Numerische Grundlagen: Finite Differenzen, Finite Elemente, Finite Volumen

S. Roller[1], M. Ferch[2], C.-D. Munz[2], M. Dumbser[2]

Universität Stuttgart
[1]Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)
www.hlrs.de
[2]Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG)
www.iag.uni-stuttgart.de

Inhalt

Zentrales Thema:

Numerisches Lösen von partiellen Differentialgleichungen

1. Differenzen-Verfahren
2. Finite-Volumen-Verfahren
3. Finite-Element-Verfahren
4. Diskussion: Explizite oder implizite Verfahren

Differenzen-Verfahren (Finite Differences Schemes – FD)

Idee:

$$u'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

Ableitung Differenzenquotient

Ersetze die Ableitungen durch Differenzenquotienten

partielle Differenzialgleichung =>
System von Differenzengleichungen in speziellen Punkten

Differenzen-Verfahren - Ablauf

1. Schritt: Diskretisierung des Rechengebietes, Gitter
2. Schritt: Auswahl der Differenzenquotienten, Ersetzen der Ableitungen durch Differenzen
3. Schritt: Ordnen der Differenzengleichungen
4. Schritt: Lösen der Differenzengleichungen, lineares Gleichungssystem

Schritt 1: Diskretisierung des Rechengebiets

Rechengebiet: Intervall $I = [a, b]$

Diskretisierung: Gitterpunkte: $x_i = a + i\Delta x, \quad i = 0, \ldots, n$

Äquidistantes Gitter: Gitterschrittweite: $\Delta x = \dfrac{b-a}{n}$

n+1: Anzahl der Gitterpunkte

n: Anzahl der Gitterintervalle

Schritt 2: Differenzenquotienten

Taylorentwicklungen

(1) $$u(x_{i-1}) = u(x_i) - \Delta x\, u_x(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx}(x_i) - \frac{\Delta x^3}{6} u_{xxx}(x_i) + - \ldots$$

(2) $$u(x_{i+1}) = u(x_i) + \Delta x\, u_x(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx}(x_i) + \frac{\Delta x^3}{6} u_{xxx}(x_i) + \ldots$$

Differenzenquotient für Ableitung: (2) – (1)

$$u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}) = 2\Delta x u_x(x_i) + \frac{2\Delta x^3}{6} u_{xxx}(x_i) + O(\Delta x^5)$$

$$\frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})}{2\Delta x} = u_x(x_i) + \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx}(x_i) + O(\Delta x^4)$$

Schritt 2: Differenzenquotienten

$$\frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})}{2\Delta x} = u_x(x_i) + O(\Delta x^2)$$ zentraler Differenzenquotient 2.Ordnung

$$\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{\Delta x} = u_x(x_i) + O(\Delta x)$$ rechtsseitiger Differenzenquotient 1.Ordnung

$$\frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{\Delta x} = u_x(x_i) + O(\Delta x)$$ linksseitiger Differenzenquotient 1.Ordnung

$$\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} = u_{xx}(x_i) + O(\Delta x^2)$$ zentraler Differenzenquotient, 2.Ordnung für 2. Ableitung

- Differenzenquotienten höherer Ordnung mehr als 3 Punkte
- Differenzenquotienten unterschiedliche Ordnung, Bauart
- Nicht-äquidistant: Formeln komplizierter

Symmetrische Formeln für das einfache FD-Verfahren

1. Symmetrische Formeln

$k =$	i	-3	-2	-1	0	$+1$	$+2$	$+3$		R
$y_i' =$	$\frac{1}{2h}$ (			-1		$+1$		)	y_k^*	$-\frac{h^2}{6} y'''$
$=$	$\frac{1}{12h}$ (		$+1$	-8		$+8$	-1	)		$+\frac{h^4}{30} y^{V}$
$=$	$\frac{1}{60h}$ (	-1	$+9$	-45		$+45$	-9	$+1$)		$-\frac{h^6}{140} y^{VII}$
$y_i'' =$	$\frac{1}{h^2}$ (			$+1$	-2	$+1$		)	$*y_k$	$-\frac{h^2}{12} y^{IV}$
$=$	$\frac{1}{12h^2}$ (		-1	$+16$	-30	$+16$	-1	)		$+\frac{h^4}{90} y^{VI}$
$=$	$\frac{1}{180h^2}$ (	$+2$	-27	$+270$	-490	$+270$	-27	$+2$)		$-\frac{h^6}{560} y^{VIII}$
$y_i''' =$	$\frac{1}{2h^3}$ (		-1	$+2$		-2	$+1$	)	$*y_k$	$-\frac{h^2}{4} y^{V}$
$=$	$\frac{1}{8h^3}$ (	$+1$	-8	$+13$		-13	$+8$	-1)		$+\frac{7h^4}{120} y^{VII}$
$y_i^{IV} =$	$\frac{1}{h^4}$ (		$+1$	-4	$+6$	-4	$+1$	)	$*y_k$	$-\frac{h^2}{6} y^{VI}$
$=$	$\frac{1}{6h^4}$ (	-1	$+12$	-39	$+56$	-39	$+12$	-1)		$+\frac{7h^4}{240} y^{VII}$

Unsymmetrische Formeln für das einfache FD-Verfahren

2. Unsymmetrische Formeln (Auswahl)

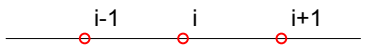
$k =$	i	-2	-1	0	$+1$	$+2$	$+3$	$+4$		R
$y_i' =$	$\frac{1}{h}$ (		-1		$+1$			)	$*y_k -$	$\frac{h}{2}\, y''$
$=$	$\frac{1}{2h}$ (		-3		$+4$	-1		)	$+$	$\frac{h^2}{3}\, y'''$
$=$	$\frac{1}{12h}$ (		-3	-10	$+18$	-6	$+1$	)	$-$	$\frac{h^4}{20}\, y^{V}$
$=$	$\frac{1}{60h}$ (	$+2$	-24	-35	$+80$	-30	$+8$	-1)	$+$	$\frac{h^6}{105}\, y^{VII}$
$y_i'' =$	$\frac{1}{h^2}$ (			$+2$	-5	$+4$	-1	)	$*y_k +$	$\frac{11h^2}{12}\, y^{IV}$
$=$	$\frac{1}{12h^2}$ (		$+11$	-20	$+6$	$+4$	-1	)	$+$	$\frac{h^3}{12}\, y^{V}$
$=$	$\frac{1}{180h^2}$ (	-13	$+228$	-420	$+200$	$+15$	-12	$+2$)	$-$	$\frac{h^5}{90}\, y^{VII}$
$y_i''' =$	$\frac{1}{2h^3}$ (		-3	$+10$	-12	$+6$	-1	)	$*y_k +$	$\frac{h^2}{4}\, y^{V}$
$=$	$\frac{1}{8h^3}$ (	-1	-8	$+35$	-48	$+29$	-8	$+1$)	$-$	$\frac{h^4}{15}\, y^{VII}$

Schritt 2: Einsetzen der Differenzen in die Gleichung

Beispiel: Lineares Randwertproblem

$$u_{xx} = r(x) - q(x)u - p(x)u_x, \quad u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + p(x_i)\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + q(x_i)u_i = r(x_i), \quad i = 1, \dots, n-1$$



u_i Näherungswert bei x_i

3 Punktestern

Schritt 3: Ordnen der Differenzengleichungen

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + p(x_i)\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + q(x_i)u_i = r(x_i)$$

$$\left(\frac{1}{\Delta x^2} - \frac{p(x_i)}{2\Delta x}\right)u_{i-1} - \left(\frac{2}{\Delta x^2} - q(x_i)\right)u_i + \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{p(x_i)}{2\Delta x}\right)u_{i+1} = r(x_i)$$

Lineares Gleichungssystem, gilt an allen inneren Gitterpunkten:

$$i = 1, \dots, n-1$$

Sonderbehandlung der äußeren Punkte: Einarbeitung der Randwerte

Schritt 4: Lineares Gleichungssystem

$$\underbrace{\left(\frac{1}{\Delta x^2} - \frac{p(x_i)}{2\Delta x}\right)}_{=:\, a_i} u_{i-1} + \underbrace{\left(-\frac{2}{\Delta x^2} + q(x_i)\right)}_{=:\, b_i} u_i + \underbrace{\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{p(x_i)}{2\Delta x}\right)}_{=:\, c_i} u_{i+1} = r(x_i)$$

$$\Rightarrow \quad a_i\, u_{i-1} + b_i\, u_i + c_i\, u_{i+1} = r(x_i), \quad i = 2, \dots, n-2$$

bekannter Randwert

Rand links: $b_1\, u_1 + c_1\, u_2 = r(x_1) - a_1\, u_0$

Rand rechts: $a_{n-1}\, u_{n-2} + b_{n-1}\, u_{n-1} = r(x_n) - c_{n-1}\, u_n$

Schritt 4: Tridiagonales Gleichungssystem

$$
\begin{aligned}
b_1\, u_1 + c_1\, u_2 &= r(x_1) - a_1\, u_0 \\
a_2\, u_1 + b_2\, u_2 + c_2\, u_3 &= r(x_2) \\
a_3\, u_2 + b_3\, u_3 + c_3\, u_4 &= r(x_3) \\
\vdots \qquad & \vdots \\
a_{n-1}\, u_{n-2} + b_{n-1}\, u_{n-1} &= r(x_n) - c_{n-1}\, u_n
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{A\vec{u}_h = r_h}$$

Schritt 4: Form des Gleichungssystems $A\vec{u}_h = r_h$

tridiagonales LGS

$$
A = \begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & \\
 & & a_4 & b_4 & c_4 & \\
 & & & a_5 & b_5 & c_5 \\
 & & & & a_6 & b_6
\end{pmatrix}
\qquad
\vec{u}_h = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix}
\qquad
\vec{r}_h = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \\ r_6 \end{pmatrix}
$$

1.1 Differenzen-Verfahren für die Poisson-Gleichung

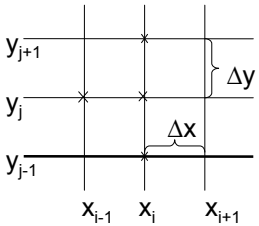
$u_{xx}+u_{yy}=f$

Rechengebiet: [a, b] x [c, d]

Randwerte (Dirichlet):

$u(a,y)=u_a(y)$ für y € [c,d]
$u(b,y)=u_b(y)$
$u(x,c)=u_c(x)$ für x € [a,b]
$u(x,d)=u_d(x)$

1. Schritt: Diskretisierung des Rechengebiets



äquidistante Schrittweiten

$$\Delta x = \frac{b-a}{n_1}, \qquad \Delta y = \frac{d-c}{n_2}$$

Gitterpunkte

$$x_i = a + i\Delta x, \quad i = 0,\dots,n_1$$

$$y_j = c + j\Delta y, \quad j = 0,\dots,n_2$$

2. Schritt: Differenzenquotienten

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad \text{appr.} \quad u_{xx}(x_i, y_j)$$

$$\frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \quad \text{appr.} \quad u_{yy}(x_i, y_j)$$

Ersetzen der Ableitungen in Poissongleichung durch Differenzen ergibt

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}$$

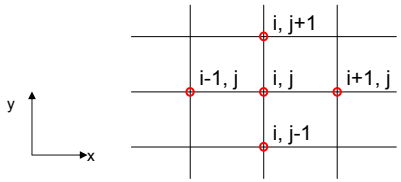
für jeden inneren Gitterpunkt x_i, y_j

3. Schritt: Ordnen der Differenzengleichungen

Gleichung an jedem inneren Gitterpunkt

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} = f(x_i, y_j)$$

$$i = 1, \dots, n_1 - 1, \; j = 1, \dots, n_2 - 1$$



5 Punktestern

$P_{i,j} = (x_i, y_j)$

$u_{i,j} \approx u(x_i, y_j)$

Näherung

exakter Wert

Aufbau des Gleichungssystems

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} = f(x_i, y_j)$$

$$i = 1, \dots, n_1 - 1, \; j = 1, \dots, n_2 - 1$$

mit Sonderbehandlung des Randes ergibt sich

$$a_{i,j} u_{i,j-1} + b_{i,j} u_{i-1,j} + c_{i,j} u_{i,j} + d_{i,j} u_{i+1,j} + e_{i,j} u_{i,j+1} = \bar{f}_{i,j}$$

$$i = 1, \dots, n_1 - 1, \; j = 1, \dots, n_2 - 1$$

Form des Gleichungssystems

$$a_{i,j} u_{i,j-1} + b_{i,j} u_{i-1,j} + c_{i,j} u_{i,j} + d_{i,j} u_{i+1,j} + e_{i,j} u_{i,j+1} = \bar{f}_{i,j} \quad \text{für} \quad i = 1, \dots, n_1 - 1, \; j = 1, \dots, n_2 - 1$$

$$u = \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ u_{31} \\ u_{41} \\ u_{12} \\ u_{22} \\ u_{32} \\ u_{42} \\ u_{13} \\ u_{23} \\ u_{33} \\ u_{43} \\ u_{14} \\ u_{24} \\ u_{34} \\ u_{44} \end{pmatrix} \qquad A = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
c_{11} & d_{11} & & & e_{11} & & & & & & & & & & & \\
b_{21} & c_{21} & d_{21} & & & e_{21} & & & & & & & & & & \\
 & b_{31} & c_{31} & d_{31} & & & e_{31} & & & & & & & & & \\
 & & b_{41} & c_{41} & & & & e_{41} & & & & & & & & \\
\hline
a_{12} & & & & c_{12} & d_{12} & & & e_{12} & & & & & & & \\
 & a_{22} & & & b_{22} & c_{22} & d_{22} & & & e_{22} & & & & & & \\
 & & a_{32} & & & b_{32} & c_{32} & d_{32} & & & e_{32} & & & & & \\
 & & & a_{42} & & & b_{42} & c_{42} & & & & e_{42} & & & & \\
\hline
 & & & & a_{13} & & & & c_{13} & d_{13} & & & e_{13} & & & \\
 & & & & & a_{23} & & & b_{23} & c_{23} & d_{23} & & & e_{23} & & \\
 & & & & & & a_{33} & & & b_{33} & c_{33} & d_{33} & & & e_{33} & \\
 & & & & & & & a_{43} & & & b_{43} & c_{43} & & & & e_{43} \\
\hline
 & & & & & & & & a_{14} & & & & c_{14} & d_{14} & & \\
 & & & & & & & & & a_{24} & & & b_{24} & c_{24} & d_{24} & \\
 & & & & & & & & & & a_{34} & & & b_{34} & c_{34} & d_{34} \\
 & & & & & & & & & & & a_{44} & & & b_{44} & c_{44}
\end{array}\right)$$

pentadiagonales LGS

4. Schritt: Lösen des Gleichungssystems

Lösungsverfahren

Gauß-Algorithmus ?

ungünstig – rechnet mit allen Nullen

sinnvoller: Iterationsverfahren

löst LGS auch nur bis zur vorgegebenen Genauigkeit

Iterative Verfahren zur Lösung schwach besetzter großer Gleichungssysteme

- **Klassische Iterationsverfahren: Jacobi-, Gauß-Seidel-, SOR-Verfahren**, Problem ist das schlecht-konditionierte System für kleine Schrittweiten. Wird nur auf kleine Systeme angewandt.
- **CG-Verfahren (Methode der konjugierten Gradienten)** geeignet für symmetrische und positiv-definite Matrizen
- **Methode der verallgemeinerten Residuen, Krylov-Unterraum-Methoden** Verallgemeinerung des CG-Verfahrens: GMRES, BIGSTAB
- **Mehrgitterverfahren** Nachteil der klassischen Interationsverfahren wird korrigiert, indem diese auf verschiedenen Gittern angewandt und kombiniert werden. Sehr schnell, aber auch Parameter abhängig

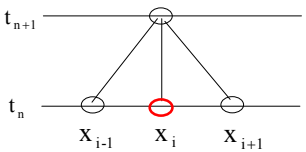
1.2 Differenzen-Verfahren für die Wärmeleitungsgleichung

Wärmeleitungsgleichung: $u_t = \kappa u_{xx}$

Explizites Verfahren $$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \kappa \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

vorwärts zentraler Differenzenquotient

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

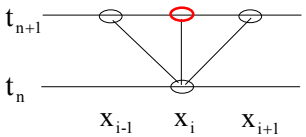


Differenzenstern

Implizite Verfahren I

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \kappa \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

rückwärts zentraler Differenzenquotient



Differenzenstern

Lineares Gleichungssystem

$$-\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} u_{i-1}^{n+1} + \left(1 + 2\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}\right) u_i^{n+1} - \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1}^{n+1} = u_i^n, \quad i = 1, \ldots, n_1 - 1$$

tridiagonales Gleichungssystem

Implizite Verfahren II

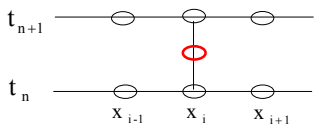
$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t}=\kappa\frac{u_{i+1}^{n+1}-2u_i^{n+1}-u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

Vollimplizites Verfahren

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t}=\kappa\frac{u_{i+1}^{n+1/2}-2u_i^{n+1/2}-u_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta x^2}$$

Crank-Nicolsen Verfahren
zentrale Differenzen in der Zeit

$$u_i^{n+1/2}=\frac{1}{2}\left(u_i^n+u_i^{n+1}\right)$$



Differenzenstern

Beurteilung eines Verfahrens

Konsistenz: Aussage über die Güte des Verfahrens – Konsistenzordnung, Fehler in einem Schritt

Stabilität: Aussage über die Robustheit bei Störungen, verschiedene Stabilitäts-kriterien

Konvergenz: Konvergenz gegen die exakte Lösung, Konvergenzordnung

Benchmark-Probleme: praktischer Test der Verfahren

Konsistenz

Konsistenz: Fehler in einem Schritt ⇔ Fehler beim Einsetzen der exakten Lösung in das Näherungsverfahren

$$\frac{u(x_{i+1})-u(x_{i-1})}{2\Delta x}=u'(x_i)+O(\Delta x^2)$$

2. Ordnung

Beispiel: Explizit in der Zeit, zentral im Raum

$$O(\Delta t,\Delta x^2)$$

1. Ordnung in der Zeit

2. Ordnung im Raum

Stabilität

Ein Verfahren für den praktischen Einsatz muss stabil sein.

Unterschiedliche Probleme erfordern unterschiedliche Stabilitätseigenschaften

Beispiel: Viskose Strömung – kein Stabilitätsproblem
turbulente Strömungen – Verfahren benötigt inhärente Stabilität
Stoßwellen – keine Oszillationen an starken Gradienten

bedingt stabil: Stabilität nur unter einer Bedingung an die Schrittweiten – Zeitschrittweite

bedingungslos stabil: Ohne Bedingung

Differenzenverfahren für parabolische DGL Zusammenfassung

Explizite Verfahren

Das explizite Verfahren $O(\Delta t, \Delta x^2)$ ist bedingt stabil unter der Bedingung

$$\kappa \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \le \frac{1}{2^d} \quad \Rightarrow \Delta t \sim \Delta x^2$$

Die Stabilitätsbedingung führt somit auf die praktische Genauigkeit $O(\Delta x^2)$ und ist damit ein Verfahren zweiter Ordnung in Raum und Zeit.

Implizite Verfahren

Das implizite Verfahren $O(\Delta t, \Delta x^2)$ oder das Crank-Nicolson-Verfahren $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ sind bedingungslos stabil.

1.3 Differenzenverfahren für hyperbolische Gleichungen

$$u_t + a u_x = 0 \;, \quad a \in \Re$$ lineare Transportgleichung

Explizite Differenzenverfahren

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0 \qquad O\left(\Delta t, \Delta x^2\right)$$

oder

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

Stabilität nach der von Neumannschen Analyse:

Bedingungslos instabil !!!!

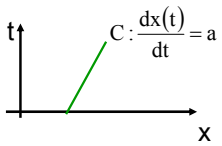
Einseitige Differenzen

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} = 0$$ linksseitige Differenzen

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0$$ rechtsseitige Differenzen

Welches dieser Verfahren ist stabil ?

Fall a>0:



physikalischer Abhängigkeitsbereich

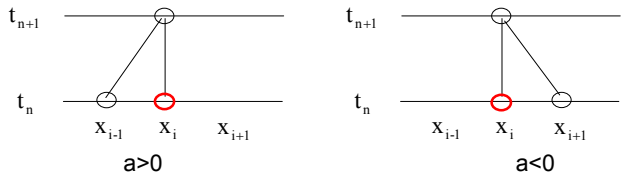
Upwind – Verfahren oder CIR - Verfahren

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} \begin{cases} u_i^n - u_{i-1}^n & \text{für } a > 0 \\ u_{i+1}^n - u_i^n & \text{für } a < 0 \end{cases}$$

Courant, Isaacson, Rees - CIR

Upwind-Verfahren:

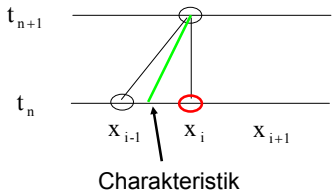
Differenzenbildung in die Richtung, aus der die Information kommt
Die Richtung der Charakteristiken geht in das numerische Verfahren ein.



Upwind – Verfahren oder CIR - Verfahren

von Neumannsche Stabilitätsanalyse: Das CIR-Verfahren ist bedingt stabil unter der Stabilitätsbedingung:

$$\boxed{|a|\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1 \qquad \text{CFL-Bedingung}}$$



Der numerische Abhängigkeitsbereich muss den physikalischen überdecken

Lax-Wendroff-Verfahren

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_{i+1/2}^{n+1/2}-u_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} = 0$$

2. Ordnung in Raum und Zeit

Ansatz: zentrale Differenzen

Prädiktor – Korrektor – Ansatz:

Prädiktor: Berechne die Hilfswerte $u_{i+1/2}^{n+1/2}$

$$u\left(x, t+\tfrac{\Delta t}{2}\right) = u(x,t) + \frac{\Delta t}{2}\underbrace{u_t(x,t)}_{=-au_x} + \frac{\Delta t^2}{8}u_{tt}(x,t) + \ldots$$

$x = x_{i+1/2}$:

$$u(x_{i+1/2}, t_{n+1/2}) = u(x_{i+1/2}, t_n) - \frac{\Delta t}{2}a u_x(x_{i+1/2}, t_n) + \ldots$$

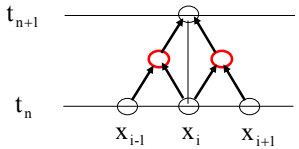
$$u_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}\left(u_i^n + u_{i+1}^n\right) - \frac{\Delta t}{2}a\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} + O\left(\Delta t^2, \Delta x^2, \Delta t\Delta x\right)$$

Lax – Wendroff - Verfahren

$$u_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}\left(u_i^n + u_{i+1}^n\right) - a\frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(u_{i+1}^n - u_i^n\right), \quad i = 0, 1, \ldots$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}\right), \quad i = 0, 1, \ldots$$

Das Lax-Wendroff-Verfahren ist bedingt stabil unter der CFL-Bedingung: $|a|\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$



Konsistenz: $O\left(\Delta t^2, \Delta x^2\right)$

Implizite Verfahren

Vollimplizit

LGS, bedingungslos stabil

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_{i+1}^{n+1}-u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0$$

Crank – Nicolson - Verfahren

LGS, bedingungslos stabil

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} + a\frac{u_{i+1}^{n+1/2}-u_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta x} = 0$$

Systeme von hyperbolischen Evolutionsgleichungen

$$u_t + Au_x = 0$$

Vollimplizit, Crank – Nicolson, Lax – Wendroff – Verfahren lassen sich direkt übertragen

z.B. Crank - Nicolson

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + A\frac{u_{i+1}^{n+1/2} - u_{i-1}^{n+1/2}}{2\Delta x} = 0$$

$$u_i^{n+1/2} = \frac{1}{2}\left(u_i^{n+1} + u_i^n\right)$$

2. Finite-Elemente-Verfahren

Anderer Ansatz: Näherungsfunktion ist eine kontinuierliche Funktion:

$$\tilde{u}(x, t) = \sum_{i=1}^{N} c_i(t)\,\phi_i(x)$$

Freiheitsgrade Basisfunktionen

Die Freiheitsgrade werden nun so bestimmt, dass sich eine möglichst gute numerische Approximation ergibt.

Basisfunktionen

Möglichkeit – Mononome: 1, x, x_2, x_3, x_4, …

Besser: lokale Funktionen – stückweise Polynome

$$\phi_i(x) = \begin{cases} k_1 + k_2 x & \text{für } x \in C_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

i-tes Gitterintervall

Berechnung der Freiheitsgrade I

Ritzsches Verfahren

- Zu der Differentialgleichung existiert ein Variationsproblem
- Einsetzen der Näherungslösung und Lösen des Variationsproblems

Kollokationsverfahren

- Die Näherungslösung erfüllt das Ausgangsproblem an gewissen Punkten exakt
- Anzahl der Punkte = Anzahl der Freiheitsgrade

Methode der gewichteten Residuen – Galerkin-Verfahren- Least Squares

- Näherungslösung wird eingesetzt und das Residuum minimiert.

Berechnung der Freiheitsgrade II

Ausgangsproblem: Lu=f

Residuum: R=Lu - f

u exakte Lösung ➡ R=0

Einsetzen der Näherungslösung: $R_h = Lu_h - f$

Kriterien für die Bestimmung der Freiheitsgrade:

$$\int_V R_h \phi_i dx = 0 \quad \text{für} \quad i = 1, 2, ...$$

Galerkin-Verfahren

Berechnung der Freiheitsgrade III

$$\int_V R_h^2 dx = \min \quad \text{für} \quad i = 1, 2, ...$$

Methode der kleinsten Quadrate

Diese Ansätze führen auf lineare Gleichungssysteme.

Lokale Basisfunktionen ➡ schwach besetzte LGS

Iterative Verfahren, z. B. SOR-Verfahren
Mehrgitter-Verfahren
CG- und Krylow-Unterraum-Methoden

3. Finite-Volumen-Verfahren

Numerisches Verfahren für Erhaltungsgleichungen.

Schritt 1: Diskretisierung des Raumes – allgemeines Gitterkonzept

Schritt 2: Rekonstruktion der Daten am Rand der Gitterzelle

Schritt 3: Flussberechnung

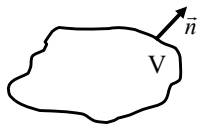
Erhaltungsgleichung $u_t + \nabla \cdot f(u) = 0 \text{ in } D \times [0, T]$

Finite-Volumen-Verfahren =
direkte Approximation der integralen Erhaltungsgleichung

Erhaltungsgleichung:

Physikalisches Modell: Integrale Aussage

Erhaltung in V: $\int_V u \, dV$

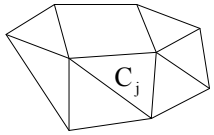


Es kann nichts entstehen oder verschwinden

$$\frac{d}{dt}\int_V u \, dV = -\int_{\partial V} f \cdot \vec{n} dS$$

Erhaltungsgleichung:

Gitter:



Integration über $C_j \times [t_n, t_{n+1}]$, C_j Gitterzelle

$$|C_j| u_j^{n+1} = |C_j| u_j^n - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial C_j} f(u(x,t)) \cdot \vec{n} \, dS \, dt$$

Evolutionsgleichung für integrale Mittelwerte

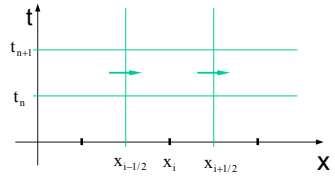
Finite-Volumen-Verfahren =
Approximation der integralen Erhaltungsgleichung

wesentlicher Baustein : Approximation des Flusses

Finite-Volumen-Verfahren in einer Raumdimension

Erhaltungsgleichung:

$$u_t + f(u)_x = 0$$



Integration über $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t_n, t_{n+1}]$:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_t(x,t) dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(u(x,t))_x \, dx dt = 0$$

Finite-Volumen-Verfahren oder Verfahren in Erhaltungsform

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_t(x,t) dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(u(x,t))_x \, dx dt = 0$$

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x,t_{n+1}) - u(x,t_n) dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{i+1/2},t)) - f(u(x_{i-1/2},t)) dt = 0$$

$$\boxed{u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (g_{i+1/2}^n - g_{i-1/2}^n)}$$

u_i^n approximiert $\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x,t_n) dx$ Integraler Mittelwert

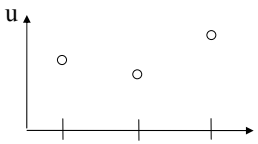
$g_{i+1/2}$ approximiert $\frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{i+1/2},t)) dt$ numerischer Fluss

Bemerkungen – Finite-Volumen-Verfahren

- Approximation von integralen Mittelwerten
- Günstig für Erhaltungsgleichungen
- Starke Gradienten, selbst Unstetigkeiten können hierbei approximiert werden
- Zur Flussberechnung zwischen den Gitterzellen wird die Wellenausbreitung analysiert – Riemannproblem: Shock-Capturing
- Rekonstruktion, hier: Stückweise konstant

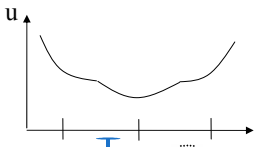
Zusammenfassung FD, FE, FV

- Finite Differenzen (FD)
  - Daten werden als Punktwerte repräsentiert
  - Einfaches Coding, auch für komplizierte Gleichungen
  - Sehr kompliziert auf unstrukturierten Gittern
  - Probleme bei starken Gradienten (Unstetigkeiten)



- Finite Volumen (FV)
  - Daten werden als Zellmittelwerte repräsentiert
  - Aufwändiger zu programmieren als FD
  - Einfach auf beliebigen Gittern anzuwenden
  - Keine Probleme mit starken Gradienten

- Finite Elemente (FE)
  - Daten als Freiheitsgrade von Basisfunktionen
  - Noch aufwändiger zu programmieren als FV
  - Einfach auf beliebigen Gittern anzuwenden
  - Spezielle Techniken verhindern Probleme mit starken Gradienten



4. Explizites oder implizites Verfahren

Kriterien:

- Rechenaufwand
  Explizites Verfahren billiger
- Theoretische Qualitätsmerkmale
  Genauigkeit – Konsistenz
  Stabilität
- Auswahl ist problemabhängig
  instationäres Problem
  Glatte Lösungen, Stabilität

Parabolische Probleme

Explizites Verfahren

Schrittweitenbedingung sehr einschränkend: $\Delta t \sim \kappa \Delta x^2$

Kommt nur in Betracht bei sehr kleinem Wärmekoeffizienten - Reibung

Implizites Verfahren

Standard-Verfahren: Crank-Nicolson
bedingungslos stabil

Hyperbolische Probleme

Explizites Verfahren

Schrittweitenbedingung $\Delta t \sim a \Delta x$

Instationäre Probleme: Meist auch ein Genauigkeitskriterium, zur Stabilisierung ist Upwind-Approximation nötig.

Implizites Verfahren

Berechnung einer stationären Lösung: vollimplizit
Stabilisierung von zentralen Differenzen unter Vermeidung von Upwinding