Erweiterung von ENO-Verfahren auf zwei Raumdimensionen und Anwendung auf hypersonische Staupunktprobleme

Von der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
— Fachbereich 1 —

der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

zur Erlangung des akademischen Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
genehmigte Dissertation

Vorgelegt von

Diplom-Mathematiker
Siegfried Müller

aus Schleiden (Eifel)

Referent:	Univ. Prof. Dr. Rolf Jeltsch, ETH Zürich
Korreferent:	Univ. Prof. Dr. Josef Ballmann
Tag der mündlichen Prüfung:	2. Dezember 1992

D82 (Diss. RWTH Aachen)

Den Herren Prof. Dr. R. Jeltsch und Prof. Dr. J. Ballmann danke ich für die Betreuung dieser Arbeit, die ständige Diskussionsbereitschaft sowie die Übernahme der Referate. Insbesondere möchte ich mich bei ihnen dafür bedanken, daß sie mir die Arbeit im SFB 253 *Grundlagen zum Entwurf von Raumflugzeugen* ermöglichten.

Für das sorgfältige Korrekturlesen möchte ich meinen Kollegen Dipl.-Math. H. Böing und Dr. M. Nitschke danken.

Mein Dank gilt allen Kollegen und Kolleginnen am Institut für Geometrie und Praktische Mathematik und am Lehr- und Forschungsgebiet für Mechanik der RWTH Aachen sowie am Seminar für Angewandte Mathematik der ETH Zürich für ihre Hilfsbereitschaft und Unterstützung; insbesondere danke ich Herrn Dr. Karl-Heinz Brakhage für die von ihm entwickelte und zur Verfügung gestellte Software zur computerunterstützten geometrischen Konstruktion.

Mein besonderer Dank gilt meiner Freundin Birgit, die mich während dieser Zeit mit ihrem Vertrauen und Verständnis für die Arbeit sehr unterstützt hat.

Inhaltsverzeichnis

Physikalische Notationen

ρ_i	Partialdichte der Komponente i		$[kg/m^3]$
ρ	Massendichte	(1.1.4)	$[kg/m^3]$
τ	spezifisches Volumen	(4.1.6)	$[m^3/kg]$
Y_i	Massenbruch der Komponente i	(1.1.3)	
$\mathbf{v}$	Geschwindigkeitsvektor		$[m/s]$
d	Anzahl der Ortskomponenten		
p_i	Partialdruck der Komponente i	(1.1.1)	$[N/m^2]$
p	Druck	(1.1.2)	$[N/m^2]$
T	Temperatur		$[K]$
e_i	spezifische innere Energie der Komponente i		$[J/kg]$
e	spezifische innere Energie		$[J/kg]$
E	spezifische Totalenergie	(1.3.9)	$[J/kg]$
e_i^0	spezifische Formationsenergie der Komponente i bei $T = 0\ K$		$[J/kg]$
h_i	spezifische Enthalpie der Komponente i	(1.2.10)	$[J/kg]$
h	spezifische Enthalpie	(1.2.10)	$[J/kg]$
H	spezifische Totalenthalpie	(1.3.9)	$[J/kg]$
$c_{v,i}$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen der Komponente i	(1.2.6)	$[J/kg\ K]$
c_v	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	(1.2.6)	$[J/kg\ K]$
$c_{p,i}$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck der Komponente i	(1.2.9)	$[J/kg\ K]$
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	(1.2.12)	$[J/kg\ K]$
γ	Verhältnis der Wärmekapazitäten	(1.2.13)	

a	eingefrorene Schallgeschwindigkeit	(4.1.6)	$[m/s]$
S	Entropie		$[J/K]$
K	Anzahl der Komponenten der Luft		
M_i	Molekulargewicht der Komponente i		$[kg/mol]$
x_i	Molenbruch der Komponente i	(1.4.12)	
c_i	Molare Konzentration der Komponente i	(1.3.4)	$[mol/m^3]$
$[A_i]$	Molare Konzentration der Komponente i	(1.5.2)	$[mol/cm^3]$
c	Summe der molaren Konzentrationen	(1.3.4)	$[mol/m^3]$
s_i	chemische Produktionsrate der Komponente i		$[kg/m^3\ s]$
$\nu'_{s,r},\ \nu''_{s,r}$	stöchiometrische Koeffizienten der Reaktion r	(1.5.1)	
$k_{f,r}$	Vorwärtsreaktionsrate der Reaktion r rate der Reaktion r	(1.5.1)	$[\quad]$ [1)]
$k_{b,r}$	Rückwärtsreaktionsrate der Reaktion r rate der Reaktion r	(1.5.1)	$[\quad]$ [1)]
$K_{c,r}$	Gleichgewichtskonstante der Reaktion r	(1.5.3)	$[\quad]$ [2)]
A_i	Molekül der Komponente i	(1.5.1)	
C_r	Koeffizient zu $k_{f,r}$	(1.5.7)	$[m^3/mol]$
S_r	Temperaturexponent der Reaktion r	(1.5.7)	
$\left(\frac{D}{k}\right)_r$	Aktivierungstemperatur der Reaktion r	(1.5.7)	$[K]$
$A_{i,r}$	Konstante der Komponente i zu $K_{c,r}$	(1.5.7)	
$\mathbf{q}_i^D$	Diffusionsfluß der Komponente i	(1.3.2)	$[kg/m^2\ s]$
$\mathbf{v}_i^D$	Diffusionsgeschwindigkeit der Komponente i		$[m/s]$
D	Diffusionskoeffizient gemäß Fick	(1.4.7)	$[m^2/s]$
D_{ij}	Mehrkomponentendiffusionskoeffizient der Komponenten i und j		$[m^2/s]$

[1)] Einheit ist von Anzahl der Reaktionspartner abhängig z. B. $[cm^3/mol\ s]$
[2)] Einheit ist von Anzahl der Reaktionspartner abhängig z. B. $[cm^3/mol]$

$\mathcal{D}_{ij}$	binärer Diffusionskoeffizient der Komponenten i und j		$[m^2/s]$
D_i^T	thermischer Diffusionskoeffizient der Komponente i		$[kg/m\ s]$
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor der Reibungsspannungen	(1.3.7)	$[kg/m\ s^2]$
μ_B	Druckviskositätskoeffizient		$[kg/m\ s]$
μ	Viskositätskoeffizient		$[kg/m\ s]$
$\mathbf{q}$	Wärmefluß	(1.3.12)	$[J/m^2\ s]$
λ	Wärmeleitungskoeffizient		$[J/K\ m\ s]$
N_{Av}	Avogadro-Konstante		$[1/mol]$
R	universelle Gaskonstante		$[J/mol\ K]$
Pr	Prandtl-Zahl	(1.4.6)	
Le	Lewis-Zahl	(1.4.8)	
Re	Reynolds-Zahl	(1.4.10)	
Ma	Machzahl	(6.2.13)	
ρ_∞	Anströmdichte		$[kg/m^3]$
u_∞	Anströmgeschwindigkeit		$[m/s]$
Ma_∞	Anströmmachzahl		
T_∞	Anströmtemperatur		$[K]$
μ_∞	Viskositätskoeffizient der Anströmung		$[kg/m\ s]$
f_i	Verteilungsfunktion	(1.4.1)	
$\mathbf{v}_i$	Molekülgeschwindigkeit des Teilchens i		
$J(f_i, f_j)$	allgemeiner Kollisionsterm		
m_i	Teilchenmasse der Komponente i		$[kg]$
X_i	äußere Kraft auf das Teilchen i		$[N]$
ξ	Störungsparameter		
$f_i^{[0]}$	Maxwell-Verteilung		
$f_i^{[j]}$	Koeffizienten der Reihenentwicklung der Verteilungsfunktion	(1.4.3)	
Φ_I	Störungsfunktion	(1.4.5)	
n	Anzahl aller Moleküle pro Volumen	(1.4.5)	$[1/m^3]$
n_i	Anzahl aller Moleküle der Komponente i	(1.4.5)	$[1/m^3]$

Mathematische Notationen

Mengen

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{N}_0$	Menge der natürlichen Zahlen mit Null
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
$\mathbb{R}^+$	Menge der positiven reellen Zahlen
$\mathbb{R}^n$	Menge der reellen, n-dimensionalen Vektoren, $n \in \mathbb{N}$
$\mathbb{R}^{n\times m}$	Menge der reellen $n \times m$-Matrizen, $n, m \in \mathbb{N}$
$C^0(A, B)$	Menge der stetigen Funktionen $f : A \to B$
$C^n(A, B)$	Menge der n-mal stetig differenzierbaren Funktionen $f : A \to B,\ n \in \mathbb{N}$

Vektoren und Matrizen

$\mathbf{r}$	Rechtseigenvektor
$\mathbf{l}$	Linkseigenvektor
$\mathbf{e}_i$	i-ter Einheitsvektor des $\mathbb{R}^n,\ n \in \mathbb{N}$
$\mathbf{R}$	Matrix der Rechtseigenvektoren
$\mathbf{L}$	Matrix der Linkseigenvektoren
$\mathbf{I}_n$	Einheitsmatrix im $\mathbb{R}^{n\times n},\ n \in \mathbb{N}$
δ_{ij}	Kronecker-Symbol

Operatoren

$\dfrac{\partial^i}{\partial t^i}$	i-te partielle Ableitung nach der Zeit t
$\dfrac{\partial}{\partial x}$	partielle Ableitung nach der Ortskomponente x
$\dfrac{d}{dt}$	totale Ableitung nach der Zeit t
$\mathbf{grad}\, f$	Gradient einer skalaren Funktion $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ definiert als $\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^T$ (kartesisch)
$\mathbf{grad}\, \mathbf{u}$	Gradient eines Vektors $\mathbf{u} \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ mit Komponenten $u_1, \ldots, u_n$ definiert als $(\mathbf{grad}\, u_1, \ldots, \mathbf{grad}\, u_n)$
$\operatorname{div} \mathbf{u}$	Divergenz eines Vektors $\mathbf{u} \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ mit Komponenten $u_1, \ldots, u_n$ definiert als $\sum\limits_{i=1}^{n} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ (kartesisch)
$\operatorname{div} \mathbf{T}$	Divergenz eines Tensors 2. Stufe $\mathbf{T} \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{n \times n})$ definiert als $(\operatorname{div}(\mathbf{T}\,\mathbf{e_1}), \ldots, \operatorname{div}(\mathbf{T}\,\mathbf{e_n}))^T$
$[q]$	Differenz einer physikalischen Größe q über einen Sprung
$\hat{f}$	Mittelwert einer Funktion $f \in C^0(\mathbb{R}^n, R^m)$
$\tilde{f}$	Funktion f unter einer Koordinatentransformation
$\|\mathbf{u}\|_2$	euklidische Norm auf dem $\mathbb{R}^n$ definiert als $\left(\sum\limits_{i=1}^{n} u_i^2\right)^{0.5}$
$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$	das durch $\|.\|_2$ induzierte Skalarprodukt $\sum\limits_{i=1}^{n} u_i v_i$
$\det \mathbf{A}$	Determinante einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Erhaltungsgleichungen

t	Zeitkomponente
$\mathbf{x}$	Ortsvektor im $\mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$
	speziell $d = 2$: $\mathbf{x} = (x, y)$ (kartesisch) bzw.
	$\mathbf{x} = (\xi, \eta)$ (beliebig)
$\mathbf{u}$	Vektor der Erhaltungsgrößen
$\mathbf{F}_i(\mathbf{u})$	Fluß der Erhaltungsgrößen in die i-te Ortsrichtung
	speziell $d = 2$: $\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}$, $\mathbf{F}_2 = \mathbf{G}$
$\mathbf{F}_i^I(\mathbf{u})$	reibungsfreier Fluß der Navier-Stokes-Gleichungen in die i-te Ortsrichtung
$\mathbf{F}_i^V(\mathbf{u})$	reibungsbehafteter Fluß der Navier-Stokes-Gleichungen in die i-te Ortsrichtung
$\mathbf{S}(\mathbf{u})$	Quellterm der Erhaltungsgleichungen
$\mathbf{U}$	Vektor der quasikonservativen Erhaltungsgrößen
$\mathbf{B}(\mathbf{U})$	Matrix der quasikonservativen Gleichungen
$\mathbf{w}$	Vektor der linearisierten Erhaltungsgrößen
$\hat{\mathbf{u}}$	Vektor der Mittelwerte der Erhaltungsgrößen
$\tilde{\mathbf{u}}$	Vektor der transformierten Erhaltungsgrößen

Rekonstruktion

N	Grad der Rekonstruktion
w	zu rekonstruierende Funktion
W	Stammfunktion zu w
Q_j^N	ENO-Interpolationspolynom vom Grad N zum j-ten Intervall
$R_j^N(., w)$	Rekonstruktionspolynom vom Grad N zum j-ten Intervall
$z_k(.)$	k-te einparametrige Kurve
$(.)_k$	wie $(.)$ aber entlang $z_k(.)$

Diskretisierung

$\mathbf{F}^{God}$	numerischer Fluß der Erhaltungsgrößen gemäß Godunov
$\mathbf{F}^{LV}$	numerischer Fluß der Erhaltungsgrößen gemäß Liu und Vinokur
V	finites Volumen
$\lvert V\rvert$	Zellvolumen von V
$\mathbf{N}$	äußere Normale zu einem finiten Volumen
$\mathbf{P}$	Zellrandmittelpunkt einer Seite eines allgemeinen Vierecks
$\mathbf{J}$	Funktionalmatrix einer Koordinatentransformation
Δt	Zeitschrittweite
$\Delta\mathbf{x}$	Vektor der Ortsschrittweiten im $\mathbb{R}^n$
t_n	n-te Zeitstufe
$\mathbf{v}_{j,k}^n$	Approximation des Erhaltungsvektors in der Zelle $V_{j,k}$ zum Zeitpunkt t_n

Einleitung

Diese Arbeit ist im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 253 *Grundlagen zum Entwurf von Raumfahrzeugen* entstanden. In dem dort bearbeiteten Teilprojekt B5 wird die Berechnung hypersonischer Staupunktströmungen bei hohen Temperaturen unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen durchgeführt. Dazu wurde ein numerisches Verfahren zur Diskretisierung der räumlich zweidimensionalen instationären Navier-Stokes-Gleichungen im chemischen Nichtgleichgewicht für ein thermisch perfektes aber kalorisch nicht perfektes Gasgemisch entwickelt und implementiert. Das physikalische Modell wird in Kapitel 1 ausführlich beschrieben.

Grundlage der Diskretisierung bilden die eindimensionalen ENO-Verfahren [C*87]. Dabei handelt es sich um Godunov-Typ-Verfahren, die auf einer Finiten-Volumen-Diskretisierung basieren. Diese werden im zweiten Kapitel motiviert und dann in Kapitel 3 mittels der Dimensionssplittingtechnik auf zwei Raumdimensionen erweitert. Die Herleitung ist dabei so allgemein gehalten, daß die Diskretisierung auf beliebige Systeme von hyperbolischen Erhaltungssätzen angewendet werden kann. Auch die Beschränkung auf zwei Ortskomponenten ist nicht wesentlich, da mittels des Dimensionssplittings die Erweiterung auf drei Komponenten analog verläuft wie die von einer auf zwei Dimensionen.

Zur Bestimmung der numerischen Flüsse ist die Lösung von sog. Riemannproblemen erforderlich. Diese werden im Fall der reibungsfreien Navier-Stokes-Gleichungen, den sog. Eulergleichungen, für ein lokal eingefrorenes Gas explizit in Kapitel 4 hergeleitet. Es wird sowohl ein iterativer Löser [CG85] als auch ein approximativer [LV89] vorgestellt. In Kapitel 5 wird das zuvor hergeleitete Verfahren auf die Navier-Stokes-Gleichungen unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen übertragen. Im Vordergrund stehen hier die Behandlung des Quellterms der chemischen Produktionsraten, die Wahl der physikalischen Randbedingungen und die Diskretisierung der dissipativen Terme.

Ein großes Problem bei der Simulation derart komplexer Probleme — wie etwa die Staupunktströmung — stellt die Validierung des Algorithmus' dar. Hier bietet sich der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen an. Dieser ist sehr wichtig, da man ja gerade die Vorgänge in der Natur simulieren will. Da die Meßmethoden teilweise recht ungenau sind — Abweichungen von 10% sind möglich — und das Modell auch nicht exakt ist, eignet sich das Experiment nur bedingt für einen quantitativen Vergleich der Diskretisierung. Deshalb wird in Kapitel 6 für den Fall einer reibungsfreien zweidimensionalen Strömung um einen stumpfen symmetrischen Körper diese entlang der Staupunktlinie analysiert und eine Grenzwertbetrachtung im Staupunkt durchgeführt. Daraus resultiert ein eindimensionales offenes Randwertproblem mit algebraischen Nebenbedingungen, dessen Diskretisierung eine mathematische und physikalische Interpretation des Staupunktes ermöglicht. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, daß die in Kapitel 6 hergeleiteten Ergebnisse in Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Rolf Jeltsch und Dipl.-Math. Michael Fey von der ETH Zürich enstanden (vgl. [FJM92]).

Im letzten Kapitel werden die numerischen Ergebnisse präsentiert. Der Schwerpunkt bildet hier insbesondere die Validierung des numerischen Verfahrens.