen $2/3$ und $500/3$.

6.4 Die Ergebnisse der numerischen Tests

Bei den nachfolgend beschriebenen Rechnungen mit dem in 6.2 angegebenen Testbeispiel wird jeweils der maximale örtliche Fehler (= ERRMAX) einer Rechnung als Maßstab für die Güte einer Rechnung gewählt. Die genaue Definition von ERRMAX lautet

$$ERRMAX = \max_{(x,y)} |T_{analyt.}(x,y) - T_{num}(x,y)|.$$

Diese Werte werden jeweils für mehrere Differenzenverfahren in einer Abbildung gezeigt, die ERRMAX sind dort in Abhängigkeit von $\sqrt{Re'} \Delta x$ aufgetragen. Bei dieser Art der Darstellung, die schon mehrfach verwendet wurde, z.B. auch in Beier et al., werden die Verfahren von der Ordnung zwei, bei denen man für nicht zu große Re'

$$ERRMAX \sim Re' \cdot \Delta x^2$$

annimmt, in einem doppeltlogarithmischen Koordinatensystem ungefähr als Geraden mit der Steigung zwei dargestellt. Der Bereich der Abszisse überdeckt das Intervall $0.15 \leq \sqrt{Re'} \Delta x \leq 7.07$. Der linke Randpunkt entspricht etwa $\Delta x = 1/30$, $Re' = 20$, der rechte $\Delta x = 0.1$, $Re' = 5000$.

Zunächst werden in einer Tabelle die Rechenergebnisse für die nicht in Günther [64] erfaßten Differenzenverfahren angegeben. Alle Verfahren dieser Tabelle sind in Konvektionsform.

Verfahren \ $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ Re'	0.45 20	0.71 50	1.42 200	2. 400	3.16 1000	5.47 3000	7.07 5000
Kawamura-Kuwahara mit UDS als NBS	0.31E-2	0.78E-2	0.17E-1	0.30E-1	0.61E-1	0.10	0.11
Kawamura-Kuwahara mit HDS	0.26E-2	0.14E-1	0.26E-1	0.44E-1	0.62E-1	0.10	0.11
Kawamura-Kuwahara mit ASS	0.26E-2	0.13E-1	0.43E-1	0.48E-1	0.11	0.12	0.13
Kawamura-Kuwahara mit ASS und LECUSSO	0.25E-2	0.11E-1	0.34E-1	0.33E-1	0.11	0.14	0.14
Gushchin et Sh. Variante B	0.29E-2	0.90E-2	0.21E-1	0.35E-1	0.42E-1	0.50E-1	0.48E-1
Generalized OCI	0.21E-2	0.34E-2	0.77E-2	0.13E-1	0.28E-1	0.41E-1	0.43E-1
Lorenz-OCI	0.44E-2	0.83E-2	0.40E-1	0.62E-1	0.79E-1	0.15	0.20
NONAME	0.17E-2	0.48E-2	0.15E-1	0.20E-1	0.49E-1	0.45E-1	0.57E-1

Tab. 6.4.1: Der maximale örtliche Fehler ERRMAX für verschiedene Differenzenverfahren, die nicht in Günther [64] untersucht wurden, als Funktion von $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ ($\Delta x = \Delta y = 0.1$).

Die ERRMAX aller in [64] untersuchten Differenzenverfahren sind in Abbildung 6.4.1 angegeben. Diese Abbildung soll nicht als quantitative Information für einzelne Verfahren dienen, - diese wird in einzelnen Abbildungen mit jeweils wenigen Verfahren gegeben -, sie soll einen Eindruck von der Bandbreite der ERRMAX der untersuchten Verfahren geben und deutlich machen, ob ein Verfahren im oberen oder unteren Teil des Fehlerbandes liegt.

Folgende Feststellungen können aus Abbildung 6.4.1 entnommen werden:

1. Die Bandbreite(-höhe) aller gezeigten Fehler zu einem festen Wert von $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ geht fast überall über mehr als eine Zehnerpotenz.
2. Alle Verfahren außer den beiden Upwind-Verfahren 1. Ordnung zeigen im Bereich $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x \leq 3$ eine Steigung von etwa 2. Die Werte zu einem Verfahren liegen unabhängig von Δx in etwa auf einer Kurve. Dies bestätigt im nachhinein die Darstellung mit $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ als Abszisse.

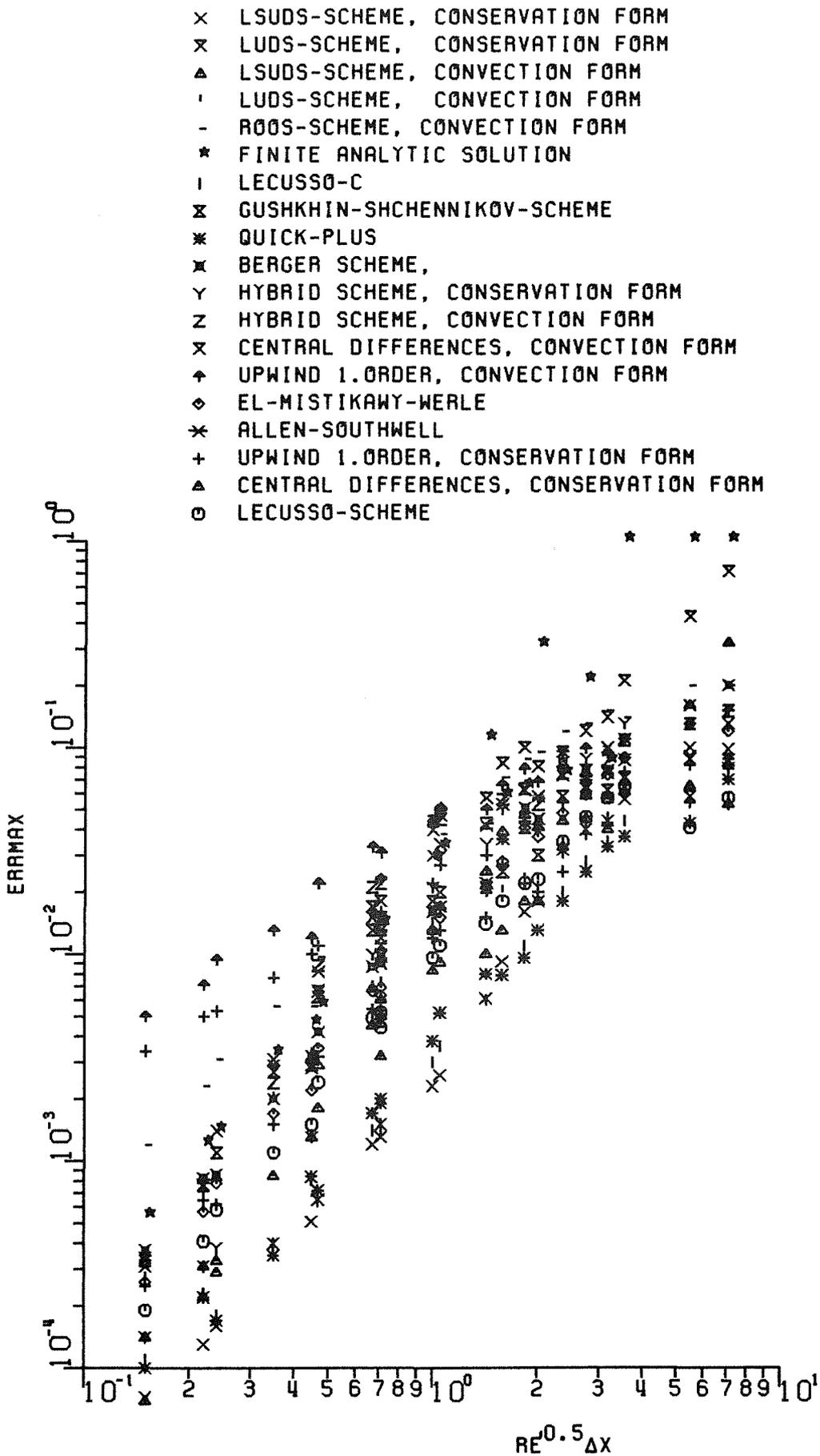


Abb. 6.4.1: Maximaler ortsabhängiger Fehler ERRMAX aller in Günther [64] untersuchten Differenzenverfahren für das Testbeispiel.

3. Es gibt immer wieder stochastische Schwankungen einzelner Punkte, obwohl der Gesamteindruck entsteht, daß alle Punkte zu einem Verfahren in etwa auf einer Kurve liegen.
4. Bei einigen Verfahren in den nachfolgenden Abbildungen kann man im Bereich $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ zwischen 1.5 und 4 eine geänderte, geringere Steigung erkennen, was in Einklang stünde mit Konvergenzsätzen, die für sehr große $Re_{\Delta x}$ bei manchen Differenzenverfahren einen schwächeren Anstieg des Fehlers prognostizieren, wie in Abschnitt 5.3 erläutert wurde.
5. Für kleine Werte von $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ haben entsprechend ihrer Fehlerordnung die beiden Upwind-Verfahren 1. Ordnung die größten Maximalfehler.
6. Zu den Verfahren, welche die niedrigsten maximalen Fehler aufweisen, gehören LSUDS in Erhaltungsform, QUICK-PLUS und LECUSSO-C. Bezieht man die in Tabelle 6.4.1 enthaltenen Differenzenverfahren in den Vergleich mit ein, so liegt, 'Generalized OCI', obwohl nicht in Erhaltungsform, fast gleich mit den drei vorgenannten Verfahren. -
Nachfolgend werden jeweils ausgewählte Teilgruppen von Differenzenverfahren näher betrachtet.

Vergleicht man die beiden Verfahren mit zentralen Differenzen in Abbildung 6.4.2, so findet man ohne Schwierigkeit die Steigung 2, wenn man eine Gerade durch die jeweiligen Punkte legt. Das Verfahren in Erhaltungsform liegt im Schnitt um den Faktor 1/2 unter dem Ergebnis der konvektiven Form. Bei beiden Verfahren scheint bei $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x \approx 2$ ein Plateau zu bestehen, bei dem ein Abweichen von der Steigung 2 vorhanden ist. Möglicherweise macht sich dort der Einfluß der örtlichen Oszillationen auf den maximalen Fehler bemerkbar.

Bei den Upwind-Verfahren 1. Ordnung in Abbildung 6.4.3 zeigt sich ebenfalls in ziemlich reiner Form der Unterschied um den Faktor 1/2 zwischen den beiden Varianten. Oberhalb $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x = 4$ deutet sich eine Abflachung an.

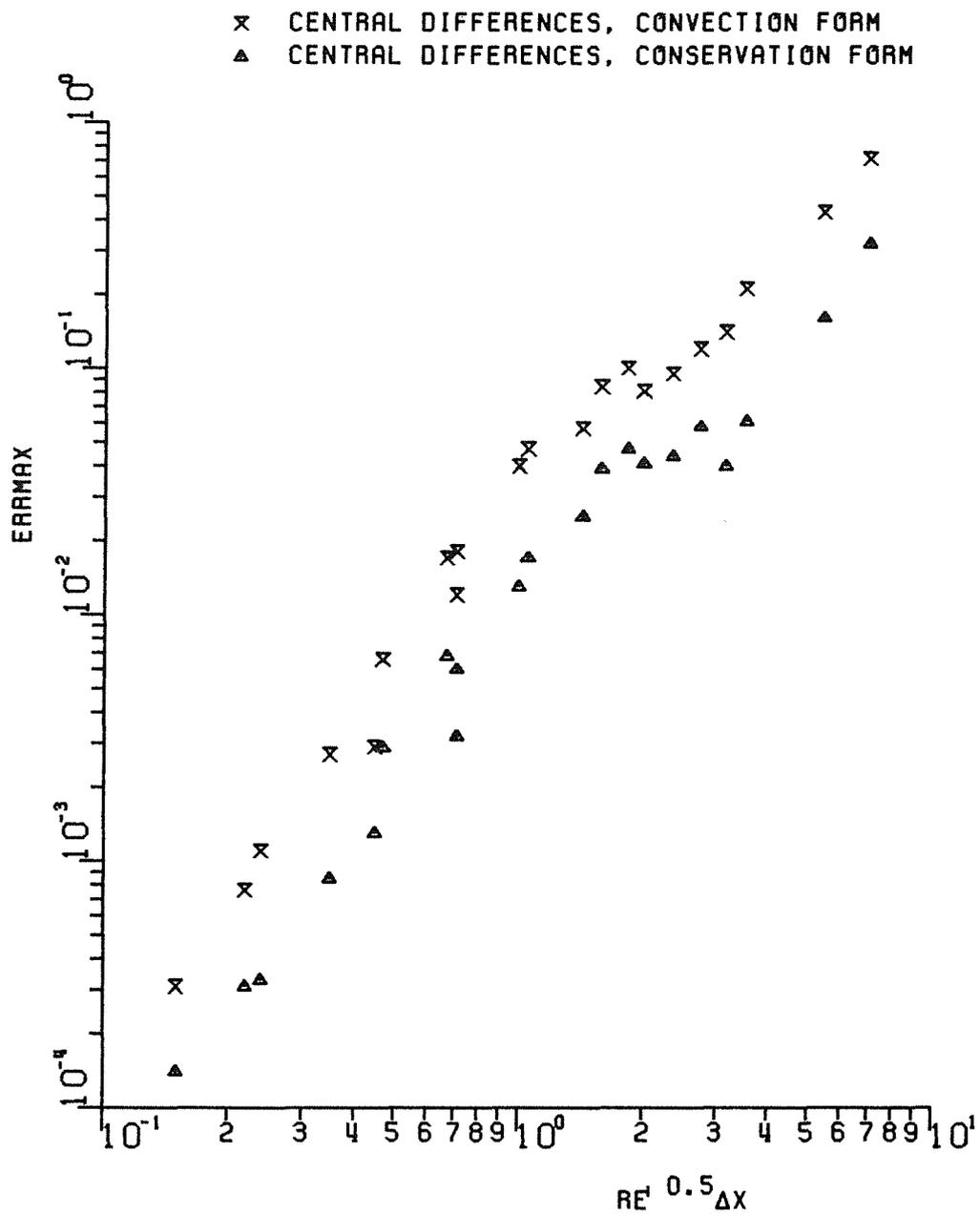


Abb. 6.4.2: Maximaler ortsabhängiger Fehler ERR_{MAX} der beiden Verfahren mit zentralen Differenzen. Die Erhaltungsform liegt im Schnitt um den Faktor zwei besser.

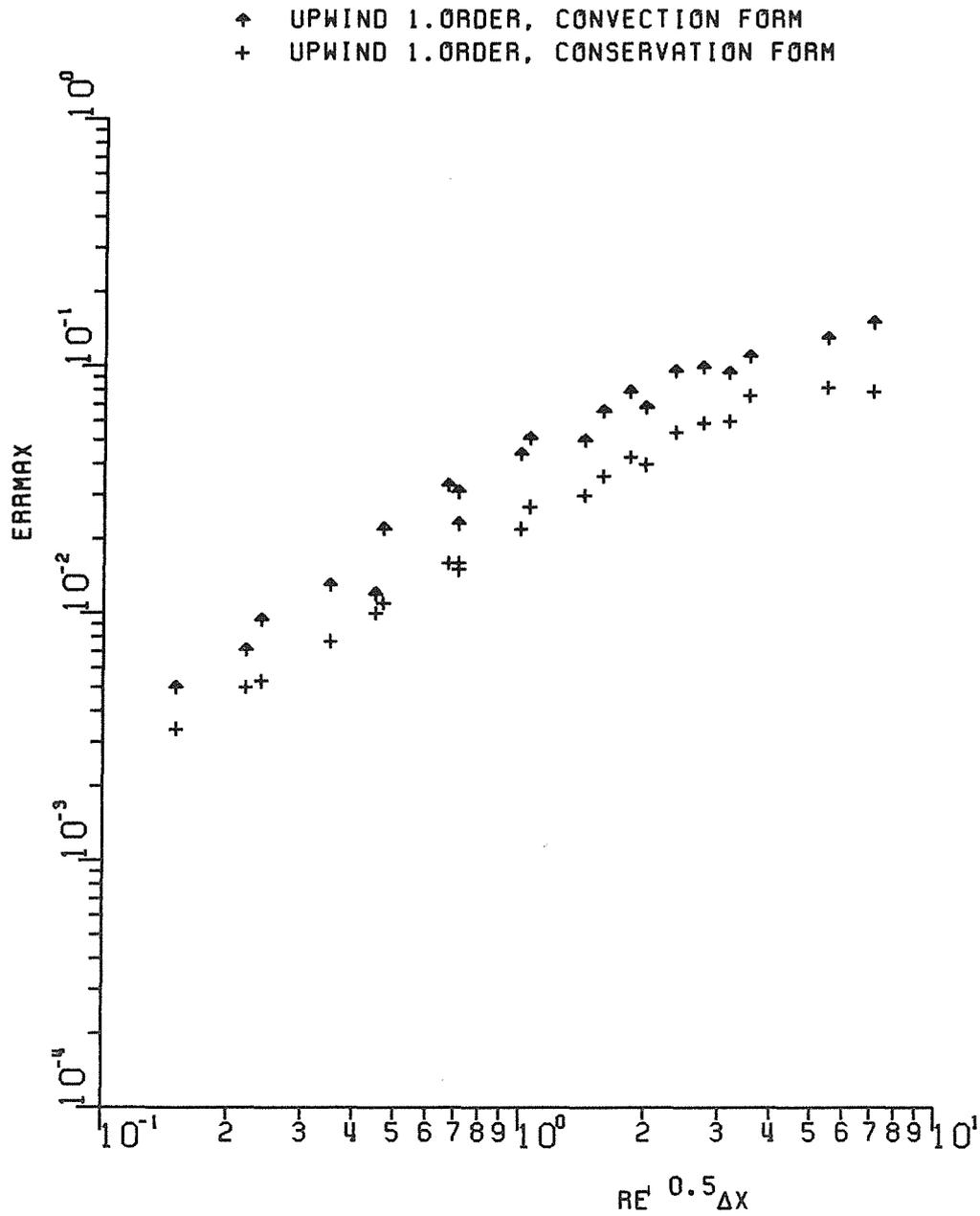


Abb. 6.4.3: Maximaler ortsabhängiger Fehler ERRMAX der beiden Upwind-Verfahren erster Ordnung. Die Erhaltungform liegt im Schnitt um den Faktor zwei besser.

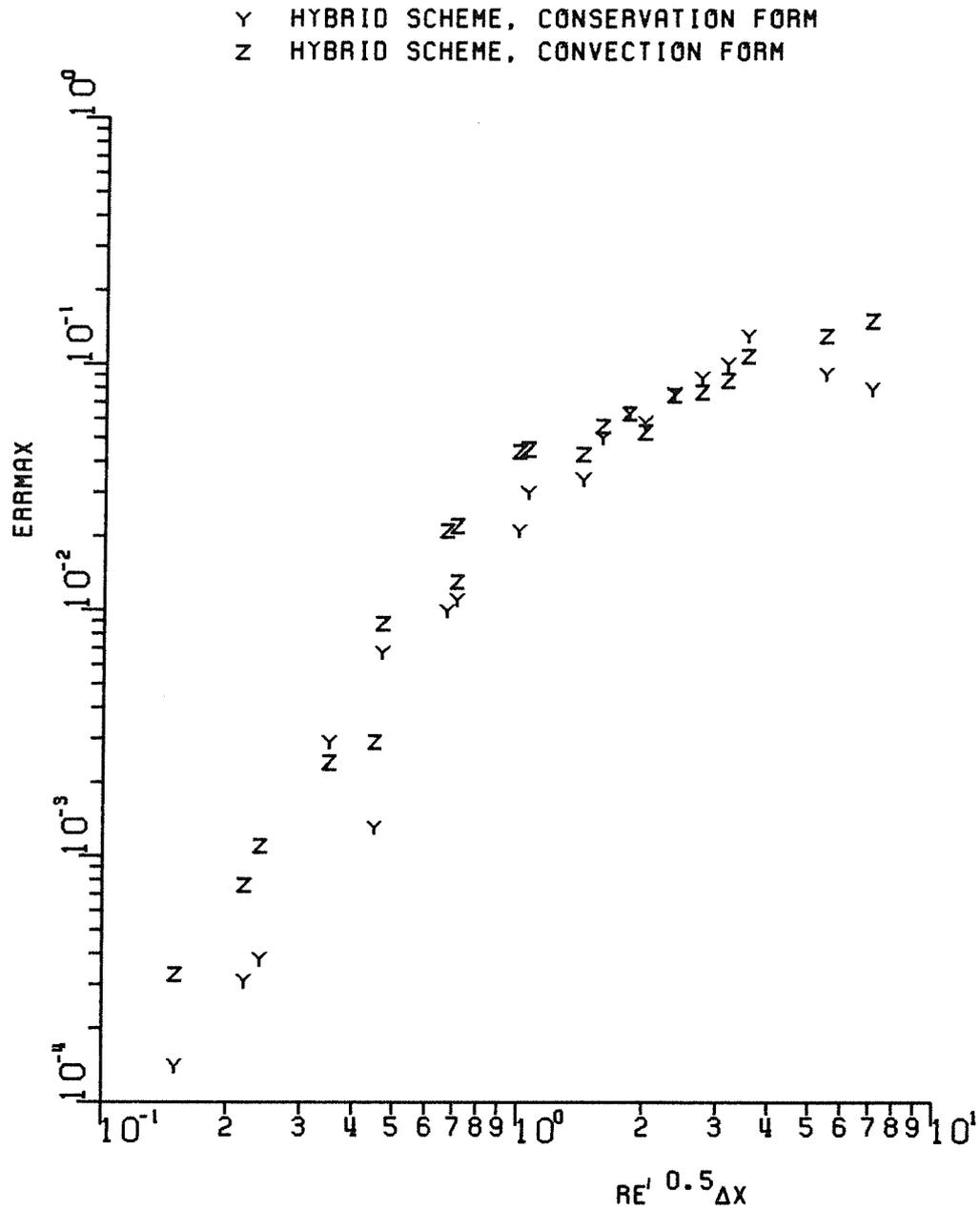


Abb. 6.4.4: Maximaler ortsabhängiger Fehler ERRMAX der beiden hybriden Verfahren.

Der Vergleich der beiden vorgenannten Verfahren (beide Varianten) mit den hybriden Verfahren in Abbildung 6.4.4 zeigt den Größenordnungsübergang etwa bei $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} = 1$, die feine Übereinstimmung zwischen Upwind- und Hybrid-Verfahren erst etwa bei $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} = 5$, so daß etwa bei $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} \approx 2$ der effektive Übergang von zentralem zum Upwind-Verfahren geschieht, d.h. daß in den für den maximalen Fehler maßgeblichen Punkten die Maschen-Reynoldszahlen im Betrag den Wert 2 überschreiten. Dies entspricht wegen

$$\text{Re}' \cdot \Delta x^2 = \text{Re}_{\Delta x} \cdot \Delta x = 4,$$

wenn wir $\Delta x = 0.1$ annehmen, einer maximalen Maschen-Reynoldszahl von 40.

Dies wird verständlich, wenn wir die exakten Lösungen des Testproblems unter die Lupe nehmen. Je größer Re' , desto größer der Bereich, in dem T Werte nahe Null hat. Starke Gradienten treten für große Re' nur in der Nähe des linken und unteren Randes auf, wo die Geschwindigkeit etwa 1/10 der maximalen Geschwindigkeit beträgt. Damit treten in Bereichen mit stärker von Null abweichenden Temperaturgradienten Maschen-Reynoldszahlen auf, die nur bei 10% der maximalen liegen und damit grob von der Größenordnung, - 40 : 10 ~ 2-, sind, bei denen bei HDS der Übergang von CDS zu UDS stattfindet.

Bei den exponentiellen Verfahren in Abbildung 6.4.5 ist die Situation weniger klar. Das Verfahren von El-Mistikawy-Werle liegt bis $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} \approx 2$ bei etwa 50% des Verfahrens von Allen-Southwell. Darüber liegen sie sehr nahe zusammen. Das Verfahren von Berger liegt bis zu $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} = 2$ in etwa zwischen beiden Verfahren. Oberhalb liegt es deutlich über den beiden anderen Verfahren.

Abbildung 6.4.6 umfaßt LECUSSO, LECUSSO-C und QUICK-PLUS sowie die Methode von Gushchin und Shchennikov. Das Verfahren von Gushchin und Shchennikov liegt meist über dem LECUSSO-Verfahren in Konvektionsform. Im ganzen Bereich $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} \leq 6$ liegen QUICK-PLUS und LECUSSO-Verfahren in Erhaltungsform grob beim halben Fehler des LECUSSO-Verfahrens in Konvektionsform. Erst oberhalb $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} = 6$ verwischen sich die Unterschiede.

Abbildung 6.4.7 vergleicht das hybride Verfahren in konvektiver Form mit dem lokal exakten Verfahren von Allen-Southwell. Die Testrechnungen bestätigen die schon mehrmals von anderen Autoren geäußerte Vermutung, daß Allen-

Southwell nicht wesentlich besser liegt als das hybride Schema in konvektiver Form.

Bei den entsprechenden Varianten in Erhaltungsform, dem erhaltungstreuen hybriden Verfahren und dem Schema von El-Mistikawy-Werle, zeigt Abbildung 6.4.8, daß keines der beiden Verfahren dem anderen deutlich überlegen ist.

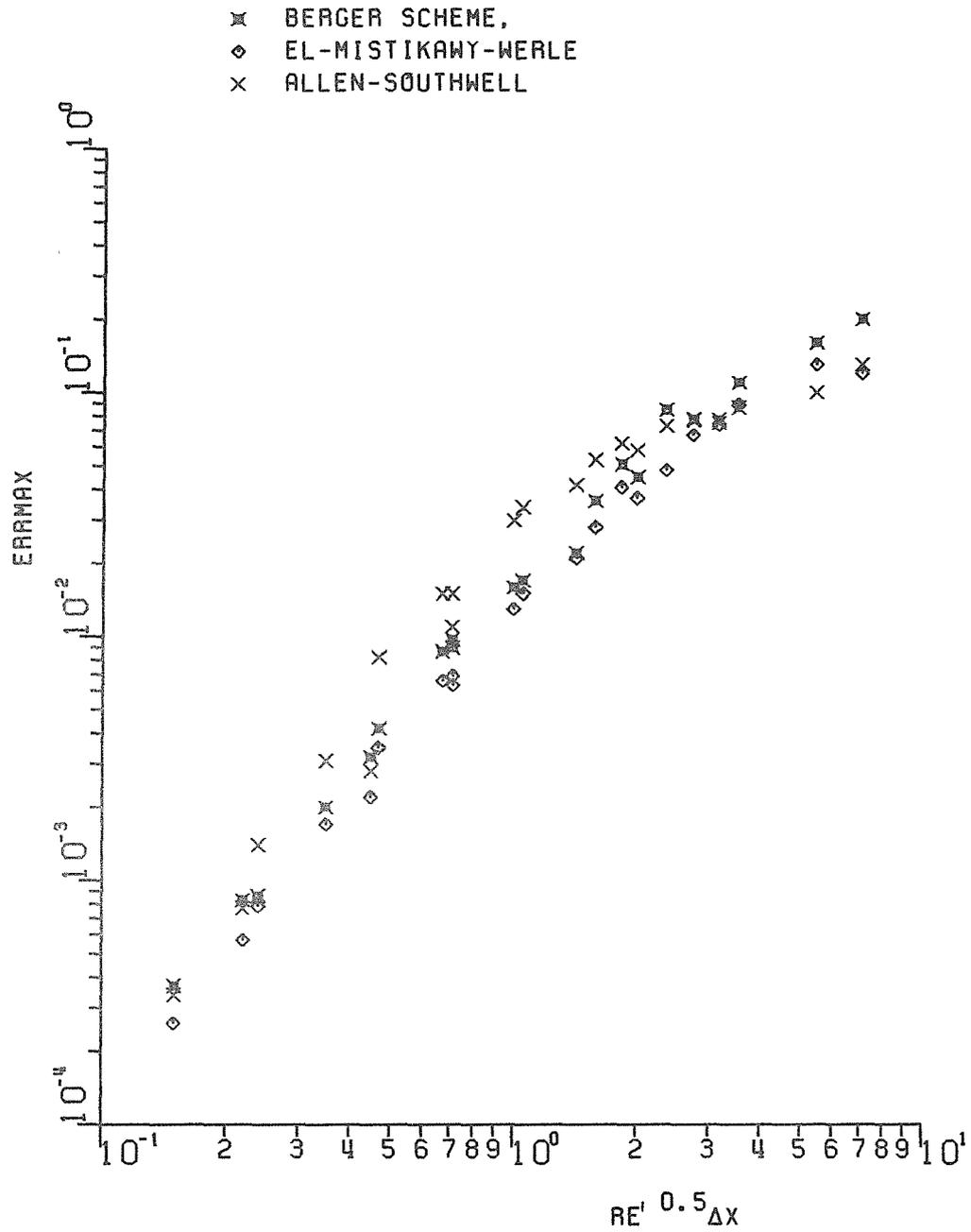


Abb. 6.4.5: Maximaler ortsabhängiger Fehler der exponentiellen Verfahren als Funktion von $\sqrt{Re^\tau \Delta x}$.

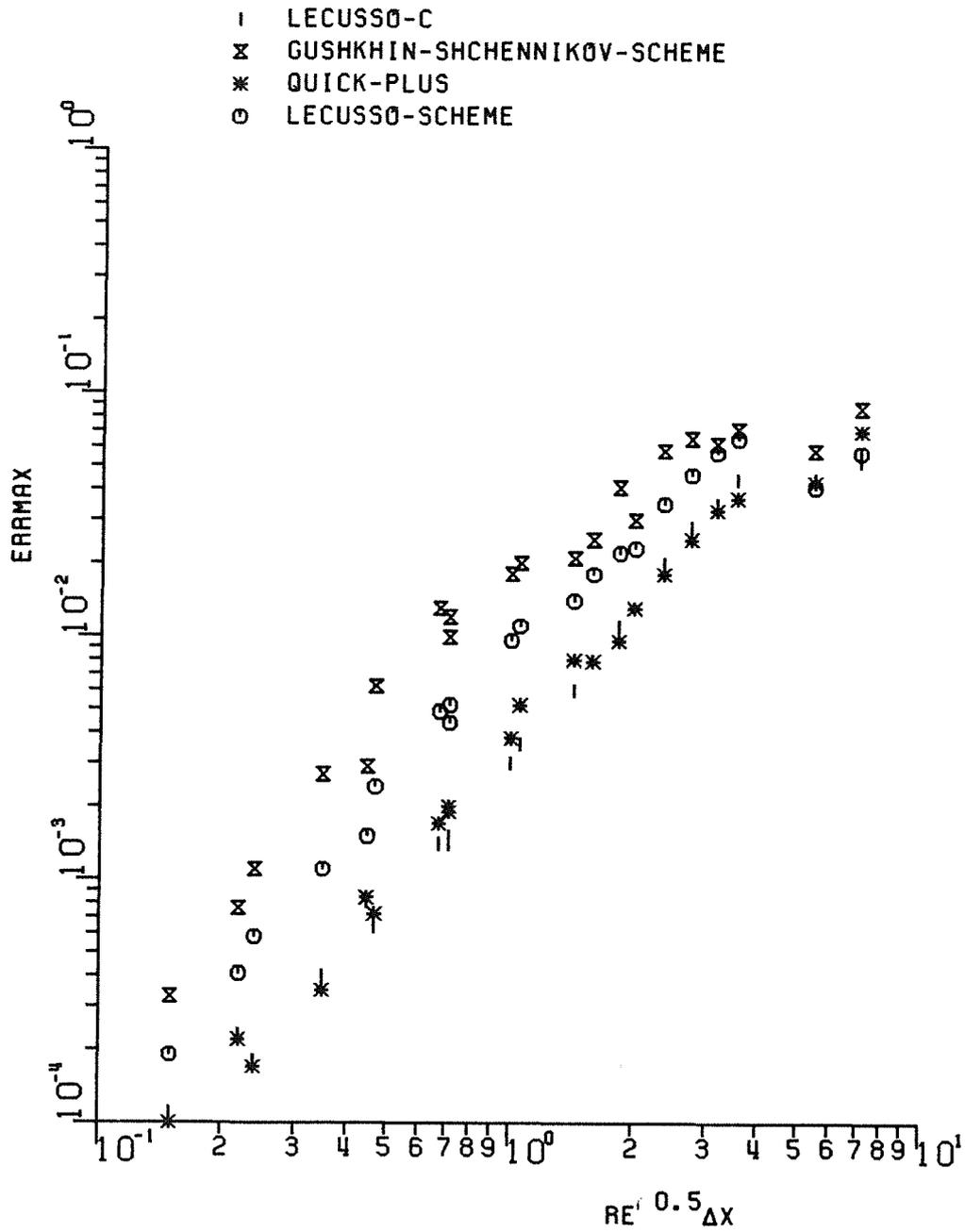


Abb. 6.4.6: Maximaler Fehler der Verfahren mit 4 Punkten (pro Dimension). Die Erhaltungsformen (LECUSSO-C und QUICK-PLUS) sind etwa um den Faktor zwei besser als die Konvektionsform (LECUSSO). Das Verfahren von Gushchin-Shchennikov (Variante A) liegt immer schlechter als LECUSSO.

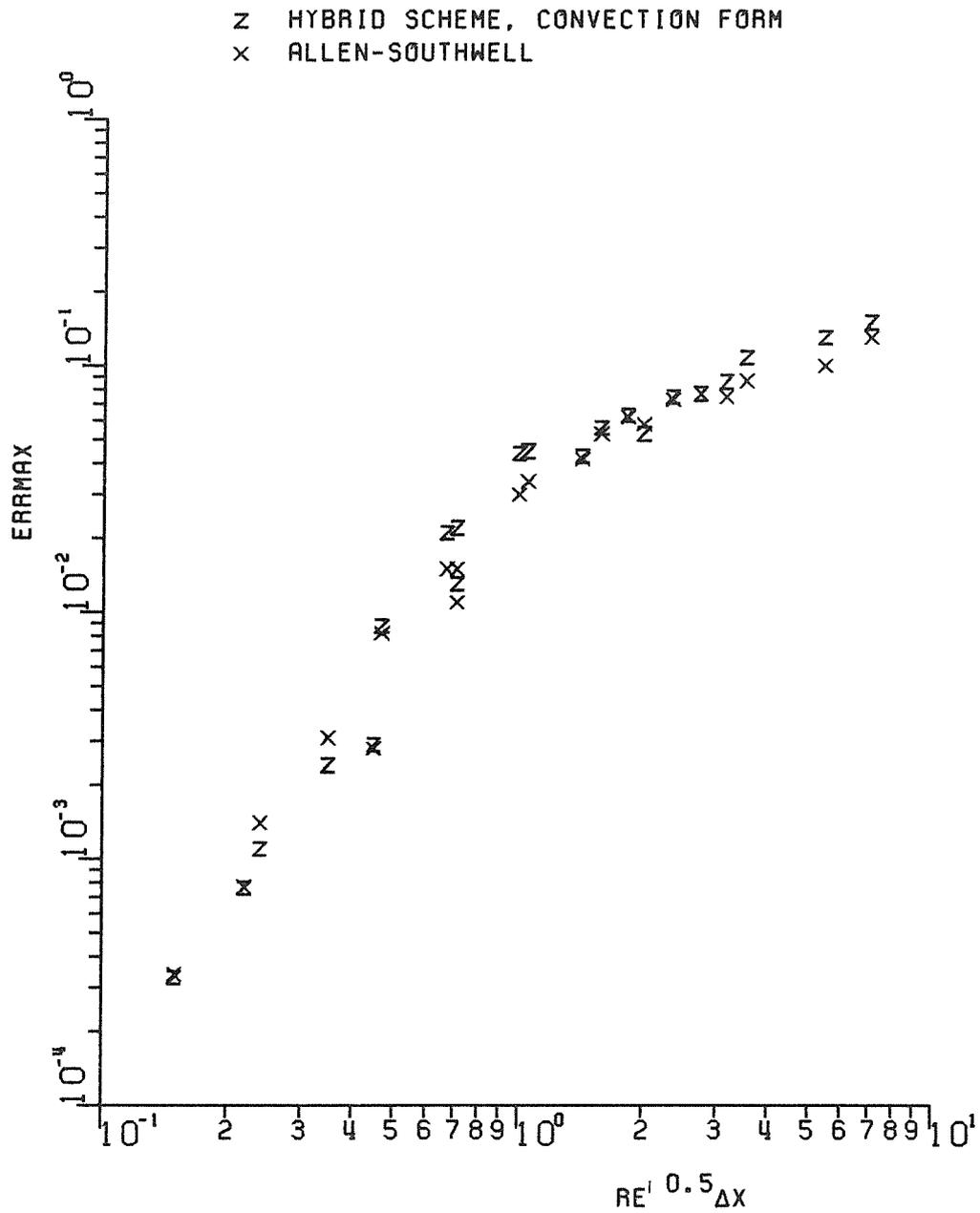


Abb. 6.4.7: Maximaler Fehler des hybriden Verfahrens in konvektiver Form (=HDS) und des Verfahrens von Allen-Southwell (=ASS). ASS liegt kaum besser als das hybride Verfahren in Konvektionsform.

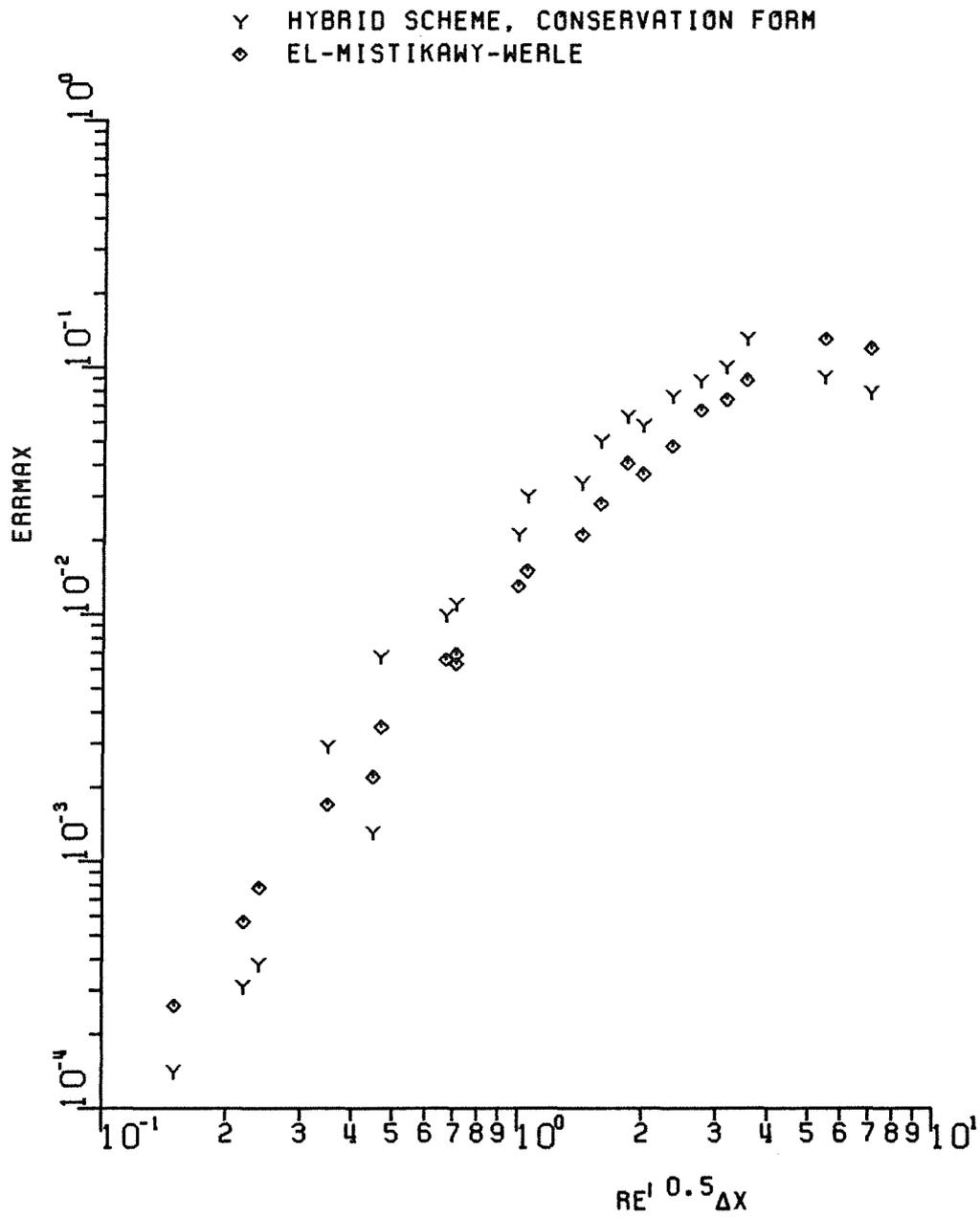


Abb. 6.4.8: Maximaler Fehler des hybriden Verfahrens in Erhaltungsform und des Verfahrens von El-Mistikawy-Werle.

Abbildung 6.4.9 vergleicht das LECUSSO-Verfahren (Konvektionsform) mit LUDS und LSUDS. Für den Bereich kleinerer $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x}$ ist LSUDS klar besser als LECUSSO und das letztere besser als LUDS. Für größere Werte von $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x}$ verwischen sich diese Unterschiede, die Verfahren sind dort nahezu gleichwertig, so daß Aussagen bezüglich des LECUSSO-Verfahrens fast ebenso für LSUDS gelten.

Einen Vergleich der in Abbildung 6.4.9 gezeigten Verfahren mit den Verfahren von Abbildung 6.4.7, sogenannten Standardverfahren, die in einer Dimension jeweils mit Dreipunktnäherungen arbeiten, zeigt Abbildung 6.4.10. Dieser Vergleich von Verfahren in konvektiver Form zeigt, daß durch die Verwendung eines geeignet gewählten Upwind-Verfahrens mit vier oder mehr Punkten beim maximalen ortsabhängigen Fehler ein Faktor zwei bis vier gewonnen werden kann.

Abbildung 6.4.11 zeigt die fortgeschrittenen Upwind-Verfahren in Erhaltungsform, das sind LUDS und LSUDS in Erhaltungsform sowie QUICK-PLUS und LECUSSO in Erhaltungsform. Hier liegt im Bereich $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} \leq 1$ die LSUDS-Erhaltungsform geringfügig besser als QUICK-PLUS und LECUSSO-C. Für $\sqrt{\text{Re}' \cdot \Delta x} \geq 1$ ist die Situation umgekehrt und QUICK-PLUS und LECUSSO-C liegen meist nahe beieinander und LSUDS (Erhaltungsform) liegt etwas schwächer.

In Abbildung 6.4.12 sind zusätzlich das Verfahren von El-Mistikawy-Werle und das hybride Verfahren in Erhaltungsform aufgenommen. Das letztere Verfahren hat gerade im Bereich höherer Maschen-Reynoldszahlen einen um den Faktor 4 bis 10 größeren maximalen örtlichen Fehler als LSUDS-C (Erhaltungsform), QUICK-PLUS und LECUSSO-C.

Es ist eine der wesentlichen Ergebnisse der Untersuchung von Günther [64], daß LSUDS-C, QUICK-PLUS und LECUSSO-C nahezu gleichwertig sind und beträchtlich kleinere maximale Fehler ergeben als Standardverfahren.

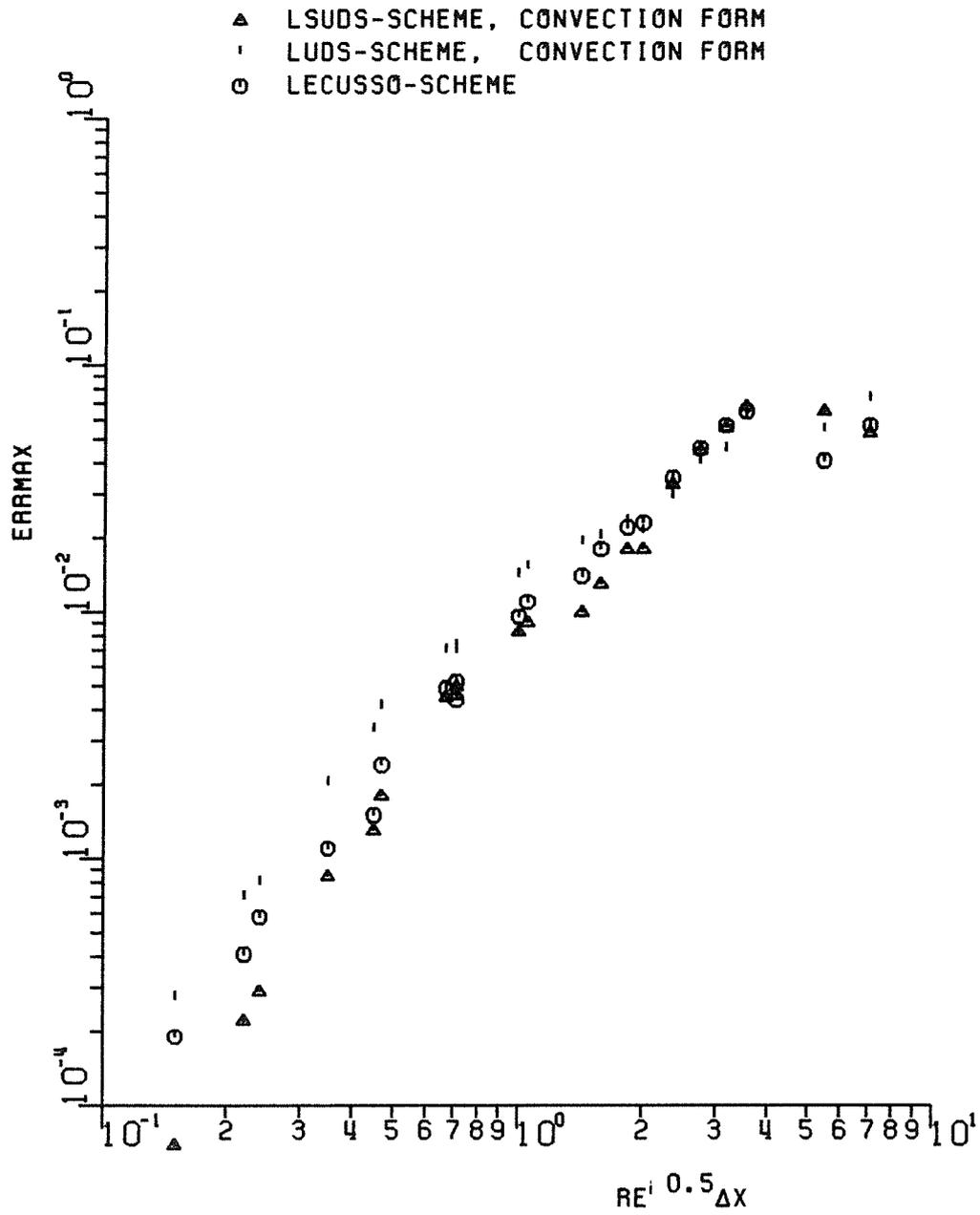


Abb. 6.4.9: Maximaler örtlicher Fehler ERRMAX von LECUSSO, LUDS, LSUDS.

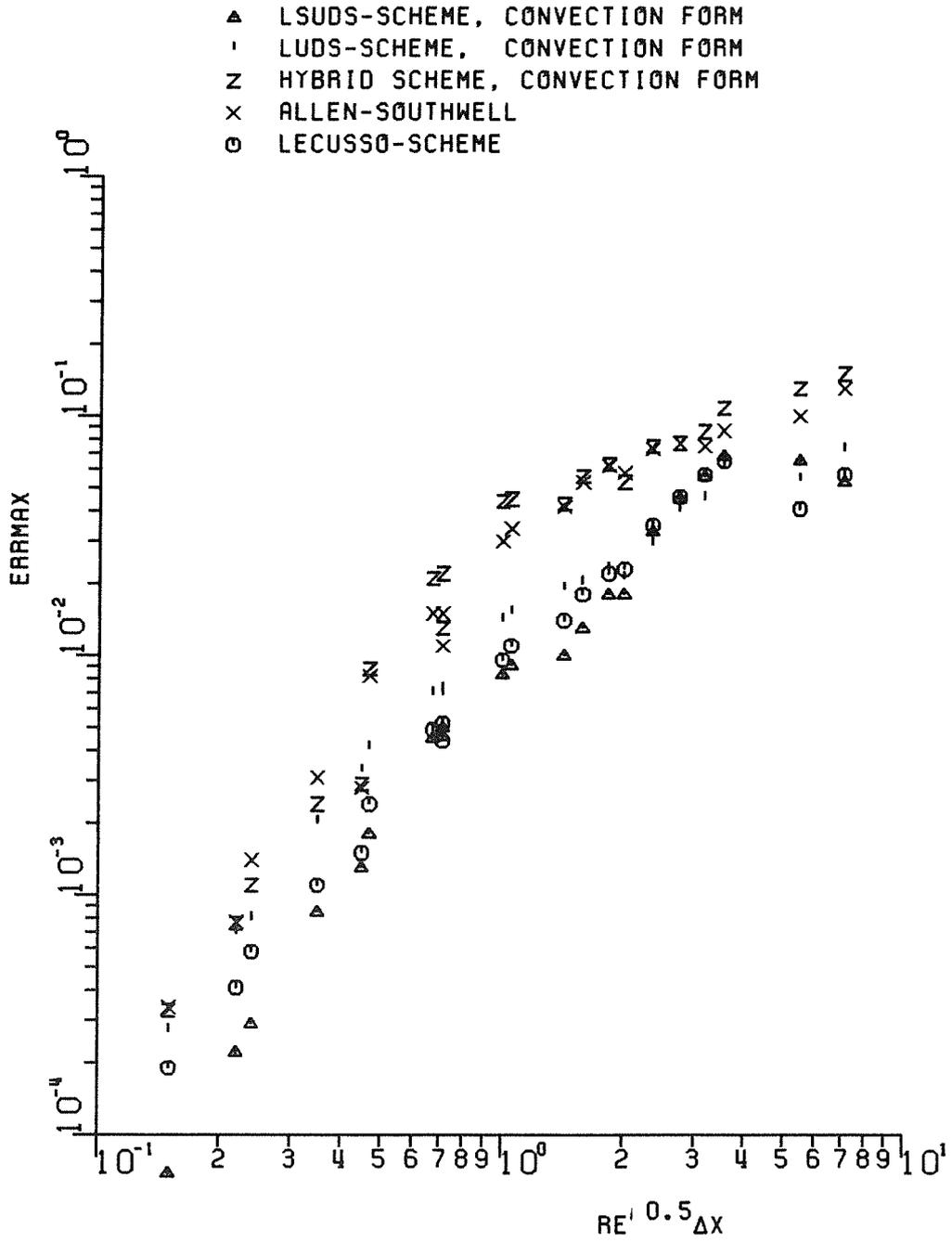


Abb. 6.4.10: Vergleich der fortgeschrittenen Upwind-Verfahren in konvektiver Form mit den Standardverfahren HDS und ASS. Die fortgeschrittenen Upwindverfahren in Konvektionsform liegen deutlich besser als HDS und ASS.

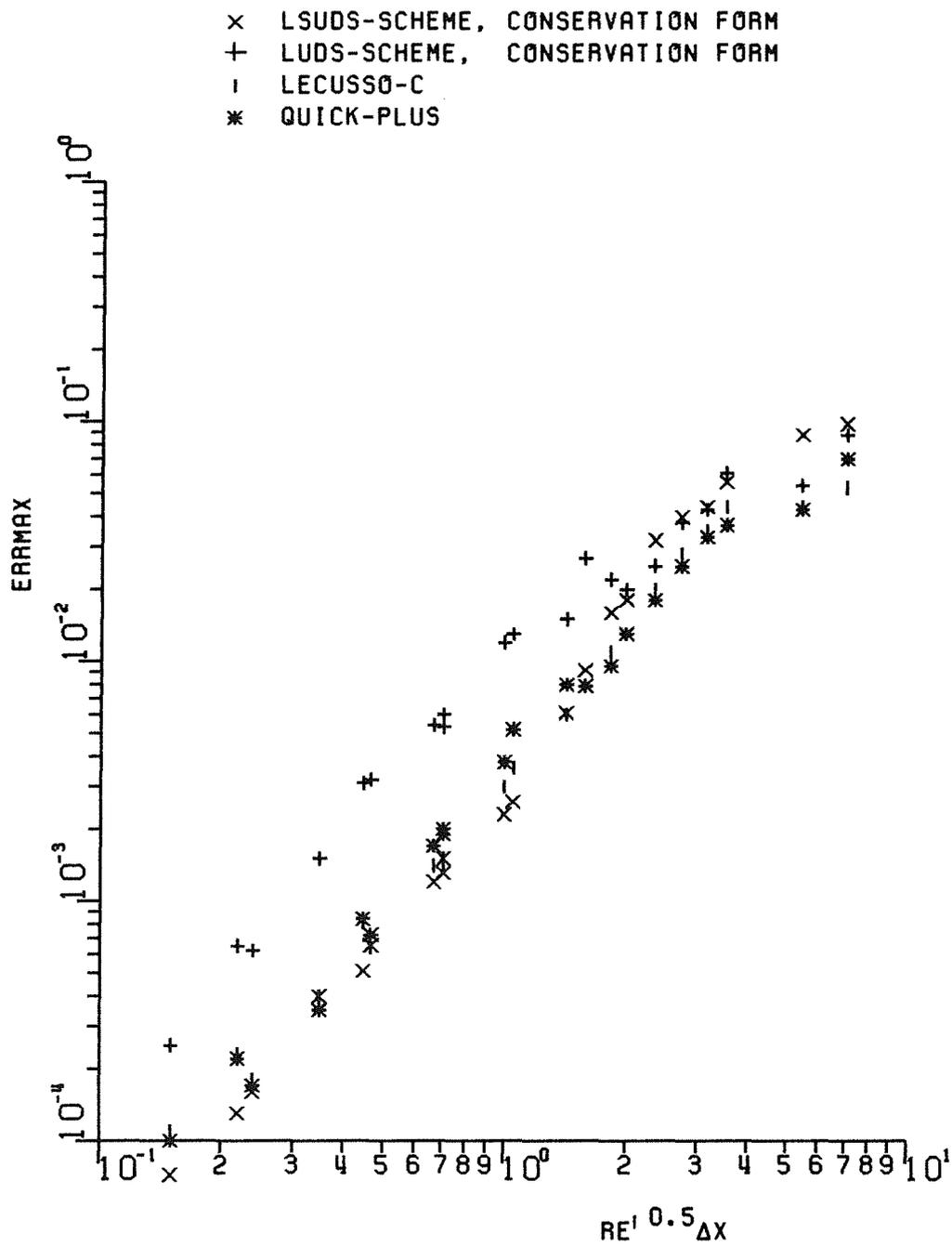


Abb. 6.4.11: Maximaler ortsabhängiger Fehler $ERRMAX$ für die Erhaltungsformen der fortgeschrittenen Upwind-Verfahren.

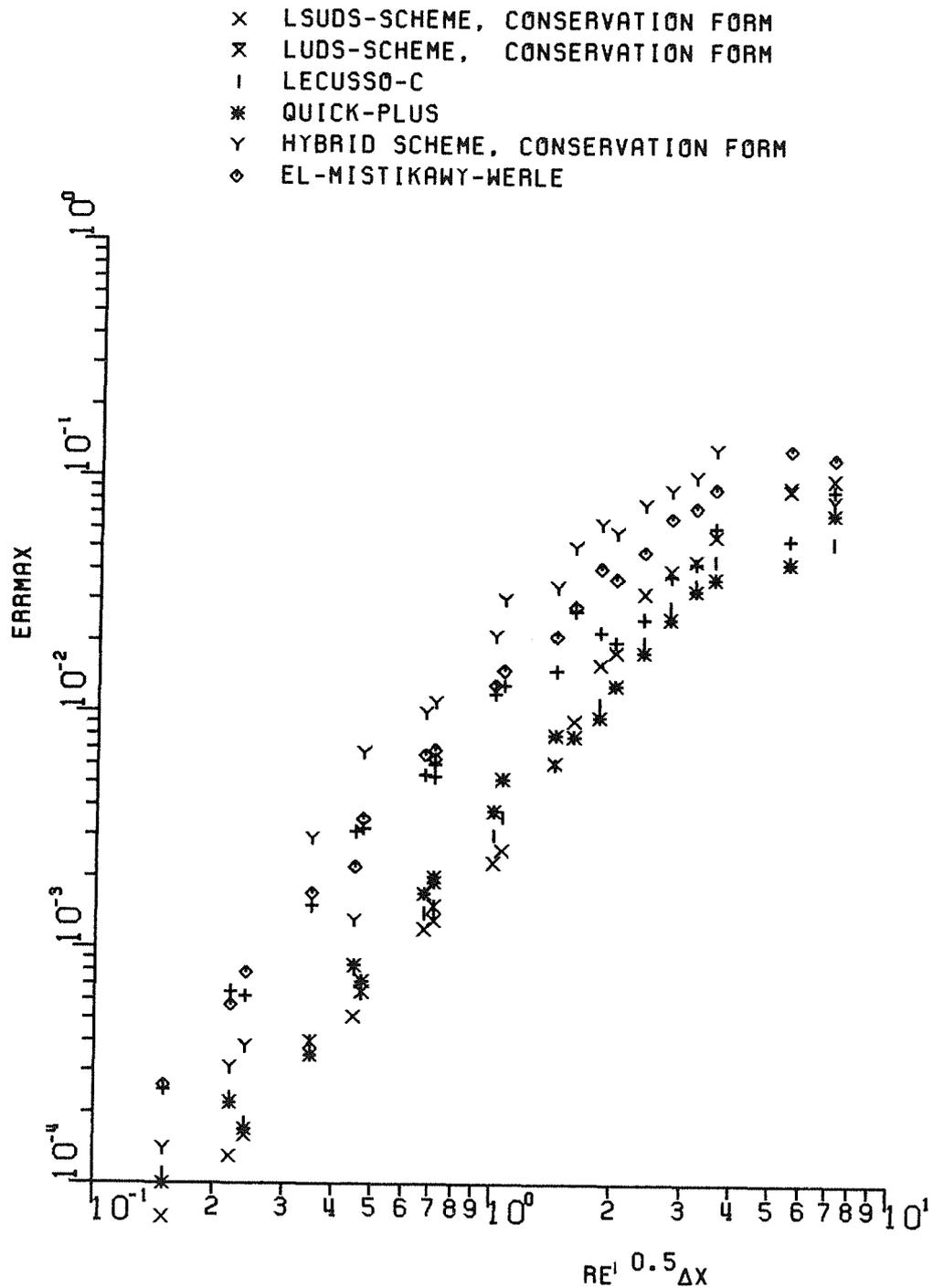


Abb. 6.4.12: Vergleich der fortgeschrittenen Upwind-Verfahren in Erhaltungsf orm mit den in Abbildung 6.4.8 gezeigten Standardverfahren. Zwischen dem Standardverfahren HDS-C ("Y") und den fortgeschrittenen Upwindverfahren LECUSSO-C ("I"), QUICK-PLUS ("*") und LSUDS-C ("X") liegt fast immer ein Faktor zwei bis fünf.

Von den in Tabelle 6.4.1 enthaltenen Verfahren wird das Schema von Kawamura-Kuwahara mit LUDS in Abbildung 6.4.13 für $\Delta x = \Delta y = 0.1$ verglichen. Dabei wird UDS als NBS für das Kawamura-Kuwahara-Schema verwendet. Beide Verfahren sind $O(\Delta x^3)$ und besitzen starre Koeffizienten. Für kleinere $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ sind die Fehler beider Verfahren etwa gleich groß, bei größeren Werten von $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ liegt LUDS deutlich besser. Damit liegen natürlich alle Verfahren wie LECUSSO und LSUDS, die besser sind als LUDS, auch günstiger als Kawamura-Kuwahara. Die Lage von 'Generalized-OCI' unter den Verfahren in konvektiver Form zeigt Abbildung 6.4.14, in der noch LECUSSO und LSUDS wieder für $\Delta x = \Delta y = 0.1$ zum Vergleich eingezeichnet sind. Mit einer Ausnahme ($Re' = 50$) liegt 'Generalized-OCI' besser als LECUSSO und LSUDS. Wie schon in Kapitel 3 bei der Vorstellung dieses Verfahrens erwähnt wurde, ist dieses Differenzenschema sehr schwierig zu programmieren, so daß seine Anwendung trotz des gezeigten günstigen Fehlerverhaltens vom Aufwand her bei Produktionsrechnungen nicht vertretbar ist. Auch ist nicht klar, wie eine entsprechende Erhaltungsform zu 'Generalized OCI' zu bilden wäre. Auf der anderen Seite wäre es wünschenswert, ein vom Fehlerverhalten her gleichwertiges explizites Differenzenverfahren zur Verfügung zu haben.

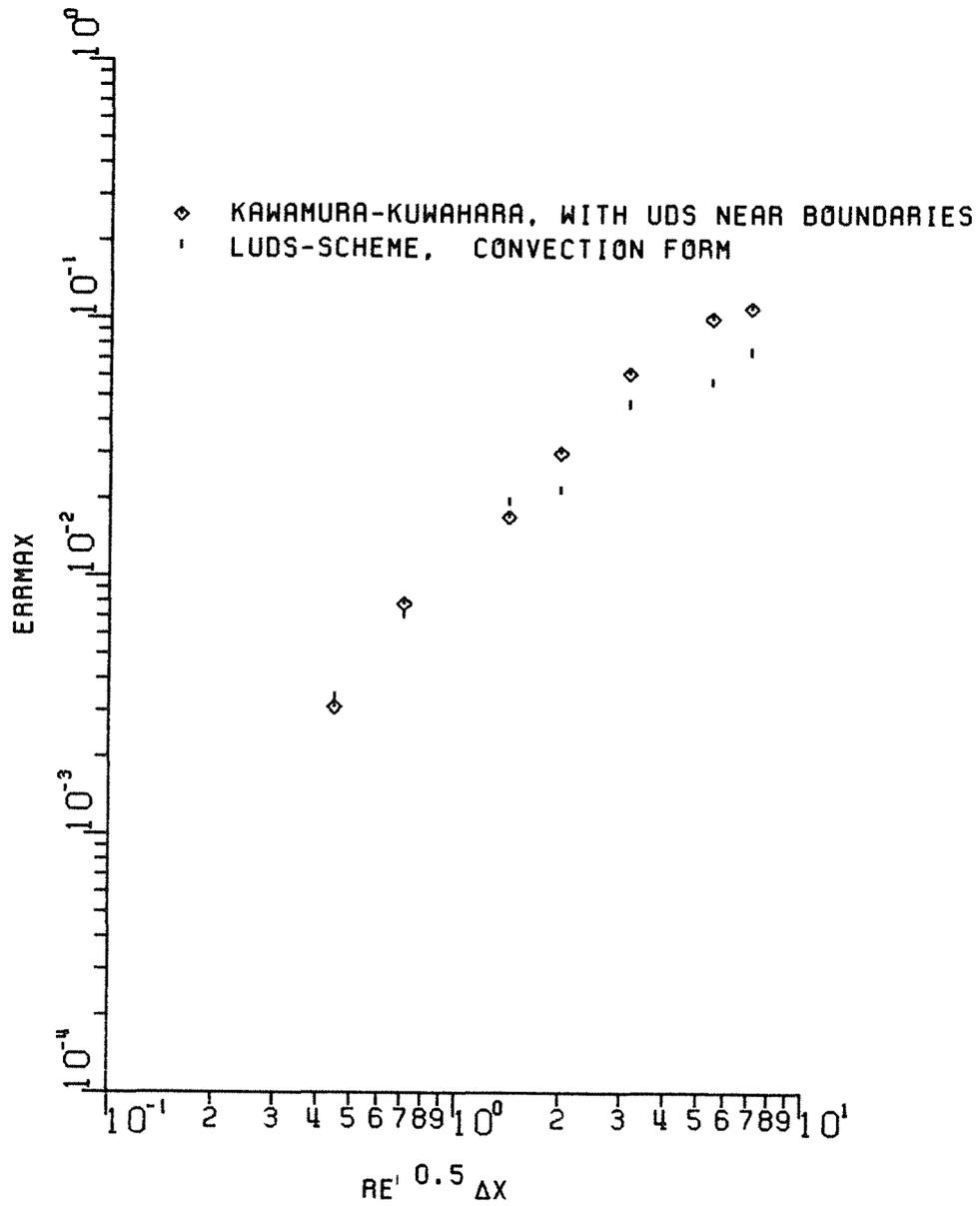


Abb. 6.4.13: Vergleich von LUDS mit dem Schema von Kawamura-Kuwahara. Die beiden Verfahren der Ordnung $O(\Delta x^3)$, das einseitige LUDS mit vier Punkten und das Verfahren von Kawamura-Kuwahara sind nahezu gleich gut.

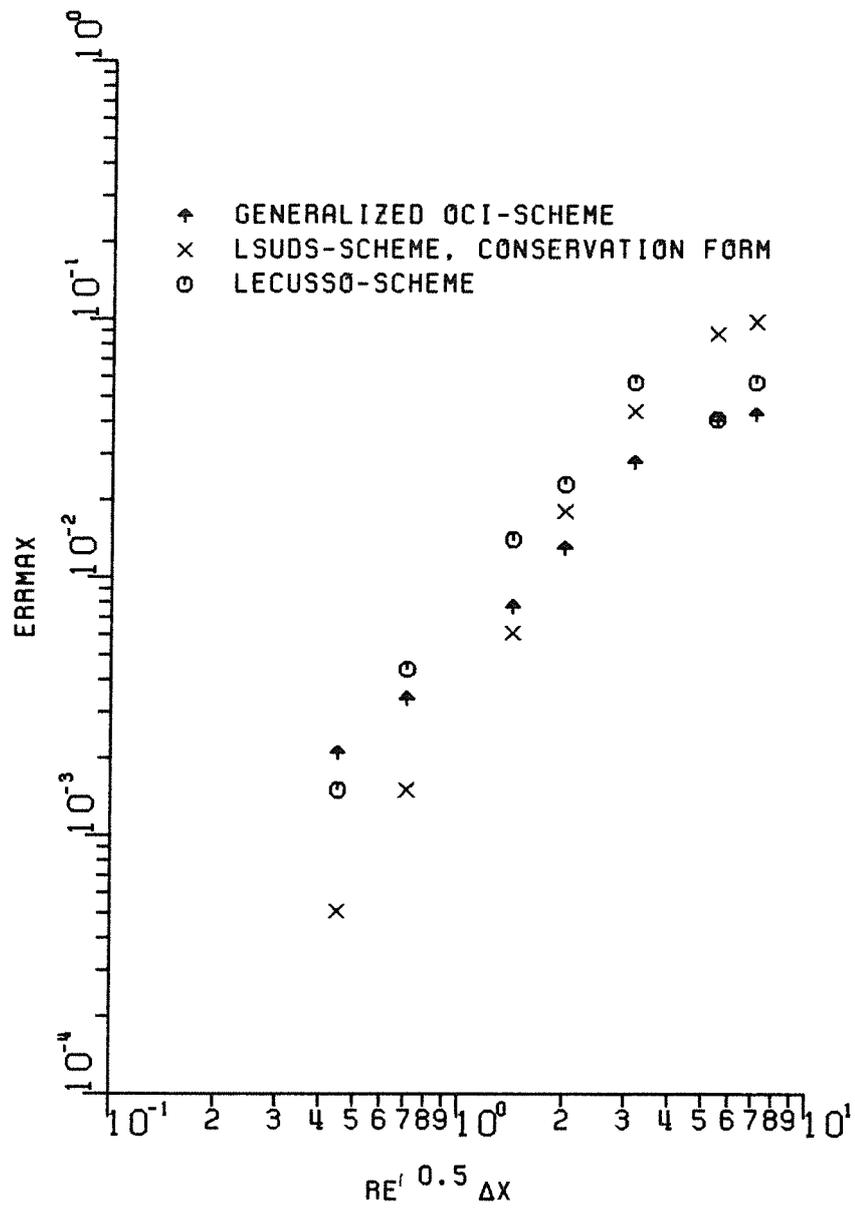


Abb. 6.4.14: Vergleich von 'Generalized-OCI' mit LECUSSO und LSUDS.

Zu den Verfahren, die in Tabelle 6.4.1 aufgeführt sind, ist noch folgendes festzuhalten:

Das OCI-Verfahren von Lorenz [103] liegt weniger günstig. Es wurde mit in die Tests aufgenommen, weil es für die Funktionen $\{1, x, x^2, \exp(\rho x), x \exp(\rho x)\}$ mit $\rho = \text{Re}_{\Delta x, i}$ exakt ist und damit einen Vergleich mit dem Verfahren NONAME erlaubt, welches ebenfalls für diese fünf Funktionen exakt ist. Hier ist das explizite-Verfahren NONAME immer mindestens um den Faktor zwei besser als das entsprechende OCI-Verfahren. NONAME bringt fast gleiche Ergebnisse bezüglich des Fehlerverhaltens wie LECUSSO.

Die zweite Variante des 2-d Verfahrens von Gushchin-Shchennikov liegt für $\sqrt{\text{Re}} \cdot \Delta x > 2$ besser. Allerdings scheint dieses Verfahren in diesem Bereich trotz des günstigeren Fehlerverhaltens Oszillationen beschränkter Amplitude aufzuweisen, wie Abbildung 6.4.15 mit erhöhtem Ordinatenmaßstab zeigt.

Aus den numerischen Vergleichen sind bisher die in Abschnitt 3.9 vorgestellten Verfahren ausgespart geblieben. Aus der Schar dieser Verfahren wurden zwei ausgewählt und mit ihnen das Testbeispiel mit den fest gewählten Parametern $\Gamma \equiv \lambda \equiv 1$ und einem Maschennetz mit 11×11 Punkten numerisch gelöst. Die beiden Verfahren sind EULER-QUICK und CCCT von Gaskell und Lau [57]. Zum Vergleich sind zwei der früher behandelten Differenzenverfahren mit aufgenommen (QUICK-C und LECUSSO-C). Alle vier Verfahren sind in Erhaltungsform. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.4.2 angegeben und in Abbildung 6.4.16 dargestellt. Zwei wesentliche Punkte können festgestellt werden:

- LECUSSO-C und CCCT sind von vergleichbarer Qualität.
- QUICK-C ist etwas schlechter als die beiden vorgenannten.
- EULER-QUICK ist fast immer schwächer als die drei anderen Verfahren.
- Bei den adaptiven Verfahren fällt das etwas ungleichmäßige Ansteigen von ERRMAX auf.

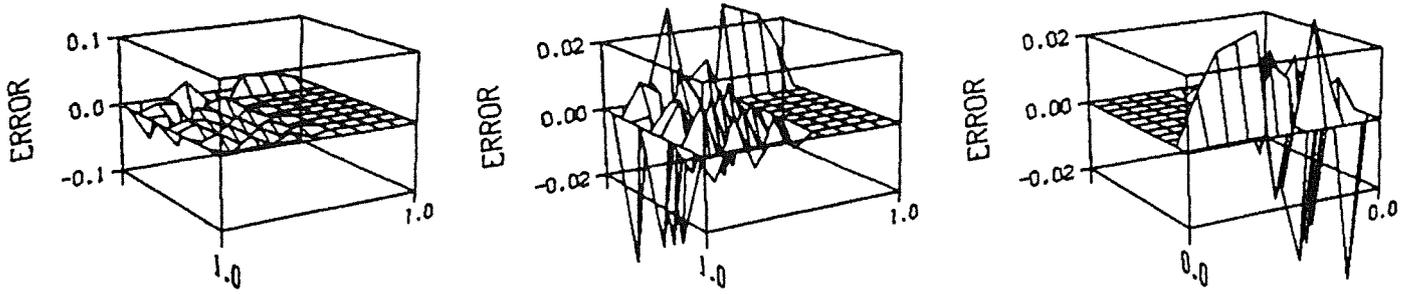


Abb. 6.4.15: Lokaler Fehler der numerischen Näherung mit Variante B der zweidimensionalen Version des Differenzenverfahrens von Gushchin-Shchennikov, $Re' = 5000$. Links mit großem Maßstab, in der Mitte überhöhte Darstellung mit kleinem Maßstab und rechts dieselbe Darstellung, um 180° gedreht. Trotz des relativ kleinen Fehlers (vgl. Tab. 6.4.1) scheint die numerische Lösung eine Art beschränkter Oszillation zu beinhalten.

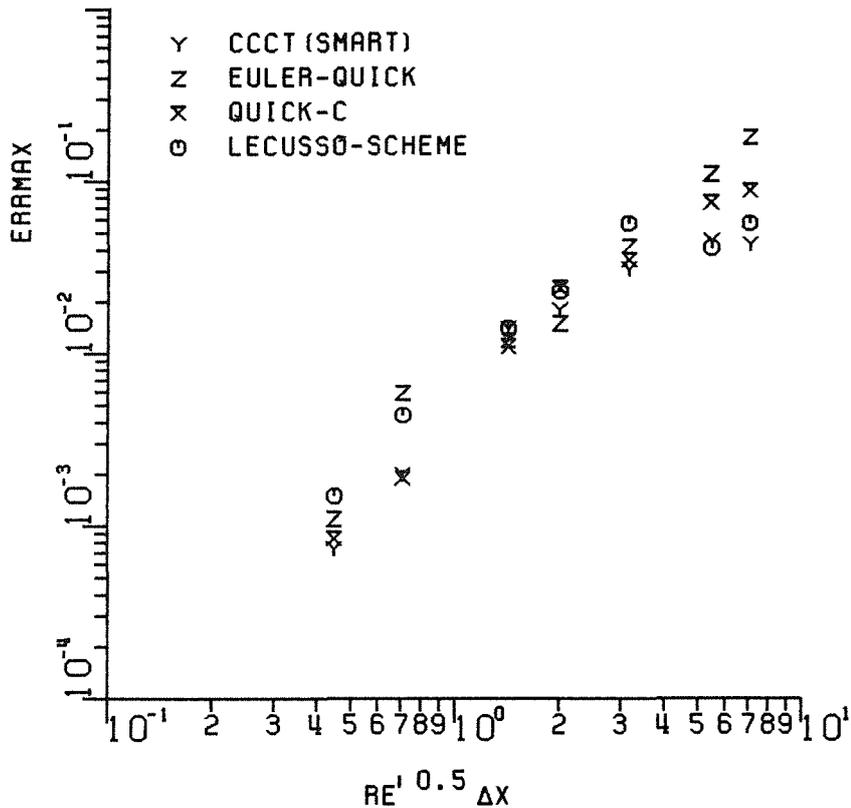


Abb. 6.4.16: Vergleich zweier fortgeschrittener Upwindverfahren (LECUSSO-C und QUICK-C) mit zwei lösungsadaptiven Verfahren (CCCT(SMART) und EULER-QUICK). Testbeispiel mit $\Gamma = \lambda = 1$, $M = N = 11$.

Re'	LECUSSO-C	QUICK-C	EULER-QUICK	CCCT
20	0.81E-3	0.85E-3	0.11E-2	0.74E-3
50	0.15E-2	0.19E-2	0.59E-2	0.20E-2
200	0.60E-2	0.11E-1	0.12E-1	0.14E-1
400	0.13E-1	0.24E-1	0.15E-1	0.18E-1
1000	0.35E-1	0.35E-1	0.42E-1	0.31E-1
3000	0.44E-1	0.75E-1	0.11	0.45E-1
5000	0.53E-1	0.88E-1	0.15	0.43E-1
10000	0.10	0.99E-1	0.18	0.10

Tab. 6.4.2: Vergleich der ERRMAX zweier lösungsadaptiver Verfahren (EULER-QUICK und CCCT) mit denen von LECUSSO-C und QUICK-C.
Standard-Testbeispiel mit $\Gamma = \lambda = 1$, $M = N = 11$.

6.5 Diskussion der Ergebnisse und Gesamtbewertung

Es ergeben sich im Detail folgende Feststellungen:

Die Verfahren mit 4 oder 5 Punkten und variablen Koeffizienten in der jeweiligen Erhaltungsform - das sind LSUDS-C, LECUSSO-C und QUICK-PLUS - sind etwa von gleicher Qualität. Für kleine $Re_{\Delta x,i}$ liegt LSUDS-C etwas besser, für größere $Re_{\Delta x,i}$ zeigen QUICK-PLUS und LECUSSO-C etwas kleinere maximale ortsabhängige Fehler. Die drei Verfahren liegen in der Regel - es treten immer wieder Ausreißer auf - etwa um den Faktor 3 besser als das Schema von El-Mistikawy-Werle und LUDS-C. Diesen beiden gegenüber ist das hybride Verfahren noch einmal (mit Ausnahme kleiner $Re_{\Delta x}$) um den Faktor zwei schlechter. Von den Verfahren in konvektiver Form liegt für kleine $Re_{\Delta x}$ LSUDS am besten, dieses vor LECUSSO und diese beiden vor LUDS, wenn man aus Gründen vertretbarer Programmieraufwandes das Verfahren 'Generalized-OCI' außer Betracht läßt.

Insgesamt liegen die Varianten der Differenzenverfahren in Erhaltungsform meist etwa um den Faktor 2 besser als die Versionen in Konvektionsform. Eine gewisse Ausnahme davon bilden LDUS und LSUDS. Offensichtlich werden randnahe Grenzschichten durch Verfahren in Erhaltungsform, welche versetzte Maschengitter verwenden, besser approximiert als durch Verfahren in konvektiver Form. Dieses Ergebnis liegt im Rahmen bekannter Erfahrungen. Insgesamt hängt die Qualität der numerischen Lösung stark von der Auflösung von Grenzschichten und bei den Verfahren, welche mehr als drei Punkte in eine Koordiantenrichtung benutzen, in gewissem Ausmaß auch von den nahe den Rändern benutzten modifizierten Differenznäherungen (NBS) bei Abströmen von der Wand ab.

Vergleicht man Allen-Southwell, LECUSSO und LSUDS als lokal exakte Verfahren mit entweder 3, 4 oder 5 Punkten, so zeigt sich (bei den Konvektionsformen), daß LECUSSO und LSUDS nahezu immer um den Faktor zwei besser sind als Allen-Southwell (siehe z.B. Abbildung 6.4.10), nur für relativ kleine $Re_{\Delta x}$ ist LSUDS besser als LECUSSO. Der Grund für dieses etwa gleich gute Abschneiden mag an den von Barrett [33] nicht gut gewählten modifizierten Differenzgleichungen in Randnähe bei LSUDS liegen. Diese Tendenz tritt noch verstärkt bei den Erhaltungsformen auf, bei den QUICK-PLUS und LECUSSO-C besser sind für größere $Re_{\Delta x}$ als LSUDS-C.

Eine Abwägung von Aufwand im Vergleich zum Nutzen für die fortgeschrittenen Upwind-Verfahren ergibt folgendes:

Diese Verfahren benützen im Vergleich zu Standardverfahren in den Differenzgleichungen entweder mehr Punkte und/oder variable Koeffizienten, die oft auch die rechenintensivere Auswertung von Exponentialfunktionen verlangen, was sowohl zu komplizierterer Programmierung als auch zu mehr Rechenaufwand führt. Weil die Verwendung von Punkten außerhalb des üblichen Dreipunktemusters mit Basispunkt, rechtem und linkem Nachbar in der Nähe des Randes modifizierte Differenzgleichungen (bei LUDS und LSUDS zweierlei Typen) verlangt, werden die Programmierung und der Rechenaufwand ebenfalls erhöht.

Demgegenüber steht ein Gewinn des Faktors 5 über weite Bereiche von Re' und mindestens eines Faktors 2, wenn wir Differenzenverfahren in konvektiver Form vergleichen, und zwar LSUDS als bestem Verfahren im Vergleich zum hybriden Verfahren. Bei den Differenzenverfahren in Erhaltungsform liegt fast durchweg ein Faktor von mindestens 4 zwischen dem hybriden Verfahren und QUICK-PLUS als einem der drei Spitzenreiter.

Insoweit scheint der Gewinn an Genauigkeit auch für Standardrechnungen gerechtfertigt. Auf der anderen Seite erlauben es die fortgeschrittenen Verfahren, bei vorgegebener Genauigkeit und vorgegebener diskreter Auflösung zu Rechnungen mit höherer typischer Kennzahl überzugehen. Bei unserem Testbeispiel, beschränkt auf die Differenzenverfahren in Erhaltungsform, bringt der Übergang vom hybriden Verfahren zu QUICK-PLUS einen Gewinn in $\sqrt{Re'} \cdot \Delta x$ von etwa 3, d.h. in Re' selbst etwa eine Größenordnung!

Es gibt noch eine Reihe von Erkenntnissen, die von geringerer Bedeutung sind:

Die Testrechnungen haben gezeigt bzw. bestätigt, daß das Verfahren von Allen-Southwell nur geringfügig besser ist als das hybride Verfahren in konvektiver Form. Für größere Maschen-Reynoldszahlen ist das El-Mistikawy-Werle-Verfahren über weite Bereiche besser als das hybride Verfahren in Erhaltungsform.

Das Verfahren FAS liegt etwa bei Allen-Southwell in der Genauigkeit, auch die örtliche Form des Fehlers ist ähnlich. Der rechnerische Aufwand, etwa das

Hundert- bis Tausendfache des Aufwandes anderer Verfahren, rechtfertigt es nicht, dieses Verfahren für Standardrechnungen zu benutzen.

Das Verfahren von Roos kommt für Standardrechnungen kaum in Frage, da seine Genauigkeit, verglichen mit dem hybriden Verfahren in Konvektionsform, kaum besser ist.

6.6 Zusammenfassend Bewertung der numerischen Tests

Die in Kapitel 3 beschriebenen Differenzenverfahren, sogenannte verbesserte Upwindverfahren, benötigen in jedem Fall einen größeren Programmier- und Rechenaufwand, weil die Näherungsgleichungen entweder mehr Punkte umfassen und/oder komplizierte Koeffizienten enthalten, deren Berechnung aufwendiger ist, wenn sie beispielsweise die Auswertung von Exponentialfunktionen verlangen. Ob dieser erhöhte Aufwand gerechtfertigt ist, ist eine der Fragen, auf die mit Hilfe der Testrechnungen eine Antwort gefunden werden soll.

Es zeigt sich in den Rechnungen, daß bei den Erhaltungsformen die lokal exakten Verfahren mit 4 Punkten (LECUSSO-C, QUICK-PLUS) und mit 5 Punkten (LSUDS) im Durchschnitt um einen Faktor 6 besser liegen als das hybride System (Abb. 6.4.12), wenn man den maximalen ortsabhängigen Fehler der numerischen Lösung als Vergleichsmaßstab nimmt. Bei den Verfahren in Konvektionsform variiert der entsprechende Vergleichsfaktor zwischen zwei und vier (Abb. 6.4.10), der Genauigkeitsgewinn ist hier nicht so ausgeprägt. Hier liegen die Fehler insgesamt bei höheren Werten, eine Tatsache, die im Rahmen bekannter Ergebnisse liegt.

Damit ist in grober Form der Gewinn umrissen, den der Aufwand durch ein verbessertes Upwindverfahren bringt.

Fortgeschrittene Upwindverfahren bieten folgende Vorteile gegenüber den Standardverfahren:

- man kann eine vorgegebene Rechengenauigkeit mit mehr Programmier- und weniger Rechenaufwand erhalten,
- man erzielt durch mehr Programmier- und Rechenaufwand eine höhere Rechengenauigkeit,
- man kann durch den Übergang von einem Standardverfahren zu einem fortgeschrittenen Verfahren bei erhöhtem Programmieraufwand und vergleichbarem Rechenaufwand (gleiche Diskretisierung) im Rahmen von Parameterstudien mit gleichbleibender Rechengenauigkeit zu wesentlich höheren Kennzahlen vorstoßen (beim Testbeispiel etwa eine Größenordnung bei Re').

7. ANWENDUNGSRECHNUNGEN MIT STANDARD- UND FORTGESCHRITTENEN DIFFERENZENVERFAHREN

Im folgenden Kapitel wird über Beispielsrechnungen berichtet, bei denen Aussagen über 2-d-Strömungsvorgänge mit Hilfe von Differenzenverfahren erzielt werden. Es handelt sich dabei sowohl um Ergebnisse, die mit Standarddifferenzenverfahren gewonnen werden als auch um Resultate, bei denen demonstriert wird, inwieweit man mit einem fortgeschrittenen (verbesserten, "advanced") Upwindverfahren bei vergleichbarem Aufwand bessere (genauere) Aussagen erhält.

7.1 Naturkonvektionsströmung in einer seitlich beheizten und gekühlten quadratischen Zelle

Viele physikalische und ingenieurtechnische Probleme beschäftigen sich mit dem Vorgang der Naturkonvektion. Dieses Phänomen hat schon eine beträchtliche Zeit große und aufwendige Forschungsanstrengungen auf sich gezogen. Von großem Interesse ist die Vorhersage von Naturkonvektionsströmungen in beheizten Kavitäten. Daher besteht und bestand großes Interesse daran, Methoden zur Berechnung solcher Vorgänge zu testen und zu prüfen. Jones [78] schlug 1979 vor, die auftriebsinduzierte Strömung in einer quadratischen Zelle mit Seitenwänden, die auf verschiedenen Temperaturen gehalten werden, als geeignetes Benchmarkproblem zu wählen, um Computerprogramme zu testen, welche für eine Reihe praktischer Probleme verwendet werden. Solche Probleme schließen Fragen der Wärmeübertragung in Fusions- und Spaltreaktoren, die Kühlung von Behältern mit radioaktiven Abfällen, die Belüftung von Räumen, die Konstruktion von Solarkollektoren, das Kristallwachstum in Flüssigkeiten und viele andere Probleme ein.

Das Testbeispiel selbst kann als Modell für eine Form von Backsteinen mit doppeltverglasten Wänden (Glasbausteine) angesehen werden. Die Gleichungen, die das Problem beschreiben, in zwei Dimensionen formuliert, und stationäre, laminare Strömung voraussetzen, sind die Erhaltungsgleichungen für Impuls, Masse und Energie. Nimmt man an, daß die Boussinesq-Approximation gilt, so lauten diese Gleichungen in einer bestimmten dimensionslosen Form:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} - Pr \nabla^2 u = 0$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} - Pr \nabla^2 v - Ra Pr T = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

und

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} - \nabla^2 T = 0 ,$$

wobei die Schwerkraft in Richtung der negativen y-Achse zeigt. Es ist

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}, Ra = \frac{\alpha g (T_H - T_C) L^3}{\kappa \nu},$$

α	Volumenausdehnungskoeffizient
g	Erdbeschleunigung
L	Breite der Kavität
κ	Wärmeleitfähigkeit
ν	kinematische Viskosität
T_H	Temperatur an der heißen Wand
T_C	Temperatur an der kühlen Wand

Die Abmessungen seien durch $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ gegeben, die Randbedingungen sind:

links:	$u = v = 0$	$T = 1$
rechts:	$u = v = 0$	$T = 0$
oben und unten:	$u = v = 0$	$\partial T / \partial y = 0$.

Für das Beispiel wurde $Pr = 0.71$ gewählt. Es ist bekannt, daß in der seitlich beheizten Kavität für jede beliebig kleine Temperaturdifferenz eine Strömung besteht. Das Beispiel war Gegenstand intensiver Untersuchungen im vorgeschlagenen Bereich von Rayleigh-Zahlen zwischen 10^3 und 10^6 . Insgesamt 36 Beiträge von 29 Autoren oder Gruppen aus aller Welt gingen für die Vergleichsrechnungen ein. Eine vorläufige Bewertung der Beiträge erfolgte durch de Vahl Davis und Jones [50]. Die Vergleichsrechnungen und Rechnungen mit besonders feiner Auflösung [51] neben einigen experimentell gewonnenen Ergebnissen haben eine relativ gute Kenntnis der Lösungen des Problems für $10^3 \leq Ra \leq 10^6$ erbracht, obwohl die besten Ergebnisse für $Ra = 10^6$ noch mit einem Fehler bis zu 1% behaftet sein können. Verglichen wurden bei den numerischen Tests die minimale und die maximale Nusselt-Zahl, die mittlere Nusselt-Zahl, maximale Geschwindigkeitskomponenten und einige weitere Größen.

Der Autor hatte an den Benchmarkrechnungen 1980 mit drei Rechenprogrammen teilgenommen und bei dem Vergleich mit den Programmen gut abgeschnitten. Es war nun von Interesse, mit verbesserten Differenzenmethoden einige der damaligen Rechnungen teilweise mit einer Methode (Günther II = Leithsche Methode) zu wiederholen, jedoch auch mit einer verbesserten Methode durchzuführen: Zu diesem Zweck war das LECUSSO-Verfahren als fortgeschrittene Methode in LEITH eingebaut worden (- in die Energie- und Impulsgleichungen) und das so verbesserte Rechenprogramm LEITHR genannt worden.

Gerade bei diesem Beispiel gab es keine bedeutenden Verbesserungen. Diese Feststellung trifft zumindest auf die Rayleigh-Zahlen 10^3 bis 10^5 zu. Dort unterschei-

den sich die mittleren Nusselt-Zahlen Nu , die als Vergleichswerte gewählt wurden, kaum bei gleicher oder ähnlicher Diskretisierung. Es ist zu vermuten, daß die Fehler dieser Rechnungen nicht in erster Linie aus einer schlechten Näherung der konvektiven Glieder herrühren, Hauptquelle für die Fehler dürfte die durch die Feinheit des Maschennetzes mögliche Näherung der Gradienten an den seitlichen Berandungen sein. Für diese Vermutung spricht auch, daß eine entsprechende Programmvariante mit UDS ebenfalls gleichwertige Rechenergebnisse erbrachte. Dies ändert sich erst in gewissem Maße für $Ra = 10^6$. Dies zeigt die nachfolgende Tabelle, in welcher Nu für verschiedene Maschennetze und LEITH sowie LEITHR angegeben wird. Der beste bekannte Wert für Nu ist als "exakter" Wert mit angegeben. Hier zeigt sich einige Male die Tendenz, daß LEITHR trotz einer größeren Diskretisierung einen besseren Wert liefert.

	LEITH		LEITHR	
	Maschennetz:	Nu:	Maschennetz:	Nu:
	11·11	11·42		
			17·17	9·75
	21·21	10·50		
	31·31	9·44	33·33	9·35
	41·41	9·12		
			65·65	8·86
	82·82	8·95		
"exakt":	8·80			

Tab. 7.1.1: Vergleich der mittleren Nusselt-Zahlen \bar{Nu} für Rechnungen zu $Ra = 10^6$ mit LEITH und mit LEITHR für verschiedene Diskretisierungen.

Um die relative Gleichwertigkeit der Rechenergebnisse bei diesem Beispiel zu belegen, werden in Abb. 7.1.1 für eine jeweils sehr grobe Auflösung mit nur 9·9 Punkten Bilder der Isothermen (unten), Stromlinien und der Wirbelstärke ("vorticity") gezeigt. Der Vergleich mit Darstellungen, die mit viel besserer Auflösung erzeugt wurden, zeigt, daß das einfache UDS bestimmte Charakteristiken des Strömungsbildes besser wiedergibt als das Ergebnis, das mit LECUSSO erzielt wurde. Demgegenüber ist das von UDS berechnete Temperaturfeld deutlich mit

Fehlern behaftet. Dies liegt daran, daß die Darstellung der Stromlinien nicht deutlich macht, daß die Absolutbeträge der Geschwindigkeit bei UDS etwas zu hoch liegen (Die Intensität der Strömung drückt links oben und rechts unten jeweils zwei Isothermen an die seitliche Wand.)

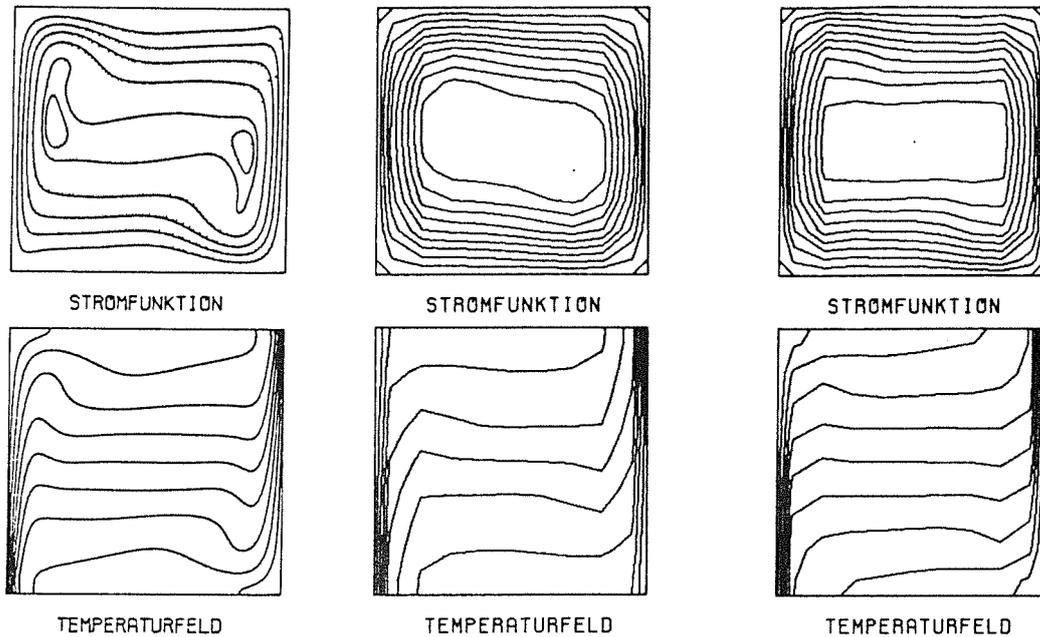


Abb. 7.1.1: Isothermen, Stromlinien und Wirbelstärke für die seitlich beheizte und gekühlte quadratische Kavität, $Ra = 10^6$. Rechenergebnisse mit UDS (Mitte) und LECUSSO (rechts), 9×9 Maschennetz, verglichen mit einer Referenzlösung (links).

7.2 Die seitlich beheizte und gekühlte quadratische Zelle, Strömung in einem mit Fluid gefüllten porösen Medium

Für diese Anordnung gelten ähnliche Feststellungen wie für die quadratische Zelle, gefüllt mit einem viskosen Fluid, siehe Abb. 7.2.1. In den Impulsgleichungen wird der Reibungsterm $-\nu\nabla^2u$ bzw. $-\nu\nabla^2v$ jeweils durch einen porösen Reibungsterm $(\nu/\kappa)u$ bzw. $(\nu/\kappa)v$ ersetzt. Die Flüssigkeit bewegt sich in dem von dem porösen (festen) Medium freigelassenen Raum der Kavität. In der Energiegleichung gehen effektive Stoffwerte ein, welche aus der Wärmeleitfähigkeit von Fluid und porösem Medium durch Mittelung entstehen.

Für jede Temperaturdifferenz an den seitlichen Wänden ist eine Strömung vorhanden. Oberer und unterer Rand seien adiabat. Wesentliche dimensionslose Größe ist die Rayleigh-Zahl $Ra = (\alpha g \Delta T L K) / \sqrt{\kappa}$ mit der Permeabilität K (-von der Dimension Länge² -) im Zähler. Die Intensität der Strömung hängt auch von der Prandtl-Zahl $Pr = \nu/\kappa_{\text{eff}}$ sowie von der Darcy-Zahl $Da = K/L^2$ ab.

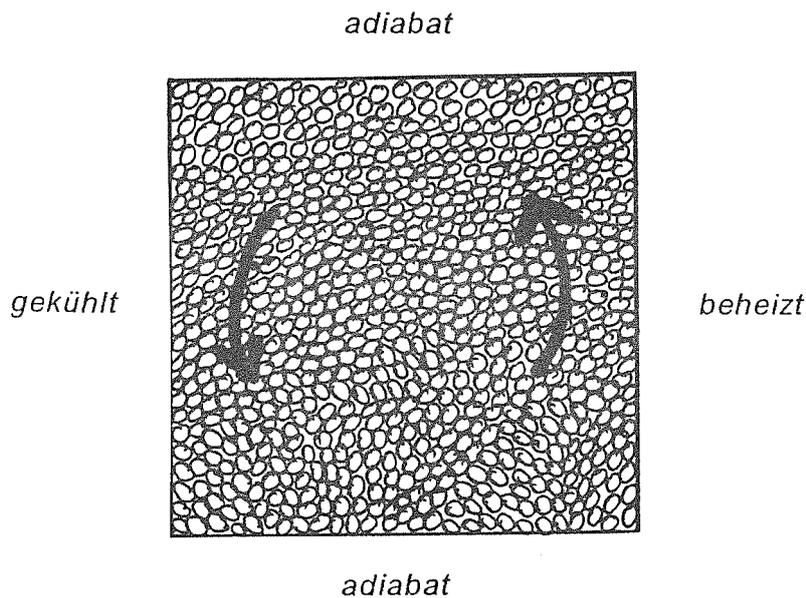


Abb. 7.2.1: Strömung in einer seitlich beheizten und gekühlten quadratischen Kavität, das darin vom porösen Medium frei gelassene Volumen ist mit Flüssigkeit gefüllt (Prinzipskizze)

Bei der Lösung dieses Problems werden Trägheitseinflüsse vernachlässigt. Auch die Zeitabhängigkeit der Impulsgleichungen kann weggelassen werden, so daß

sich bei gegebenem Temperaturfeld und nach unten (negative y -Richtung) zeigendem Schwerevektor der durch die Dichte dividierte Druck ϕ aus

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = Ra \frac{\partial T}{\partial y}$$

mit konventionellen Randbedingungen bestimmen läßt. Die Geschwindigkeiten werden aus dem Darcyschen Gesetz mit Auftriebsterm berechnet

$$\frac{\nu}{K} u = -grad \phi - g \left(1 - \alpha (T - T_o) \right) e_y.$$

ν ist die kinematische Zähigkeit, g die Gravitationskonstante, T_o eine Referenztemperatur, α der thermische Volumenexpansionskoeffizient und e_y ein Einheitsvektor. Mit den gewonnenen Geschwindigkeiten wird die Temperatur für den aktuellen Zeitschritt berechnet. Der neu berechnete Gradient $\partial T / \partial y$ erlaubt die Druckberechnung für den nächsten Zeitschritt. Der Lösungsgang beinhaltet damit die Lösung einer Poissongleichung für den Druck ϕ mit Inhomogenität proportional zu $\partial T / \partial y$ und die transiente Berechnung eines Temperaturfeldes aus einer zeitabhängigen Konvektions-Diffusionsgleichung, welche Geschwindigkeiten beinhaltet, die sich aus einem Ausdruck $grad \phi$ und einem weiteren Summanden zusammensetzen.

Das behandelte Beispiel (Abb. 7.2.2) handelt von einer quadratischen, seitlich beheizten und gekühlten Kavität mit der Rayleigh-Zahl $Ra = (\alpha g \Delta T L K) / \nu k = 45$, der Prandtl-Zahl $Pr = 1$ und der Darcy-Zahl $Da = K/L^2 = 10^{-3}$. Errechnet wird jeweils ein stationärer Zustand. Als Referenzzustand wird hier das Ergebnis einer Beispielsrechnung mit dem Rechenprogramm LEITH mit 33·33 Punkten benutzt, während die getesteten Methoden, die in der Energiegleichung eingesetzt wurden, mit einer Diskretisierung von 9·9 Punkten arbeiten. Untersucht wurden hier CDS und das Verfahren von Atias et al., das LECUSSO-Verfahren und UDS. Dargestellt werden jeweils die Stromfunktion und das Temperaturfeld. Die maximalen Maschen-Reynoldszahlen $Re_{\Delta x}$ für u lagen bei 5, die entsprechenden $Re_{\Delta y}$ etwa bei 15. CDS und LECUSSO ergeben jeweils ein relativ gutes Stromlinienfeld, soweit dies mit dem groben Gitter überhaupt möglich ist. Auch die Temperaturfelder stimmen global gut mit der Referenzlösung überein. Bei CDS springt eine offensichtliche Instabilität ins Auge, die im Bereich der größten auftretenden Geschwindigkeiten (- wo die Stromlinien am dichtesten liegen -) auftritt und dort lokal den Temperaturverlauf falsch wiedergibt. Demgegenüber ver-

dirbt das Verfahren von Atias et al. bei der Energiegleichung im Zusammenwirken mit der Druckgleichung die Strömung, dabei bilden sich im Innern der Kavität zwei Wirbel aus, das Temperaturfeld ist dadurch in fehlerhafter Weise verzerrt, so daß dieses Verfahren etwas unerwartet keine gute Lösung liefert. Die numerische Lösung mittels UDS ist indiskutabel, sie macht klar, was eine $O(\Delta x)$ -Näherung bei nicht sehr kleinem Δx bedeuten kann.

Im Gegensatz zum Beispiel von 7.1 scheint hier die numerische Approximation des konvektiven Terms in der einzigen auftretenden Konvektions-Diffusionsgleichung, der Energiegleichung, die Güte des gesamten Rechenergebnisses stark zu beeinflussen, da bei jeweils gleicher Auflösung (9·9 Punkte) die Ergebnisse von UDS und Atias et al. unzureichend sind. Andererseits liegt CDS trotz einiger punktueller Instabilitäten noch passabel, während die mit LECUSSO berechnete numerische Lösung der Referenzlösung sehr gut nahekommt.

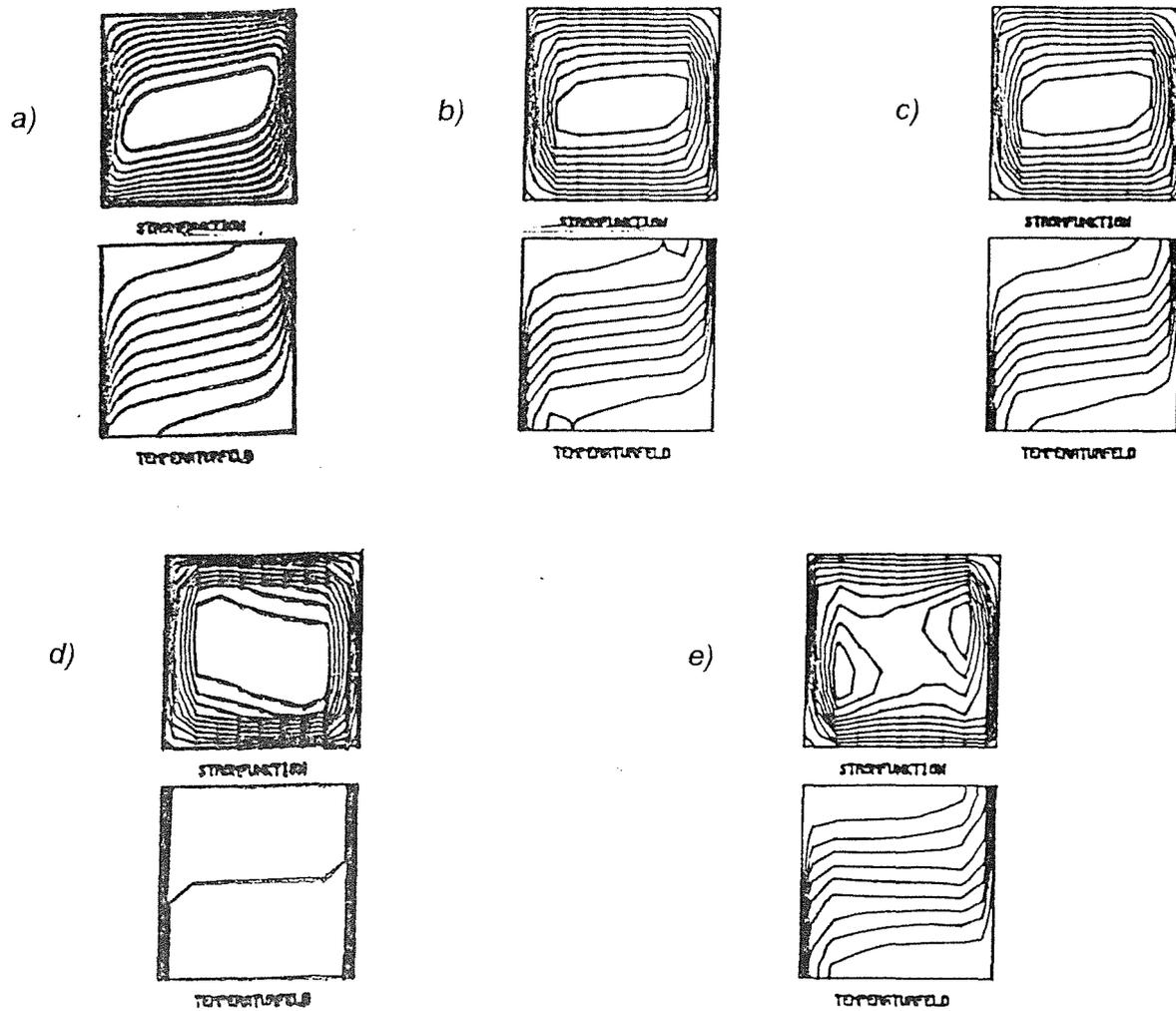


Abb. 7.2.2: Numerische Ergebnisse (Stromlinien, Isothermen) mit verschiedenen Differenzenverfahren für die quadratische Kavität, gefüllt mit flüssigkeitsgesättigtem porösem Medium, links gekühlt, rechts beheizt, oben und unten adiabatisch, $Ra = (ag\Delta TK \cdot H) / (\nu k_i) = 45$, $Da = 10^{-3}$
 a) Referenzlösung, Code LEITH mit 33·33 Punkten,
 b) - e) jeweils 9·9 Punkte, b) CDS, c) LECUSSO,
 d) UDS und e) Verfahren von Atias et al.

7.3 Ungleichmäßige Beheizung in einer quadratischen Zelle, transiente Strömung in porösem Medium

Die Temperaturbedingungen legen jeweils zwischen zwei Ecken einen linearen Temperaturverlauf fest, und zwar so, daß diese Temperaturen durch die in Abb. 7.3.1 in den Ecken angegebenen Werte festgelegt werden. Damit ist diese Anordnung an der Unterseite wärmer als an der Oberseite und wird daher versuchen, eine globale Strömung zu erzeugen, um Wärme von unten nach oben zu transportieren. Andererseits ist die linke Seite des Behälters isotherm, während die rechte Seite unten warm und oben kalt ist und dadurch eine thermische Randbedingung vorgegeben ist, die bei adiabaten horizontalen und linker Seite bekanntlich (Küblbeck [82]) zu einer stationären oder oszillierenden Doppelrollenströmung führt.

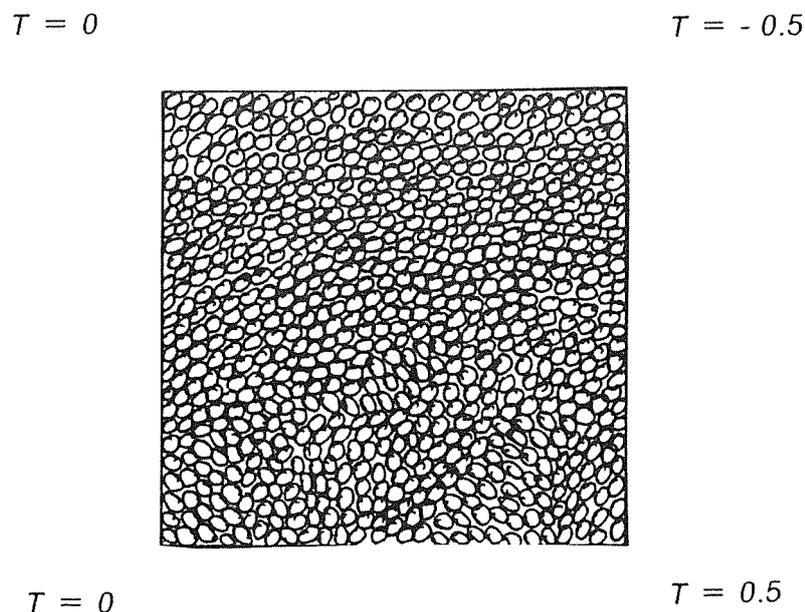


Abb. 7.3.1: Prinzipskizze der ungleichmäßigen Beheizung

Die Beispielsrechnungen sind transiente Rechnungen mit den Modellannahmen wie in 7.2, mit den Verfahren CDS und LECUSSO, jeweils mit einem Maschenetz von $17 \cdot 17$ Punkten. Abbildung 7.3.2 gibt für $Ra = 6.5 \cdot 10^5$ ($Pr = 1$, Da



Abb. 7.3.2: Transiente Strömung in der ungleichmäßig beheizten quadratischen Kavität, mit flüssigkeitsgesättigtem porösen Medium, $Ra = 6.5 \cdot 10^5$, $Pr=1$, $Da=10^{-3}$. Gezeigt werden jeweils zeitabhängige Stromlinien (obere Reihe) und Isothermenfelder (untere Reihe), a) gerechnet mit CDS, b) gerechnet mit LECUSSO. Die örtliche Auflösung betrug in allen Fällen 17·17 Punkte. Die obere Lösung a) ergibt infolge numerischer Instabilität eine unphysikalische Lösung mit einer wechselnden Zahl von Wirbeln. LECUSSO errechnet trotz des groben Netzes eine oszillierende Stockwerksdoppelrollenströmung mit einer freien Temperaturgrenzschicht in etwa der halben Höhe der Kavität.

= 10^{-3}) zeitabhängige Stromlinien- und Isothermenfelder, beginnend mit gleichem Ausgangszustand. Es gibt für dieses Beispiel keine Referenzlösung.

Dennoch läßt sich feststellen, daß die numerische Lösung mit CDS wertlos ist, während die mit LECUSSO erhaltene Lösung die Charakteristika der Doppelrollenströmung aufweist, die schon erwähnt wurde und auch bei Küblbeck für ein ähnliches Beispiel auftritt. Bei LECUSSO sind bis auf kleine, gelegentlich hinzukommende Wirbel immer zwei Hauptwirbel nahe der ungleichmäßig beheizten Wand vorhanden. Bei CDS hat man ein unphysikalisches, durch numerische Instabilitäten verursachtes chaotisches Verhalten mit wechselnder Zahl von Wirbeln.

Auch die zwischen den beiden Wirbeln liegende Temperaturgrenzschicht, die sich auf- und abwärts bewegt, wird bei LECUSSO plausibel wiedergegeben.

Es muß noch angemerkt werden, daß die Zeitauflösung bei beiden Rechnungen gleich war, es wurde bei LECUSSO keine verbesserte Zeitintegration verwendet, da der Schwerpunkt der Untersuchungen auf der Behandlung des konvektiven Termes liegt.

7.4 Die Kármánsche Wirbelstraße

Zu den Vorgängen, deren Wiedergabe durch Rechnungen oft mit Schwierigkeit verbunden ist, gehört der Strömungsverlauf hinter umströmten Hindernissen. Dieses Problem mit einem kreisförmigen Zylinder als Hindernis wird in einer bekannten¹ Arbeit 1982 von Brooks and Hughes [41] behandelt und mit einer FEM-Methode, der in 2.6 erwähnten 'Streamline upwind/Petrov-Galerkin'-Formulierung (=SUPG), numerisch gelöst. Das Problem wird dort als sehr schwierig bezeichnet ("... is one of the most challenging problems for numerical solution methods"). Die erstaunlich gute numerische Lösung jener Autoren gelang mit auch deshalb, weil sie ein Maschennetz mit sehr feiner Auflösung in der Umgebung des Hindernisses gewählt hatten.

Strömungen nach Hindernissen treten in der Praxis häufig auf. Ist das Hindernis verhältnismäßig klein und von regelmäßiger Form (Kreis, Quadrat), so entstehen für bestimmte Parameterkombination ($40 < Re < 150$) besonders interessante Strömungsstrukturen. Re wird hier mit der Dicke des Strömungshindernisses berechnet.

Bewegt man einen zylindrischen Körper gleichförmig in einer ruhenden Flüssigkeit mit der Geschwindigkeit U senkrecht zu seiner Achse, so bildet sich bei geeigneten Werten von U und entsprechenden Körperabmessungen hinter dem Hindernis ein System von Einzelwirbeln in bestimmten Abständen auf zwei nahezu parallelen Geraden aus. Dieses System, das man als Wirbelstraße bezeichnet, folgt dem Körper mit der kleineren Geschwindigkeit $u < U$. Die einzelnen Wirbel sind ungefähr gleich groß, besitzen aber in den beiden Reihen der Wirbelstraße entgegengesetzten Drehsinn.

Diese Wirbelstraßen sind experimentell ausgiebig untersucht worden, die Ergebnisse sind in zahlreichen Originalarbeiten und Büchern dokumentiert, dort sind auch die Parameterbereiche für gut ausgebildete Wirbelstraßen angegeben und die geometrischen Verhältnisse beschrieben. Ein typisches experimentelles Ergebnis zeigt die folgende Fotografie, die dem Buch [20] entnommen wurde (Abb. 7.4.1).

1. Diese Arbeit wurde 1990 in einer Spezialausgabe der gleichen Zeitschrift wiederveröffentlicht als einer der fünf am meisten zitierten Beiträge seit Gründung der Zeitschrift im Jahre 1970!

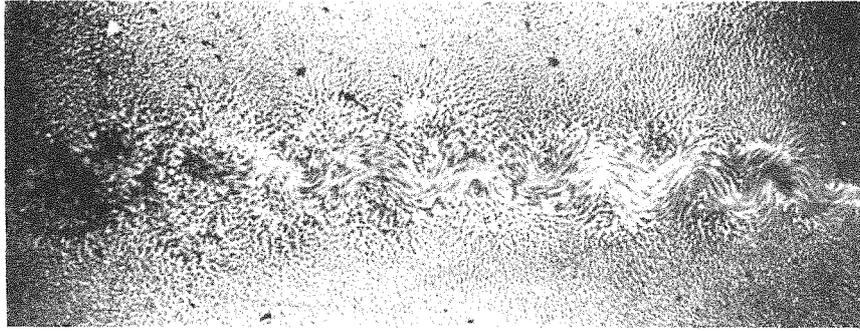


Abb. 7.4.1: Fotografie einer stabilen Wirbelstraße bei $Re = (Ud/\nu) = 475$

Ein analytisch berechnetes Stromlinienbild einer stabilen Wirbelstraße zeigt Abbildung 7.4.2.

Bezeichnet man den Abstand zweier gleichsinnig drehender Wirbel mit l und den Abstand der beiden Wirbelreihen mit h , so ergibt sich aus theoretischen Untersuchungen für kreisförmige Hindernisse ein Wert von $h/d \approx 0,28$, während experimentelle Werte von h/d geringfügig höher liegen.

Die Kármánsche Wirbelstraße wurde 1986 von japanischen Autoren im Rahmen eines größeren Tests numerischer Methoden als eines der Testbeispiele gewählt, Maekawa-Muramatsu [104]. Diese Tests hatten das Ziel, für den 3-d hydraulischen Code COMMIX [52] eine fortgeschrittene Upwindmethode zur Berechnung des konvektiven Transports auszuwählen. Die Empfehlung aus jener Arbeit ging dahin, das QUICK-FRAM-Verfahren und das EXQUISITE-Verfahren (ähnlich dem EULER-QUICK-Verfahren [93]) in COMMIX einzubauen.

COMMIX berechnet für sehr allgemeine dreidimensionale Geometrien Zwangs- und Naturkonvektionsvorgänge sowie Mischkonvektion für laminare und turbulente Verhältnisse, die letzteren mit sehr einfachen Turbulenzmodellen. Auch die Strömung von Fluiden in porösen Medien ist zugelassen.

Das Programm rechnet mit primitiven Veränderlichen, d.h. den Geschwindigkeiten in den drei Koordinatenrichtungen, und mit einer Druckgleichung. Der Code COMMIX wurde in USA entwickelt und wird heute bei verschiedenen Einrich-

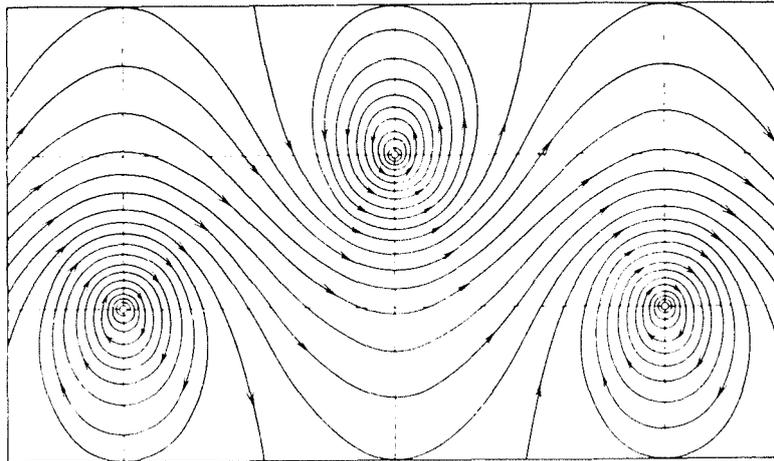


Abb. 7.4.2: Stromlinienbild der stabilen Wirbelstraße, aus Kaufmann [20]

tungen in USA, Japan und der Bundesrepublik für Sicherheitsuntersuchungen in der Kerntechnik eingesetzt.

Zeitlich etwas versetzt hat K. Sakai von der Universität Osaka/Japan das vom Verfasser vorgeschlagene Verfahren LECUSSO in die im Kernforschungszentrum Karlsruhe vorhandene Version von COMMIX eingebaut. Um die neue Programmversion zu testen, griff Sakai auf das zuvor genannte Beispiel der Kármán'schen Wirbelstraße zurück und berechnete mit drei Methoden dieses Beispiel. Die Anordnung ist in Abb. 7.4.3 gezeigt. Die eine Methode war UDS, die Basismethode von COMMIX, die zweite Methode war QUICK. Dieses Verfahren läßt sich sehr leicht durch Modifikation erhalten (Vereinfachung der Koeffizienten), wenn man LECUSSO in ein Rechenprogramm eingebaut hat, die dritte Methode war LECUSSO. Zunächst kann festgestellt werden, daß die Rechenergebnisse für UDS und für QUICK von Sakai fast vollständig übereinstimmen mit den Resultaten der Studie der japanischen Autoren von 1986 [104]. Dies belegen die Stromlinienbilder von Abbildung 7.4.4, welche jeweils Geschwindigkeitsvektoren der berechneten Strömung zu einem bestimmten Zeitpunkt bei gleicher Diskretisierung zeigen. Zu diesen Ergebnisse ist zu sagen, daß UDS völlig versagt. Unabhängig von der Intensität der Strömung findet sich eine Rückströmung hinter dem Hindernis. Diese Rückströmung zeigt keinerlei Wirbelbildung. Bei QUICK zeichnet sich eine Struktur ab, die kurz hinter dem Hindernis etwas nach oben und unten versetzte deutliche Wirbel zeigt, danach liegen die Wirbel, fast wie auf einer Achse aufgereiht, hintereinander. Die versetzte Wirbelstruktur wird von LECUSSO besser

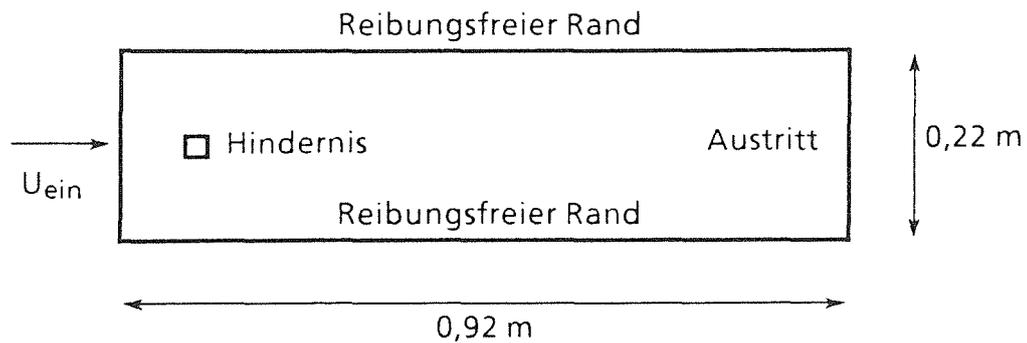


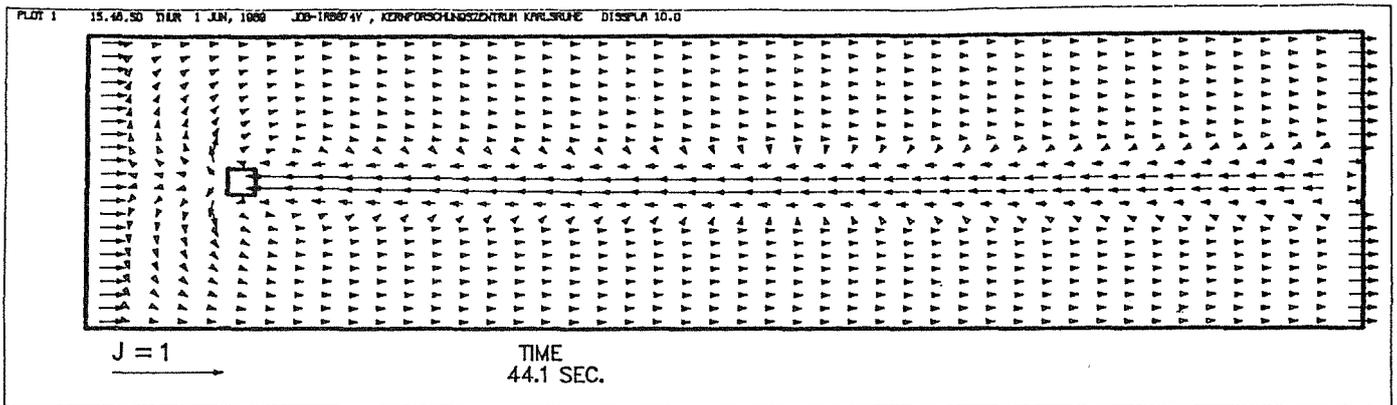
Abb. 7.4.3: Anordnung für die Berechnung der Kármánschen Wirbelstraße

wiedergegeben. Die ersten Wirbel erscheinen etwas flachgedrückt, danach ergibt sich ein Bild, das am ehesten mit den Darstellungen der physikalischen Wirklichkeit übereinstimmt. Diese Übereinstimmung kann hier auch quantitativ festgestellt werden.

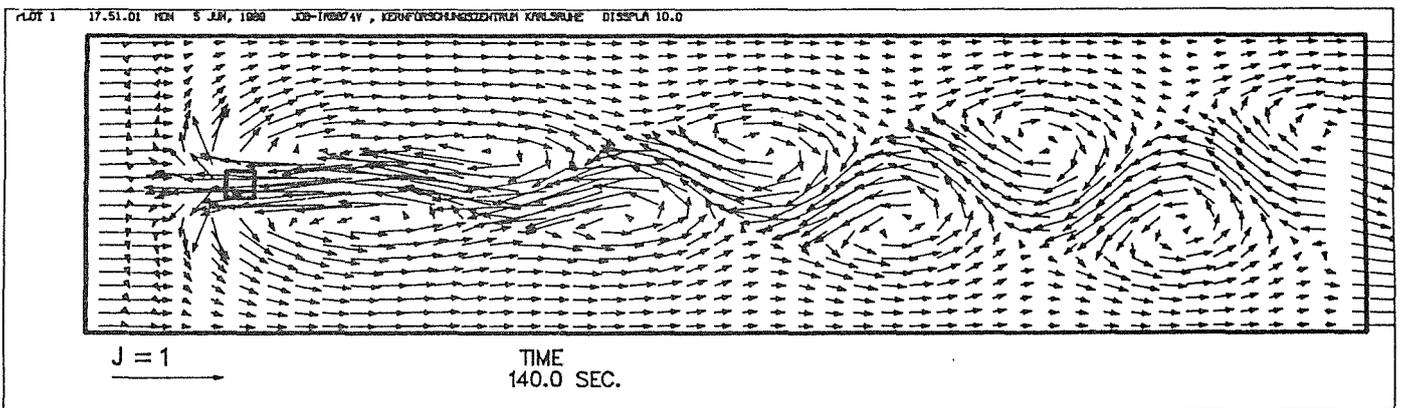
Zieht man die in der Abbildung mehr rechts liegende Wirbel zu einer groben Bestimmung des Verhältnisses von h/d heran, so findet man einen Wert von 0,315, der im Bereich der zuvor erwähnten Werte liegt. Aus den Ergebnissen der japanischen Studie von 1986 [104] (dort Abb. 2.9) kann zudem geschlossen werden, daß die damals empfohlenen Verfahren QUICK-FRAM und "Modified EXQUISITE" eher schlechtere numerische Lösungen als QUICK errechnen.

Das Beispiel der Wirbelstraße macht deutlich, daß die Anwendung verbesserter Upwindmethoden bei der Berechnung intensiver Strömungen nicht nur eine graduelle Fehlerreduzierung bringt, sondern das physikalische Phänomen zumindest qualitativ richtig berechnet, während bei gleicher Diskretisierung das Ergebnis der Standardmethode (UDS) nichts mit der Wirklichkeit zu tun hat.

UDS



LECUSSO



QUICK

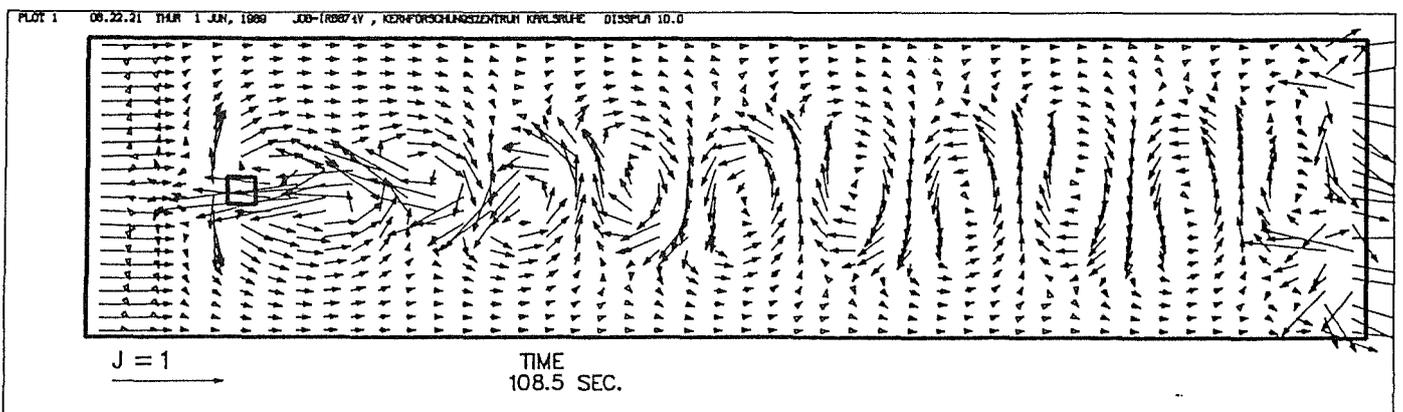


Abb. 7.4.4: Numerische Lösung des Problems der Wirbelstraße mit drei Differenzenverfahren. Die Bilder zeigen berechnete Geschwindigkeitsvektoren für eine Reynoldszahl von etwa 70. LECUSSO gibt die physikalischen Verhältnisse am besten wieder.

7.5 Fortgeschrittene Upwindverfahren für Anwendungsrechnungen

In vielen Anwendungsrechnungen stellt die numerische Lösung von Konvektions-Diffusions-Gleichungen nur einen Teilschritt des gesamten Rechenganges dar. Wenn dieser Teilschritt ein kritischer Punkt der gesamten Rechnung ist, liegen die Genauigkeitsgewinne teilweise wie bei der Berechnung der Wirbelstraße (7.4) in der Größenordnung der bei reinen Konvektions-Diffusionsproblemen gegebenen Werte oder noch besser. Ist die Lösung solcher Probleme eher unkritisch, d.h. stellt dieser Schritt einen gleichgewichtigen Teilschritt unter mehreren anderen dar, so kann sich das verbesserte Ergebnis des Teilschritts wegen der Fehler der anderen Rechenschritte nicht oder nur wenig bemerkbar machen wie bei der Strömung in der seitlich beheizten Kavität (7.1). Die Beispiele geben einen guten Eindruck davon, wie bestimmte Anwendungsrechnungen durch den Einsatz fortgeschrittener Upwindmethoden bei etwa gleichem Rechenaufwand (zusätzlich $\leq 10\%$) und etwas erhöhtem Programmieraufwand zu besseren Rechenergebnissen führen.

8. SCHLUBFOLGERUNGEN

- 1) Berechnungsvorgänge nehmen im Bereich der Thermo- und Fluidodynamik einen sich immer stärker ausweitenden Rahmen ein, damit verbunden ist eine weiter zunehmende Bedeutung dieser Methoden. Diese Entwicklung ist im Zusammenhang zu sehen mit der größeren Leistungsfähigkeit von Computern, die Rechnungen immer weiter verbilligen, während die Kosten für physikalische Experimente keinen drastischen Reduzierungen unterliegen können. Diese Entwicklung wird anhalten.
- 2) Die anfangs meist heuristisch begründeten und theoretisch wenig abgesicherten Rechenmethoden der Thermo- und Fluidodynamik wurden später kritischen Prüfungen unterzogen, um die Gründe von offensichtlichem Versagen der bekannten Methoden herauszufinden. Dies waren am Anfang ausschließlich Differenzenverfahren. Schnell stellte sich heraus, daß plausible Differenzennäherungen von Differentialgleichungen instabil sein können. Dies hatte zur Folge, daß eine ziemlich weit entwickelte Theorie der Stabilität und Konvergenz von Differenzenverfahren entstand (Stabilität + Konsistenz = Konvergenz), die auf viele Fragen eine zufriedenstellende Antwort gibt. Losgelöst von der Frage, wie sich die numerischen Näherungen für immer feiner werdende Maschennetze verhalten, steht die Aufgabe, Eigenschaften der Lösungen von Differenzennäherungen mit einer bestimmten Diskretisierung sicherzustellen. Hier ist die Entwicklung noch nicht so weit fortgeschritten, viele bisherige Ergebnisse (z.B. charakteristische Polynommethode) lassen sich nach heutigem Kenntnisstand nur für eindimensionale Probleme formulieren, andere Methoden arbeiten nur unter relativ eingeschränkten Voraussetzungen (Matrixmethoden). Hier besteht noch ein großer Bedarf an weiteren Untersuchungen zu Eigenschaften von Lösungen von Differenzengleichungen ("Qualitative Theorie der Lösungen von Differenzengleichungen" in Anlehnung an einen entsprechenden Begriff für Differentialgleichungen).
- 3) Mit der Zeit ist die Zahl der vorgeschlagenen numerischen Verfahren stark angestiegen. Als neue methodische Ansätze haben sich die Finite-Element-Methode (FEM) und die Spektralverfahren ihre eigenen Verdienste erworben. Mit FEM lassen sich geometrisch wesentlich komplexere Probleme behandeln, die Analyse der FEM-Verfahren ist stark verwandt mit der von Differenzenverfahren. Der Ansatz der Spektralverfahren ist anders geartet, so daß sich wenig Überschneidungen mit den anderen Methoden ergeben. Die

Frage nach einer allgemein "besten" oder "ökonomischsten" Methode bzw. nach einer für ein bestimmte Problem "geeignetsten" Methode muß nach heutigem Kenntnisstand offen bleiben, wie schon in Kapitel 3 mit Verweis auf einen hervorragenden Kenner der Materie (Patankar [11]) festgestellt wurde. Dies impliziert,

- daß weiterhin numerische Methoden vorgeschlagen werden,
 - daß der Stellenwert einiger älterer Methoden zurückgeht,
 - daß einzelne Verfahren analysiert und getestet werden,
 - daß verschiedene Verfahren gegeneinander mit individuell oder in Absprache von Fachleuten ausgewählten Beispielen ("benchmarks") getestet werden.
- 4) Der Wunsch der Anwender, leicht verständliche, gut programmierbare, übersichtliche und robuste (Synonym für "stabil" und "versagensfrei") Methoden zur Verfügung gestellt zu bekommen, wird weiter bestehen. Viele vorgeschlagenen Verfahren finden nie den Weg in Anwenderprogramme; daß größere Anwendungsprogramme (wie z. B. PHOENICS [122], SIMPLE [107] und seine Folgeversionen, COMMIX [52], FLOW3D [79] als auf FDM basierende Verfahren oder FIDAP [56], ENTWIFE [131] als FEM-Codes) außer UDS (bzw. HDS) eine weitere Näherung zur Behandlung des konvektiven Transports enthalten, ist die Ausnahme.
- 5) Die vorstehenden Ausführungen haben gezeigt, daß die lokal exakten Verfahren mit mehr als drei Punkten in einer Dimension geeignet erscheinen, mit vertretbarem zusätzlichem Aufwand bessere numerische Ergebnisse zu liefern als die Standarddifferenzenverfahren. Sie sind frei von physikalisch falschen ortsabhängigen Oszillationen und reduzieren in den meisten Fällen den maximalen numerischen Fehler um Faktoren drei bis vier im Vergleich zu Standardverfahren. Diese Vorteile lassen es geboten erscheinen, entsprechende Verfahren für allgemeinere Fragestellungen zu entwickeln. Solche allgemeineren Probleme umfassen u.a.
- Differenzenverfahren mit nicht gleichmäßigen Maschennetzen,
 - Verfahren für andere Geometrien, z. B. radiale Geometrien. Für diese Geometrie sind die Lösungen der Konvektions-Diffusionsgleichung mit konstanten Koeffizienten, welche die Basis einer lokal exakten Methode sind, komplizierter als die relativ einfachen Exponentialfunktionen für x-y-Geometrie.

- Differenzenverfahren für physikalische Gleichungen, die neben konvektivem und diffusivem Transport noch weitere Phänomene beinhalten, z.B. Quell- und Senkterme oder Absorptionsvorgänge.

Daneben gibt es weitere Differenzenverfahren, zu denen u. U. geeignete Verallgemeinerungen mit mehr als drei Punkten (in einer Raumdimension) existieren. Dies wäre beispielsweise für das Verfahren von Samarski von Interesse. Zu den nicht geklärten Fragen gehört, ob es ein Fünfpunkteverfahren der Ordnung vier ($O(\Delta x^4)$) gibt, das die Punkte mit den Indizes $i+2, i+1, i, i-1, i-2$, benutzt.

Abzusehen sind Verallgemeinerungen der Vierpunktformeln vom Typ der Verfahren von Agarwal, Leonard und Atias et al., welche eine verbesserte zeitliche Auflösung bieten.

Die Ausführungen in Kapitel 5 haben gezeigt, daß noch ein großer Bedarf an der Erarbeitung von theoretischen Resultaten besteht. Ein Gebrauch numerischer Methoden in praktischen Rechnungen darf nicht allein durch gute Erfahrungen bei der Berechnung von Modellproblemen gerechtfertigt werden.

L I T E R A T U R V E R Z E I C H N I S

a) BÜCHER

zum Thema 'Numerische Methoden der Thermo- und Fluidodynamik'
("Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer")

- /1/ Anderson, D.A.,
Tannehill, J.C.,
Pletcher, R.H. *Computational Fluid Mechanics and
Heat Transfer.*
Hemisphere, New York, 1984.
- /2/ Baker, A.J. *Finite Element Computational Fluid
Mechanics.*
Hemisphere, Washington, 1983.
- /3/ Chow, C.-Y. *An Introduction to Computational Fluid
Dynamics.*
Wiley, New York, 1979.
- /4/ Fletcher, C. *Computational Techniques for Fluid
Dynamics, Vols. I und II.*
Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- /5/ Gosman, A.D.,
Pun, W.M.,
Runchal, A.K.,
Spalding, D.B.,
Wolfshtein, M. *Heat and Mass Transfer in Recirculating
Flows.*
Academic Press, London, 1969.
- /6/ Hirsch, C. *Numerical Computation of Internal and
External Flows.*
Vol. I, Wiley, New York, 1988.
- /7/ Holt, M. *Numerical Methods in Fluid Dynamics.*
Springer-Verlag, 1977.
- /8/ Jaluria, Y.,
Torrance, K.E. *Computational Heat Transfer.*
Hemisphere, New York, 1986.
- /9/ Minkowycz, W.J.,
Sparrow, E.M.,
Schneider, G.E.,
Pletcher, R.H. *Handbook of Numerical Heat Transfer.*
Wiley, New York, 1988.
- /10/ Noye, J. *An Introduction to Finite Difference
Techniques.*
In: Numerical Simulation of Fluid Motion,
ed. by J. Noye, North-Holland, Amsterdam,
1-112, 1978.
- /11/ Patankar, S.V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.*
Hemisphere, New York, 1980.

- /12/ Peyret, R., Taylor, T.D. *Computational Methods for Fluid Flow.* Springer, New York, 1983.
- /13/ Roache, P.J. *Computational Fluid Dynamics.* Hemisphere, New York, 1972.
- /14/ Shih, T.M. *Numerical Heat Transfer.* Hemisphere, New York, 1984.

b) ANDERE BÜCHER

- /15/ Doolan, E.P., Miller, J.J.H., Schilders, W.H.A. *Uniform Numerical Methods for Problems with Initial and Boundary Layers.* Boole Press, Dublin, 1980.
- /16/ Forsythe, G.W., Wasow, W.R. *Finite Difference Methods for Partial Difference Equations.* Wiley, New York, 1960.
- /17/ Godunov, S.K. Rjabenki, V.S. *Theory of Difference Schemes.* North-Holland, 1984.
- /18/ Henrici, P. *Error Propagation for Difference Methods.* Wiley, New York, 1963.
- /19/ Hillis, D. *The Connection Machine.* MIT Press, 1985.
- /20/ Kaufmann, W. *Technische Hydro- und Aeromechanik.* 2. Auflage, Springer, Berlin, 1958.
- /21/ Lakshmikanta, V., Trigante, D. *Theory of Difference Equations and Numerical Analysis.* Academic Press, New York, 1988.
- /22/ Milne-Thomson, C.M. *The Calculus of Finite Differences.* Mc Millan, 1933.
- /23/ Richtmyer, R.D., Morton, K.W. *Difference Methods for Initial-Value Problems.* Interscience Publishers, New York, 1967.
- /24/ Samarski, A.A. *Theory of Difference Methods.* Deutsche Übersetzung bei Geest und Portig, Leipzig, 1984. Russische Ausgabe von 1977.

- /25/ Varga, R.S. *Matrix Iterative Analysis.*
Prentice Hall, Englewoods Cliff, NJ,
1962.
- /26/ Voigt, R.G., *Spectral methods for partial differential*
Gottlieb, D.A, *equations.*
Hussaini, M.Y. *SIAM Philadelphia, 1984.*
- /27/ Willers, F.A. *Methoden der Praktischen Analysis.*
de Gruyter, Berlin, 2. Auflage, 1957.
- /28/ Yanenko, N.N. *The Method of Fractional Steps.*
Springer-Verlag, New York, 1971.

c) ORIGINALARBEITEN

- /129/ Agarwal, R.K. *A Third-order-accurate Upwind Scheme for Navier Stokes Solutions in Three Dimensions.*
In: Computers in Flow Prediction and Fluid Dynamics Experiments, ed. by K.N. Ghia et al., Proc. ASME winter meeting, Washington, 73-82, 1981.
- /130/ Allen, D.N.,
Southwell, R.V. *Relaxation methods applied to determine the motion, in two dimensions, of a viscous fluid past a fixed cylinder.*
Quart. J. Mech. Appl. Math. 8, 129-145, 1955.
- /131/ Ansorge, R.,
Geiger, C. *Fehlerabschätzungen bei Aufgaben mit schwach strukturierten Anfangsdaten.*
In: Lecture Notes in Mathematics, vol. 333, ed. by R. Ansorge and W. Törnig, Springer, New York, 21-43, 1973.
- /132/ Atias, M.,
Wolfshtein, M.,
Israeli, M. *Efficiency of Navier-Stokes solvers.*
AIAA Journal 15, 263-266, 1977.
- /133/ Barrett, K.E. *Super upwinding - Elements of doubts and discrete differences of opinion on the numerical muddling of the incomprehensible defective confusion equation.*
In: Numerical Modelling in Diffusion Convection, ed. by J. Caldwell and A.O. Moscardini, Pentech Press, London, 33-48, 1982.
- /134/ Beier, R.A.,
Ris, J. de,
Baum, H.R. *Accuracy of finite difference methods in recirculating flows.*
Numerical Heat Transfer 6, 283-302, 1983.
- /135/ Berger, A.E. *A conservative uniformly accurate difference method for a singular perturbation problem in conservation form.*
SIAM J. Numer. Anal. 23, 6, 1241-1253, 1986.
- /136/ Berger, A.E.,
Solomon, J.M.,
Ciment, M.,
Leventhal, S.H.,
Weinberg, B.C. *Generalized OCI schemes for boundary layer problems.*
Math. Comp. 35, 695-731, 1980.

- /137/ Boris, J.P.,
Book, D.L. *Flux-Corrected Transport I:
SHASTA-a fluid transport algorithm that
works.*
J. Comput. Phys. 11, 38-69, 1973.
- /138/ Boris, J.P. *New directions in computational fluid
dynamics.*
Ann. Reviews Fluid. Mech. 21,
345-385, 1989.
- /139/ Braga, W. *Secondary flows on low aspect ratio
rotating cavities.*
*In: Computational Techniques and
Applications CTAC-87, ed. by J.Noye and
Fletcher C., Elsevier Science Publishers
B.V.(North Holland), 119-128, 1988.*
- /140/ Braga, W. *On the use of some weighted upwind schemes
for strongly convective flows.*
Numerical Heat Transfer, Part B, 18, 43-60, 1990.
- /141/ Brooks, A.N.
Hughes, T.J.R. *Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulation
for convection dominated flows with particular
emphasis on the incompressible
Navier-Stokes equations.*
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 32, 199-259, 1982.
- /142/ Chapman, M. *FRAM-nonlinear damping algorithms for the
continuity equation.*
J. Comput. Phys., 44, 84-103, 1981.
- /143/ Chen, C.-J.,
Naseri-Neshat, H.,
Ho, K.-S. *Finite analytic numerical solution of heat
transfer in two-dimensional cavity flow.*
Numerical Heat Transfer 4, 179-199, 1981.
- /144/ Christie, I.,
Griffiths, D.F.,
Mitchell, A.R.,
Zienkiewicz, O.C. *Finite element methods for second order
differential equations with significant
first derivatives.*
Intern. J. Numer. Methods Engrg. 10,
134-143, 1977.
- /145/ Ciment, M.,
Leventhal, S.H.,
Weinberg, B.C. *The operator compact implicit method for
parabolic equations.*
J. Comput. Phys. 28, 135-166, 1978.
- /146/ Collatz, L. *Aufgaben monotoner Art.*
Arch. Math. 3, 365-376, 1952.
- /147/ Courant, R.,
Friedrichs, K.O.,
Lewy, M. *Über die partiellen Differenzengleichun -
gen der Mathematischen Physik.*
Math. Ann. 100, 32-76, 1928.

- /48/ Courant, R.,
Isaacson, E.,
Rees, M. *On the solution of nonlinear hyperbolic
differential equations by finite differences.*
Commun. Pure Appl. Math. 5, 243-255, 1952.
- /49/ Dennis, S.C.R.,
Hudson, D.J. *A difference method for solving the
Navier-Stokes equations.*
*In: Proc. First Intern. Conf. Num.
Methods in Laminar and Turbulent
Flow, Swansea, ed. by C.Taylor et
al., Penntech Press, 69-80, 1978.*
- /50/ De Vahl Davis, G.,
Jones, I.P. *Natural convection in a square cavity.
A comparison exercise.*
Int. J. Numer. Methods Fluids 3,
227-248, 1983.
- /51/ De Vahl Davis, G. *Natural convection in a square cavity.
A benchmark solution.*
Int. J. Numer. Methods Fluids 3,
249-264, 1983.
- /52/ Domanus, H.M.,
Shah, W.T.,
Schmitt, R.C.,
Shah, V.L.,
Chen, E.F. *COMMIX-1B: A three-dimensional transient
single-phase computer program for thermal
hydraulic analysis of single and
multicomponent Systems.*
NUREG/CR-4348, Vol.I/II;
ANL-85-42 Vol.I/II, 1985.
- /53/ Donea, J. *Generalized Galerkin methods for convection-
-dominated problems, in 'Advances in computational
nonlinear mechanics', Doltsinis, I.St. (ed.),
Springer, 1987.*
- /54/ Donea, J. *Recent advances in copmputational methods for
staedy and transient transport problems.*
Nuclear Engineering and Design, 80, 141-162, 1984.
- /55/ El-Mistikawy, T.M.,
Werle, M.J. *Numerical method for boundary layers with
Blowing - the Exponential Box Scheme.*
AIAA J. 16, 749-751, 1978.
- /56/ Fluid Dynamics
International, Inc. *FIDAP Theoretical Manual, 1986.*
- /57/ Gaskell, P.H.,
Lau, A.K.C. *Curvature-compensated convective
transport: SMART, a new boundedness
preserving transport algorithm.*
Intern. J. Numer. Methods in Fluids 8,
617-641, 1988.
- /58/ Gaskell, P.H.,
Lau, A.K.C. *An assessment of direct stress modelling
for elliptic turbulent flows with the
aid of a non-diffusive, boundedness*

- preserving discretisation scheme.
In: Proc. Fifth Intern. Conf. Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, Montreal, ed. by C. Taylor et al., Pineridge Press, Swansea, U.K., 351-362, 1987.
- /159/ Gaskell, P.H.,
Lau, A.K.C. *Unsteady flow: A curvature compensated approach.*
In: Proc. Sixth Intern. Conf. Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, ed. by C. Taylor et al., Pineridge Press, Swansea, U.K., 51-62, 1989.
- /160/ Gresho, P.
Chan, S.T.
Lee, R.L.
Upson, G.D. *A modified finite element method for solving the time-dependent, incompressible Navier-Stokes equations, Part 1: Theory.*
Intern. J. Numer. Methods Fluids, 4, 557-598, 1984.
- /161/ Günther, Cl. *A consistent upwind method of second order for the convection-diffusion equation.*
In: Computational Techniques and Applications CTAC-87, ed. by J. Noye and C. Fletcher, Elsevier Science Publishers (North Holland), 249-258, 1988.
- /162/ Günther, Cl. *Interner Bericht Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1986.*
- /163/ Günther, Cl. *Monotone Upwind-Verfahren 2.Ordnung zur Lösung der Konvektions-Diffusionsgleichung.*
ZAMM 68, T383-T384, 1988.
- /164/ Günther, Cl. *Vergleich verschiedener Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der 2-d-Konvektions-Diffusionsgleichung anhand eines Beispiels mit bekannter exakter Lösung.*
KfK 4439, 1988.
- /165/ Günther, Cl. *The LECUSSO-difference scheme as method with artificial diffusivity of order three.*
In: Proc. Sixth Intern. Conf. Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, ed. by C. Taylor et al., Pineridge Press, Swansea, 133-142, 1989.
- /166/ Günther, Cl. *Locally exact four point upwind difference schemes without wiggles.*
In: Proc. Fifth Int. Symp. Numer. Methods Eng., Lausanne, ed. by R. Gruber et al., Springer, Berlin, 693-698, 1989.

- 167/ Günther, Cl. *Conservative versions of the locally exact consistent upwind scheme of second order (LECUSSO). Extended Abstracts of the Lectures of the Second World Congress on Computational Mechanics, Stuttgart, FRG, 27.-31. August 1990, 898-901.*
- 168/ Gushchin, V.A.,
Shchennikov, V.V. *A monotonic difference scheme of second-order accuracy. Zh. vychisl. Mat. mat. Fiz. 14, 3, 789-792, 1974. Engl. Übersetzung in USSR Comp. Math. and Math. Phys. 14, 252-256, 1974.*
- 169/ Han, T.,
Humphrey, J.A.C.,
Lauder, B. *A comparison of hybrid and quadratic upstream differencing in high Reynolds number elliptic flows. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 29, 81-95, 1981.*
- 170/ Hassan, Y.A.,
Galpin, P.F.,
Raithby, G.D. *A stable mass-flow-weighted two-dimensional skew upwind scheme. Numerical Heat Transfer 6, 395-408, 1983 .*
- 171/ Heinrich, J.C.
Huyakorn, P.S.
Zienkiewicz, O.C.
Mitchell, A.R. *An 'upwind' finite element scheme for two-dimensional convective transport equation. Intern. J. Numer. Methods Engrg. 11, 134-143, 1977.*
- 172/ Hindsmarsh, A.C.,
Gresho, P.M. *The stability of explicit Euler time-integration for certain finite difference approximations of the multi-dimensional advection-diffusion equation. Intern. Journal Num. Methods Fluids 4, 853-897, 1984.*
- 173/ Hirsh, R.S.,
Ferguson, R.E. *Compact differencing schemes for advective problems. In: Proc. Seventh Int. Conf. Numer. Methods in Fluid Dynamics, Stanford, ed. by W.C. Reynolds and R.W. MacCormack, Springer, Berlin, 206-211, 1981.*
- 174/ Hirt, C.W. *Heuristic stability theory for finite difference equations. J. Comput. Phys. 2, 339-355, 1968.*
- 175/ Hughes, T.J.R.,
Brooks, A. *A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. In: Finite Element Methods for Convection-Dominated Flows, ed. by T.J.R. Hughes, ASME, New York, 1979.*

- 176/ Hughes, T.J.R. *Recent progress in the development and understanding of SUPG methods with special reference to the compressible Euler and Navier-Stokes equations. Int. J. Numer. Methods Fluids 7, 1261-1275, 1987.*
- 177/ Il'in, A.M. *Differencing scheme for a differential equation with a small parameter affecting the highest derivative. Mat. Zametki 6, 237-248, 1969. Engl. Übersetzung in Math. Notes 6, 596-602, 1969.*
- 178/ Jones, I.P. *A comparison problem for numerical methods in fluid dynamics: The double glazing problem. In: Numerical Methods in Thermal Problems, ed. by R.W. Lewis und K. Morgan, Pineridge Press, Swansea, U.K., 338-348, 1979, und in: J. Fluid Mech. 95, 4, inside back cover, 1979.*
- 179/ Jones, I.P.,
Kightly, J.R.,
Thompson, C.P.,
Wilkes, N.S. *FLOW3D, a computer code for the prediction of laminar and turbulent flow and heat transfer: Release 1. AERE-R 11825, Harwell, 1985, also 1985 HTFS Research Symposium.*
- 180/ Kawamura, T.,
Kuwahara, K. *Computation of high Reynolds number flow around a circular cylinder with surface roughnes. AIAA-paper 84-0340, 1984.*
- 181/ Kellogg, R.B.,
Tsan, A. *Analysis of some difference approximations for a singular perturbation problem without turning points. MTAC 32, no.144, 1025-1039, 1978.*
- 182/ Küblbeck, K.,
Merker, G.P.,
Straub, J. *Advanced numerical computation of twodimensional time-dependent free convection in cavities. Int. J. Heat Mass Transfer, 23, 203-217, 1980.*
- 183/ Lax, P.D.,
Richtmyer, R.D. *Survey of stability of linear finite difference equations. Commun. Pure Appl. Math. 9, 267-293, 1956.*
- 184/ Leonard, B.P. *News-Flash: upstream parabolic interpolati on. In: Proc. 2nd GAMM Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics. Köln, W. Germany, 97-104, 1977.*

- /185/ Leonard, B.P. *A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. Comput. Methods. Appl. Mech. Eng. 19, 59-98, 1979.*
- /186/ Leonard, B.P. *The QUICK finite difference method for the convection-diffusion equation. In: Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations. III, ed. by R. Vichnevetsky and Stepleman, R.S., IMACS, 292-297, 1979.*
- /187/ Leonard, B.P. *A survey of finite differences of opinion on numerical muddling of the incomprehensible defective convection equation. In: Finite Element Methods for Convection Dominated Flows, ed. by T.J.R. Hughes, (AMD-34, ASME, New York), 1-30, 1979.*
- /188/ Leonard, B.P. *QUICK 2D method for computing heat transfer in driven laminar flow past a cavity. In: Computer Methods in Laminar and Turbulent Flow, ed. by C. Taylor, Pentech Press, London, 313-323, 1980.*
- /189/ Leonard, B.P. *The QUICK Algorithm: A uniformly third-order finite-difference method for highly convective flows. In: Computer Methods in Fluids, ed. by K. Morgan et al., Pentech Press, London, 159-195, 1980.*
- /190/ Leonard, B.P. *A survey of finite differences with upwinding for numerical modelling of the the incompressible convective diffusion equation. In: Computational Techniques in Transient and Turbulent Flow, vol. 2, ed. by C.Taylor and K.Morgan, Pineridge Press, Swansea, U.K., 1-35, 1981.*
- /191/ Leonard, B.P. *A survey of finite differences with upwinding for numerical modelling of the incompressible convective diffusion equation. In: Recent Advances in Numerical Methods in Fluids, Vol.2, ed. by C.Taylor and K. Morgan, Pineridge Press, Swansea, U.K., 1-35, 1981.*
- /192/ Leonard, B.P. *A stable, accurate, economical and comprehensible algorithm for the Navier-Stokes and*

- scalar transport equations.
In: Proc. Second Intern. Conf. Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, Venice, ed. by C. Taylor and B.A. Schrefler, Pineridge Press, Swansea, U.K., 543-553, 1981.
- /193/ Leonard, B.P. *The EULER-QUICK code.*
In: Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow III, ed. by C.Taylor et al., Pineridge Press, Swansea, U.K., 489-499, 1983.
- /194/ Leonard, B.P. *A CONVECTIVELY stable, third-order accurate finite-difference method for steady two-dimensional flow and heat transfer.*
In: Numerical Properties and Methodologies in Heat Transfer, ed. by T.M. Shih, Hemisphere, Washington, 221-226, 1983.
- /195/ Leonard, B.P. *Third-order upwinding as a rational basis for computational fluid dynamics.*
In: Computational Techniques and Applications CTAC-83, ed. by J. Noye and C. Fletcher, Elsevier Science Publishers B.V.(North Holland), 106-120, 1984.
- /196/ Leonard, B.P. *Locally modified QUICK scheme for highly convective 2d and 3d flows.*
In: Proc. Fifth Intern. Conf. Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, Montreal, ed. by C. Taylor et al., Pineridge Press, Swansea, U.K., 35-47, 1987.
- /197/ Leonard, B.P. *Elliptic Systems: Finite Difference Method IV.*
In: Handbook of Numerical Heat Transfer, ed. by W.J.Minkowycz et al., Wiley, New York, 347-378, 1988.
- /198/ Leonard, B.P. *ULTRA-SHARP simulation of convection.*
In: Numerical Methods in Thermal Problems, vol. VI, part 1, ed. by R.W.Lewis and K.Morgan, 366-377, 1989.
- /199/ Leonard, B.P.,
Leschziner, M.A.,
McGuirk, J. *Third-order finite-difference method for steady two-dimensional convection.*
In: Proc. First Intern. Conf. Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, ed. by C. Taylor et al., Pentech Press, London, 807-819, 1978.

- /100/ Leschziner, M.A. *Practical evaluation of three finite difference schemes for the computation of steady state recirculating flows.*
Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 23, 293-312, 1980.
- /101/ Leventhal, S.H. *An operator compact implicit method of exponential type.*
J. Comput. Phys. 46, 138-165, 1982.
- /102/ Lorenz, J. *Zur Inversmonotonie diskreter Probleme.*
Num. Math. 27, 227-238, 1977.
- /103/ Lorenz, J. *Stability and consistency analysis of difference methods for singular perturbation problems.*
In: Analytical and Numerical Approaches to Asymptotic Problems in Analysis,
ed. by O. Axelsson et al.,
North Holland, 141-156, 1981.
- /104/ Maekawa, I.,
Muramatsu, T. *Higher order differencing schemes in fluid fluid flow analysis and their applications to in-vessel thermo-hydraulics.*
5th IAHR Liquid Metal Working Group Meeting Grenoble, France, June 23-27, 1986 (Unveröffentlicht).
- /105/ Noye, J. *Three-point two-level finite difference methods for the one-dimensional advection equation.*
In: Computational Techniques and Applications CTAC-85, ed. by J. Noye and R. May, Elsevier Science Publisher B.V. (North Holland), 159-192, 1986.
- /106/ Patankar, S.V. *Recent developments in computational heat transfer.*
J. Heat Transfer, 110, 1037-1045, 1989.
- /107/ Patankar, S.V.,
Spalding, D.B. *A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows.*
Int. J. Heat Mass Transfer, 15, 1787-1806, 1972.
- /108/ Patel, M.K.,
Markatos, N.C.,
Cross, M. *Method of reducing false-diffusion errors in convection-diffusion problems.*
Appl. Math. Modelling, 9, 302-306, 1985.
- /109/ Patel, M.K.,
Markatos, N.C.,
Cross, M. *A critical evaluation of seven discretization schemes for convection-diffusion equations.*
Int. J. Numer. Methods in Fluids 5, 225-244, 1985.

- /110/ Patel, M.K.,
Markatos, N.C. *A critical evaluation of eight discretization schemes for two-dimensional convection-diffusion equations. Int. J. Numer. Methods in Fluids 6, 129-154, 1986.*
- /111/ Pollard, A.,
Siu, A.L.-W. *The calculation of some laminar flows using various discretization schemes. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 35, 293-313, 1982.*
- /112/ Price, H.S.,
Varga, R.S.,
Warren, J.E. *Application of oscillation matrices to diffusion-convection equations. J. Math. Phys. 45, 301-311, 1966.*
- /113/ Raithby, G.D. *Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. Computer Methods Appl. Mech. Eng. 9, 153-164, 1976.*
- /114/ Rice, J.G.,
Schnipke, R.J. *An equal-order velocity-pressure formulation that does not exhibit spurious pressure modes. Computer Methods Appl. Mech. Eng. 48, 313-327, 1985.*
- /115/ Roos, H.-G. *A second order monotone upwind scheme. Computing 36, 57-67, 1986.*
- /116/ Runchal, A.K. *Convergence and accuracy of three finite difference schemes for a two-dimensional conduction and convection problem. Int. J. Num. Meth. Eng. 4, 541-550, 1972.*
- /117/ Runchal, A.K. *CONDIF: A modified central-difference scheme for convective flows. Intern. J. Numer. Methods Eng. 24, 1593-1608, 1987.*
- /118/ Saitoh, T.,
Hirose, K. *High-accuracy benchmark solutions to natural convection in a square cavity. Computational Mechanics 4, 417-427, 1989.*
- /119/ Samarski, A.A. *On monotonic difference schemes for elliptic and parabolic equations in the case of a non-self-adjoint elliptic operator. Zh. vychisl. Mat. mat. Fiz 5, 548-551, 1965.*
- /120/ Shih, S.-D.,
Kellogg, R.B. *Asymptotic analysis of a singular perturbation problem. SIAM J. Math. Anal. 18, 5, 1467-1511, 1987.*

- /121/ Spalding, D.B. *A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives.*
Int. J. Num. Meth. Eng. 4, 551-559, 1972.
- /122/ Spalding, D.B. *A general-purpose computer program for multi-dimensional one- and two-phase flow.*
Mathematics and Computers in Simulation. North Holland, vol.XXIII, 267-276, 1981.
- /123/ Stoyan, G. *Monotone difference schemes for convection-diffusion problems.*
ZAMM 59, 361-372, 1979.
- /124/ Tao, W.Q.,
Sparrow, E.M. *The transportative property and convective numerical stability of the steady-state convection-diffusion finite-difference equation.*
Numerical Heat Transfer 11, 491-497, 1987.
- /125/ Trottenberg, U. *SUPRENUM - The Concept.*
Supercomputer 30, Vol. VI, 2, 5-12, Amsterdam, 1989.
- /126/ Vanka, S.P. *Second order upwind differencing in a recirculating flow.*
AIAA J. 25, 11, 1435-1441, 1987.
- /127/ Vanka, S.P. *Block-implicit multigrid solution of Navier-Stokes equations in primitive variables.*
J. Comput. Phys. 65, 138-158, 1986.
- /128/ Van Veldhuizen, M. *Higher order schemes of positive type for singular perturbation problems.*
In: Numerical Analysis of Singular Perturbation problems, ed. by P.W. Hemker and J.J.H. Miller, Academic Press, London, 361-383, 1979.
- /129/ Varga, R.S. *On a discrete maximum principle.*
Siam J. Numer. Anal. 3,2, 355-359, 1966.
- /130/ Wesseling, P. *Multigrid methods in computational fluid dynamics.*
ZAMM 70, T337-T347, 1990.
- /131/ Winters, K.H.,
Plessner, Th. *The extension of the ENTWIFE package to problems of convection driven by surface tension.*
AERE-R 11835, Harwell Laboratory, 1985.

/132/ Zhu, J.,
Leschziner, M.A.

*A local oscillation-damping algorithm for
higher order convection schemes.*
Computer Methods Appl. Mech. Eng. 67,
355-366, 1988.