ME 747 Introduction to computational fluid dynamics

Lecture 6

Basics of discretization methods

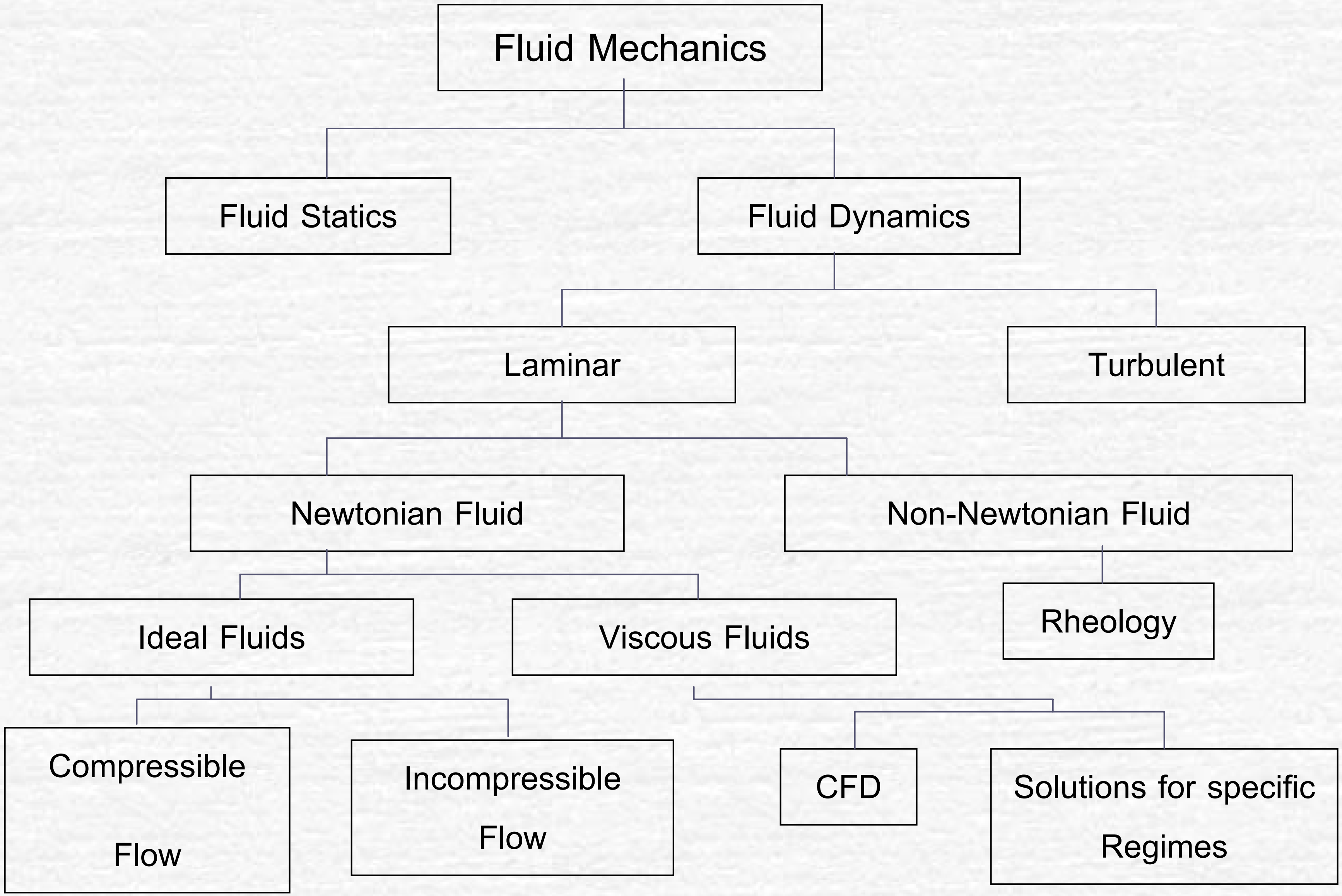
By Chainarong Chaktranond

Lecture schedule

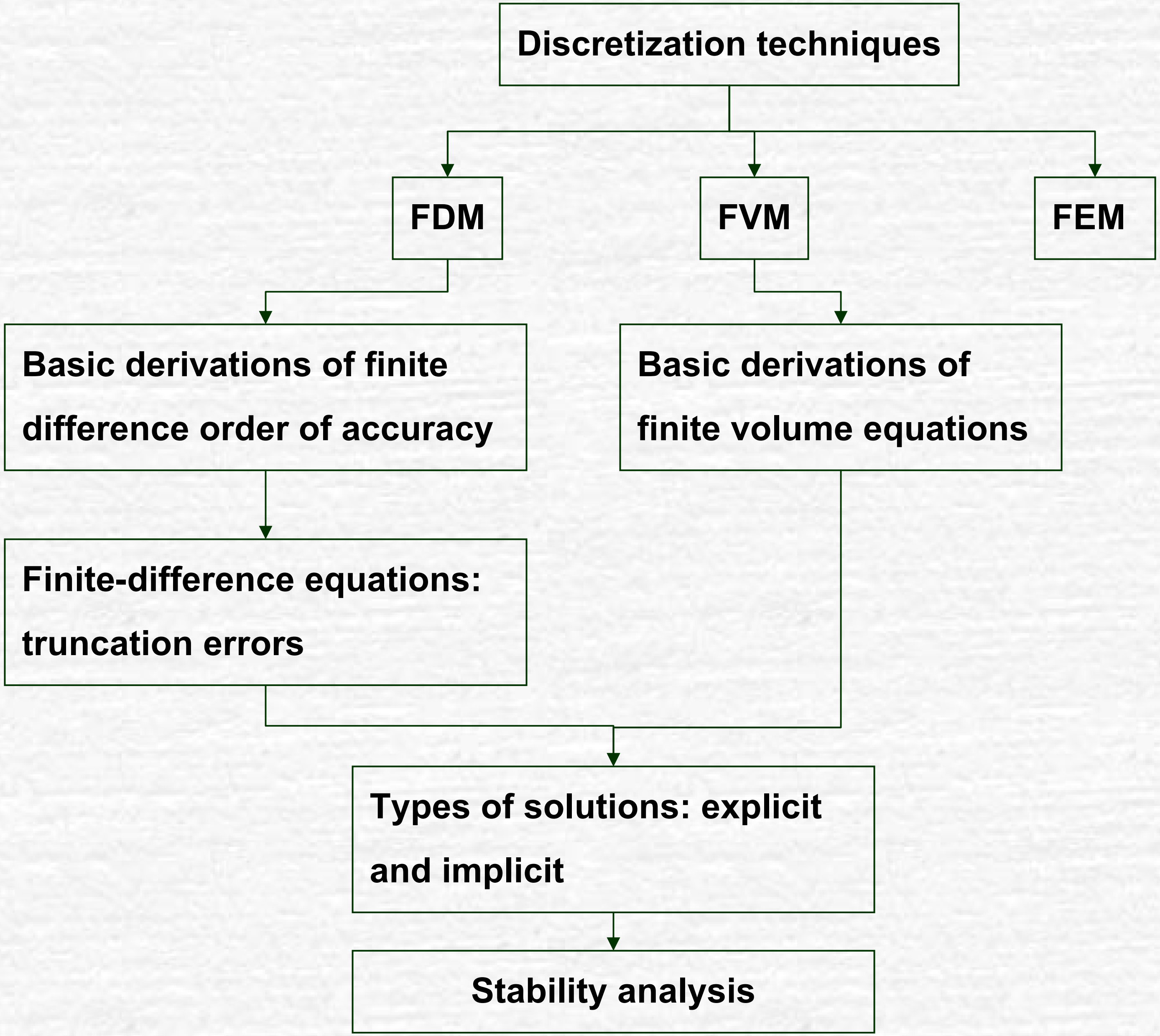
8 - 9	**6. Basics of discretization methods** -Principle of discretization method, Truncation error, Round-off and Discretization errors, Convergence for marching problems, Stability analysis, Von Neumann analysis
10 - 12	**7. Application of numerical methods to selected model equations** - Wave and Heat equations, Euler explicit and implicit methods, Second-order upwind method, Second central different method
13 – 14	**8. Application of numerical methods to selected model equations (Continue)** - Laplace’s and Burges equations - Adam-Bashforth and Crank-Nicolson methods - Solve the matrices with ADI, SOR methods, and etc.
15 - 16	**9. Numerical techniques to solve fluid flow problems**

Contents

- Principle of discretization method
- Truncation error, Round-off and Discretization errors
- Convergence for marching problems
- Stability analysis and von Neumann analysis


Fluid Mechanics
Fluid Statics
Fluid Dynamics
Laminar
Turbulent
Newtonian Fluid
Non-Newtonian Fluid
Ideal Fluids
Viscous Fluids
Rheology
Compressible Flow
Incompressible Flow
CFD
Solutions for specific Regimes

Descritization of PDEs



Types of Errors and Problems

Types of Errors:

- Modeling Error.
- Discretization Error.
- Convergence Error.

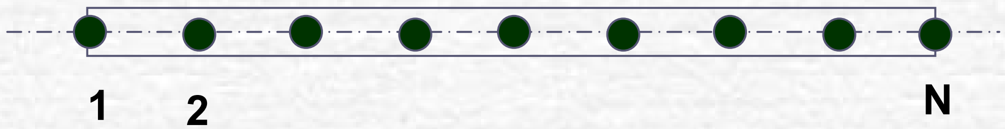
Reasons due to which Errors occur:

- Stability.
- Consistency.
- Conservedness and Boundedness.

Principle of discretization method

- Finite difference & Finite volume approaches

  - Continuous problem domain is “discretized” เพื่อให้ตัวแปรตาม (Dependent variabiles) ที่พิจารณาเกิดขึ้นเฉพาะที่จุดที่ดิสคริท (Discrete point)



- สมการทางพีชคณิตของ PDEs

  - อนุพันธ์ถูกแสดงในรูปของผลต่าง (Difference)

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{u(x+\Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$

Principle of discretization method

- ธรรมชาติของคำตอบของระบบสมการพีชคณิตขึ้นกับรูปสมการ

Ex. 1-D heat transfer problem

$$\frac{1}{\alpha}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

- Equilibrium problems โดยปกติจะต้องทำการแก้สมการทุกสมการพร้อมกันตลอดทั้งโดเมนที่ระบุเงื่อนไขขอบเขต (Boundary conditions) ที่แน่นอนอันหนึ่งๆ

ใช้ Forward difference สำหรับอนุพันธ์เทียบกับเวลา (t = nΔt) และใช้ Central difference สำหรับอนุพันธ์อันดับสอง

$$\underbrace{\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}}_{\textbf{PDE}} = \underbrace{\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} - \alpha\frac{\left(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n\right)}{\left(\Delta x\right)^2}}_{\textbf{FDE}} + \underbrace{\left[-\left.\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right|_{n,i}\frac{\Delta t}{2} + \alpha\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{n,i}\frac{\left(\Delta x\right)^2}{12} + \cdots\right]}_{\textbf{T.E.}}$$

Simple explicit scheme for heat equation

$$\frac{\partial T}{\partial t}-\alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=\frac{T_i^{n+1}-T_i^n}{\Delta t}-\alpha\frac{\left(T_{i+1}^n-2T_i^n+T_{i-1}^n\right)}{\left(\Delta x\right)^2}+\left[-\left.\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right|_{n,i}\frac{\Delta t}{2}+\alpha\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{n,i}\frac{\left(\Delta x\right)^2}{12}+\cdots\right]$$

- One unknown ปรากฏในสมการ FDE
- Marching problem $\longrightarrow$ เพื่อหาค่า T ในแต่ละเวลา ดังนั้น ต้องการ Initial condition สำหรับ T
- ค่า Truncation error สามารถหาได้จาก PDE – FDE = T.E. ในกรณีคือ

$$T.E.\approx O\left(\Delta t\right)+O\left[\left(\Delta x\right)^2\right]$$

- ถ้าด้านขวาสมการเขียนอยู่ในรูป n+1 แล้วจะเปลี่ยนเป็น Implicit scheme และจะเกิด unknown 3 ค่า

Round-Off and Discretization Errors

❑ Round-off error

- เกิดเนื่องจากจำนวนทศนิยมที่ใช้สำหรับคำนวณหาคำตอบ
- ในบางครั้งขนาดของ Round-off error จะเป็นสัดส่วนกับจำนวนของกริด (Grid points) : การใช้กริดละเอียดมากจะลด T.E. แต่จะทำให้ Round-off error มากขึ้น

❑ Discretization error

- เป็นค่าผิดพลาดในคำตอบอันเนื่องจากการใช้ Discrete method แทน analytical method

Consistency

- Consistency เกี่ยวข้องกับ การใช้รูปประมาณของ FDE
- การใช้ FDE แทน PDE มีความสอดคล้องตรงกัน ถ้าเราสามารถแสดงได้ว่าความแตกต่างระหว่าง PDE และ FDE หายเป็นศูนย์เมื่อเราใช้กริดละเอียดมากๆ

$$\lim_{mesh \to 0}\left(PDE - FDE\right) = \lim_{mesh \to 0}\left(T.E.\right) = 0$$

เช่น สมการ DuFort-Frankel equation

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{2\Delta t} = \alpha \frac{\left(u_{i+1}^{n} - u_i^{n+1} - u_i^{n-1} + T_{i-1}^{n}\right)}{\left(\Delta x\right)^2} + \left[\frac{\alpha}{12}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{n,i}\left(\Delta x\right)^2 - \alpha\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_{n,i}\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 - \frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right|_{n,i}\left(\Delta t\right)^2\right]$$

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \to 0}\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right) = 0$$

Comparison between explicit and implicit approaches

	Explicit	Implicit
Advantages	- Simple to set up and program	- Stability can be maintained over much larger values of Δt
Disadvantages	- For a Δx, Δt must be less than some limit	-More complicated to set up and program - Large matrix manipulations - Truncation error is large

Round-Off and Discretization Errors

$$Round\ off\ \ error = \varepsilon = N - D$$

$$Discretization\ error = A - D$$

where A = analytical solution of PDE

D = exact solution of FDE

N = numerical solution from a real computer with finite accuracy

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \longrightarrow \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{\left(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n\right)}{\left(\Delta x\right)^2}$$

$$N = D + \varepsilon \longrightarrow \frac{D_i^{n+1} + \varepsilon_i^{n+1} - D_i^n - \varepsilon_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{D_{i+1}^n + \varepsilon_{i+1}^n - 2D_i^n - 2\varepsilon_i^n + D_{i-1}^n + \varepsilon_{i-1}^n}{\left(\Delta x\right)^2} \quad \text{(a)}$$

$$\frac{D_i^{n+1} - D_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{D_{i+1}^n - 2D_i^n + D_{i-1}^n}{\left(\Delta x\right)^2} \quad \text{(b)}$$

(a) – (b)

$$\frac{\varepsilon_i^{n+1} - \varepsilon_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{\varepsilon_{i+1}^n - 2\varepsilon_i^n + \varepsilon_{i-1}^n}{\left(\Delta x\right)^2}$$

Errors and unstable

$$\frac{\varepsilon_i^{n+1} - \varepsilon_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{\varepsilon_{i+1}^n - 2\varepsilon_i^n + \varepsilon_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

- คำตอบจะ stable ถ้า ε แต่ละตัวมีค่าลดลงระหว่าง *n* ไป *n+1*
- ดังนั้นสำหรับคำตอบที่ Stable

$$\left| \frac{\varepsilon_i^{n+1}}{\varepsilon_i^n} \right| \le 1$$

Error analysis with Fourier series

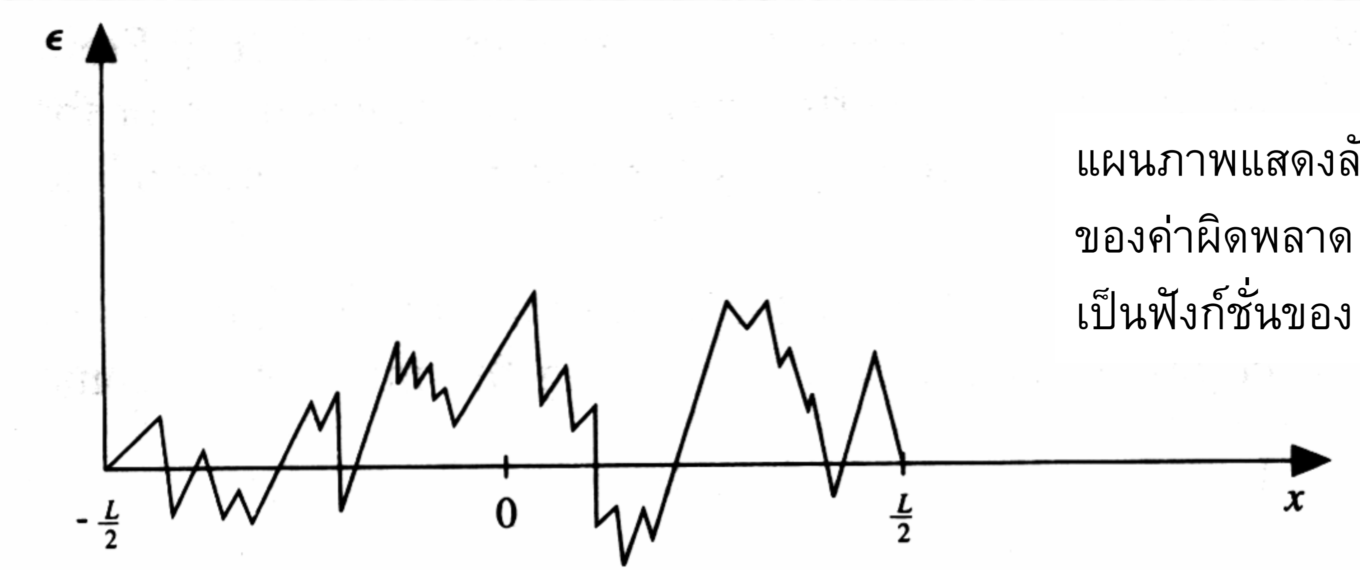
- จาก random variation of ε เทียบกับ x

$$\varepsilon(x) = \sum_m A_m e^{ik_m x} \qquad \text{(c)}$$

  - คำตอบทั่วไปของสมการ (c) เขียนได้เป็น

$$e^{ik_m x} = \cos k_m x + i \sin k_m x \qquad m = 1, 2, 3, \ldots$$

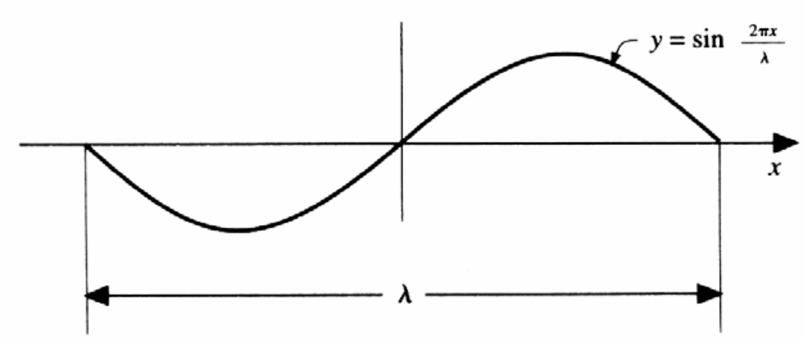
ที่ซึ่ง k_m คือ wave number และ ค่า real part ของสมการ แสดง ค่า error



แผนภาพแสดงลักษณะความผันแปรของค่าผิดพลาด (Round off error) ที่เป็นฟังก์ชั่นของ x

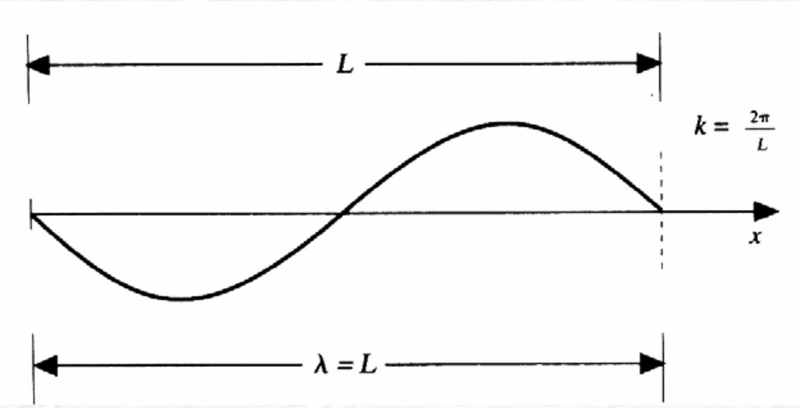
กำหนดให้ λ คือ wave length

$$y = \sin \frac{2\pi x}{\lambda}$$

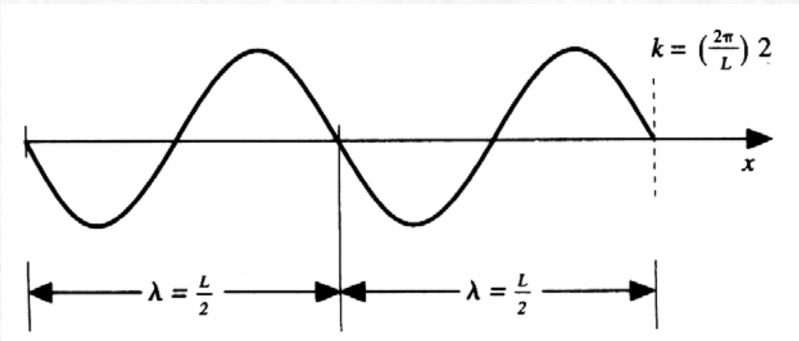


$$y = \sin k_m x \quad \text{where} \quad k_m = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Sine function



Wave length คือ L



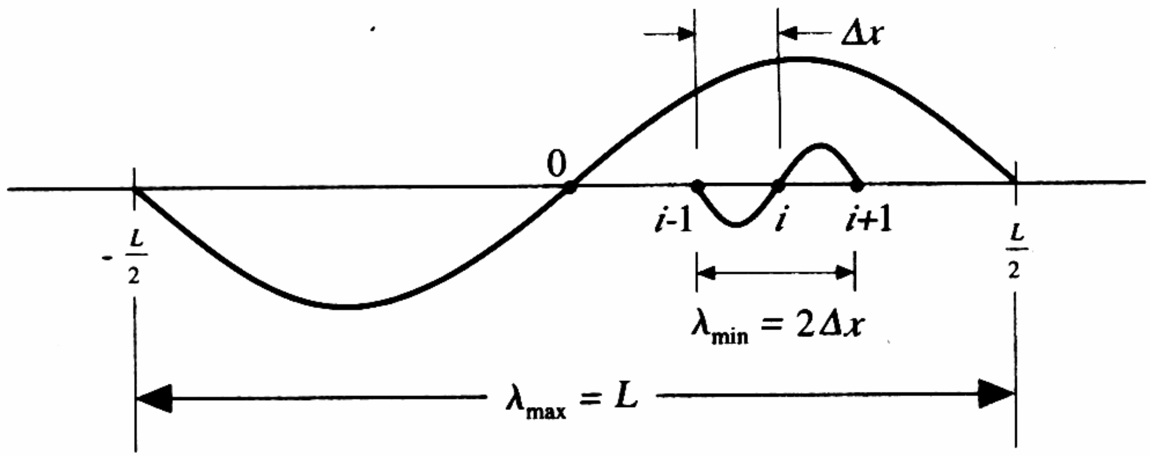
Wave length คือ L/2

(highest-order harmonic allowable)

$$\lambda_{\max} = L$$

$$\lambda_{\min} = 2\Delta x \longrightarrow k_m = \frac{2\pi}{2L/N} = \frac{2\pi}{L}\frac{N}{2} \longrightarrow \varepsilon(x) = \sum_{m=1}^{N/2} A_m e^{ik_m x}$$

$$\Delta x = L/N$$



Error มีแนวโน้มที่จะเพิ่มหรือลดอย่าง exponential ตามเวลา

$$\varepsilon(x,t) = \sum_{m=1}^{N/2} e^{at} e^{ik_m x}$$

พิจารณา เทอมหนึ่งของ Fourier series

$$\varepsilon_m\left(x,t\right)=e^{at}e^{ik_m x}$$

พิจารณาสมการ

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$\frac{e^{a\left(t+\Delta t\right)}e^{ik_m x}-e^{at}e^{ik_m x}}{\alpha\Delta t}=\frac{e^{at}e^{ik_m\left(x+\Delta x\right)}-2e^{at}e^{ik_m x}+e^{at}e^{ik_m\left(x-\Delta x\right)}}{\left(\Delta x\right)^2} \tag{d}$$

หารสมการ (d) ด้วย $e^{at}e^{ik_m x}$

$$\frac{e^{a\Delta t}-1}{\alpha\Delta t}=\frac{e^{ik_m\Delta x}-2+e^{-ik_m\Delta x}}{\left(\Delta x\right)^2}$$

$$e^{a\Delta t}=1+\frac{\alpha\Delta t}{\left(\Delta x\right)^2}\left(e^{ik_m\Delta x}+e^{-ik_m\Delta x}-2\right)$$

จากความสัมพันธ์

$$\cos\left(k_m \Delta x\right) = \frac{e^{ik_m \Delta x} + e^{-ik_m \Delta x}}{2}$$

ดังนั้น

$$e^{a\Delta t} = 1 + \frac{\alpha \Delta t}{\left(\Delta x\right)^2}\left(e^{ik_m \Delta x} + e^{-ik_m \Delta x} - 2\right) = 1 + \frac{2\alpha \Delta t}{\left(\Delta x\right)^2}\left[\cos\left(k_m \Delta x\right) - 1\right]$$

จาก Trigonometric identity

$$\sin^2 \frac{k_m \Delta x}{2} = \frac{1 - \cos\left(k_m \Delta x\right)}{2}$$

ดังนั้น

$$e^{a\Delta t} = 1 - \frac{4\alpha \Delta t}{\left(\Delta x\right)^2}\sin^2 \frac{k_m \Delta x}{2}$$

$$\frac{\varepsilon_i^{n+1}}{\varepsilon_i^n} = \frac{e^{a\left(t+\Delta t\right)} e^{ik_m x}}{e^{at} e^{ik_m x}} = e^{a\Delta t}$$

ดังนั้น

$$\left|\frac{\varepsilon_i^{n+1}}{\varepsilon_i^n}\right| = \left|e^{a\Delta t}\right| = \left|1 - \frac{4\alpha \Delta t}{\left(\Delta x\right)^2}\sin^2 \frac{k_m \Delta x}{2}\right| \le 1$$

กรณีที่ 1

$$1-\frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{k_m\Delta x}{2}\le 1$$

ดังนั้น

$$\frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{k_m\Delta x}{2}\ge 0$$

กรณีที่ 2

เนื่องจาก $\frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2}$ มีค่าเป็นบวกเสมอ

$$1-\frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{k_m\Delta x}{2}\ge -1$$

ดังนั้น

$$\frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{k_m\Delta x}{2}-1\le 1$$

$$\boxed{\frac{\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2}\le\frac{1}{2}}$$

Example

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

ซึ่ง c คือ wave speed

Solution ของสมการเขียนได้เป็น $u\left(x - ct\right) = const$

Solution ต้องการข้อมูลเริ่มต้น (Initial data) ที่ t = 0

Lax (1954) เสนอการหาคำตอบในรูป

$$u_i^{n+1} = \frac{u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n}}{2} - c\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\frac{u_{i+1}^{n} - u_{i-1}^{n}}{2}\right)$$

เทอมแรกทางขวาแสดงถึงค่าเฉลี่ยของตัวไม่รู้ค่า (Unknown) ณ เวลาก่อน ขณะที่เทอมที่สองเป็นผลต่างชองอนุพันธ์ของระยะ (Spatial derivative)

Example (ต่อ)

โดยการใช้ Fourier analysis หรือ Von Neumann stability analysis

$$u_i^{n+1} = e^{at} e^{ik_m x}$$

$$u_i^{n+1} = \frac{u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n}}{2} - c\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\frac{u_{i+1}^{n} - u_{i-1}^{n}}{2}\right)$$

$$e^{a(t+\Delta t)} e^{ik_m x} = \frac{e^{at} e^{ik_m(x+\Delta x)} + e^{at} e^{ik_m(x-\Delta x)}}{2} - \upsilon\left(\frac{e^{at} e^{ik_m(x+\Delta x)} - e^{at} e^{ik_m(x-\Delta x)}}{2}\right)$$

ที่ซึ่ง $\upsilon = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$

$$e^{a\Delta t} = \frac{e^{ik_m(\Delta x)} + e^{ik_m(-\Delta x)}}{2} - \upsilon\left(\frac{e^{ik_m(\Delta x)} - e^{ik_m(-\Delta x)}}{2}\right)$$

$$e^{a\Delta t} = \cos\beta - \upsilon i \sin\beta$$

ที่ซึ่ง $\beta = ik_m \Delta x$

Example (ต่อ)

Stability เกิดขึ้นเมื่อ

$$|G| \leq 1$$

$$|\cos\beta - (\upsilon \sin\beta) i| \leq 1$$

$$\upsilon = c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$ เรียก Courant number

เนื่องจากค่ากำลังสองค่า Absolute ของค่าจำนวนเชิงซ้อน (Complex number) คือ ผลรวมของค่ากำลังสองของส่วนจำนวนจริงและส่วนจำนวนเชิงซ้อน

ดังนั้น Stability จะเกิดขึ้นเมื่อ $|\upsilon| \leq 1$

เงื่อนไขนี้มีชื่อเรียกว่า Courant-Friedrichs-Levy (CFL) conditon