Kapitel 3

Numerische Formulierung

Im allgemeinen ist es nicht möglich, mit Ausnahme weniger einfacher Strömungsfälle, exakte Lösungen zu den Erhaltungsgleichungen herzuleiten. Die Lösung der Erhaltungsgleichungen ist bei praktisch relevanten Strömungsproblemen nur mit Hilfe numerischer Verfahren zusammen mit zugehörigen Anfangs- und Randbedingungen möglich, und somit stellt sich die Notwendigkeit ein, numerische Verfahren für deren Approximationen zu konstruieren und zu entwickeln. Die numerische Lösung geht zunächst von einer Diskretisierung eines gewissen Rechengebiets, welches integriert werden soll, in eine Reihe diskreter Zellen mit Hilfe eines numerischen Netzes aus, innerhalb dessen eine Strömung berechnet werden soll. Dann werden die Erhaltungsgleichungen durch eines der möglichen Verfahren in den diskreten Punkten in Differenzengleichungen überführt. Dabei werden nur in den diskreten Punkten die Werte der Strömungsgrößen näherungsweise bestimmt.

Die Methodenvielfalt zur numerischen Lösung partieller Anfangs- und Randwertprobleme ist groß. Dazu zählt auch die *Linienmethode*, welche sich im allgemeinen auf folgende Art konstruieren läßt. Zunächst werden die Erhaltungsgleichungen durch ein geeignetes Differenzenverfahren nur bezüglich der räumlichen partiellen Ableitungen in den diskreten Punkten diskretisiert. Es entsteht dann ein Anfangswertproblem gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung in der Zeit, welches numerisch integriert wird.

Es wird hier angenommen, daß ein Integrationsgebiet aus einer Reihe diskreter Zellen besteht, welche ein Rechennetz bilden. Da die Erhaltungsgleichungen (2.7) für ein beliebiges Kontrollvolumen gültig sind, gelten sie auch für jede einzelne Zelle im Rechennetz. Bild 3.1 zeigt eine geometrische Darstellung der knotenzentrierten Anordnung, bei welcher die Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} und die Ortskoordinaten auf dem gleichen Gitterpunkt abgelegt sind. Die Berandungen der Zellen werden jeweils in der Mitte zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten definiert. Gesucht ist die zeitliche Änderung der diskreten Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} in jeder einzelnen Zelle.

Definiert man die über jede einzelne Zelle mit dem Volumeninhalt V und dem Flächeninhalt S gemittelten Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} , so wird die zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} in jeder einzelnen Zelle aus den Erhaltungsgleichungen (2.7) durch die Bilanzgleichungen

$$V\frac{d\mathbf{Q}}{dt} + \sum_{i=1}^{3} \frac{F^{\xi^{i}}S}{\Delta\xi^{i}} \approx 0$$
(3.1)



Bild 3.1: Eine Anordnung für die numerische Flußfunktion in zwei Dimensionen

 mit

$$F^{\xi^{i}} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}, \quad \mathbf{n}^{\xi^{i}} = \frac{\mathbf{S}^{\xi^{i}}}{S}$$
(3.2)

approximiert. Darin ist der Vektor F^{ξ^i} die Normalflußfunktion, welche im Mittelpunkt der Seitenflächen definiert ist. Diese Bilanzgleichungen zeigen, daß die zeitliche Änderung der gemittelten Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} in jeder einzelnen Zelle im Gleichgewicht mit der Änderung der Flüsse über deren Seitenflächen ist.

Die Qualität der Lösung \mathbf{Q} der Bilanzgleichungen (3.1) zu einem Zeitpunkt t wird überwiegend von den Vorgehensweisen für die Berechnung der Flüsse über die Seitenflächen, die Zeitdiskretisierung sowie die Behandlung zugehöriger Anfangs- und Randbedingungen beeinflußt, welche im folgenden kurz dargestellt werden.

3.1 Berechnung der Flußfunktion

Die Komponenten der Flüsse F^{ξ^i} über die Seitenflächen einer Reihe diskreter Zellen in einem Rechennetz lassen sich auf die abhängigen Variablen in den Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} zurückführen, wohingegen die Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} bei der knotenzentrierten Anordnung in Bild 3.1 in den Knotenpunkten abgelegt sind. Somit ist zur Berechnung der Flüsse F^{ξ^i} an den Seitenflächen aus den Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} oder den abhängigen Variablen in benachbarten Knotenpunkten eine Interpolation (oder Extrapolation) erforderlich. Dies ist ein zentrales Merkmal der *Finite-Volumen*-Methode. Die so numerisch gewonnene Flußfunktion wird als die *numerische Flußfunktion* \tilde{F}^{ξ^i} bezeichnet. Es existieren unterschiedliche Verfahren zur Berechnung der numerischen Flußfunktion \tilde{F}^{ξ^i} an den Seitenflächen.

3.1.1 Schemata für die reibungsfreien Terme

Im Mittelpunkt des Lösungsverfahrens für die Erhaltungsgleichungen nach der Finite-Volumen-Methode steht die Berechnung der numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ an den Seitenflächen aus benachbarten Zustandsgrößen, welche in den Knotenpunkten abgelegt sind. Es gibt zwei Möglichkeiten für die Berechnung der numerischen Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ höherer Ordnung. Eine davon, welche der Philosophie der Finite-Volumen-Methode nahe kommt, ist das sogenannte MUSCL(Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws)-Konzept nach van Leer [81], in welchem die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ nur mit Hilfe der an die Seitenflächen interpolierten (oder extrapolierten) Zustandsgrößen berechnet wird.

Seien \mathbf{Q}^- bzw. \mathbf{Q}^+ die durch eine Interpolation (oder Extrapolation) negativ- und positivseitiger Knotenwerte an die Seitenflächen erzielten Erhaltungsgrößen, so ist die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_I^{\xi^i}$ durch einen Ausdruck der Form

$$\tilde{F}_I^{\xi^i} = f(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}^{\xi^i}) \tag{3.3}$$

gegeben.

Sollen die Subskripte L und R die Knotenpunkte der von einer Seitenfläche z. B. cd in Bild 3.1 unmittelbar links und rechts liegenden Zellen darstellen, so ist für erste Ordnung genau $\mathbf{Q}^-=\mathbf{Q}_L$ bzw. $\mathbf{Q}^+=\mathbf{Q}_R$, welches numerisch sehr dissipativ ist. Für höhere Ordnung genau kann \mathbf{Q}^- über eine Interpolation (oder Extrapolation) aus \mathbf{Q}_{L-1} , \mathbf{Q}_L und möglicherweise \mathbf{Q}_R erzielt werden. Analoge Vorgehensweise erfolgt für \mathbf{Q}^+ .

$$\mathbf{Q}^{-} = f(\mathbf{Q}_{L-1}, \mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R), \quad \mathbf{Q}^{+} = f(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R, \mathbf{Q}_{R+1}).$$
(3.4)

Hierin können zur Interpolation (oder Extrapolation) unterschiedliche Formen für die abhängigen Variablen ausgewählt werden. Die Vorgehensweisen für $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$, welche heutzutage häufig zur Anwendung kommen, lassen sich grob in zwei Wege unterteilen.

Eine Möglichkeit für die Bestimmung der numerischen Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ liegt darin, die Erhaltungsgrößen **Q** der an die Seitenfläche angrenzende Zellen L, R arithmetisch zu mitteln und mit diesem Mittelwert die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ nach

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \mathbf{F}_{I}(\frac{\mathbf{Q}_{L} + \mathbf{Q}_{R}}{2}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}$$
(3.5)

zu berechnen. Diese Berechnungsvorschrift kann auch mit Hilfe des linear interpolierten Zustandsvektors \mathbf{Q}^- oder \mathbf{Q}^+ ($\mathbf{Q}^-=\mathbf{Q}^+$) aus \mathbf{Q}_R und \mathbf{Q}_L in *MUSCL*-Verfahren (3.3) und (3.4) gewonnen werden.

Andererseits kann die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ auch aus der Mittelung der Flüsse in den benachbarten Knotenpunkten L, R

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \frac{\mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}}{2}$$
(3.6)

erreicht werden. Die zentralen Schemata (3.5) und (3.6) sind dann äquivalent, wenn die Flußfunktion $F_I^{\xi^i}$ linear ist. Jedoch ist $F_I^{\xi^i}$ eine nichtlineare Funktion von **Q**. Diese Schema sind von zweiter Ordnung genau, wenn die Gitterweite in einem Rechennetz genügend glatt ist.

Der Operator $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ aus zentralen Verfahren bringt einige Stabilitätsprobleme mit sich. Derartige Verfahren liefern die entkoppelten Lösungen in den gerad- und ungeradzahligen Punkten wie Plus-Minus-Wellen, und deren Diskretisierungsfehler ist dispersiv, aber nicht dissipativ, so daß zentrale Verfahren numerisch instabil sind. Diese Instabilität äußert sich durch kurzwellige Oszillationen der Strömungsgrößen mit der Gitterweite in glatten Lösungen. Außerdem treten in der Nähe von Verdichtungsstößen sehr starke Oszillationen auf, welche bei genügender Stoßstärke zum Abbruch der Rechnung führen können. Somit müssen diese Diskontinuitäten durch einen glatten Übergang mit starken Gradienten ersetzt werden, damit die Stöße über eine bestimmte Anzahl von Zellen geglättet werden können. Diese Glättung ist nur dann einzuschalten, wenn sie notwendig ist, um nicht die Lösungen im gesamten Strömungsfeld zu verfälschen. Zur Unterdrückung numerischer Oszillationen in glatten bzw. unstetigen Lösungen wird bei zentralen Verfahren zusätzlich ein künstlicher Fluß benötigt [60]. Faßt man die zur Dämpfung von Oszillationen in glatten bzw. unstetigen Lösungen benötigten Terme zu $\mathbf{F}_{D}(\mathbf{Q})$ zusammen, ergibt sich dann die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ im Fall von z. B. (3.6)

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \frac{\mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}}{2} + \mathbf{F}_{D}(\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}.$$
(3.7)

 mit

$$\mathbf{F}_D(\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^*} = g(\mathbf{Q}) + D\mathbf{Q},\tag{3.8}$$

wobei D eine konstante Matrix ist. Der nichtlineare Ausdruck $g(\mathbf{Q})$ wird für die künstliche Dissipation zur Unterdrückung der über unstetige Lösungen auftretenden nichtlinearen Oszillationen eingesetzt, während der lineare Term $D\mathbf{Q}$ für kurwellige Oszillationen in glatten Lösungen vorgesehen ist [60]. Die Instabilität infolge kurzwelliger Oszillationen in glatten Lösungen ist verhältnismäßig schwach im Vergleich zu den in der Nähe von Stößen auftretenden nichtlinearen Schwingungen.

Ein Anfangswertproblem, welches zur Zeit t = 0 zwei voneinander durch eine Diskontinuität getrennte Bereiche unterschiedlicher Zustände \mathbf{Q}_L , \mathbf{Q}_R ($\mathbf{u} \neq 0$) besitzt, bezeichnet man als das *Riemannproblem* [28]. Dieses Problem ist schematisch in Bild 3.2 dargestellt. Es existieren drei unterschiedliche Wellen, welche Gebiete voneinander trennen, in welchen Zustandsgrößen konstant sind. In den Niederdruckteil hinein breitet sich die Stoßwelle aus, über welche alle Zustandsgrößen diskontinuierlich sind. Anschließend läuft die Kontakt-Diskontinuität nach, über welche die Dichte wieder diskontinuierlich, aber die Geschwindigkeit und der statische Druck kontinuierlich sind. In gegenseitiger Richtung bewegt sich die dritte Welle, über welche alle Zustandsgrößen kontinuierlich sind, es aber einen glatten Übergang gibt. Diese Welle bezeichnet man als den Expansionsfächer, da die Dichte von Gasen abnimmt, wenn die Welle durchläuft. Für die anfängliche Diskontinuität in x = 0 ist die Lösung $\mathbf{Q}(x, t)$ nur eine Funktion von x/t. Dies bedeutet, daß sich die Wellen mit konstanter Geschwindigkeit bewegen und die Lösung $\mathbf{Q}(x, t)$ entlang jeder Kurve x/t in der x-t Ebene konstant ist. Die Form der Lösung hängt vom Zusammenhang zwischen den Anfangsdaten ab. Im Sonderfall $\mathbf{u} = 0$ bezeichnet man dieses Problem als das *Stoßrohrproblem*.

Nach dem Konzept der *Finite-Volumen*-Methode sind die Zustandsgrößen innerhalb jeder Zelle eines Gitternetzes konstant. Daher ergeben sich an den Seitenflächen gegenüberliegender Zellen Unstetigkeiten der Strömungsgrößen, was zu einem nichtlinearen *Riemannproblem*



Bild 3.2: Eindimensionales *Riemannproblem* für die *Euler*-Gleichungen

führt. Godunov [28] hat als erster einen Vorschlag gemacht, für die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ an den Seitenflächen benachbarter Zellen mit diskontinuierlichen Zustandsgrößen \mathbf{Q}_{L} , \mathbf{Q}_{R} innerhalb jeder Zelle zum Zeitpunkt t, eine Reihe eindimensionaler *Riemannprobleme* einzuführen. Die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ ist dann durch

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = f(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R}, \mathbf{n}^{\xi^{i}})$$
(3.9)

gegeben. Die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_I^{\xi^i}$ läßt sich in folgender Weise umformulieren. Definiert man

$$\Delta^{+} F_{I}^{\xi^{i}} = \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} - \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}, \qquad (3.10)$$

$$\Delta^{-} F_{I}^{\xi^{i}} = \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} - \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}, \qquad (3.11)$$

so erhält man aus (3.10), (3.11) die numerische Flußfunktion

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}$$
$$= \frac{1}{2}[(\mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}) - (\Delta^{+}F_{I}^{\xi^{i}} - \Delta^{-}F_{I}^{\xi^{i}})]$$
(3.12)

und die Flußdifferenz

$$\Delta F_I^{\xi^i} = \mathbf{F}_I(\mathbf{Q}_R) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i} - \mathbf{F}_I(\mathbf{Q}_L) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i} = \Delta^+ F_I^{\xi^i} + \Delta^- F_I^{\xi^i}.$$
(3.13)

 $\Delta^{\pm} F_{I}^{\xi^{i}}$ in (3.13) kann man als Beiträge zu $\Delta F_{I}^{\xi^{i}}$ jeweils infolge vorwärts und rückwärts laufender Wellen über die Seitenflächen betrachten. Im Überschallbereich entspricht $\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})$ entweder \mathbf{Q}_{L} oder \mathbf{Q}_{R} , so daß die exakte Lösung des *Riemannproblems* unnötig ist, da das Vorzeichen aller Eigenwerte für die *Jacobi*-Matrix gleich ist. Die meisten Verfahren, welche auf der Lösung des *Riemannproblems* beruhen, lassen sich in der Form (3.12) ausdrücken. Der erste Term in (3.12) entspricht dem zentralen Verfahren (3.6), welches instabil ist, aber der zweite Term ist ein dissipativer Term, welcher das *Godunov*-Verfahren stabil macht.

Die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ in (3.9) oder (3.12) ist eine nichtlineare Funktion von \mathbf{Q}_{L} sowie \mathbf{Q}_{R} , und daher muß für $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ an jeder Seitenfläche ein algebraisches nichtlineares Gleichungssystem iterativ gelöst werden. Die iterative Lösung ist ein Engpaß des Godunov-Verfahrens und damit sehr zeitaufwendig. In Finite-Volumen-Methoden werden die Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} über jede Zelle gemittelt, was zu Diskretisierungsfehlern führt. Dies heißt, daß es sich nicht lohnt, das Riemannproblem an jeder Seitenfläche exakt zu lösen und es möglich ist, ebenso zu guten numerischen Ergebnissen anhand eines wirtschaftlichen Riemannlösers zu kommen. Es wurde in der Vergangenheit eine Vielzahl von Lösungsverfahren für das Riemannproblem vorgeschlagen, um durch die Auffindung einer Approximation zu $\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})$ Rechenzeit zu reduzieren. Ein Verfahren, welches auf der approximativen Lösung des Riemannproblems beruht, bezeichnet man als approximativen Riemannlöser [56], [61], welcher zu explizit nichtiterativen Ausdrücken für die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ in (3.12) führt. Im Gegensatz zu approximativen Riemannlösern bezeichnet man das Godunov-Verfahren auch als den exakten Riemannlöser.

Viele approximative Riemannlöser gehen davon aus, daß ein eindimensionales lineares hyperbolisches System mit einer konstanten Koeffizientenmatrix

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0 \tag{3.14}$$

für zwei diskontinuierliche Anfangszustandsgrößen \mathbf{Q}_L , \mathbf{Q}_R mit Hilfe des Godunov-Verfahrens für das lineare Riemannproblem leicht gelöst werden kann. Die entsprechende Flußfunktion für das Godunov-Verfahren in konservativer Form ist durch

$$f(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R) = A\mathbf{Q}^*(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$$
$$= A\mathbf{Q}_L + A^-(\mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L)$$
$$= A\mathbf{Q}_R - A^+(\mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L)$$
(3.15)

 mit

$$A = A^{+} + A^{-}, \quad A^{+} = R\Lambda^{+}R^{-1}, \quad A^{-} = R\Lambda^{-}R^{-1}$$
(3.16)

gegeben. Die Mittelung von (3.15) ergibt

$$f(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R}) = \frac{1}{2} [A(\mathbf{Q}_{L} + \mathbf{Q}_{R}) + (A^{-} - A^{+})(\mathbf{Q}_{R} - \mathbf{Q}_{L})]$$
$$= \frac{1}{2} [A(\mathbf{Q}_{L} + \mathbf{Q}_{R}) - |A|(\mathbf{Q}_{R} - \mathbf{Q}_{L})]$$
(3.17)

mit

$$|A| = A^{+} - A^{-} = R|\Lambda|R^{-1} \quad \text{und} \quad |\Lambda| = diag(|\lambda_{1}|, |\lambda_{2}|, |\lambda_{3}|),$$
(3.18)

wobei R die Eigenvektormatrix ist und Λ die diagonale Matrix der reellen Eigenwerte λ der Koeffizientenmatrix A. Wenn alle Eigenwete der Keffizientenmatrix A das gleiche Vorzeichen besitzen, ist entweder A^+ oder A^- null, und (3.17) zu einer voll einseitigen Methode wird.

Einer der populärsten approximativen Riemannlöser, welcher heutzutage häufig zur Verwendung kommt, geht auf Roe [61] zurück. Er hat die nichtlineare Flußfunktion $F_I^{\xi^i}$ durch eine lokale Linearisierung modifiziert, um eine Approximation zum nichtlinearen Riemannproblem ohne Aufwand erreichen zu können. Die Flußfunktion $F_I^{\xi^i}$ wird durch

$$\mathbf{F}_{I}^{\xi^{i}} \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} = A(\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R}))\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} \approx \tilde{A}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})\mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}$$
(3.19)

modifiziert, wobei die gemittelte *Jacobi*-Matrix $\tilde{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$ so ermittelt wird, daß das dadurch modifizierte *Riemannproblem* konservativ und hyperbolisch sein kann, d. h.

$$\tilde{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)(\mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i} = \mathbf{F}_I(\mathbf{Q}_R) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i} - \mathbf{F}_I(\mathbf{Q}_L) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i}$$
(3.20)

und

$$\tilde{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R) = \frac{\partial \mathbf{F}_I(\mathbf{Q}^*(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R))}{\partial \mathbf{Q}^*(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)} = R\Lambda R^{-1},$$
(3.21)

wobei R die vollständig besetzte Matrix der Eigenvektoren ist und Λ die diagonale Matrix der reellen Eigenwerte λ von $\tilde{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$. Nun kann man für die Flußfunktion $\tilde{F}_I^{\xi^i}$ das Godunov-Verfahren (3.17) für das lineare hyperbolische System (3.14) auf das modifizierte Riemannproblem (3.19) anwenden.

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \tilde{A}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} \mathbf{Q}^{*}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})$$

$$= \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \tilde{A}^{-}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})(\mathbf{Q}_{R} - \mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}$$

$$= \mathbf{F}_{I}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} - \tilde{A}^{+}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})(\mathbf{Q}_{R} - \mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}$$
(3.22)

Aus der Mittelung der letzten zwei Ausdrücke in (3.22) kann man einen ähnlichen Ausdruck wie (3.17) in konservativer Form erhalten

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}_{I}^{\xi^{i}}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \mathbf{F}_{I}^{\xi^{i}}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}) - |\tilde{A}(\mathbf{Q}_{L}, \mathbf{Q}_{R})|(\mathbf{Q}_{R} - \mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}], \qquad (3.23)$$

wobei

$$|\tilde{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)| = \tilde{A}^+(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R) - \tilde{A}^-(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R) = R|\Lambda|R^{-1}.$$
(3.24)

Der Ausdruck (3.23) ist nur eine numerische Flußfunktion nach Godunov für ein lineares hyperbolisches System, und der erste Term entspricht dem zentralen Verfahren (3.6), aber der zweite Term spielt die Rolle einer Dissipation, welche den approximativen Riemannlöser stabilisiert. Das Schema nach Roe verletzt die Entropiebedingung, wenn die Eigenwerte von $|\tilde{A}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)|$ verschwinden. Die zur Zeit zur Verwendung kommende Form ist also in gewisser Weise modifiziert, um unphysikalische Lösungen zu vermeiden. Die optimale Wahl für $\mathbf{Q}^*(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$ ist die *Roe*-Mittelung von \mathbf{Q}_L und \mathbf{Q}_R , allerdings kann auch eine einfachere arithmetische Mittelung verwendet werden.

Ein algebraischer Ansatz für die numerische Flußfunktion in (3.3) ist das *flux-vector-splitting* nach *Steger-Warming* [74] bzw. van Leer [82], in welchem die Flußfunktion in zwei Anteile entsprechend dem Vorzeichen der Eigenwerte für die konstante *Jacobi*-Matrix aufgespalten wird:

$$F_I^{\xi^i} = \mathbf{F}_I^+(\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i} + \mathbf{F}_I^-(\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i}, \qquad (3.25)$$

wobei $\partial \mathbf{F}_{I}^{+}/\partial \mathbf{Q}$ keine negativen Eigenwerte enthält, und vice versa. Die Lösung des auf die Flußfunktion (3.25) bezogenen approximativen Riemannproblems ist durch

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \mathbf{F}_{I}^{+}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \mathbf{F}_{I}^{-}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}$$
(3.26)

gegeben. Das flux-vector-splitting (3.26) nach Steger-Warming läßt sich auch in ähnlicher Form wie (3.23) ausdrücken:

$$\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}_{I}^{\xi^{i}}(\mathbf{Q}_{R}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} + \mathbf{F}_{I}^{\xi^{i}}(\mathbf{Q}_{L}) \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}}) - |A|(\mathbf{Q}_{R} \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}} - \mathbf{Q}_{L} \cdot \mathbf{n}^{\xi^{i}})].$$
(3.27)

Dieses Verfahren entspricht nur dem Godunov-Verfahren (3.17), welches auf ein lineares *Riemannproblem* angewendet wurde, und ist nicht stetig differenzierbar beim Übergang von \mathbf{F}^- zu \mathbf{F}^+ . Dieses Problem wurde von van Leer [82] und weiter von Hänel [41] korrigiert.

Die Genauigkeit approximativer Riemannlöser ist von erster Ordnung und kann durch eine Interpolation (oder Extrapolation) der Strömungsgrößen anhand des MUSCL-Verfahrens auf eine höhere Ordnung erhöht werden. Der Übergang auf eine Genauigkeit höherer Ordnung führt allerdings zu unphysikalischen Oszillationen in Gebieten starker Variablenänderungen, z. B. in der Nähe von Verdichtungsstößen, ähnlich wie bei zentralen Verfahren. Daher muß zur Unterdrückung derartiger Oszillationen in den Gebieten die Genauigkeit auf erste Ordnung reduziert werden, in den übrigen Bereichen jedoch höhere Ordnung erhalten bleiben. Einen Schaltparameter φ ($0 \le \varphi \le 1$), welcher darüber entscheidet, ob ein approximativer Riemannlöser von erster Ordnung oder höherer Ordnung in einem Strömungsfeld sein soll, bezeichnet man als Limiter oder Limiterfunktion. Im Ansatz der Limiterfunktion wird der Wert von φ in Abhängikeit von den Zustandsgrößen im Strömungsfeld zwischen 0 in Bereichen starker Änderung der Strömungsgrößen und 1 in Gebieten kleiner Gradienten der Variablen variiert. In der Literatur existiert eine Vielzahl verschiedener Limiterfunktionen (z. B. van Leer-Limiter, van Albada-Limiter, Roe-Limiter, minimod, superbee) [1].

Für die numerische Flußfunktion $\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}}$ wird in dieser Arbeit auf einen approximativen Riemannlöser [59] mit der van Albada-Limiterfunktion [1] zurückgegriffen. Im folgenden wird dieses Rechenverfahren kurz dargestellt. Für die detaillierte Theorie sei auf [59] verwiesen. Der Ausgangspunkt des Verfahrens ist die Ermittlung von Differenzen in den charakteristischen Variablen zwischen den Zuständen \mathbf{Q}^{+} und \mathbf{Q}^{-} . Der Riemannlöser verwendet einen Zwischenzustand \mathbf{Q}^{*} an der Seitenfläche. Die reibungsfreie numerische Flußfunktion nach dem Verfahren wird wie folgt berechnet:

$$\tilde{F}_I^{\xi^i} = \mathbf{F}_I^{\xi^i}(\mathbf{Q}^*) \cdot \mathbf{n}^{\xi^i}, \qquad (3.28)$$

wobei

$$\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q}_L + \Delta Q_{\hat{\alpha}} \mathbf{g}^{\hat{\alpha}} \tag{3.29}$$

und

$$\Delta Q_{\hat{\alpha}} = \begin{cases} (\mathbf{Q}^{-} - \mathbf{Q}_{L}) \mathbf{g}_{\hat{\alpha}} & \text{für} \quad \lambda(\hat{\alpha}) > 0\\ (\mathbf{Q}^{+} - \mathbf{Q}_{L}) \mathbf{g}_{\hat{\alpha}} & \text{für} \quad \lambda(\hat{\alpha}) \le 0 \end{cases}$$
(3.30)

Die mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit $\lambda(\hat{\alpha})$ wird anhand des dichtegewichteten Mittelwertes nach *Roe* [61] ermittelt. Das Subskript $\hat{\alpha}$ stellt die kovariante charakteristische Komponente dar, während das Superskript $\hat{\alpha}$ die kontravariante charakteristische Komponente zum Ausdruck bringt.

Um die Expansionswelle zu verhindern, wird die Änderung $\Delta\lambda(\hat{\alpha})$ in der Ausbreitungsgeschwindigkeit zwischen den Zuständen \mathbf{Q}^+ und \mathbf{Q}^- unter der Annahme einer linearen Variation zwischen zwei Zuständen berechnet:

$$\Delta\lambda(\hat{\alpha}) = \frac{\partial\lambda(\hat{\alpha})}{\partial\mathbf{Q}_{\hat{\alpha}}} [\mathbf{Q}^{+} - \mathbf{Q}^{-}]_{\hat{\alpha}}.$$
(3.31)

Diese Anderung ist bei Expansionswellen stets positiv, Verdichtungsstöße sind dagegen durch eine negative Änderung der Ausbreitungsgeschwindigkeit gekennzeichnet. Nimmt man nun sowohl für die charakteristische Variable $\mathbf{Q}_{\hat{\alpha}}$ als auch für deren Ausbreitungsgeschwindigkeit $\lambda(\hat{\alpha})$ eine lineare Variation zwischen den Zuständen \mathbf{Q}^+ und \mathbf{Q}^- an, so kann der Zustand, welcher mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit null korrespondiert, nach folgender Gleichung berechnet werden:

$$(\mathbf{Q}^*)_{\hat{\alpha}} = (\mathbf{Q}^-)_{\hat{\alpha}} + \left[\frac{1}{2} - \frac{\lambda(\hat{\alpha})}{\Delta\lambda(\hat{\alpha})}\right] (\mathbf{Q}^+ - \mathbf{Q}^-)_{\hat{\alpha}}.$$
 (3.32)

Unter Verwendung dieser Gleichung und der Abkürzung $s = 1/2 - \lambda(\hat{\alpha})/\Delta\lambda(\hat{\alpha})$ erhält man schließlich die vollständige Gleichung zur Berechnung des Zwischenzustandes \mathbf{Q}^*

$$\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q}_L + \Delta Q_{\hat{\alpha}} \mathbf{g}^{\hat{\alpha}}; \quad \Delta Q_{\hat{\alpha}} = \begin{cases} (\mathbf{Q}^- - \mathbf{Q}_L) \mathbf{g}_{\hat{\alpha}} + \min(1, \max(0, s)) \\ \times (\mathbf{Q}^+ - \mathbf{Q}^-) \mathbf{g}_{\hat{\alpha}} & \text{für} \quad \Delta \lambda(\hat{\alpha}) > 0 \\ & \text{Gleichung}(3.30) & \text{sonst.} \end{cases}$$
(3.33)

3.1.2 Schema für die reibungsbehafteten Terme

Die auf die Reibung bezogenen Terme, die dissipativen Terme, in den Erhaltungsgleichungen, enthalten Ausdrücke mit unterschiedlichen und gleichen zweiten Ableitungen für die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors \mathbf{u} und der Temperatur T. Diese Terme zeigen elliptischen Charakter und damit keine ausgezeichnete Ausbreitungsrichtung von Informationen und Störungen. Daher werden diese Terme durch zentrale Differenzen zweiter Ordnung approximiert.

Für die numerische Funktion $\tilde{F}_V^{\xi^i}$ ist die Berechnung der Gradienten von **u** und *T* notwendig. Dies kann in konservativer Form nach dem *Gau*ß-Satz

$$\int_{V} \nabla \Phi dV = \int_{S} \Phi \mathbf{n} dS \tag{3.34}$$

erfolgen, wobei Φ die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors **u** oder die Temperatur *T* bezeichnet. Bei der Anwendung der konservativen Form (3.34) auf eine Fläche einer Hilfszelle, welche im Mittelpunkt der ursprünglichen Zelle R+1/2 steht, z. B. in ξ^1 -Koordinatenrichtung, erhält man aus (2.10)

$$\nabla \Phi_{R+1/2} = (\mathbf{S}_{R}^{\xi^{1}} \Phi_{R} - \mathbf{S}_{L}^{\xi^{1}} \Phi_{L} + \mathbf{S}_{R}^{\xi^{2}} \Phi_{R} - \mathbf{S}_{L}^{\xi^{2}} \Phi_{L} + \mathbf{S}_{R}^{\xi^{3}} \Phi_{R} - \mathbf{S}_{L}^{\xi^{3}} \Phi_{L})/V_{R+1/2}, \qquad (3.35)$$

wobei $V_{R+1/2}$ der Volumeninhalt der verwendeten Hilfszelle ist.

Die Werte von Φ in den ersten zwei Termen in (3.35) entsprechen den Komponenten der gleichen zweiten Ableitungen und sind schon bekannt, wohingegen die verbleibenden Terme, welche durch eine Interpolation zu bestimmen sind, zu den unterschiedlichen zweiten Ableitungen beitragen. Die Werte von Φ in den letzten vier Termen können entweder durch die lineare Interpolation aus den umliegenden zwei Knotenwerten oder die bilineare Interpolation aus den umliegenden vier Knotenwerten bestimmt werden. Die Vorgehensweise für die weiteren Seitenflächen in jeder Koordinatenrichtung erfolgt analog. Alle oben erwähnten Beziehungen für den Gradienten können durch eine geschickte Manipulation für die Transpose und die Divergenz in (2.34) in analoger Weise verwendet werden.

3.2 Zeitdiskretisierung

Berechnet man die numerische Flußfunktion \tilde{F}^{ξ^i} zum Zeitpunkt t in den Bilanzgleichungen (3.1) in oben beschriebener Weise für eine Reihe von Zellen im Inneren eines Rechennetzes, so erhält man ein nichtlineares System gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung in der Zeit t der Form

$$V\frac{d\mathbf{Q}}{dt} = -\mathbf{Res}(\mathbf{Q}) \tag{3.36}$$

 mit

$$\mathbf{Res}(\mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^{3} \frac{(\tilde{F}_{I}^{\xi^{i}} - \tilde{F}_{V}^{\xi^{i}})S}{\Delta\xi^{i}},$$
(3.37)

wobei $\mathbf{Res}(\mathbf{Q})$ die Summe aus den numerisch erzielten Flüssen über jede Seitenfläche einer Zelle ist und \mathbf{Q} die entsprechenden Erhaltungsgrößen innerhalb der Zelle mit dem Volumeninhalt V.

Es ist kaum zu erwarten, daß man analytisch zu den Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} direkt aus (3.36)

als eine Funktion der kontinuierlichen Zeit t gelangt. Um jedoch dieses Problem numerisch lösen zu können, muß es mit Hilfe eines Differenzenverfahrens in der Zeitrichtung t diskretisiert werden, welches die Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} zu diskreten Zeitpunkten approximiert.

Ein lineares Mehrschrittverfahren [23] zur Berechnung einer Approximation zu diskreten Zeitpunkten für die gesuchten Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} ist durch die Vektorfunktion

$$\sum_{j=0}^{m} \alpha^{j} \mathbf{Q}^{n+j} = -\frac{\Delta t}{V} \sum_{j=0}^{m} \beta^{j} \mathbf{Res}(\mathbf{Q}^{n+j}) \quad (n = 0, 1, 2, ..; \ m = 1, 2, 3, ..)$$
(3.38)

gegeben ($|\alpha^{0}| + |\beta^{0}| \neq 0, \alpha^{m} \neq 0$), wobei der Lösungsvektor \mathbf{Q}^{n+m} eine Approximation für die Erhaltungsgrößen $\mathbf{Q}(t^{n+m})$ (eine Bezeichnung für die analytische Lösung von (3.36) zu einem Zeitpunkt t^{n+m}) darstellen soll. Δt bezeichnet eine konstante Zeitschrittgröße, d. h. $\Delta t = t^{n+m} - t^{n+m-1}$, und *n* den Zeitschrittszähler für den diskreten Zeitpunkt. Damit steht t^{n+m} für den (n + m)-ten diskreten Zeitpunkt, an welchem die Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} analytisch oder numerisch berechnet werden. Die Koeffizienten α^{j} und β^{j} sind entsprechend dem verwendeten Schema gegeben.

Ein durch (3.38) gegebenes Schema heißt explizit, wenn $\beta^m = 0$ ist, sonst implizit. Bei expliziten Verfahren wird der Lösungsvektor \mathbf{Q}^{n+m} zum Zeitpunkt t^{n+m} in (3.38) direkt aus den Lösungsvektoren zu den vorhergehenden Zeitpunkten t^{n+j-1} berechnet, während bei impliziten der Lösungsvektor \mathbf{Q}^{n+m} aus den Lösungsvektoren sowohl zum Zeitpunkt t^{n+m} als auch zu den vorhergehenden Zeitpunkten t^{n+j-1} bestimmt werden muß. Explizite und implizite Verfahren bringen spezielle Vor- bzw. Nachteile.

Explizite Verfahren sind nur unter gewissen Bedingungen für die Zeitschrittgröße Δt stabil. Die Stabilitätsbedingung führt bei sehr großer Gitterdichte an Grenzschichten turbulenter Strömungen zu äußerst kleinen Zeitschrittgrößen. Von Vorteil bei expliziten Schemata ist, daß keine algebraischen Gleichungssysteme iterativ zu lösen sind, was also weniger Speicherplatz erfordert, da die algebraischen Beziehungen nacheinander abgearbeitet werden. Dies ist besonders vorteilhaft bei Vektorrechenanlagen.

Implizite Verfahren erfahren verhältnismäßig wenige Einschränkungen der Zeitschrittgröße, so daß sie im allgemeinen nur durch das Zeitmaß des physikalischen Vorgangs bestimmt ist. Bei impliziten Verfahren muß jedoch ein algebraisches nichtlineares Gleichungssystem bei jedem Zeitabschnitt gelöst werden, was zu einem großen Speicherplatzbedarf führt. Interessiert man sich nur für einen stationären Zustand, können die größtmöglichen Zeitschrittgrößen pro Zellenvolumen mit Vorteil eingesetzt werden, welche die CFL-Bedingung erfüllen. Mit der CFL-Bedingung ist gemeint, daß der Einflußbereich eines Differenzenverfahrens den Einflußbereich der partiellen Differentialgleichungen einschließt. Diese Bedingung ist nur eine notwendige Bedingung für Stabilität, jedoch keine hinreichende.

Bei impliziten Verfahren ($\beta^m \neq 0$) ist ein algebraisches nichtlineares Gleichungssystem der Form

$$\frac{V}{\Delta t}\alpha^{m}\mathbf{Q}^{n+m} - \mathbf{N}(\mathbf{Q}^{n+m}) = 0$$
(3.39)

 mit

$$\mathbf{N}(\mathbf{Q}^{n+m}) = -\frac{V}{\Delta t} \sum_{j=0}^{m-1} \alpha^j \mathbf{Q}^{n+j} - \sum_{j=0}^m \beta^j \mathbf{Res}(\mathbf{Q}^{n+j})$$
(3.40)

für \mathbf{Q}^{n+m} bei jedem Zeitschritt zu lösen, da die Funktion $\operatorname{Res}(\mathbf{Q}^{n+m})$ aus (3.36) eine nichtlineare Funktion des gesuchten Lösungsvektors \mathbf{Q}^{n+m} ist.

Dabei ist die Genauigkeit von \mathbf{Q}^{n+m} gegen $\mathbf{Q}(t^{n+m})$ durch die Ordnung q des verwendeten Differenzenverfahrens bestimmt. Vom Differenzenverfahren (3.38) ist bei jedem Zeitschritt ein lokaler Diskretisierungsfehler von $O(\Delta t^{q+1})$ auf der Zeitachse t zu erwarten, wenn ein Zeitschritt mit allen exakten vorhergehenden Erhaltungsgrößen in (3.36) (z. B., $\mathbf{Q}^{n+m-1} = \mathbf{Q}(t^{n+m-1})$) gemacht wird. Das Schema von Ordnung q liefert den globalen Diskretisierungsfehler $\mathbf{Q}(t^{n+m}) - \mathbf{Q}^{n+m} = O(\Delta t^q)$ auf der Zeitachse t, wenn man (3.38) für $n \to \infty$ von t^0 bis zu einem bestimmten Zeitpunkt t^{n+m} integriert.

Die lokale Genauigkeit ist z. B. bei dem expliziten *Euler-vorwärts*-Verfahren $(m = 1, \alpha^1 = -\alpha^0 = 1.0, \beta^1 = 0, \beta^0 = 1.0)$

$$V\frac{(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)}{\Delta t} = -\mathbf{Res}(\mathbf{Q}^n)$$
(3.41)

sowie bei dem impliziten Euler-rückwärts-Verfahren ($m = 1, \alpha^1 = -\alpha^0 = 1.0, \beta^1 = 1.0, \beta^0 = 0$)

$$V\frac{(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)}{\Delta t} = -\mathbf{Res}(\mathbf{Q}^{n+1})$$
(3.42)

ebenso von erster Ordnung (q = 1). Die Verwendung des expliziten Euler-vorwärts-Verfahrens führt oft auf Schwierigkeiten mit der Stabilität. Das implizite Euler-rückwärts-Verfahren ist zwar stabil, jedoch dissipativ für zeitliche Auflösung wegen der niedrigen Ordnung und kommt derzeit häufig zur Berechnung stationärer Strömungen zum Einsatz. Der zeitliche Abbruchfehler zweiter Ordnung wirkt als eine numerische Dissipation wie die bei der Flußberechnung erster Ordnung im Strömungsfeld, so daß es notwendig ist, eine zeitliche Diskretisierung höherer Ordnung zu verwenden, um die mit dem zeitlichen Abbruchfehler verbundene numerische Dissipation zu vermeiden.

Ein semi-implizites Verfahren, bei welchem die Genauigkeit und vor allem die Stabilität erhöht wird, ist das Crank-Nicolson-Verfahren (m = 1) zweiter Ordnung (q = 2). Es setzt sich aus dem expliziten Euler-vorwärts und dem impliziten Euler-rückwärts-Verfahren zusammen

$$V\frac{(\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n)}{\Delta t} = -\frac{\operatorname{\mathbf{Res}}(\mathbf{Q}^n) + \operatorname{\mathbf{Res}}(\mathbf{Q}^{n+1})}{2},$$
(3.43)

wobei die Flüsse zu den zwei verschiedenen Zeitpunkten linear gemittelt werden.

Die lokale Genauigkeit zweiter Ordnung (q = 2) ergibt das rückwärts genommene Schema ($m = 2, \alpha^2 = 1.5, \alpha^1 = -2.0, \alpha^0 = 0.5, \beta^2 = 1.0, \beta^0 = \beta^1 = 0$)

$$V\frac{(3\mathbf{Q}^{n+2}-4\mathbf{Q}^{n+1}+\mathbf{Q}^n)}{2\Delta t} = -\mathbf{Res}(\mathbf{Q}^{n+2}), \qquad (3.44)$$

bei welchem für \mathbf{Q}^{n+2} die Lösungsvektoren auf den zwei vorhergehenden Zeitebenen benötigt werden. Für die Berechnung instationärer Strömungen wird in dieser Arbeit dieses *rückwärts* genommene Schema eingesetzt.

Die Erhaltungsgrößen $\mathbf{Q}(t^{n+m})$ in (3.36) enthalten bereits einen auf die räumlichen Diskretisierung bezogenen Fehler gegenüber den Erhaltungsgrößen \mathbf{Q} in (2.7), währenddessen enthält der Lösungsvektor \mathbf{Q}^{n+m} in (3.38) die Diskretisierungsfehler in Bezug auf Raum sowie Zeit. Die Genauigkeit von \mathbf{Q}^{n+m} wird außerdem von Randbedingungen sowie Rundungsfehlern beeinflußt. Mit zunehmenden Zeitschritten vermehrt sich der mit der räumlichen Diskretisierung verbundene Fehler unabhängig von $O(\Delta t^q)$, und die Anzahl der Zeitschritte bei expliziten Verfahren ist für einen bestimmten Zeitraum größer als bei impliziten. Als Folge sind für Vorgehen gleicher Ordnung auf der Zeitachse implizite Verfahren vor expliziten zu bevorzugen, wenn man nur den Effekt des räumlichen Diskretisierungsfehlers auf die Lösungsgenauigkeit von \mathbf{Q}^{n+m} betrachtet.

3.3 Anfangs- und Randbedingungen

Um die Gleichung (3.38) in der Zeitrichtung anzutreiben, sind entsprechend dem vorliegenden Strömungsproblem eine Anfangsverteilung der abhängigen Variablen zum Zeitpunkt t^0 und geeignete Randbedingungen bei jedem diskreten Zeitpunkt t^{n+m} erforderlich.

3.3.1 Anfangsbedingungen

Zu Beginn der Rechnung ($t^0 = n\Delta t = 0$) ist die vollständige Beschreibung eines Strömungsfeldes auf allen Gitterpunkten notwendig. Falls man sich vom Anfangszeitpunkt t^0 an für eine Lösung zu einem bestimmten Zeitpunkt t^{n+m} , wie z. B. die Kreiszylinderumströmung zum Anfangsstadium bei Anfahrt aus der Ruhe, interessiert, muß man eine gute Anfangslösung des vorliegenden Problems vorgeben, und man schreibt dafür in der Regel die stationäre analytische Lösung des Problems vor, wenn sie zur Verfügung steht. Soll jedoch ohne Interesse an instationären Strömungen in der Zeit der Anfangsphase nur eine zeitlich voll ausgebildete periodische Strömung gewonnen werden, hat die Anfangslösung überhaupt keinen Einfluß auf die Genauigkeit der periodischen Strömung, wenn die Anfangsverteilung zumindest physikalisch ist, so daß die Anfangsbelegung des Strömungsfeldes völlig willkürlich ist. In der Regel kommt eine Approximation der stationären Strömung zur Verwendung.

Für ein *m-Schritt*-Verfahren $(m \ge 2)$, wie z. B. bei (3.44), sind zusätzlich für die Anfangsverteilung der abhängigen Variablen $\mathbf{Q}^0(\mathbf{r})$ die Strömungsfelder zu den vorhergehenden Zeitpunkten $(0 < n \le m-1)$ erforderlich, für welche ein (m-1)-*Schritt*-Verfahren zur Verfügung steht.

3.3.2 Randbedingungen

Zur Lösung von (3.39) bei jedem Zeitschritt t^{n+m} sind zusätzlich zu den physikalischen Randbedingungen, welche in Kapitel 2 erläutert wurden, geeignete numerische Bedingungen auf den Berandungen des vorliegenden Strömungsproblems vorzuschreiben.

Für den statischen Druck p existiert keine physikaliche Randbedingung an der Wand. Der statische Druck an der Wand wird daher bei großen Reynolds-Zahlen näherungsweise aus der

Impulsgleichung

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0 \tag{3.45}$$

bestimmt, wenn die Druckänderung und die Gitterweite in der Grenzschicht senkrecht zur Wand hinreichend klein sind.

Angenommen, daß der Ein- und Austrittsrand des verwendeten Rechennetzes weit genug von einem angeströmten Gegenstand entfernt ist, also der Reibungseffekt am Ein- und Ausströmrand vernachlässigbar ist, erhält man aus der Charakteristikentheorie für die *Euler*-Gleichungen [42] die Art der Randbedingungen. Die Anzahl der vorzugebenden Variablen am Ein- und Ausströmrand ist aus der Ausbreitungsrichtung von Störungen und Informationen bestimmt und unterscheidet sich zwischen den Unterschall- und Überschallrändern. Die übrigen abhängigen Variablen werden aus dem Inneren des Rechennetzes extrapoliert.

Um die Berechnung der Strömung durch eine Schaufelreihe nur in einem Schaufelkanal zu ermöglichen, ist die periodische Randbedingung zum Zeitpunkt t^{n+m} z. B. in der Form (siehe Bild 6.3)

$$\mathbf{Q}^{n+m}(x,y,z) = \mathbf{Q}^{n+m}(x,y+S,z)$$
(3.46)

an einer Grenzfläche der benachbarten Schaufelkanäle vorzugeben, wobei S die Teilung eines Schaufelgitters ist. Die Punkte auf den periodischen Berandungen werden in der gleichen Weise wie die Punkte im Inneren des Rechengebietes behandelt. Zunächst wird das verwendete Rechennetz dadurch modifiziert, daß man eine Gitterlinie künstlicher Gitterpunkte zum ursprünglichen Rechennetz addiert, welche den inneren Punkten des eine Teilung entfernten benachbarten Schaufelkanals entsprechen. Hierbei müssen die so künstlich entstandenen Zellen mit denen der eine Teilung entfernten Zellen übereinstimmen. Dann werden die Erhaltungsgrößen, welche auf den inneren Punkten berechnet wurden, bei jeder nichtlinearen Iteration zu den künstlichen Punkten transferiert.