

Computational Fluid Dynamics

I + II

Numerische Strömungsmechanik

I + II

Prof. Dr.-Ing. Dieter Hänel

Matthias Meinke

Lennart Schneiders, Konrad Pausch, Marian Albers

Jannik Borgelt

Institute of Aerodynamics

RWTH Aachen University

Inhaltsverzeichnis

1	Numerische Strömungsmechanik I	5
1.1	Grundgleichungen der Strömungsmechanik	7
1.1.1	Allgemeine Formulierung der Erhaltungsgleichungen	7
1.1.2	Erhaltungsgleichungen in kartesischen Koordinaten (x,y,t)	12
1.1.3	Anfangs- und Randbedingungen	20
1.2	Klassifizierung und Charakteristiken partieller Differentialgleichungen	22
1.2.1	Partielle Differentialgleichungen 1. Ordnung	22
1.2.2	Partielle Differentialgleichungen 2. Ordnung	26
1.2.3	Vereinfachte Berechnung der Charakteristiken	29
1.3	Grundlagen der numerischen Lösung	30
1.3.1	Entwicklung von konsistenten Differenzenausdrücken	30
1.3.2	Numerische Stabilität	37
1.3.3	Konvergenz	48
1.4	Iterationsverfahren für elliptische Differentialgleichungen	50
1.4.1	Einführung	50
1.4.2	Diskretisierung der Poissongleichung	51
1.4.3	Prinzip der Iterationsverfahren	53
1.4.4	Konsistenz und Stabilität der Iterationsverfahren	54
1.4.5	Darstellung wichtiger Iterationsverfahren	55
1.4.6	Konvergenz von Iterationsverfahren	62
2	Numerische Strömungsmechanik II	69
2.1	Numerische Lösung parabolischer, partieller Differentialgleichungen	69
2.1.1	Einführung	69
2.1.2	Lösung der Fourier-Gleichung	71
2.1.3	Grenzschichtgleichungen	73
2.2	Numerische Lösung skalarer, hyperbolischer Differentialgleichungen	79
2.2.1	Einführung	79
2.2.2	Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) Bedingung	80
2.2.3	Numerische Dämpfung	82
2.2.4	Wichtige Differenzenschemata für die skalare Konvektionsgleichung	85
2.2.5	Skalare, hyperbolische Gleichungen 2. Ordnung	97
2.3	Formulierung der Euler Gleichungen	102
2.3.1	Einführung	102
2.3.2	Formen der Euler Gleichungen	103

2.3.3	Diskontinuierliche Lösungen der Euler Gleichungen	113
2.4	Numerische Lösung der Euler Gleichungen	117
2.4.1	Formulierung der eindimensionalen Euler Gleichungen	117
2.4.2	Ortsdiskretisierung der Flüsse	118
2.4.3	Zeitdiskretisierung (Lösungsmethoden)	131
2.4.4	Berechnung eines eindimensionalen Strömungsproblem – Stoßrohr- strömung	139
2.4.5	Ortsdiskretisierung in mehreren Dimensionen	144

Kapitel 1

Numerische Strömungsmechanik I

Einleitung

Die numerische Fluidodynamik ist ein Teilgebiet der Strömungsmechanik, in dem die Strömungsgleichungen, meist partielle Differentialgleichungen, numerisch mit Hilfe von Digitalrechnern gelöst werden. Dadurch ist man in der Lage, Lösungen von Strömungsproblemen zu ermitteln, für die auf Grund mathematischer Schwierigkeiten keine analytischen Lösungen zu erhalten sind. Durch ständig verbesserte Lösungsmethoden und wachsende Rechnerkapazitäten ist die numerische Strömungsmechanik zu einem sehr wichtigen Bereich in Forschung und Industrie geworden. Anwendungsbereiche sind überall dort gegeben, wo Strömungsprobleme dominieren, wie z.B. in der Luft- und Raumfahrtindustrie und in der Automobilindustrie, aber auch in grundlegenden Untersuchungen von Strömungsproblemen, wie z.B. in der Turbulenzforschung.

Die numerische Strömungsmechanik basiert auf Näherungen der zugrunde liegenden Differentialprobleme, z.B. durch Überführen von Differentialen in Differenzen an diskreten Punkten eines Integrationsbereiches. Durch die Näherungen werden Fehler verursacht, durch die die numerische Lösung von der exakten Lösung des Strömungsproblems abweichen kann. Wichtigste Aufgabe der numerischen Strömungsmechanik ist es deshalb Näherungen so zu formulieren, daß die Fehler begrenzt bleiben und, daß die numerische Lösung mit feiner werdender Auflösung, d.h. kleineren Schrittweiten, gegen die exakte Lösung strebt (Konvergenz des numerischen Problems).

Die Grundkenntnisse zur numerischen Formulierung der Strömungsgleichungen mittels Differenzenapproximationen sollen in dieser Vorlesung vermittelt werden. Im 1. Kapitel dieser Vorlesung werden zunächst die Strömungsgleichungen mit ihren wichtigsten Formen und Näherungen vorgestellt. Eine mathematische Einordnung dieser Gleichungen mit Hilfe der Charakteristiken wird im 2. Kapitel gegeben. Die Grundlagen der numerischen Formulierung von partiellen Differentialgleichungen werden im 3. Kapitel behandelt. Es werden die Herleitung konsistenter Differenzenapproximationen und Bedingungen für numerische Stabilität und Konvergenz von Anfangswertproblemen aufgeführt. Die iterative Lösungen von elliptischen partiellen Differentialgleichungen vom Typ der Poisson- und Laplacegleichung werden im 4. Kapitel behandelt. Es werden hierfür die wichtigsten Iterationsverfahren und ihre Grundlagen behandelt.

Im zweiten Teil der Vorlesung wird auf wichtige Systeme von Strömungsgleichungen

eingegangen. Im ersten Kapitel wird die numerische Integration der Prandtl'schen Grenzschichtgleichungen diskutiert und ein Lösungsverfahren hierfür entwickelt. Im weiteren Teil der Vorlesung wird die numerische Lösung der Eulergleichungen für kompressible, instationäre Strömungen behandelt. Die Lösung dieses hyperbolischen, nichtlinearen Systemes ist eine der wichtigsten Aufgaben der numerischen Strömungsmechanik, nicht nur zur Berechnung reibungsfreier Strömungen, sondern auch als Grundlage für die Lösung der Navier-Stokes Gleichungen (die in dieser Vorlesung nicht behandelt werden können). Für die Eulergleichungen werden die Lösungseigenschaften diskutiert. Diese beinhalten sowohl stetige als auch unstetige Lösungen (Verdichtungsstöße). Um beide Lösungen numerisch zu erfassen, ist sogenannte konservative Diskretisierung nötig. Hierzu werden die wichtigsten Differenzschemata diskutiert.

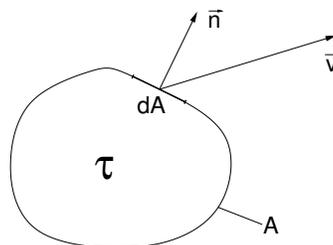
1.1 Grundgleichungen der Strömungsmechanik

- Die Strömung eines Kontinuums (Gas, Flüssigkeit) wird durch die Erhaltungssätze von Masse, Impuls und Energie beschrieben.
- Zur Lösung dieser Erhaltungsgleichungen sind zusätzliche Beziehungen nötig:
 - Kalorische Zustandsgleichung z.B. $e = c_v T$
 - Thermische Zustandsgleichung z.B. $p = \rho R T$
 - Ansätze für Transportkoeffizienten z.B. $\eta = \eta(T), \lambda = \lambda(T)$
- Die Anfangs- und Randbedingungen legen das Strömungsproblem fest.

1.1.1 Allgemeine Formulierung der Erhaltungsgleichungen

Integrale Formulierung der Erhaltungsgleichungen

Die Integralform der Erhaltungsgleichungen ergibt sich direkt aus dem fundamentalen Erhaltungsprinzip der klassischen Physik. Dieses Prinzip wird angewendet auf ein durchströmtes Kontrollvolumen τ mit der Oberfläche A . Jedem Oberflächenelement dA von τ ist ein Normalenvektor \vec{n} zugeordnet.



Das Erhaltungsprinzip für das Volumen τ läßt sich in gemeinsamer Form für die spezifischen Größen Masse, Impuls und Energie pro Volumeneinheit formulieren:

$$\begin{aligned}
 & \text{Zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen } \vec{U} \text{ im Volumen } \tau \\
 & + \text{verallgemeinerter Fluß } \vec{H} \text{ (Flüsse, Spannungen) normal zu der Oberfläche } A \\
 & = \text{Wirkung der Volumenkräfte } \vec{F}_{vol} \text{ in } \tau
 \end{aligned}$$

Mathematisch formuliert ergibt dies die Integralform der Erhaltungsgleichungen:

$$\int_{\tau} \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} d\tau + \oint_A \vec{H} \cdot \vec{n} dA = \int_{\tau} \vec{F}_{vol} d\tau$$

Hierbei ist \vec{U} der Vektor der Erhaltungsgrößen mit Masse/Volumen (ρ), Impuls/Volumen ($\rho \vec{v}$) und Energie/Volumen ($\rho E = \rho (e + \frac{1}{2} \vec{v}^2)$) als Komponenten.

$$\vec{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \end{pmatrix}$$

Der verallgemeinerte Flußvektor \vec{H} faßt die Wirkung der Flüsse und Spannungen zusammen. Die erste Komponente von \vec{H} beschreibt den Massenfluß $\rho \vec{v}$, die zweite Komponente enthält den Impulsstrom $\rho \vec{v} \vec{v}$ und den Spannungstensor $\bar{\sigma}$, die dritte Komponente setzt sich zusammen aus dem Energiefluß $\rho \vec{v} E$, der Leistung der Spannungsanteile $\bar{\sigma} \vec{v}$ und dem Wärmestrom \vec{q} :

$$\vec{H} = \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} + \bar{\sigma} \\ \rho E \vec{v} + \bar{\sigma} \vec{v} + \vec{q} \end{pmatrix}$$

Die Volumenkräfte werden durch den Vektor \vec{F}_{vol} repräsentiert, der die Volumenkraft \vec{f}_{vol} , z.B. die Schwerkraft $\vec{f}_{vol} = \rho \vec{g}$, und die Leistung der Volumenkräfte $\vec{f}_{vol} \cdot \vec{v}$ enthält:

$$\vec{F}_{vol} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{f}_{vol} \\ \vec{f}_{vol} \cdot \vec{v} \end{pmatrix}$$

Komponentenweise ergeben sich somit die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie zu:

$$\begin{aligned} \int_{\tau} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\tau + \oint_A [\rho \vec{v}] \cdot \vec{n} dA &= 0 \\ \int_{\tau} \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} d\tau + \oint_A [\rho \vec{v} \vec{v} + \bar{\sigma}] \cdot \vec{n} dA &= \int_{\tau} \vec{f}_{vol} d\tau \\ \int_{\tau} \frac{\partial \rho E}{\partial t} d\tau + \oint_A [\rho E \vec{v} + \bar{\sigma} \vec{v} + \vec{q}] \cdot \vec{n} dA &= \int_{\tau} \vec{f}_{vol} \cdot \vec{v} d\tau \end{aligned}$$

Auf Grund der einheitlichen Gestalt der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie und infolge der direkten Anwendbarkeit auf durch Gitternetze definierte Kontrollvolumina ist die Integralform der Erhaltungsgleichungen ein wichtiger Ausgangspunkt für numerische Diskretisierungsschemata (z.B. Finite-Volumen Methode).

Differentielle Formulierung der Erhaltungsgleichungen

Die integrale Form der Erhaltungsgleichungen läßt sich mittels Integralsätze in ein System partieller Differentialgleichungen überführen. Dies führt direkt zu der konservativen bzw. Divergenzform der Erhaltungsgleichungen. Diese Form ist gleichfalls ein wichtiges Ausgangssystem für die numerische Diskretisierung.

Weitere differentielle Formen der Erhaltungsgleichungen lassen sich durch Einführung von anderen abhängigen Variablen anstelle der Erhaltungsgrößen \vec{U} herleiten. Diese werden meist nichtkonservative Formen genannt. Diese Formen haben jedoch bis auf Ausnahmen (z.B. die Grenzschichtgleichungen) eine geringere Bedeutung für die numerische Diskretisierung. Sie lassen sich jedoch oft besser als die konservativen Formen zur Analyse des Lösungsverhalten heranziehen.

a) Konservative (Divergenz-) Form:

Unter Voraussetzung stetiger und genügend oft differenzierbarer Funktionen in Ort und Zeit läßt sich aus der Integralform:

$$\int_{\tau} \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} d\tau + \oint_A \vec{H} \cdot \vec{n} dA = \int_{\tau} \vec{F}_{vol} d\tau$$

mit Hilfe des Gauß'schen Integralsatzes:

$$\oint_A \vec{H} \cdot \vec{n} dA = \int_{\tau} \nabla \cdot \vec{H} d\tau$$

durch Differentiation nach dem Volumen τ eine Differentialform bestimmen:

$$\boxed{\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{H} = \vec{F}_{vol}}$$

Dieses System partieller Differentialgleichungen wird allgemein als konservative Form oder als Divergenzform (wegen $\nabla \cdot \vec{H}$) der Erhaltungsgleichungen bezeichnet. Die Divergenzform der Erhaltungsgleichungen ist, wie die Integralform, eine wichtige Ausgangsform für die numerische Lösung.

Mit den Komponenten des Vektors der spezifischen Erhaltungsgrößen \vec{U} , des verallgemeinerten Flußvektors $\vec{H} = \vec{H}(\vec{U})$ und des Vektors der Volumenkräfte $\vec{F}_{vol} (f_{vol})$ ergibt sich das System der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v} &= 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + \bar{\sigma}) &= \vec{f}_{vol} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \vec{v} + \bar{\sigma} \vec{v} + \vec{q}) &= \vec{f}_{vol} \cdot \vec{v} \end{aligned}$$

b) Nichtkonservative Formen

Wählt man statt der Erhaltungsgrößen \vec{U} einen Satz anderer Größen (z.B. ρ, \vec{v}, E) als abhängige Variable so erhält man sogenannte nichtkonservative Formen der Erhaltungsgleichungen. In diesem Falle kann die Divergenzform nicht aufrecht erhalten werden, als Kennzeichen der nichtkonservativen Form treten dann Variablen als Koeffizienten vor den Differentialen auf.

Eine nichtkonservative Form erhält man z.B. für ein mit \vec{v} mitbewegtes Bezugssystem (Lagrangsche Formulierung). Hierbei ergibt sich die zeitliche Änderung als "substantielle Ableitung" im mitbewegten System:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla$$

Damit schreiben sich Erhaltungsgleichungen in der folgenden Form:

$$\begin{aligned} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} &= 0 \\ \frac{D\vec{v}}{Dt} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} &= \frac{1}{\rho} \vec{f}_{vol} \\ \frac{DE}{Dt} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\bar{\bar{\sigma}}\vec{v} + \vec{q}) &= \frac{1}{\rho} \vec{f}_{vol} \cdot \vec{v} \end{aligned}$$

Dieses System stellt nur eine mögliche nichtkonservative Formulierung dar. Insbesondere für den Energiesatz sind noch verschiedene andere Formen möglich, z.B.:

$$\rho \frac{De}{Dt} + \bar{\bar{\sigma}} \cdot \nabla \vec{v} + \nabla \cdot \vec{q} = 0$$

Thermische und kalorische Zustandsgleichungen

Die Beschreibung kompressibler Strömungen erfordert zur Schließung der Erhaltungsgleichungen zusätzliche Beziehungen zwischen den thermischen und kalorischen Zustandsgrößen. Für ein thermisch und kalorisch ideales Gas (z.B. Luft für Temperaturen bis ca. 800 K) gelten folgende Beziehungen:

- Thermische Zustandsgleichung:

$$p = \rho R T$$

- Kalorische Zustandsgleichung:

$$e = c_v T \quad h = e + p/\rho = c_p T \quad \text{mit} \quad c_p = \text{const.} \quad \text{und} \quad c_v = \text{const.}$$

Der Zusammenhang zwischen Druck p und innerer Energie e ergibt sich somit zu:

$$p = (\gamma - 1) \rho e \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v}$$

Transportkoeffizienten

Zur Berechnung der Schubspannungen und des Wärmestromes sind Schließungsansätze nötig, die diese Größen mit den Strömungsvariablen verknüpfen. Man unterscheidet hierbei zwischen laminarer und turbulenter Strömung.

In laminarer Strömung kann für die meisten Gase und Flüssigkeiten in einem weiten Gültigkeitsbereich die Näherung eines Newton'schen Fluids verwendet werden, nach der die Schubspannung linear vom Geschwindigkeitsgradient abhängt, z.B. in der Form $\tau = -\eta \frac{du}{dy}$. Analog dazu gilt das Fourier'sche Gesetz für einen linearen Zusammenhang zwischen Wärmestrom und Temperaturgradient, d.h. $\vec{q} = -\lambda \nabla T$.

Die Proportionalitätsfaktoren sind die Transportkoeffizienten für den molekularen Impulsaustausch (Viskosität η) und für den Energieaustausch (Wärmeleitfähigkeit λ). Diese sind Materialkonstanten und hängen nur noch vom thermodynamischen Zustand des Fluids ab. Für Gase ist die Viskosität im wesentlichen eine Funktion der Temperatur, die näherungsweise durch ein Potenzgesetz ausgedrückt werden kann:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^\omega \quad \text{mit} \quad .5 < \omega < 1 \quad (\text{Luft } \omega = .72)$$

Die Wärmeleitfähigkeit ist unter der Voraussetzung konstanter Prandtl-Zahl $Pr = \frac{c_p \eta}{\lambda}$ und konstantem c_p Wert proportional zur Viskosität.

Für turbulente Strömungen, bei denen der Impuls- und Energieaustausch über stochastische Schwankungsbewegungen erfolgt, ist die mathematische Formulierung der Vorgänge wesentlich schwieriger und noch nicht eindeutig gelöst.

Im Allgemeinen bauen die Ansätze turbulenter Strömung auf der Mittelung nach Reynolds auf (siehe z.B. Vorlesung Strömungslehre II). Hierbei wird eine augenblickliche Strömungsgröße f in einen zeitlichen Mittelwert \bar{f} und einen Schwankungsanteil f' aufgespalten. Nach Einführen dieser Ansätze in die Erhaltungsgleichungen und zeitlicher Mittelung erhält man die sogenannten zeitlich gemittelten Gleichungen, die sich von den ursprünglichen Gleichungen durch zusätzliche Spannungs- und Wärmestromanteile (Schein- oder Reynolds-spannungen) unterscheiden. Solche Anteile, wie z.B. das Kreuzprodukt der Geschwindigkeitsschwankung $\overline{u'v'}$, sind zusätzliche Unbekannte, die durch Schließungsannahmen mit den zeitlich gemittelten Größen verknüpft werden müssen. Hierfür existieren eine Anzahl von Schließungsansätzen vom Mehrgleichungsmodell (z.B. $k - \epsilon$ Modell) bis zum einfacheren algebraischen Modell. Einer der einfachsten algebraischen Schließungsansätze ist die Prandtl'sche Mischungsweghypothese

$$\overline{u'v'} = -l^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = -\eta_{turb} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y}$$

Mit einem solchen sogenannten Wirbelviskositätsansatz kann der Ansatz für ein Newton'sches Fluid beibehalten werden, indem die Viskosität η durch die effektive Viskosität aus der Summe von laminarer und turbulenter Viskosität, d.h. $\eta_{eff} = \eta_{lam} + \eta_{turb}$, ersetzt wird. Somit ändert sich die prinzipielle Struktur der Erhaltungsgleichungen nicht.

1.1.2 Erhaltungsgleichungen in kartesischen Koordinaten (x,y,t)

In diesem Abschnitt werden die Erhaltungsgleichungen in kartesischen Koordinaten hergeleitet und die Navier-Stokes Gleichungen und ihre wichtigsten Näherungen für kompressible und inkompressible Strömungen angegeben.

Die Navier-Stokes Gleichungen, die die Strömung mit Reibung und Wärmeleitung beschreiben, stellen die vollständigste Beschreibung von Kontinuumsströmungen dar. Ihre Lösungen sind jedoch sehr komplex und erfordern einen hohen Rechenaufwand. Aus diesem Grunde werden dort, wo es physikalisch sinnvoll erscheint, Näherungen dieser Gleichungen verwendet. Eines der wichtigsten Näherungskonzepte ist die Grenzschichttheorie nach Prandtl. Diese Theorie gilt für große Reynoldszahlen und anliegende Strömung. Nach dieser Theorie kann das Strömungsfeld um einen Körper zerlegt werden in eine dünne reibungsbehaftete Grenzschicht an der Körperberandung und in eine reibungsfreie Außenströmung. Innerhalb der Grenzschicht ist der Druck normal zur Berandung konstant, er wird somit durch die reibungsfreie Außenströmung bestimmt. Entsprechend dieser Aufteilung der Strömung können auch die Navier-Stokes Gleichungen in einfachere Systeme von Gleichungen aufgespalten werden. Für die Grenzschichtströmung ergeben sich die Grenzschichtgleichungen, während die reibungsfreie Außenströmung durch die Eulergleichungen, bzw. deren Näherung, die Potentialgleichung, bestimmt wird.

Im folgenden wird die Wirkung der Volumenkräfte vernachlässigt ($\vec{F}_{vol} = 0$).

Vereinbarungen für kartesische Koordinaten

Zur Darstellung in kartesischen Koordinaten sind einige Vereinbarungen nötig:

Hinweis: Es gilt $\vec{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = (f_1, f_2)^T$

- Flächennormale: $\vec{n}dA = (dy, -dx)^T$
- Volumen: $\tau = \tau(x, y)$
- Nabla-Operator: $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)^T$
- dyadisches Produkt zweier Vektoren $\vec{a}\vec{b}$ z.B. für Impulsfluß $\rho \vec{v}\vec{v}$

$$\vec{a}\vec{b} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x b_x & a_x b_y \\ a_y b_x & a_y b_y \end{pmatrix}$$

- inneres Vektorprodukt von Tensor mit Vektor $\overline{\overline{T}}\vec{a}$, z.B. für $\overline{\overline{\sigma}}\vec{v}$ oder $\overline{\overline{\sigma}}\vec{n}$

$$\overline{\overline{T}}\vec{a} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} a_x + t_{12} a_y \\ t_{21} a_x + t_{22} a_y \end{pmatrix}$$

- Geschwindigkeit: $\vec{v} = (u, v)^T$
- Erhaltungsgrößen: $\vec{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E)^T$

$$\text{mit } E = c_v T + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)$$

- Spannungstensor mit Druckanteil und Reibungsanteil $\bar{\sigma} = pI + \sigma$

mit
$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$$

und
$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\eta \left(2u_x - \frac{2}{3}(u_x + v_y) \right) \\ \sigma_{yy} &= -\eta \left(2v_y - \frac{2}{3}(u_x + v_y) \right) \\ \sigma_{xy} &= -\eta (u_y + v_x) \end{aligned}$$

- Wärmestrom: $\vec{q} = (q_x, q_y)^T = -\lambda (T_x, T_y)^T$

- verallgemeinerter Flußvektor mit reibungsfreiem und Reibungsanteil $\vec{H} = \vec{H}_{inv} + \vec{H}_{vis}$
in kartesischen Komponenten: $\vec{H}_{inv} = (E_{inv}, F_{inv})^T$ $\vec{H}_{vis} = (E_{vis}, F_{vis})^T$

mit

$$\begin{aligned} E_{inv} &= (\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, \rho uE + up)^T & E_{vis} &= (0, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, u\sigma_{xx} + v\sigma_{xy} + q_x)^T \\ F_{inv} &= (\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, \rho vE + vp)^T & F_{vis} &= (0, \sigma_{xy}, \sigma_{yy}, u\sigma_{xy} + v\sigma_{yy} + q_y)^T \end{aligned}$$

Erhaltungsgleichungen für kompressible Strömungen

Navier-Stokes Gleichungen

Die Navier-Stokes Gleichungen beschreiben die Kontinuumsströmung mit Reibung und Wärmeleitung. Unter dem Begriff Navier-Stokes Gleichungen wird hier das vollständige System der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie verstanden.

a) Integralform

Mit obigen Vereinbarungen ergibt sich die Integralform nach Ausführung des Skalarproduktes $\vec{H} \cdot \vec{n} dA$

$$\int_{\tau} \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} d\tau + \oint_A (E_{inv} + E_{vis}) dy - \oint_A (F_{inv} + F_{vis}) dx = 0$$

Die Anteile $E dy - F dx$ entsprechen der Normalprojektion des Flusses $\vec{H} = (E, F)^T$ auf ein Oberflächenelement $dA = \sqrt{dx^2 + dy^2}$, multipliziert mit dA .

b) Konservative Form (Divergenz-Form)

Mit den kartesischen Komponenten von ∇ und \vec{H} ergibt sich die Divergenzform zu:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(E_{inv} + E_{vis}) + \frac{\partial}{\partial y}(F_{inv} + F_{vis}) = 0$$

In komponentenweiser Darstellung ergeben sich die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p + \sigma_{xx}) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv + \sigma_{xy}) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho uv + \sigma_{xy}) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho v^2 + p + \sigma_{yy}) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u E + up + u\sigma_{xx} + v\sigma_{xy} + q_x) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho v E + vp + v\sigma_{yy} + u\sigma_{xy} + q_y) &= 0
 \end{aligned}$$

c) Nichtkonservative Form

Für die vorn aufgeführte, nichtkonservative Form mit den Variablen $\vec{V} = (\rho, u, v, E)^T$ und der substantiellen Ableitung $\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y}$ ergibt sich folgendes System in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned}
 \frac{D}{Dt} \rho &+ \rho \frac{\partial}{\partial x} u &+ \rho \frac{\partial}{\partial y} v &= 0 \\
 \frac{D}{Dt} u &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (p + \sigma_{xx}) &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \sigma_{xy} &= 0 \\
 \frac{D}{Dt} v &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \sigma_{xy} &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} (p + \sigma_{yy}) &= 0 \\
 \frac{D}{Dt} E &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (up + u\sigma_{xx} + v\sigma_{xy} + q_x) &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} (vp + u\sigma_{xy} + v\sigma_{yy} + q_y) &= 0
 \end{aligned}$$

Eulergleichungen

Die Eulergleichungen erhält man aus den Navier-Stokes Gleichungen durch Vernachlässigung der Reibungsterme ($\sigma = 0$) und der Wärmeleitungsterme ($\vec{q} = 0$). Durch diese Vereinfachung ändert sich jedoch auch der Typ und das Lösungsverhalten der Erhaltungsgleichungen. Die Eulergleichungen werden ausführlich im Teil II der Vorlesung behandelt.

Analog zu den Navier-Stokes Gleichungen können folgende Formen dargestellt werden:

a) Integralform

$$\int_{\tau} \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} d\tau + \oint_A (E_{inv}) dy - \oint_A (F_{inv}) dx = 0$$

Die Anteile $E dy - F dx$ entsprechen der Normalprojektion des Flusses $\vec{H} = (E, F)^T$ auf ein Oberflächenelement $dA = \sqrt{(dx^2 + dy^2)}$, multipliziert mit dA .

b) Konservative Form (Divergenz-Form)

Mit den kartesischen Komponenten von ∇ und \vec{H} ergibt sich die Divergenzform zu:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} E_{inv} + \frac{\partial}{\partial y} F_{inv} = 0$$

In komponentenweiser Darstellung ergeben sich die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho uv) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho v^2 + p) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u E + up) &+ \frac{\partial}{\partial y} (\rho v E + vp) &= 0 \end{aligned}$$

c) Nichtkonservative Form

Für die vorn aufgeführte nichtkonservative Form mit den Variablen $\vec{V} = (\rho, u, v, E)^T$ und der substantiellen Ableitung $\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y}$ ergibt sich folgendes System in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \rho &+ \rho \frac{\partial}{\partial x} u &+ \rho \frac{\partial}{\partial y} v &= 0 \\ \frac{D}{Dt} u &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} p &+ 0 &= 0 \\ \frac{D}{Dt} v &+ 0 &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} p &= 0 \\ \frac{D}{Dt} E &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (up) &+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} (vp) &= 0 \end{aligned}$$

Potentialgleichung

Potentialströmung erfordert drehungsfreie, isoenergetische Strömung. Die Annahmen sind:

- drehungsfreie Strömung $\nabla \times \vec{v} = 0$,
identisch erfüllt durch das Potential ϕ , wenn $\vec{v} = \nabla \phi$ bzw. $u = \phi_x$ $v = \phi_y$
- stationäre Strömung $\frac{\partial}{\partial t} = 0$
- isoenergetische Strömung $H_t = h + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) = \text{const.}$
daraus $T/T_0 = 1/(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma^2)$
- isentrope Strömung folgt aus Croccoschem Wirbelsatz ($\vec{v} \times (\nabla \times \vec{v}) = \nabla H_t - T \nabla S$),
daraus $\nabla S = 0$ und somit $T/T_0 = (\rho/\rho_0)^{\gamma-1} = (p/p_0)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$

Die Dichte ρ und die Schallgeschwindigkeit a sind hierbei Funktionen, die noch vom Potential ϕ abhängen. Man berechnet sie mittels der Isentropenbeziehung und dem Energiesatz als Funktion von $\vec{v} = \nabla \phi$.

Damit reduzieren sich die Eulergleichungen zu der Potentialgleichung. Auch für die Potentialgleichung lassen sich verschiedene Formen angeben.

a) Konservative Form

Diese Form erhält man aus der Kontinuitätsgleichung und der Definition des Potentials

$$(\rho \phi_x)_x + (\rho \phi_y)_y = 0$$

b) Nichtkonservative Form

Eine nichtkonservative Form ergibt sich aus den Eulergleichungen mit $dp = a^2 d\rho$ für $s = \text{const.}$

$$(u^2 - a^2) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 2uv \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + (v^2 - a^2) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0$$

Grenzschichtgleichungen

Die Grenzschichtgleichungen werden aus den Navier-Stokes Gleichungen mit Hilfe der Prandtl'schen Grenzschichttheorie hergeleitet (siehe dort, z.B.: H. Schlichting: "Grenzschichttheorie"). Die wichtigsten Annahmen hierfür sind große Reynoldszahlen $Re \gg 1$ und anliegende Strömung. Die Reibung ist dann nur in einer dünnen körpernahen Grenzschicht der Dicke δ wirksam mit den Größenordnungen $\frac{\delta}{L} \sim \frac{v}{U_\infty} \sim \frac{1}{\sqrt{Re_\infty}}$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} &= 0 \\ \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= 0 \\ \rho u \frac{\partial h}{\partial x} + \rho v \frac{\partial h}{\partial y} - u \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \end{aligned}$$

Erhaltungsgleichungen für inkompressible Strömungen

Viele Fluide, z.B. Flüssigkeiten, können in weiten Bereichen als inkompressibel betrachtet werden, d.h. die Dichte ρ ist konstant. Als Konsequenz hieraus reduziert sich die Kontinuitätsgleichung zu $\text{div } \vec{v} = 0$, was zu veränderten Lösungseigenschaften führt, da keine Zeitableitung in dieser Gleichung auftritt.

Weiterhin ist der Druck nicht mehr über eine Zustandsgleichung an Dichte und Temperatur gekoppelt. Eine Folge davon ist, daß die Energiegleichung von den übrigen Gleichungen entkoppelt ist (eine gewisse Kopplung besteht über die Transportkoeffizienten, z.B. die Viskosität $\eta(T)$, die hier vernachlässigt wird). Deswegen reicht für die Berechnung der Strömung die Lösung der Kontinuitäts- und Impulsgleichung.

Als weitere Konsequenz der Entkopplung des Druckes läßt sich für den Druck keine explizite Bestimmungsgleichung herleiten, die gleichzeitig die Kontinuitätsgleichung erfüllt (divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld). Aus diesem Grunde wird in Lösungsverfahren, die auf den Gleichungen mit Druck und Geschwindigkeit als Variable aufbauen, der Druck als Parameter so iteriert, daß zu jeder Zeit die Kontinuitätsgleichung erfüllt ist.

Diese Druckiteration wird durch die Formulierung der Gleichungen mit der Stromfunktion und dem Wirbelvektor als Variable vermieden, da hierbei der Druck eliminiert wird. Diese Formulierung ist für zweidimensionale Strömung sehr geeignet, ihre Erweiterung auf drei Dimensionen ist jedoch sehr aufwendig.

Beide Formulierungen der Navier-Stokes Gleichungen werden im folgenden aufgeführt.

Navier-Stokes Gleichungen

a) \vec{v} , p Formulierung

Für konstante Dichte ergibt sich folgendes System von Kontinuitäts- und Impulsgleichung mit Geschwindigkeit und Druck als abhängige Variable:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} &= \nu \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} &= \nu \nabla^2 v \end{aligned}$$

mit dem Laplace-Operator $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$

und der kinematischen Viskosität $\nu = \eta/\rho$

b) $\psi - \zeta$ Formulierung (Stromfunktions- und Wirbeltransportgleichung)

Die Druckterme werden durch Anwendung des Rotationsoperators auf die Impulsgleichungen eliminiert ($\nabla \times \text{Impulssatz}$). Hierdurch erhält man die Wirbeltransportgleichung mit der z-Komponente des Wirbelvektors ζ als Variable.

$$\zeta = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$$

Die Kontinuitätsgleichung wird durch die Definition der Stromfunktion identisch erfüllt.

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = u \quad , \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = -v$$

Die Poissongleichung für die Bestimmung der Stromfunktion ψ ergibt sich durch Einsetzen der Stromfunktion in die Definition von ζ .

Somit lassen sich die Navier-Stokes Gleichungen als Stromfunktions- und Wirbeltransportgleichung schreiben:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\zeta \quad \parallel \text{Poissongleichung für } \psi$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} = \nu \nabla^2 \zeta \quad \parallel \text{Wirbeltransportgleichung}$$

Der Druck p kann nachträglich aus der Poisson-Gleichung für den Druck bestimmt werden, die durch Bildung der Divergenz der Impulssätze hergeleitet wird:

$$\nabla^2 p = -\rho \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} \right]$$

Eulergleichungen

Die Eulergleichungen für inkompressible Strömungen erhält man für verschwindende Viskosität ($\nu = 0$). Wie für die Navier-Stokes Gleichungen gibt es die zwei Formulierungen:

a) \vec{v}, p Formulierung

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} = 0$$

b) $\psi - \zeta$ Formulierung (Stromfunktions- und Wirbeltransportgleichung)

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\zeta \quad \parallel \text{Poissongleichung für } \psi$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} = 0 \quad \parallel \text{Wirbeltransportgleichung}$$

Der Druck p kann nachträglich aus der Poisson-Gleichung für den Druck bestimmt werden.

Potentialgleichung

Die Potentialgleichung erhält man aus den Eulergleichungen für drehungsfreie ($\zeta = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} = 0$) und stationäre ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) Strömung. Je nach abhängiger Variable unterscheidet man:

- Geschwindigkeitsformulierung (Cauchy-Riemansche Gleichungen)

Die Bedingung der Drehungsfreiheit ersetzt die Impulssätze, die Kontinuitätsgleichung bleibt erhalten.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} &= 0\end{aligned}$$

- Stromfunktionsformulierung

Die Definition der Stromfunktion (erfüllt die Kontinuitätsgleichung), in die Gleichung der Drehungsfreiheit eingesetzt, ergibt die Laplace-Gleichung für die Stromfunktion:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0$$

- Potentialformulierung

Die Definition des Potentials, $\vec{v} = \nabla \Phi$, in die Kontinuitätsgleichung eingesetzt, ergibt die Laplace-Gleichung für die Potentialfunktion:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0$$

Die Integration der Impulsgleichungen unter Berücksichtigung der Drehungsfreiheit ergibt die Bernoulli-Gleichung zur Berechnung des Druckes:

$$p_0 = p + \frac{\rho}{2} (u^2 + v^2) = \text{const.}$$

Grenzschichtgleichungen

Die Prandtlschen Grenzschichtgleichungen einer inkompressiblen Strömung lauten:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0 \\ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= 0\end{aligned}$$

1.1.3 Anfangs- und Randbedingungen

Die Anfangs- und Randbedingungen definieren das Strömungsproblem, welches durch Lösung der Erhaltungsgleichungen bestimmt werden soll.

Die Anzahl der vorzuschreibenden Bedingungen ist durch die höchste Ableitung einer unabhängigen Variablen gegeben. Ihre Aufteilung in Anfangs- und Randbedingungen wird durch den Typ der partiellen Differentialgleichungen bestimmt. Elliptische partielle Differentialgleichungen führen auf Randwertprobleme, d.h. dort sind auf allen Rändern Randbedingungen vorzuschreiben. Hyperbolische und parabolische partielle Differentialgleichungen haben reelle Charakteristiken, und somit einen begrenzten Einflußbereich, für den auf einer nichtcharakteristischen Berandung Anfangsbedingungen vorgeschrieben werden (Anfangswertproblem). Ist der Einflußbereich zusätzlich durch Ränder begrenzt, müssen dort noch Randbedingungen vorgeschrieben werden (Anfangs-Randwertproblem).

Die Art der Randbedingungen werden durch das zu lösende physikalische Problem festgelegt. Die wesentlichen Arten der Randbedingungen sind:

- 1. Art (Dirichlet'sche Randbedingung)

$$U = g_1(x, y) \quad \text{Wert der Variable ist auf Rand gegeben}$$

$$\text{z.B. Haftbedingung} \quad u = 0, \quad v = 0$$

- 2. Art (Neumann'sche Randbedingung)

$$\frac{\partial U}{\partial n} = g_2(x, y) \quad \text{Normalgradient der Variablen ist auf Rand gegeben}$$

$$\text{z.B. adiabate Wand} \quad q_n = \lambda \frac{\partial T}{\partial n} = 0$$

- 3. Art (Linearkombination aus 1. und 2. Art)

$$\alpha U + \beta \frac{\partial U}{\partial n} = g_3(x, y) \quad \text{Normalgradient und Wert sind kombiniert}$$

$$\text{z.B. "slip" Strömung auf Wand bei verdünnten Gasen} \quad a \frac{\partial u}{\partial n} + u = 0$$

- 4. Art Periodische Randbedingung

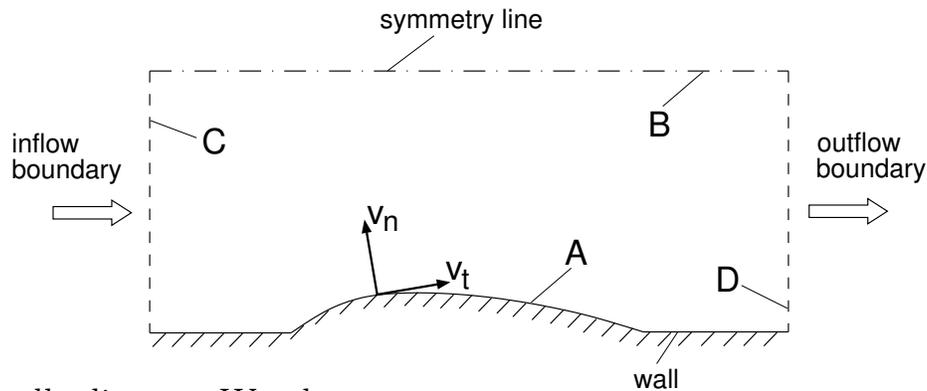
$$U(x_1, y_1) = U(x_2, y_2) \quad \text{Randwerte zweier Integrationsgrenzen } C_1 \text{ und } C_2 \text{ gleich}$$

$$\text{z.B.: Turbinengitter}$$

Wichtigste Voraussetzung für die Lösung ist die Formulierung eines sachgemäßen Problems, d.h. kleine Änderungen der Anfangs-oder Randwerte von $O(\varepsilon)$ dürfen auch nur kleine Änderung der Lösung von $O(\varepsilon)$ bewirken!

Typische Randbedingungen der Strömungsmechanik

Integrationsbereich:



A. Randbedingung Wand:

- reibungsfrei:

$$\left. \begin{array}{l} v_n = 0 \rightarrow \text{undurchlässige Wand} \\ \text{bzw. } \vec{v} = v_t \rightarrow \text{Tangentenbedingung} \end{array} \right\} \text{Wand ist Stromlinie}$$

Randbedingung für Eulergleichungen und Potentialgleichung.

- reibungsbehaftet:

$$\begin{array}{l} \text{RB wie reibungsfrei } v_n = 0 \\ + \text{ zusätzlich Haftbedingung: } v_t = 0 \\ + \text{ zusätzlich thermische RB: } T = T_w \text{ isotherme Wand} \\ \text{oder } q_n = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \text{ adiabate Wand} \end{array}$$

B. Randbedingung Symmetrielinie:

$$\begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial n} = 0 \\ v_n = 0 \end{array} \quad f = \rho, p, T, v_t$$

C.+D. Randbedingungen Ein- und Ausströmrand:

→ Problemabhängig, da meist Schnitt durch unbekanntes Strömungsfeld

→ Anzahl der Randbedingungen (d.h. vorzugebende Variable)

oft aus (reibungsfreier) Charakteristikentheorie bestimmt

z.B. für 2-D Strömung ist vorzugeben:

$Ma < 1$	Einströmung	3 Variable (z.B. T_o, p_o, u)
$Ma > 1$	Einströmung	4 (alle) Variable
$Ma < 1$	Ausströmung	1 Variable (z.B. p)
$Ma > 1$	Ausströmung	keine

1.2 Klassifizierung und Charakteristiken partieller Differentialgleichungen

Charakteristische Lösungen sind ausgezeichnete Lösungen von partiellen Differentialgleichungen. Diese Lösungen sind dadurch gekennzeichnet, daß sie unabhängig von der benachbarten Lösung sind, d.h. das Anfangswertproblem kann von einer solchen Lösungskurve aus nicht eindeutig fortgesetzt werden. Mathematisch bedeutet dies, daß Ableitungen der Lösung quer zur Lösungskurve unbestimmt sind.

Die Steigung der entsprechenden Grundkurve der charakteristischen Lösung wird i.a. als Charakteristik bezeichnet. Die Charakteristiken sind unabhängig vom Koordinatensystem und damit „charakteristische“ Eigenschaft einer partiellen Differentialgleichung. Der Wert der Charakteristik, reell oder komplex, bestimmt die Lösungsverhalten der partiellen Differentialgleichungen und dient der Klassifizierung der Gleichungen in elliptische, parabolische und hyperbolische partielle Differentialgleichungen.

Die Charakteristiken legen den physikalischen Einflußbereich fest. Reelle Charakteristiken (hyperbolische und parabolische Gleichungen) führen auf Anfangswertproblem mit einem begrenzten Einflußbereich (z.B. Machkegel). Komplexe Charakteristiken bei elliptischen Gleichungen führen auf Randwertprobleme ohne bevorzugte Einflußrichtung.

Für die numerischen Lösungsverfahren sind die Charakteristiken notwendig z.B. für die Entwicklung stabiler und genauer Differenzenschemata und zur Darstellung von Randbedingungen.

1.2.1 Partielle Differentialgleichungen 1. Ordnung

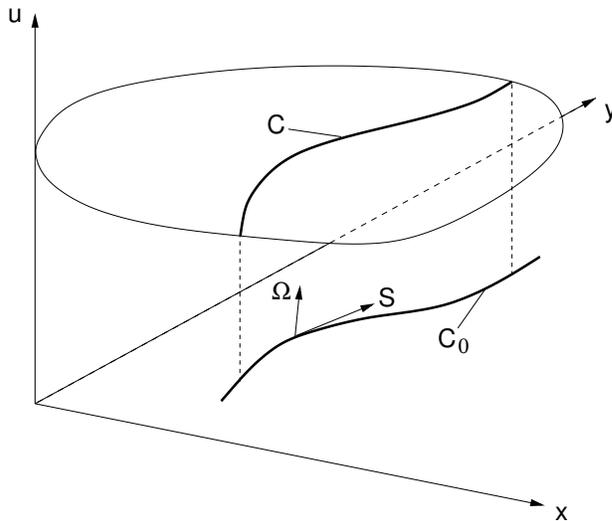
Die einfachste Herleitung und Interpretation der Charakteristiken ist für skalare partielle Differentialgleichungen 1. Ordnung möglich. Diese Gleichungen führen zu reellen Charakteristiken und sind somit von hyperbolischem Typ.

Charakteristikenbedingung

Für die Herleitung der Charakteristik wird die folgende Gleichung betrachtet:

$$a u_x + b u_y = c$$

Über der Grundkurve C_0 , gegeben durch $\Omega(x, y) = const.$, sei die Lösung $u(x, y)$ auf der Lösungskurve C bekannt (Anfangsbedingung). Zur Darstellung der Charakteristiken muß zunächst untersucht werden, für welche Grundkurven die Querableitungen der Lösung unbestimmt werden. Hierzu transformiert man die Differentialgleichung in ein Koordinatensystem (S, Ω) , mit S tangential zu C_0 und Ω quer zu C_0



Lösungsfläche $u(x, y)$

C : char. Lösungskurve

C_0 : char. Grundkurve $\Omega = \text{const.}$

$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{C_0}$: char. Richtungsableitung

Für die Transformation $(x, y) \rightarrow (S, \Omega)$ erhält man mit den Ableitungen

$$u_x = S_x u_S + \Omega_x u_\Omega; \quad u_y = S_y u_S + \Omega_y u_\Omega$$

die Differentialgleichung $au_x + bu_y = c$ im neuen Koordinatensystem:

$$(a\Omega_x + b\Omega_y)u_\Omega + (aS_x + bS_y)u_S = c$$

Für die Untersuchung des Verhaltens der Querableitung u_Ω ist der Wert des ersten Klammersausdruckes $Q \equiv a\Omega_x + b\Omega_y$ entscheidend:

- a) Der Wert von Q ist ungleich Null.

$$Q = a\Omega_x + b\Omega_y \neq 0$$

In diesem Falle ist die Querableitung u_Ω eindeutig durch die Lösung bestimmt. Die Nachbarlösung auf einer Kurve $\Omega + \Delta\Omega$ kann eindeutig aus der Lösung $u(x, y)$ auf $\Omega = \text{const.}$ fortgesetzt werden.

$$\rightarrow u(\Omega + \Delta\Omega) = u(\Omega) + u_\Omega(\Omega) \cdot \Delta\Omega + \dots$$

Das Anfangswertproblem ist eindeutig!

- b) Der Wert von Q ist Null.

$$Q = a\Omega_x + b\Omega_y = 0$$

In diesem Falle ist die Querableitung u_Ω unbestimmt ($0 \cdot u_\Omega = \dots$). Die Lösung hängt somit nur von Ableitungen u_S tangential zur Lösungskurve ab. Das Anfangswertproblem kann nicht eindeutig zu einer Nachbarlösung fortgesetzt werden.

Man bezeichnet dann $u(x, y)$ als *charakteristische Lösung* und die Kurve $\Omega = \text{const.}$ als *charakteristische Grundkurve* C_0 , deren Ableitung $\frac{dy}{dx}$ die *Charakteristik* bildet. Die Bedingung $Q = 0$ nennt man danach die *Charakteristikenbedingung*.

Charakteristik und Gleichung der charakteristischen Grundkurve

Aus der Charakteristikenbedingung $Q = 0$ und der Gleichung der Grundkurve $\Omega = \text{const.}$

$$\begin{aligned} Q &= a\Omega_x + b\Omega_y = 0 \\ d\Omega &= \Omega_x dx + \Omega_y dy = 0 \end{aligned}$$

erhält man die Steigung der charakteristischen Grundkurve (= Charakteristik)

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{C_0} = -\frac{\Omega_x}{\Omega_y} = \frac{b}{a}$$

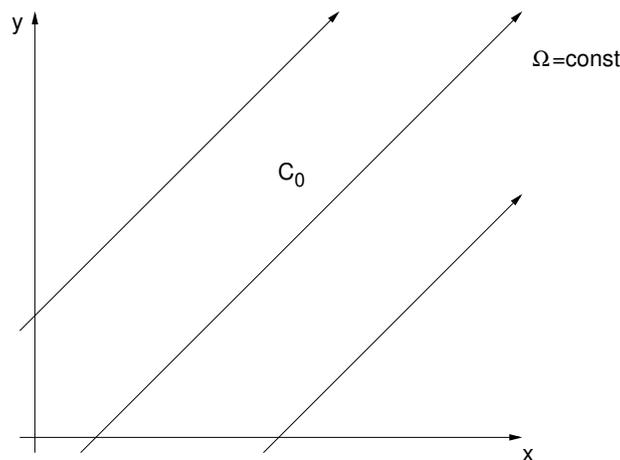
Die Gleichung der Grundkurve C_0 ergibt sich durch Integration von

$$\frac{d\Omega}{-\Omega_y} = \frac{dy}{dx} \Big|_{C_0} dx - dy = \frac{b}{a} dx - dy = 0$$

mit vorgegebenen Anfangswerten x_0, y_0 der Grundkurve zu:

$$y = y_0 + \frac{b}{a}(x - x_0)$$

Die charakteristischen Grundkurven der Gleichung $au_x + bu_y = c$ bilden somit eine Schar von Geraden mit der Steigung b/a .



Charakteristische Lösung

Die charakteristische Lösung (Verträglichkeitsbedingung) ist die Lösung längs der charakteristischen Grundkurve. Zur Darstellung dieser speziellen Lösung der Ausgangsgleichung wird diese in ein neues Koordinatensystem $\xi(x, y), \tau(x, y)$ transformiert. Eine Koordinate, hier $\xi = \text{const.}$, repräsentiert die charakteristische Grundkurve $\Omega = \text{const.}$ (der Allgemeinheit halber hier $\xi = \text{const.}$ genannt), die andere Koordinate ist (für Gleichungen 1. Ordnung) frei wählbar, hier z.B. $\tau = x$.

$$\begin{aligned} d\xi &= \frac{b}{a} dx - dy \\ d\tau &= dx \end{aligned}$$

Aus der Gleichung $a u_x + b u_y = c$ folgt mit der Kettenregel

$$u_x = \xi_x u_\xi + \tau_x u_\tau = \frac{b}{a} u_\xi + u_\tau, \quad u_y = \xi_y u_\xi + \tau_y u_\tau = -u_\xi$$

die transformierte Gleichung (Normalform der Gleichung)

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \tau} \right|_{\xi=\text{const.}} = \frac{c}{a}$$

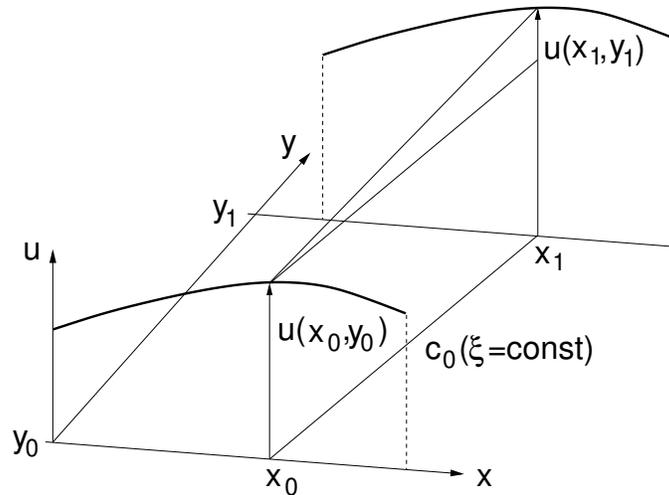
Die charakteristische Lösung über der Grundkurve $\xi = \frac{b}{a}x - y = \text{const.}$ ergibt sich durch Integration über τ :

$$u(\tau, \xi) = \frac{c}{a} \cdot \tau + k(\xi)$$

Für den Anfangswert $u_0(x_0, y_0)$ auf der charakteristischen Grundkurve $\xi = \xi_0 = \frac{b}{a}x_0 - y_0 = \text{const.}$ und mit $\tau = x$ erhält man die Lösung:

$$u(x, y) = \frac{c}{a} (x - x_0) + u_0(x_0, y_0)$$

Im Spezialfall $c = 0$ bleibt die Anfangslösung längs der charakteristischen Linie konstant, d.h. $u(x, y) = u(\xi) = \text{const.}$ Lösungen dieser Art treten in der Gasdynamik öfter auf, z.B. für die Prandtl-Meyer Expansion.



1.2.2 Partielle Differentialgleichungen 2. Ordnung

Die Herleitung der Charakteristiken erfolgt analog zu den Gleichungen 1. Ordnung. Als Ausgangsgleichung wird folgende Gleichung betrachtet:

$$L(u) = a u_{xx} + 2b u_{xy} + c u_{yy} + d(x, y, u, u_x, u_y) = 0$$

Über der Grundkurve C_0 , gegeben durch $\Omega(x, y) = \text{const.}$, seien die Lösung $u(x, y)$ und die niederen Ableitungen u_x und u_y bekannt. Zur Darstellung der Charakteristiken (höchste Querableitungen unbestimmt) transformiert man die Differentialgleichung in ein Koordinatensystem (S, Ω) , mit S tangential zu C_0 und Ω quer zu C_0

Für die Transformation $(x, y) \rightarrow (S, \Omega)$ erhält man die Ableitungen

$$\begin{aligned} u_{xx} &= u_{\Omega\Omega} \Omega_x^2 + 2u_{S\Omega} \Omega_x S_x + u_{SS} S_x^2 + u_{\Omega} \Omega_{xx} + u_S S_{xx} \\ u_{yy} &= u_{\Omega\Omega} \Omega_y^2 + \dots \\ u_{xy} &= u_{\Omega\Omega} \Omega_x \Omega_y + \dots \end{aligned}$$

Alle Ableitungen, außer der zweiten Querableitung $u_{\Omega\Omega}$, sind auf der Lösungskurve bekannt.

Damit erhält man die Differentialgleichung im neuen Koordinatensystem:

$$L(u) = Q \cdot u_{\Omega\Omega} + [\sim] u_{\Omega S} + [\sim] u_{SS} + [\sim] = 0$$

mit

$$Q = a \Omega_x^2 + 2b \Omega_x \Omega_y + c \Omega_y^2$$

Für die Darstellung des Charakteristikenproblems ist entscheidend, daß die höchste Querableitung, hier $u_{\Omega\Omega}$, unbestimmt ist. Dies ist dann der Fall, wenn die Charakteristikenbedingung $Q = 0$ gilt.

Mit $Q=0$ und der Grundkurve $\Omega = \text{const.}$

$$\begin{aligned} Q &= a \Omega_x^2 + 2b \Omega_x \Omega_y + c \Omega_y^2 = 0 \\ d\Omega &= \Omega_x dx + \Omega_y dy = 0 \end{aligned}$$

erhält man das charakteristische Polynom

$$a \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - 2b \frac{dy}{dx} + c = 0$$

Die Charakteristiken ergeben sich als Wurzeln dieses Polynomes zu

$$\frac{dy}{dx} \Big|_{1,2} = \frac{1}{a} \left(b \pm \sqrt{b^2 - ac} \right)$$

Entscheidend für das Lösungsverhalten ist, ob die Charakteristiken reell oder komplex sind. Dieses wird durch das Vorzeichen der Diskriminante Δ bestimmt

$$\Delta = b^2 - a \cdot c$$

Je nach Vorzeichen der Diskriminante erfolgt die Klassifizierung der partiellen Differentialgleichungen 2. Ordnung in hyperbolischen, parabolischen und elliptischen Typ (in Analogie zur Kegelschnittgleichung $a y^2 - 2b xy + c x^2 = 0$).

- hyperbolisch $\Delta > 0$ $\left. \frac{dy}{dx} \right|_1 \neq \left. \frac{dy}{dx} \right|_2$ reelle Charakteristiken
- parabolisch $\Delta = 0$ $\left. \frac{dy}{dx} \right|_1 = \left. \frac{dy}{dx} \right|_2$ reelle Doppelcharakteristik
- elliptisch $\Delta < 0$ $\left. \frac{dy}{dx} \right|_1 \neq \left. \frac{dy}{dx} \right|_2$ komplexe Charakteristiken

Für Systeme partieller Differentialgleichungen 1. Ordnung (z.B. Eulergleichungen) gilt die gleiche Klassifizierung wie für Gleichungen 2. Ordnung.

Kanonische bzw. Normalform von Gleichungen 2. Ordnung

Ähnlich wie bei der Herleitung der charakteristischen Lösung von Gleichungen 1. Ordnung lassen sich die partiellen Differentialgleichungen 2. Ordnung durch Transformation auf charakteristische Koordinaten (bzw. Kombinationen) auf eine typische Form (Normalform) bringen, bei der die höchsten Ableitungen koeffizientenfrei sind.

Für die Gleichung

$$a u_{xx} + 2b u_{xy} + c u_{yy} + F(u_x, u_y, u, x, y) = 0$$

mit den Charakteristiken

$$\frac{dy}{dx} = \frac{b}{a} \pm \frac{1}{a} \sqrt{b^2 - ac}$$

lassen sich mit den Abkürzungen

$$\alpha = \frac{b}{a} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{1}{a} \sqrt{|b^2 - ac|}$$

neue Koordinaten einführen:

$$\begin{aligned} d\xi_1 &= \alpha dx - dy \\ d\eta_1 &= \beta dx \end{aligned}$$

Die Transformation der Gleichung ergibt die folgenden Normalformen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_1^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial \eta_1^2} + \dots &= 0 \quad \text{hyperbolische PDGL.} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial \eta_1^2} + \dots &= 0 \quad \text{elliptische PDGL.} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial \eta_1^2} + \dots &= 0 \quad \text{parabolische PDGL.} \end{aligned}$$

Für hyperbolische Gleichungen existiert eine weitere Normalform mit den charakteristischen Koordinaten

$$\begin{aligned} d\xi &= d\xi_1 + d\eta_1 = \left. \frac{dy}{dx} \right|_1 dx - dy \\ d\eta &= d\xi_1 - d\eta_1 = \left. \frac{dy}{dx} \right|_2 dx - dy \end{aligned}$$

Diese Normalform lautet:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \dots = 0$$

Viele Gleichungen der Strömungsmechanik, insbesondere in kartesischen Koordinaten, treten in ihrer Normalform auf und sind durch Vergleich mit den Normalformen einzuordnen.

1.2.3 Vereinfachte Berechnung der Charakteristiken

Aus der ausführlichen Herleitung läßt sich erkennen, daß zur Bestimmung der Charakteristiken die Bedingung $Q = 0$ genügt, wobei Q sich aus der Transformation der führenden Ableitungen nach Ω ergibt. Für eine vereinfachte Berechnung kann man deshalb eine Variable $u(x, y)$ als Funktion von Ω allein betrachten, d.h. $u(x, y) = u(\Omega(x, y))$. Die Ableitungen, z.B. nach x , ersetzt man durch

$$u_x = \Omega_x \cdot u_\Omega \quad , \quad u_{xx} = (\Omega_x)^2 \cdot u_{\Omega\Omega} + \dots$$

Die Charakteristiken ergeben sich dann aus der Charakteristikenbedingung $Q = 0$ und aus $\Omega = \text{const.}$

1. Beispiel: Gleichung 1. Ordnung

$$\begin{aligned} & \underline{a u_x + b u_y = c} \\ & (a \Omega_x + b \Omega_y) u_\Omega = c \\ & Q = a \Omega_x + b \Omega_y = 0 \\ & d\Omega = \Omega_x dx + \Omega_y dy = 0 \\ & \rightarrow \underline{\frac{dy}{dx} \Big|_1 = \frac{b}{a}} \rightarrow \text{hyperbolisch} \end{aligned}$$

2. Beispiel: System von Gleichungen (Cauchy-Riemannsche Gleichungen)

$$\begin{aligned} & \left. \begin{aligned} \underline{u_x + v_y = 0} \\ \underline{u_y - v_x = 0} \end{aligned} \right\} \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial}{\partial x} \end{array} \right) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \\ & Q = \det \begin{vmatrix} \Omega_x & \Omega_y \\ \Omega_y & -\Omega_x \end{vmatrix} = -\Omega_x^2 - \Omega_y^2 = 0 \rightarrow \frac{\Omega_x}{\Omega_y} \Big|_{1,2} = \pm \sqrt{-1} = \pm I \\ & \rightarrow \underline{\frac{dy}{dx} \Big|_{1,2} = \pm I} \rightarrow \text{elliptisch} \end{aligned}$$

3. Beispiel: Wellengleichung

$$\begin{aligned} & \underline{u_{tt} - a_o^2 u_{xx} = 0} \\ 1. \text{ Weg: } & Q = \Omega_t^2 - a_o^2 \Omega_x^2 = 0 \rightarrow \frac{\Omega_t}{\Omega_x} \Big|_{1,2} = \pm a_o \\ & \underline{\frac{dx}{dt} \Big|_{1,2} = \pm a_o} \rightarrow \text{hyperbolisch} \end{aligned}$$

2. Weg: Substitution $q = u_t$, $p = u_x \rightarrow q_x = p_t$

$$\begin{aligned} q_t - a_o^2 p_x &= 0 \\ q_x - p_t &= 0 \end{aligned}$$

$$Q = \det \begin{vmatrix} \Omega_t & -a_o^2 \Omega_x \\ \Omega_x & -\Omega_t \end{vmatrix} = -\Omega_t^2 + a_o^2 \Omega_x^2 = 0 \rightarrow \frac{\Omega_t}{\Omega_x} \Big|_{1,2} = \pm a_o$$

1.3 Grundlagen der numerischen Lösung

Zur numerischen Lösung der partiellen Differentialgleichungen unterteilt man den Integrationsbereich in ein Gitternetz diskreter Punkte in der Ebene der unabhängigen Variablen (Raum, Zeit). Auf den diskreten Punkten sind die geometrischen Koordinaten und die abhängigen Variablen (Erhaltungsgrößen) definiert. Für jeden Gitterpunkt werden die Differentialgleichungen durch Differenzgleichungen approximiert. Diese Gleichungen und die diskretisierten Rand- und Anfangsbedingungen ergeben ein System von gekoppelten, algebraischen Gleichungen, das auf einem digitalen Rechner gelöst werden kann.

Die numerische Lösung ist auf Grund der Differenzenbildung eine Näherung. Das Ziel der numerischen Lösung ist es, sich der exakten Lösung des Differentialproblems zu nähern, d.h. die numerische Lösung soll konvergent sein. Eine Lösung heißt konvergent, wenn mit kleiner werdenden Schrittweiten die numerische in die exakte Lösung übergeht. Um konvergente Lösungen zu erreichen, müssen einige notwendige Voraussetzungen bei der Diskretisierung erfüllt werden, nämlich Konsistenz und numerische Stabilität des Differenzenschema. Die Grundlagen hierzu werden in diesem Kapitel behandelt.

1.3.1 Entwicklung von konsistenten Differenzenausdrücken

Bei der numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen stehen nur an den diskreten Punkten Informationen zur Verfügung. Die Differenzenausdrücke, die die Differentiale an einem bestimmten Punkt (Aufpunkt) approximieren, sind Funktionen der umgebenden Nachbarwerte.

Die Entwicklung von Differenzenausdrücken für die abhängige Variable erfolgt mit Hilfe von Taylorreihen um den Aufpunkt. Wichtige Voraussetzung hierfür ist:

Alle abhängigen Variablen besitzen lokal eine Reihenentwicklung,
d.h. ihr Verlauf sei stetig und genügend oft differenzierbar.

Durch die Reihenentwicklung wird das Differential ersetzt durch eine Differenzenapproximation plus einem Abbruchfehler τ , der die nicht berücksichtigten Terme der Reihe repräsentiert.

$$\frac{\partial f}{\partial x} \rightarrow \frac{\Delta f}{\Delta x} + \tau$$

Der Abbruchfehler ist die Differenz zwischen Differentialform und der entsprechenden Differenzenapproximation.

$$\tau \equiv \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\Delta f}{\Delta x}$$

Er ist eine wichtige Größe zur Beurteilung der Konsistenz, der Genauigkeit und der Lösungseigenschaften von Differenzenapproximationen.

Man bezeichnet die Differenzenapproximation als konsistent, wenn mit kleiner werdenden Schrittweiten, $\Delta x \rightarrow 0$, diese gegen das Differential strebt. Damit muß auch der Abbruchfehler verschwinden.

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \tau = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\Delta f}{\Delta x} \right) = 0$$

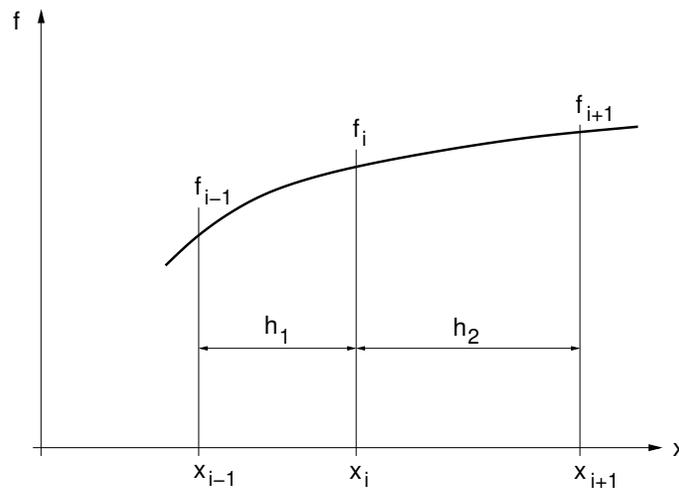
Der Abbruchfehler enthält die nicht berücksichtigten höheren Ableitungen der Taylorreihenentwicklung, multipliziert mit Potenzen der Schrittweiten. Bei geeigneter Normierung haben die Variablen und ihre Ableitungen die Größenordnung $O(1)$. Für die Schrittweiten Δx gilt $\Delta x \ll 1$. Somit wird die Größenordnung von τ und damit der Diskretisierungsfehler durch die kleinste Potenz der Schrittweite bestimmt, d.h.

$$\tau = O(\Delta x^k) \quad k > 0$$

Durch unterschiedliche Wahl der berücksichtigten Stützstellen und Glieder der Reihenentwicklung ändert sich der Abbruchfehler und somit die Lösungseigenschaften der Differenzennäherung. Das bedeutet, daß der Übergang von Differential zu Differenz nicht eindeutig ist. Es existieren somit für einen Differentialausdruck unterschiedliche Differenzenapproximationen. Dies wird im folgenden für die wichtigen ersten und zweiten Ableitungen gezeigt.

Differenzenausdrücke für Ableitungen 1. und 2. Ordnung

Gesucht sind Differenzenausdrücke für $\frac{\partial f}{\partial x}$ oder $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ einer Variablen $f(x)$, die an diskreten Punkten x_i gegeben ist ($f(x_i) = f_i$). Die maximale Zahl der Stützpunkte sei drei. Die Schrittweiten $h_i = x_i - x_{i-1}$ können variabel sein.



- Taylorreihenentwicklung von $f_{i\pm 1}$ um f_i :

$$(1) \quad f_{i+1} = f_i + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i \cdot h_2 + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i \cdot \frac{h_2^2}{2!} + \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i \cdot \frac{h_2^3}{3!} + \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_i \cdot \frac{h_2^4}{4!} + \dots$$

$$(2) \quad f_{i-1} = f_i - \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i \cdot h_1 + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i \cdot \frac{h_1^2}{2!} - \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i \cdot \frac{h_1^3}{3!} + \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_i \cdot \frac{h_1^4}{4!} + \dots$$

- Approximationen für $\frac{\partial f}{\partial x}$ (durch Kombination von (1) und (2)):

- a) Vorwärtsdifferenz

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_2} + \left(-\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{h_2}{2!} - \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \frac{h_2^2}{3!} + \dots \right) \quad \tau = O(h_2)$$

b) Rückwärtsdifferenz

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h_1} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{h_1}{2} - \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \frac{h_1^2}{3!} + \dots \right) \quad \tau = O(h_1)$$

c) Zentraldifferenz

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{h_1 + h_2} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{h_1 - h_2}{2} - \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2} + \dots \right) \tau = O(h_1 - h_2)$$

d) Zentraldifferenz ($\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ eliminiert, genauer als c) für $h_2 \neq h_1$)

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{h_1^2 (f_{i+1} - f_i) + h_2^2 (f_i - f_{i-1})}{h_1 h_2 (h_1 + h_2)} + \left(-\frac{1}{6} h_1 h_2 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \tau = O(h_1 \cdot h_2)$$

e) Zentraldifferenz für konst. Schrittweiten $h = h_1 = h_2$

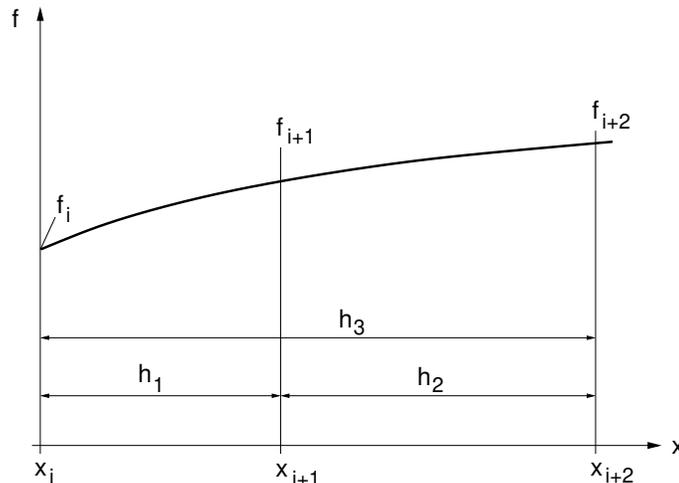
$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \left(-\frac{1}{6} h^2 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \quad \tau = O(h^2)$$

• Approximationen für $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ a) Zentraldifferenz

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{2[(f_{i+1} - f_i)h_1 - (f_i - f_{i-1})h_2]}{h_1 h_2 (h_1 + h_2)} + \left(\frac{h_1 - h_2}{3} \cdot \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \tau = O(h_1 - h_2)$$

b) Zentraldifferenz für konst. Schrittweiten $h = h_1 = h_2$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} - \left(\frac{h^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} + \dots \right) \quad \tau = O(h^2)$$

• Einseitige (3-Punkt) Approximationen für $\frac{\partial f}{\partial x}$ und $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ mit $h_3 = h_1 + h_2$ Taylorreihenentwicklung von f_{i+1}, f_{i+2} um f_i

$$f_{i+1} = f_i + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i \cdot h_1 + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i \cdot \frac{h_1^2}{2!} + \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i \cdot \frac{h_1^3}{3!} + \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_i \cdot \frac{h_1^4}{4!} + \dots$$

$$f_{i+2} = f_i + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i \cdot h_3 + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i \cdot \frac{h_3^2}{2!} + \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_i \cdot \frac{h_3^3}{3!} + \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_i \cdot \frac{h_3^4}{4!} + \dots$$

a) Einseitige Differenz für $\frac{\partial f}{\partial x}$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = - \frac{(f_{i+2} - f_i) h_2^2 - (f_{i+1} - f_i) h_3^2}{h_2 h_3 (h_3 - h_2)} + \left(\frac{h_2 h_3}{6} \cdot \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \tau = O(h_2 h_3)$$

Konstante Schrittweiten : $h = h_2 = h_3 / 2$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = - \frac{f_{i+2} + 3 f_i - 4 f_{i+1}}{2 h} + \left(\frac{h^2}{3} \cdot \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \tau = O(h^2)$$

b) Einseitige Differenz für $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{2 \cdot [(f_{i+2} - f_i) h_2 - (f_{i+1} - f_i) h_3]}{h_2 h_3 (h_3 - h_2)} + \left(-\frac{h_3 + h_2}{3} \cdot \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \tau = O(h_2 + h_3)$$

Konstante Schrittweiten : $h = h_2 = h_3 / 2$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{f_{i+2} - 2 f_{i+1} + f_i}{h^2} + \left(-h \cdot \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \right) \tau = O(h)$$

Differenzenschemata

Die Lösung einer Differentialgleichung erfolgt numerisch durch Ersetzen der Differentiale durch Differenzen. Hierdurch erhält man für jeden Gitterpunkt eine Differenzengleichung, die i.a. für jeden Punkt gleich ist und deshalb als Differenzenschema bezeichnet wird.

Die Differenzengleichungen aller Gitterpunkte bilden ein System algebraischer Gleichungen, das zu lösen ist. Entsprechend der verschiedenen Differenzenbildungen für eine Ableitung können unterschiedlich starke Kopplungen der Unbekannten zwischen den Gitterpunkten auftreten. Im wesentlichen unterscheidet man hierbei zwischen expliziten und impliziten Differenzenschemata.

Explizite Differenzenschemata führen auf Verfahren, bei denen die Unbekannte an einem Gitterpunkt direkt aus bekannten Werten ermittelt werden kann, da keine Kopplung zu den Nachbarn besteht (Lösungsmatrix ist eine Einheitsmatrix). Der Vorteil ist die einfache, und somit schnelle Auflösung des Gleichungssystems. Der Nachteil ist jedoch eine Beschränkung der Schrittweiten durch numerische Stabilität.

In impliziten Differenzenschemata sind die Unbekannten zwischen den Nachbarn gekoppelt (Lösungsmatrix mit Bandstruktur). Infolge der Kopplung ist i.a. keine Schrittweitenbegrenzung aus Stabilitätsgründen nötig, jedoch ist die Lösung des Gleichungssystems wesentlich aufwendiger, da sie rekursiv erfolgt.

Beispiele für implizites und explizites Schema:

Diskretisierung der parabolischen Fourierrechnung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \nu = \text{const.} > 0$$

Diskrete Variable:

$$t_n = n \cdot \Delta t \quad x_i = i \cdot \Delta x \quad u_i^n = u(x_i, t_n)$$

- Explizites Schema : Zeitableitung vorwärts und Ortsabl. zentral für Punkt t_n, x_i .

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

→ Auflösung nach Unbekannter u_i^{n+1}

$$\underline{u_i^{n+1}} = u_i^n + \sigma(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad \text{mit } \sigma = \nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

- Implizites Schema: Zeitableitung rückwärts und Ortsabl. zentral für Punkt t_{n+1}, x_i .

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

→ Auflösung nach den Unbekannten $u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1}, u_{i+1}^{n+1}$

$$\underline{-\sigma u_{i-1}^{n+1} + (1 + 2\sigma) u_i^{n+1} - \sigma u_{i+1}^{n+1}} = u_i^n$$

⇒ gekoppeltes tridiagonales Gleichungssystem

⇒ Auflösung mit Gaußschem Eliminationsverfahren

Ergänzung: Lösung eines tridiagonalen Gleichungssystems

Die Lösung tridiagonaler Gleichungssysteme, z.B. aus einem impliziten Differenzenschema, erfolgt mit einem Gaußschen Eliminationsverfahren. Das Verfahren, speziell für tridiagonale Systeme, wird auch Thomas-Algorithmus oder Richtmeyer-Algorithmus genannt.

Das tridiagonale Gleichungssystem für die Unbekannten u_i sei:

$$a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = R_i \quad i = 2, \dots, im - 1 \quad (1.1)$$

Die Randbedingungen für $i = 1$ und $i = im$ seien in allgemeiner Form von 3. Art, welche Dirichlet'sche und Gradienten-Randbedingungen einschließen.

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial x} = \gamma$$

Diese Randbedingung diskretisiert, z.B. für $i = 1$ ergibt $\alpha u_1 + \beta \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} = \gamma$ und somit die Randwerte für $i = 1$ und $i = im$ in der Form

$$u_1 = r_1 u_2 + s_1 \quad \text{und} \quad u_{im} = r_{im} u_{im-1} + s_{im}$$

Mit einem Rekursionsansatz wird Gl. (1) auf ein bidiagonales Gleichungssystem (hier obere Dreiecksmatrix) zurückgeführt.

$$u_i = E_i u_{i+1} + F_i \quad (1.2)$$

Die Rekursionskoeffizienten E_i und F_i erhält man durch Einsetzen von Gl. (2) in die Ausgangsgleichung (1) und Elimination von u_{i-1}

$$E_i = \frac{-c_i}{a_i E_{i-1} + b_i} \quad \text{und} \quad F_i = \frac{R_i - a_i F_{i-1}}{a_i E_{i-1} + b_i} \quad (1.3)$$

Der Lösungsablauf erfordert zunächst die Berechnung der Rekursionskoeffizienten für $i = 2, \dots, im$ nach Gl. (3). Die Startwerte E_1 und F_1 ergeben sich aus dem Rekursionsansatz und der Randbedingung für $i = 1$.

$$\begin{aligned} u_1 &= E_1 u_2 + F_1 \\ u_1 &= r_1 u_2 + s_1 \\ \rightarrow E_1 &= r_1 \quad F_1 = s_1 \end{aligned}$$

Nachdem alle Rekursionskoeffizienten E_i, F_i für $i = 2, \dots, im$ berechnet sind, bestimmt man die Lösung von u_i aus Gl. (2). Hierzu benötigt man den Randwert u_{im} , der sich aus dem Rekursionsansatz und der Randbedingung für $i = im$ ergibt.

$$\begin{aligned} u_{im-1} &= E_{im-1} u_{im} + F_{im-1} \\ u_{im} &= r_{im} u_{im-1} + s_{im} \\ \rightarrow u_{im} &= \frac{-r_{im} F_{im-1} - s_{im}}{r_{im} E_{im-1} - 1} \end{aligned}$$

Die endgültige Lösung berechnet man mit dem Rekursionsansatz Gl. (2)

$$u_i = E_i u_{i+1} + F_i \quad i = im - 1, im - 2, \dots, 1$$

Konsistenz von Differenzenschemata

Für ein Differenzenschema ist, wie für die einzelnen Differenzen, Konsistenz mit der Differentialform nachzuweisen. Die Differenzenformulierung einer partiellen Differentialgleichung muß im Grenzübergang $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ gegen die Differentialgleichung streben, da nur dann die numerische Lösung gegen die analytische streben kann.

Man bezeichnet ein Differenzenschema als konsistent mit einer partiellen Differentialgleichung, wenn mit verschwindenden Schrittweiten $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ das Differenzenschema in die partielle Differentialgleichung übergeht, d.h. wenn der Abbruchfehler gegen Null geht.

Für ein Differenzenschema $L_\Delta(u) = 0$ einer partiellen Differentialgleichung $L(u) = 0$ mit der exakten Lösung u ist Konsistenz dann gegeben, wenn

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \|L(u) - L_\Delta(u)\| = \lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \|\tau(u)\| = 0$$

Beispiel : Konsistenznachweis für das explizite Schema der Fourierrechnung

$$\text{PDGl.: } L(u) = \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

$$\text{FDGl.: } L_\Delta(u) = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} - \nu \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} = 0$$

Taylorreihenentwicklung :

$$u^{n+1} = u^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^n \Delta t + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_i^n \frac{\Delta t^2}{2} + \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \Big|_i^n \frac{\Delta t^3}{6} + \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} \Big|_i^n \frac{\Delta t^4}{24} + \dots$$

$$u_{i\pm 1} = u_i \pm \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i \frac{\Delta x^2}{2} \pm \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_i \frac{\Delta x^3}{6} + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_i \frac{\Delta x^4}{24} \pm \dots$$

in FDGl. :

$$L_\Delta(u) = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \frac{\Delta t}{2} + O(\Delta t^2) - \nu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{12} \Delta x^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + O(\Delta x^4) \right]$$

Abbruchfehler :

$$\tau(u) = L(u) - L_\Delta(u) = -\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \frac{\Delta t}{2} + \nu \frac{\Delta x^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

Konsistenz :

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \tau(u) = 0$$

1.3.2 Numerische Stabilität

Einführung

Numerische Stabilität, bzw. Instabilität ist eine Eigenschaft eines Differenzschemas, die das Verhalten der Differenzlösung auf kleine Störungen beschreibt. Solche Störungen werden durch „externe“ Fehler verursacht, wie z.B. der Rundungsfehler infolge endlicher Stellenzahl eines Rechners. Je nachdem, ob diese Fehler von Zeitschritt zu Zeitschritt begrenzt bleiben oder anwachsen, spricht man von stabilen bzw. instabilen Schemata.

Die Differenzlösung eines Differentialproblem es kann instabil werden, obwohl die entsprechende analytische Lösung stabil ist. Die Ursache liegt an der Approximation, durch die im Prinzip eine um den Abbruchfehler veränderte Differentialgleichung gelöst wird. Mit dem Differentialproblem $L(\hat{u}) = 0$ und dem Differenzenproblem $L_{\Delta}(\hat{u}) = 0$ ergibt sich die veränderte Differentialgleichung zu:

$$L_{\Delta}(\hat{u}) = L(\hat{u}) - \tau = 0$$

Durch die höheren Ableitungen im Abbruchfehler verändern sich die Lösungseigenschaften und durch die Schrittweiten darin entsteht eine starke Abhängigkeit der Stabilität von den Schrittweiten (siehe auch Hirtsche Stabilitätsanalyse). Aus diesem Grunde ist es wichtig, den Stabilitätsbereich eines Differenzschemas zu ermitteln.

Ein vereinfachtes Stabilitätskriterium läßt sich wie folgt herleiten:

Die exakte Differenzlösung zur Zeit $t = n\Delta t$ der Differenzgleichung $L_{\Delta}(U) = 0$ sei U^n und W^n sei die aktuelle Lösung (mit Rundungsfehler) dieser Gleichung. Der maximale Fehlerbetrag der Differenz $|\varepsilon^n| = |W^n - U^n|$ zwischen zwei Zeitschritten $t = n\Delta t$ und $t + \Delta t = (n + 1)\Delta t$ ist proportional einer positiven Konstanten k

$$\max |\varepsilon^{n+1}| = k \cdot \max |\varepsilon^n| \quad k > 0$$

Nach n Schritten ergibt sich aus einem Anfangsfehler ε^0 der maximale Fehlerbetrag

$$\max |\varepsilon^{n+1}| = k^n \cdot \max |\varepsilon^0|$$

Ein Schema ist dann stabil, wenn für $n \rightarrow \infty$ der Fehler begrenzt bleibt, d.h.

$$\underline{k \leq 1}$$

bzw.

$$\underline{\max |\varepsilon^{n+1}| \leq \max |\varepsilon^n|}$$

Zur Stabilitätsuntersuchung von Differenzschemas setzt man eine bestimmte Fehlerverteilung in das Schema ein und überprüft das Kriterium. Für eine Einzelstörung ergibt sich die „diskrete Störtheorie“, für eine periodische Störung erhält man die „von Neumannsche Stabilitätsanalyse“.

Diskrete Störtheorie der Stabilität

Die diskrete Störtheorie ist eine empirische Methode zur Untersuchung der Stabilität. Hierbei wird als Anfangsbedingung eine Einzelstörung ε auf einem Gitterpunkt vorgegeben. Diese wird einer exakten Differenzlösung U überlagert. Die aktuelle Lösung W ist dann:

$$W = U + \varepsilon$$

Das zeitliche und räumliche Verhalten der Störung erhält man aus der Lösung der Differenzgleichung für aufeinanderfolgende Zeitschritte. Das Schema wird instabil, wenn der maximale Betrag der Störung anwächst.

Bei linearen Gleichungen erfüllt die Störung ε (Fehler) dieselbe Differenzgleichung wie die Lösung U selbst, da

$$L_{\Delta} \cdot W = \underbrace{L_{\Delta} \cdot U}_0 + L_{\Delta} \cdot \varepsilon = 0 \quad \Rightarrow \quad L_{\Delta} \cdot \varepsilon = 0$$

Für lineare Gleichungen kann deshalb der Verlauf der Störung direkt aus der Differenzgleichung berechnet werden. Dies soll an einem Beispiel gezeigt werden.

Beispiel : Betrachtet wird ein explizites Schema für die Fourierrechnung $u_t = \nu u_{xx}$:

$$\varepsilon_i^{n+1} = \sigma \varepsilon_{i-1}^n + (1 - 2\sigma) \varepsilon_i^n + \sigma \varepsilon_{i+1}^n \quad \text{mit} \quad \sigma = \nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

Die Analyse des Fehlerverhaltens ergibt die folgenden Resultate:

- Anfangsbedingung $n = 0$
 $\varepsilon_i^0 = \varepsilon$ für $i = i_s$ $\varepsilon_i^0 = 0$ für $i \neq i_s$
- Zeitschritt $n = 1$
 $\varepsilon_{i_s}^1 = (1 - 2\sigma) \varepsilon$; $\varepsilon_{i_s \pm 1}^1 = \sigma \varepsilon$
 aus $\frac{\max|\varepsilon^1|}{\max|\varepsilon^0|} \leq 1$ folgt $|\sigma| \leq 1$ bzw. $|1 - 2\sigma| \leq 1$
 $\rightarrow 0 < \sigma \leq 1$
- Zeitschritt $n = 2$
 $\varepsilon_{i_s}^2 = (1 - 4\sigma + 6\sigma^2) \varepsilon$; $\varepsilon_{i_s \pm 1}^2 = (2\sigma - 4\sigma^2) \varepsilon$; $\varepsilon_{i_s \pm 2}^2 = \sigma^2 \varepsilon$
 $\rightarrow 0 < \sigma \leq 2/3$
- Zeitschritt n ($n \rightarrow \infty$)
 $\rightarrow \underline{0 < \sigma \leq 1/2}$ asymptotische Stabilitätsgrenze

Das Verhalten der Störung für eine stabile Lösung mit $\sigma = \frac{1}{2}$ und für eine instabile Lösung mit $\sigma = 1$ ist in den folgenden Tabellen dargestellt.

- $\sigma = 1/2$ Fehler $\max |\varepsilon_i^n|$ klingt ab \rightarrow die Lösung bleibt stabil

		$i\Delta x$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$n\Delta t$	$n \backslash i$	0	1	2	3	is=4	5	6	7	8	9	10	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0.5	1	0	0	0	0	ε	0	0	0	0	0	0	
1.0	2	0	0	0	$\frac{1}{2}\varepsilon$	0	$\frac{1}{2}\varepsilon$	0	0	0	0	0	
1.5	3	0	0	$\frac{1}{4}\varepsilon$	0	$\frac{1}{2}\varepsilon$	0	$\frac{1}{4}\varepsilon$	0	0	0	0	
2.0	4	0	$\frac{1}{8}\varepsilon$	0	$\frac{3}{8}\varepsilon$	0	$\frac{3}{8}\varepsilon$	0	$\frac{1}{8}\varepsilon$	0	0	0	
2.5	5	0	0	$\frac{1}{4}\varepsilon$	0	$\frac{3}{8}\varepsilon$	0	$\frac{1}{4}\varepsilon$	0	$\frac{1}{16}\varepsilon$	0	0	
3.0	6	0	$\frac{1}{8}\varepsilon$	0	$\frac{7}{16}\varepsilon$	0	$\frac{7}{16}\varepsilon$	0	$\frac{1}{32}\varepsilon$	0	$\frac{1}{32}\varepsilon$	0	

- $\sigma = 1$ Fehler $\max |\varepsilon_i^n|$ steigt \rightarrow die Lösung wird instabil

		$i\Delta x$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$n\Delta t$	$n \backslash i$	0	1	2	3	is=4	5	6	7	8	9	10	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
1	1	0	0	0	0	ε	0	0	0	0	0	0	
2	2	0	0	0	ε	$-\varepsilon$	ε	0	0	0	0	0	
3	3	0	0	ε	-2ε	3ε	-2ε	ε	0	0	0	0	
4	4	0	ε	-3ε	6ε	-7ε	6ε	-3ε	ε	0	0	0	
5	5	0	-4ε	10ε	-16ε	19ε	-16ε	10ε	-4ε	ε	0	0	
6	6	0	14ε	-30ε	45ε	-51ε	45ε	-30ε	15ε	-5ε	ε	0	

Folgerungen :

- Für eine große Anzahl von Zeitschritten ist das Schema stabil, wenn

$$0 < \sigma \leq 1/2 \quad (\text{bedingt stabiles Diff.-Schema})$$

- Aus der Stabilitätsbedingung folgt eine Zeitschrittbegrenzung

$$\Delta t_{\max} \leq 1/2 \cdot \frac{\Delta x^2}{\nu}$$

- Eine Ortsschrittverkleinerung bewirkt eine quadratische Verkleinerung von Δt

$$\Delta t \sim \Delta x^2$$

- Für praktische Rechnungen ist die Störtheorie jedoch zu aufwendig!

von Neumann'sche Stabilitätsanalyse

J.von Neumann , Los Alamos (1944) in: O'Brien et.al. : Journ. Math.Phys., 29 ,1951

- Statt einer Einzelstörung betrachtet man eine räumlich periodische Fehlerfunktion mit zeitabhängiger Amplitude (Fourierreihe). Durch einen solchen Ansatz wird die Stabilitätsuntersuchung analytisch durchführbar, man erhält sofort das asymptotische Verhalten für $n \rightarrow \infty$. Die periodische Fehlerfunktion wird in die Differenzgleichung eingesetzt und das zeitliche Verhalten der Amplitude berechnet. Wächst die Amplitude von Zeitschritt zu Zeitschritt, ist das Schema instabil, umgekehrt ist es stabil.
- Die wesentliche Einschränkung ist:
Die Analyse gilt nur für lineare Anfangswertprobleme ,
d.h. der Einfluß von Randbedingungen wird nicht betrachtet.
- Trotz der Einschränkung ist die von Neumann Analyse die meist verwendete Stabilitätsanalyse für Anfangswertprobleme. Sie liefert auch für nichtlineare Probleme sinnvolle Aussagen, wenn sie auf die entsprechende linearisierte Differenzgleichung (mit eingefrorenen Koeffizienten) angewendet wird.

Herleitung der Methode

Die Herleitung erfolgt für eine skalare, lineare Differenzgleichung in (x,t) .

- Die Fehlerfunktion wird in Form einer Fourierreihe angesetzt, mit der Amplitudenfunktion V und einer periodischen Ortsfunktion e^{Ikx} :

$$\varepsilon(x, t) = \sum_{k_{min}}^{k_{max}} V(t, k) \cdot e^{Ikx}$$

mit der Wellenzahl $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und $I = \sqrt{-1}$

Für das diskrete Differenzenproblem mit $x = i \Delta x$ und $t = n \Delta t$ folgt für den Ansatz

$$\varepsilon_i^n = \sum_{k_{min}}^{k_{max}} V^n(k) \cdot e^{Iki\Delta x} = \sum_{\Theta_{min}}^{\Theta_{max}} V^n(\Theta) \cdot e^{I\Theta i}$$

Hierbei ist $\Theta = k \Delta x$ der Wellenwinkel. Die Wellenzahlen k_{min} , k_{max} bzw. die Wellenwinkel Θ_{min} , Θ_{max} folgen aus den minimal und maximal auflösbaren Wellenlängen $\lambda_{min} = 2 \Delta x$ und $\lambda_{max} = 2 L$ des diskreten Problems (L =Integrationslänge). Damit sind der untere und obere Wert des Wellenwinkels $\Theta_{min} = 0$ und $\Theta_{max} = \pi$. Für diesen Bereich muß die Stabilität untersucht werden.

- Dieser Ansatz wird in die Differenzgleichung eingeführt. Ein allgemeines Differenzschema für zwei Zeitebenen lautet:

$$\sum_{j=-l_1}^{l_2} d_j \cdot u(x + j\Delta x, t + \Delta t) = \sum_{j=-m_1}^{m_2} c_j \cdot u(x + j\Delta x, t)$$

Ein Beispiel hierzu ist das explizite Schema für $u_t = \nu u_{xx}$:

$$u_i^{n+1} = \sigma u_{i-1}^n + (1 - 2\sigma) u_i^n + \sigma u_{i+1}^n \quad \rightarrow \quad \sum_{j=0}^0 d_j u_{i+j}^{n+1} = \sum_{j=-1}^1 c_j u_{i+j}^n$$

- Für lineare Gleichungen kann die Variable u durch den Fehler ε ersetzt werden. Mit dem Ansatz für ε_i^n erhält man für das allgemeine Schema:

$$\sum_j d_j \cdot \sum_{\Theta} V^{n+1}(\Theta) \cdot e^{I\Theta(i+j)} = \sum_j c_j \cdot \sum_{\Theta} V^n(\Theta) \cdot e^{I\Theta(i+j)}$$

Nach Vertauschung der Summanden

$$\sum_{\Theta} V^{n+1}(\Theta) \cdot \sum_j d_j \cdot e^{I\Theta(i+j)} = \sum_{\Theta} V^n(\Theta) \cdot \sum_j c_j \cdot e^{I\Theta(i+j)}$$

kann die Gleichung für jeden Wellenwinkel einzeln erfüllt werden (d.h. \sum_{Θ} weg).

Damit ergibt sich für einen Wellenwinkel Θ der gesuchte Zusammenhang zwischen den Amplituden zur alten und zur neuen Zeit

$$V^{n+1}(\Theta) = \frac{\sum_j c_j \cdot e^{I\Theta(i+j)}}{\sum_j d_j \cdot e^{I\Theta(i+j)}} \cdot V^n(\Theta)$$

Der Proportionalitätsfaktor zwischen den Amplituden V ist der Verstärkungs- oder Amplifikationsfaktor G .

$$G(\Theta, \Delta t, \Delta x, c_j, d_j) = \frac{\sum_j c_j \cdot e^{I\Theta(i+j)}}{\sum_j d_j \cdot e^{I\Theta(i+j)}}$$

Das Stabilitätskriterium, daß dieser Faktor zu erfüllen hat erhält man durch wiederholte (n -fache) Anwendung bis zur Anfangsamplitude $V^0(\Theta)$.

$$V^n(\Theta) = [G(\Theta \dots)]^n \cdot V^0(\Theta)$$

Damit der Fehler für $n \rightarrow \infty$ begrenzt bleibt, muß gelten:

$$|G(\Theta)| \leq 1 \quad \text{für} \quad 0 \leq \Theta \leq \pi$$

Diese Ungleichung ist die Stabilitätsbedingung für skalare Differenzenschemata.

- Die Stabilitätsanalyse läßt sich analog für Systeme herleiten. In diesem Falle ist \vec{V} der Vektor der Amplituden der einzelnen Variablen und \vec{G} die Verstärkungsmatrix. Es gilt dann:

$$\vec{V}^{n+1} = \vec{G} \vec{V}^n$$

Die Matrixnorm muß folgende Bedingung erfüllen :

$$\|\bar{G}^n\| \leq \text{const.} \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

Das Stabilitätskriterium fordert für die Eigenwerte λ_G von \bar{G} :

$$|\lambda_G| \leq 1$$

Anwendungsbeispiele der von Neumann Stabilitätsanalyse

Die von Neumannsche Stabilitätsanalyse ist eines der wichtigsten Hilfsmittel zur Untersuchung von numerischen Lösungsverfahren für Anfangswertprobleme. Die Anwendung der Analyse soll deshalb an Beispielen demonstriert werden, um zu zeigen, wie die Analyse sich in formalen Schritten durchführen läßt.

- 1. Beispiel:

Für die 2-D Fourier (Wärmeleitungs-) Gleichung

$$u_t = \nu (u_{xx} + u_{yy})$$

ist die Stabilität eines expliziten Schemas zu untersuchen. Das explizite Differenzenschema besteht aus einer Vorwärtsdifferenz in der Zeit und zentralen Differenzen in x und y Richtung:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \sigma_x (u_{i-1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n) + \sigma_y (u_{i,j-1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j+1}^n)$$

mit $\sigma_x = \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}$ und $\sigma_y = \frac{\nu \Delta t}{\Delta y^2}$

Als periodische Störung wird ein zweidimensionaler Fourieransatz für die Variable $u_{i,j}^n$ (= Ansatz für Fehler $\varepsilon_{i,j}^n$) vorgegeben.

$$u_{i,j}^n = V^n \cdot e^{I(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} = V^n \cdot e^{I(k_x i \Delta x + k_y j \Delta y)} = V^n \cdot e^{I(\Theta_x i + \Theta_y j)}$$

Der Verstärkungsfaktor ergibt sich aus $V^{n+1} = G \cdot V^n$ zu:

$$G = 1 - 2\sigma_x (1 - \cos \Theta_x) - 2\sigma_y (1 - \cos \Theta_y)$$

Die Stabilitätsbedingung $|G| \leq 1$ ist für $0 \leq \Theta \leq \pi$ zu überprüfen. Da G im allgemeinen komplex ist, empfiehlt es sich statt des Betrages das Quadrat vom Betrag zu untersuchen, d.h. $|G|^2 = (\text{Re } G)^2 + (\text{Im } G)^2 \leq 1$. Für den vorliegenden reellen Ausdruck für G ergibt sich:

$$|G|^2 = [1 - 2\sigma_x (1 - \cos \Theta_x) - 2\sigma_y (1 - \cos \Theta_y)]^2 \leq 1$$

Die Ungleichung ist für $0 \leq \Theta \leq \pi$ erfüllt, wenn gilt

$$\rightarrow \underline{\sigma_x + \sigma_y \leq \frac{1}{2}}$$

Das untersuchte Schema ist somit bedingt stabil. Der Zeitschritt ist danach begrenzt durch:

$$\Delta t \leq 1 / (2\nu(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}))$$

- 2. Beispiel:

Als zweites Beispiel soll die Anwendung der Stabilitätsanalyse auf ein System von Differenzgleichungen gezeigt werden. Das Ausgangssystem von partiellen Differentialgleichungen für die Variablen u und v ist hierbei:

$$\begin{aligned} u_t + a v_x &= 0 \\ v_t + b u_x &= 0 \end{aligned}$$

Das System kann zusammengefaßt werden zu:

$$\vec{U}_t + A \vec{U}_x = 0 \quad \text{mit} \quad \vec{U} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & a \\ b & 0 \end{pmatrix}$$

Für das System wird ein explizites Schema mit Vorwärtsdifferenz in der Zeit und zentraler Differenz im Ort, für beide Variablen gleich, formuliert. Dies ergibt:

$$\vec{U}_i^{n+1} = \vec{U}_i^n - A \frac{\Delta t}{2\Delta x} (\vec{U}_{i+1}^n - \vec{U}_{i-1}^n)$$

Der eindimensionale Fourieransatz ist auf den Vektor der Variablen anzuwenden:

$$\vec{U}_i^n = \vec{V}^n \cdot e^{I\Theta i} \quad \text{mit} \quad \vec{V}^n = \begin{pmatrix} V_u \\ V_v \end{pmatrix}^n$$

Die Verstärkungsmatrix $\overline{\overline{G}}$ erhält man aus der Umformung $\vec{V}^{n+1} = \overline{\overline{G}} \vec{V}^n$ zu:

$$\overline{\overline{G}} = \begin{pmatrix} 1 & -a \frac{\Delta t}{\Delta x} I \sin \Theta \\ -b \frac{\Delta t}{\Delta x} I \sin \Theta & 1 \end{pmatrix}$$

Die Stabilitätsbedingung fordert, daß die Beträge der Eigenwerte von $\overline{\overline{G}}$ kleiner gleich Eins bleiben, d.h. $|\lambda(\overline{\overline{G}})| \leq 1$.

Die Eigenwerte λ folgen aus:

$$|\overline{\overline{G}} - \lambda \overline{\overline{E}}| = (1 - \lambda)^2 + ab \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \sin \Theta \right)^2 = 0$$

Die Wurzel dieser Gleichung ergibt:

$$\lambda_{1,2} = 1 \pm I \sqrt{ab \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \sin \Theta \right)^2}$$

Eine Überprüfung der Beträge für $0 \leq \Theta \leq \pi$ zeigt, daß mindestens ein Eigenvektor den Betrag Eins überschreitet für $a \cdot b > 0$.

$$|\lambda_{1,2}| = 1 + ab \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \sin \Theta \right)^2$$

Somit ist dieses Schema instabil für $a \cdot b > 0$.

- 3. Beispiel:

In diesem Beispiel wird die Stabilität eines Schemas mit drei Zeitebenen untersucht. Ein solches Schema wird für eine hyperbolische Transportgleichung formuliert.

$$u_t + a u_x = 0$$

Durch Verwendung von zentralen Differenzen in Zeit und Ort um $t = n \Delta t$ ergibt sich ein explizites Schema $O(\Delta x^2, \Delta t^2)$ mit den Zeitindizes $n-1$, n und $n+1$ (Dufort-Frankel Schema).

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

$$\text{bzw. } u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - C (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad \text{mit } C = \frac{a \Delta t}{\Delta x}$$

Mit dem üblichen Fourieransatz

$$u_i^n = V^n \cdot e^{I \Theta i}$$

und der Bedingung, daß der Verstärkungsfaktor für alle Zeitebenen gilt, d.h.

$$G = \frac{V^{n+1}}{V^n} = \frac{V^n}{V^{n-1}}$$

erhält man eine quadratische, komplexe Gleichung für G

$$G^2 + I 2C \sin \Theta \cdot G = 1$$

mit den Wurzeln:

$$G_{1,2} = -I C \sin \Theta \pm \sqrt{1 - (C \sin \Theta)^2}$$

Für beide Lösungen ist die Stabilitätsbedingung $|G| \leq 1$ für $0 \leq \Theta \leq \pi$ zu überprüfen. Es müssen hierbei Fallunterscheidungen getroffen werden:

a) $(C \sin \Theta)^2 > 1 \rightarrow C > 1$ Wurzel imaginär

$$|G|^2 = \left(-C \sin \Theta \pm \sqrt{(C \sin \Theta)^2 - 1} \right)^2$$

$$\rightarrow |G|^2 > 1$$

instabiles Schema für $C > 1$

b) $(C \sin \Theta)^2 \leq 1 \rightarrow C \leq 1$ Wurzel reell

$$|G|^2 = (C \sin \Theta)^2 + (1 - (C \sin \Theta)^2)$$

$$\rightarrow |G|^2 = 1$$

bedingt stabiles Schema für $C \leq 1$

Hirtsche Stabilitätsanalyse

C.W.Hirt : Heuristic Stability Theorie for Finite Difference Equations, J. of Comp.Phys., vol 2, 1968.

Die Ursache der Instabilität von Differenzlösungen liegt an der endlichen Reihenentwicklung, durch die im Prinzip eine um den Abbruchfehler veränderte Differentialgleichung gelöst wird. Mit dem Differentialproblem $L(\hat{u}) = 0$ und dem Differenzenproblem $L_\Delta(\hat{u}) = 0$ ergibt sich die Differentialgleichung der Differenzenapproximation zu:

$$L_\Delta(\hat{u}) = L(\hat{u}) - \tau = 0$$

Der Abbruchfehler enthält die höheren Ableitungen, multipliziert mit Potenzen der Schrittweiten. Dadurch verändern sich die Lösungseigenschaften der Differentialgleichung der Differenzenapproximation, wodurch die Lösung instabil werden kann, obwohl die Lösung des Originalproblems stabil bleibt.

Die Idee der Hirtschen Analyse ist es, die Eigenschaften der Differentialgleichung der Differenzenapproximation zu untersuchen und mit dem Verhalten bekannter analoger Gleichungen zu vergleichen und deren physikalischen Inhalt zu interpretieren (z.B. positive Zähigkeit oder Charakteristiken). Dadurch liefert die Hirtsche Analyse z.T. sehr anschaulich die Auswirkung numerischer Approximation. Die Analyse ist jedoch nicht immer zu verwenden, da es oft an Vergleichslösungen fehlt!

Das Prinzip der Hirtschen Analyse, d.h. die Entwicklung eines gegebenen Differenzenschema mittels Taylorreihen in eine Differentialgleichung bei festen $\Delta x, \Delta t \dots$ und der Interpretation, soll anhand von zwei Beispielen erfolgen.

- 1. Beispiel

Für die hyperbolische Transportgleichung (Modellgleichung für reibungsfreie Strömung)

$$u_t + a u_x = 0 \quad a = \text{const.}$$

wird ein explizites Schema mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit und Rückwärtsdifferenzen im Ort betrachtet ("upwind" Schema, falls $a > 0$).

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

Mittels Taylorreihen für u um den Punkt (x_i, t_n) und durch Ersetzen der zweiten Zeitableitung u_{tt} mit Hilfe der Differentialgleichung, d.h.

$$u_{tt} = -a u_{xt} = -a (u_t)_x = a^2 u_{xx}$$

erhält man die Differentialgleichung der Differenzenapproximation:

$$u_t + a u_x = \left(a \frac{\Delta x}{2} - a^2 \frac{\Delta t}{2} \right) \cdot u_{xx} + O(\Delta x^2, \Delta t^2)$$

Aus der ursprünglichen hyperbolischen Gleichung ergibt sich für feste Schrittweiten eine parabolische Gleichung! Diese Gleichung hat die gleiche Struktur wie die Konvektions- Diffusionsgleichung (Modellgleichung für die Navier-Stokes Gleichung):

$$u_t + a u_x = \nu \cdot u_{xx}$$

Die Lösung dieser Gleichung ist für positive Zähigkeit ν immer gedämpft, d.h. Störungen klingen ab.

In Analogie dazu bezeichnet man den Faktor vor der zweiten Ableitung der Differentialgleichung der Differenzenapproximation als numerische Zähigkeit ν_{num}

$$\nu_{num} = a \frac{\Delta x}{2} - a^2 \frac{\Delta t}{2} = a \frac{\Delta x}{2} \cdot (1 - C) \quad \text{mit} \quad C = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Aus der Analogie folgt für positive numerische Zähigkeit eine gedämpfte, d.h. stabile Lösung und umgekehrt eine angefachte, d.h. instabile Lösung.

Aus dieser Forderung ergibt sich für Stabilität

$$\begin{aligned} a > 0: \quad \nu_{num} > 0 \quad \text{für} \quad C = a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 &\rightarrow \text{bedingt stabil} \\ a < 0: \quad \nu_{num} < 0 \quad \text{für} \quad \text{alle } C &\rightarrow \text{instabil} \end{aligned}$$

Diese Bedingungen folgen auch aus der von Neumann Stabilitätsanalyse.

Die numerische Zähigkeit hat eine große Bedeutung bei der numerischen Lösung hyperbolischer partieller Differentialgleichungen, wie z.B. der Eulergleichungen. Sie ist zum einen notwendig für die numerische Stabilität zum Ausdämpfen kleiner Störungen (Rundungsfehler), zum anderen verursacht sie quasi-viskose Effekte, wie „Verschmieren“ der Lösung. Ein wichtiges Ziel ist es deshalb, solche Effekte auf ein Minimum zu reduzieren.

- 2. Beispiel

Für die parabolische Diffusionsgleichung

$$u_t = \nu u_{xx}$$

wird ein explizites Schema betrachtet:

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

Mittels Taylorreihen erhält man die Differentialgleichung der Differenzenapproximation zu

$$u_t - \nu u_{xx} = -\frac{\Delta t}{2} u_{tt} + O(\Delta x^2, \Delta t^2)$$

Die Gleichung umgeschrieben, ergibt:

$$u_{xx} - \frac{\Delta t}{2\nu} u_{tt} = \frac{1}{\nu} u_t + O(\Delta x^2, \Delta t^2)$$

Das ursprünglich parabolische Problem wird somit numerisch für $\Delta t \neq 0$ zu einem hyperbolischen Problem (vergl. Wellengleichung $u_{tt} - a_0^2 u_{xx} = 0$).

Als Vergleichslösung kann die analoge Lösung eines hyperbolischen Problems einer Wellengleichung betrachtet werden. Der Einflußbereich dieser Gleichung ist durch die Charakteristiken $\frac{dt}{dx}|_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\Delta t}{2\nu}}$ festgelegt. Für die numerische Lösung hyperbolischer Gleichungen ist es notwendig, daß der numerische Einflußbereich größer gleich dem Einflußbereich der Charakteristiken ist, d.h.:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \geq \frac{dx}{dt} |_C$$

Daraus folgt mit $\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \sqrt{\frac{\Delta t}{2\nu}}$ eine Stabilitätsaussage für das explizite Schema:

$$\underline{\sigma = \nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}}$$

Diese Beziehung für das bedingt stabile Schema wird durch andere Analysen bestätigt.

1.3.3 Konvergenz

Das Ziel jeder numerischen Rechnung ist es, der exakten Lösung einer partiellen Differentialgleichung möglichst nahe zu kommen, wobei die numerische Lösung mit feiner werdendem Gitter die analytische Lösung immer besser annähern soll. Dies wird als Konvergenz der Lösung bezeichnet.

Der Konvergenznachweis für ein Schema läßt sich in allgemeinsten Form nicht durchführen. Für lineare Anfangswertprobleme jedoch ist es möglich nachzuweisen, daß die Erfüllung der Konsistenz und Stabilität eines Differenzschemas hinreichend ist für Konvergenz der numerischen Lösung. Dies soll im folgenden erläutert werden.

Gegeben sei ein lineares Anfangswertproblem

$$L(\hat{u}) = 0$$

mit der exakten Lösung \hat{u} und der Anfangsbedingung

$$B(\hat{u}) = 0$$

Die Differenzenapproximation dieses Problems mit der exakten Differenzenlösung U sei

$$L_{\Delta}(U) = 0 \quad \text{und} \quad B_{\Delta}(U) = 0$$

Die aktuelle Rechnerlösung $W = U + \varepsilon$ mit dem Rundungsfehler ε erfüllt ebenfalls die Differenzenapproximation.

$$L_{\Delta}(W) = 0 \quad \text{und} \quad B_{\Delta}(W) = 0$$

Mit der Definition des Konvergenzfehlers $e = \hat{u} - U$ und dem Rundungsfehler ε erhält man für die Rechnerlösung W

$$W = U + \varepsilon = \hat{u} + U - \hat{u} + \varepsilon = \hat{u} - e + \varepsilon$$

Die Konvergenz des Problems läßt sich jetzt wie folgt definieren:

Eine Differenzenlösung ist konvergent, wenn sich in jedem Punkte $P(\vec{x}, t)$ die Differenzenlösung der exakten Differentiallösung nähert, falls die Schrittweiten $\Delta x, \Delta t$ gegen Null streben. Daraus folgt, daß e und ε in diesem Falle verschwinden müssen.

Die numerische Stabilität beschreibt das Verhalten der Rundungsfehler ε . Eine Differenzenlösung ist dann stabil, wenn

$$\max |\varepsilon^{n+1}| = k^n \cdot \max |\varepsilon^0|$$

Das bedeutet, die Rechnerlösung W nähert sich für ein stabiles Schema ($k \leq 1$) der exakten Differenzenlösung U (bis auf einen kleinen Anfangsfehler ε^0 bei $k = 1$). Damit ist

$$W = U = \hat{u} - e$$

Die Konsistenz erfordert, daß der Abbruchfehler mit den Schrittweiten $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ verschwindet.

Für lineare Gleichungen läßt sich ein Zusammenhang zwischen Konvergenz - und Abbruchfehler herstellen:

$$L(\hat{u}) - L_{\Delta}(U) = L(\hat{u}) - L_{\Delta}(\hat{u}) + L_{\Delta}(\hat{u}) - L_{\Delta}(U) = \tau(\hat{u}) + L_{\Delta}(e) = 0$$

Dies gilt auch für die diskrete Anfangsbedingung.

$$\tau_B(\hat{u}) + B_{\Delta}(e) = 0$$

Für eine konsistente Approximation mit $\tau \rightarrow 0, \tau_B \rightarrow 0$ für $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ und ein korrekt gestelltes Anfangswertproblem folgt:

$$L(e) = 0 \quad \text{und} \quad B(e) = 0$$

Die Lösung dieses Problemes führt auf

$$e = \hat{u} - U = 0$$

Daraus folgt Konvergenz.

Der Beweis wurde von P. Lax in allgemeiner Form als Laxscher Äquivalenzsatz durchgeführt.

Laxscher Äquivalenzsatz

P.D.Lax, R.D.Richtmeyer: Comm. on Pure and Appl. Math., vol 9, 1956

Für eine konsistente Differenzenapproximation
eines korrekt gestellten linearen Anfangswertproblem
ist die numerische Stabilität notwendige und hinreichende Bedingung
für die Konvergenz der Lösung.

Für lineare Anfangswertprobleme bietet der Laxsche Satz die Möglichkeit, den Konvergenznachweis durch den einfacheren Nachweis von Stabilität und Konsistenz zu ersetzen. Für nichtlineare Anfangs- und Randwertprobleme fehlt der allgemeine Konvergenznachweis. Deshalb wird der Konvergenznachweis von Lax vielfach auf eine linearisierte Form eines nichtlinearen Problems angewendet, um auch hierfür eine Aussage über die Verwendbarkeit eines Schemas zu erhalten. Der Laxsche Äquivalenzsatz zum Nachweis der Konvergenz ist somit eines der wichtigsten Hilfsmittel für die Entwicklung von Differenzenschemata.

1.4 Iterationsverfahren für elliptische Differentialgleichungen

1.4.1 Einführung

Eine wichtige Klasse von Gleichungen der Strömungsmechanik ist von elliptischem Typ (siehe auch Kapitel 1. und 2. dieser Vorlesung). Gleichungen dieser Art beschreiben vor allem stationäre Strömungen, sowohl reibungsbehaftete als auch reibungsfreie (Unterschall-) Strömungen. Beispiele hierfür sind die Potentialgleichung, die Poissongleichung für die Stromfunktion oder den Druck, aber auch Systeme, wie die stationären Navier-Stokes Gleichungen. Typische, in der Strömungsmechanik auftretende elliptische Gleichungen haben die Form

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) = 0$$

oder sie bilden Systeme, wie z.B. die Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen:

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

Die bisherigen Grundlagen der numerischen Behandlung von partiellen Differentialgleichungen, wie z.B. Stabilitätsanalyse und Konvergenznachweis, setzen Anfangswertprobleme voraus. Anfangswertprobleme entstehen durch einen begrenzten Einflußbereich infolge reeller Charakteristiken bei parabolischen und hyperbolischen Differentialgleichungen. Hierdurch ist die Informationsausbreitungsrichtung vorgeschrieben, entsprechend schreitet die Lösung in einer Richtung voran, z.B. in der Zeit. Im Gegensatz zu diesem Lösungsverhalten führen die elliptischen partiellen Differentialgleichungen zu Randwertproblemen. Bei diesen Problemen wird die Information im Lösungsfeld gleichzeitig und aus allen Richtungen übertragen. Damit beeinflussen auch sämtliche Randwerte einen Feldpunkt im Inneren. Dieses unterschiedliche Ausbreitungsverhalten von Informationen bei Anfangswertproblemen und Randwertproblemen erfordert auch unterschiedliche Lösungsverfahren. Deshalb spricht man oft bei Anfangswertproblemen von Marschrichtungsverfahren, während bei elliptischen Randwertproblemen von Feldverfahren gesprochen wird.

Die numerische Lösung bei elliptischen Randwertproblemen erfordert entsprechend der Informationsübertragung die direkte, gleichzeitige Lösung für alle Gitterpunkte des diskretisierten Integrationsgebietes. Dies kann durch direkte Invertierungsverfahren für Matrizen, wie z.B. durch den Gaußschen Algorithmus erfolgen. Dieser Algorithmus ist für nicht zu große Systeme die günstigste Methode. Für große Systeme, wie sie oft bei der numerischen Lösung von Strömungsproblemen mit hohen Gitterpunktzahlen entstehen, steigt die Rechenzeit und Speicherbedarf von direkten Methoden überproportional an. Aus diesem Grunde werden für die Lösung solcher Probleme sehr häufig Iterationsverfahren verwendet. Hierbei wird ein (einfacherer) Teil der Lösungsmatrix direkt invertiert, während der andere Teil der Lösungsmatrix auf einen genäherten Lösungsvektor angewendet wird. Die Lösung erfolgt, ausgehend von einer Startlösung, schrittweise bis zu einer konvergierten Lösung, die numerisch durch ein Abbruchkriterium definiert wird. Der Rechenzeit- und Speicherbedarf pro Iterationsschritt ist wesentlich kleiner als der für direkte Methoden. Der gesamte Rechenaufwand bis zur konvergierten Lösung hängt jedoch noch von der Iterationszahl

und damit von den Konvergenzeigenschaften des verwendeten Iterationsverfahrens ab. In diesem Kapitel sollen deshalb anhand der numerischen Lösung der Poissongleichung einige der wichtigsten Iterationsverfahren vorgestellt und ihre Eigenschaften diskutiert.

1.4.2 Diskretisierung der Poissongleichung

Für die Diskussion von Iterationsverfahren für Randwertprobleme soll die numerische Lösung der Poissongleichung betrachtet werden. Gleichungen dieses Typs treten auf als Bestimmungsgleichungen für die Stromfunktion und für den Druck bei inkompressibler Strömung. Ihre Lösung umfasst aber auch bei verschwindender rechter Seite die Lösung der Laplace-Gleichung, mit der die Potentialströmung beschrieben wird.

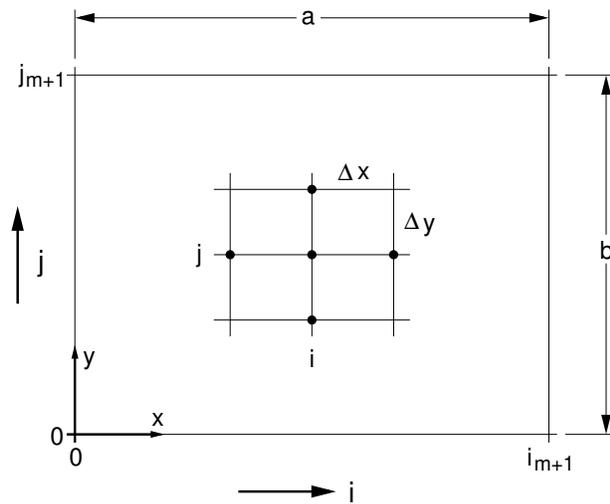
Definition des Randwertproblems

Die Lösung in einem rechteckigen Integrationsgebiet D soll durch die Poissongleichung in kartesischen Koordinaten (x, y) beschrieben werden.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x, y)$$

Auf der Berandung C sind Dirichletsche Randbedingungen vorgeschrieben.

$$u = g(x, y)$$



Die Diskretisierung des Randwertproblems erfolgt in einem Integrationsbereich mit den Kantenlängen a und b unterteilt in $(im + 1)$ bzw. $(jm + 1)$ Intervalle mit konstanten Schrittweiten:

$$\Delta x = \frac{a}{im + 1} \quad \Delta y = \frac{b}{jm + 1}$$

Die zweiten Ableitungen der Gleichung werden durch zentrale Differenzen der Ordnung $O(\Delta x^2)$ bzw. $O(\Delta y^2)$ approximiert. Die diskretisierte Poissongleichung für einen Punkt (i, j) mit $1 \leq i \leq im$ und $1 \leq j \leq jm$ lautet damit:

$$u_{i,j} - \Theta_x (u_{i-1,j} + u_{i+1,j}) - \Theta_y (u_{i,j-1} + u_{i,j+1}) = \delta^2 f_{i,j}$$

Folgende Abkürzungen wurden hierbei definiert:

$$\Theta_x = \frac{\Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \quad \Theta_y = \frac{\Delta x^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \quad \delta^2 = \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}$$

Zusammen mit den Randbedingungen erhält man ein gekoppeltes System von $im \cdot jm$ algebraischen Gleichungen, deren Lösung für die diskreten Punkte (i, j) gesucht ist.

Matrix - Vektor Darstellung

Zur Diskussion der Lösungsverfahren ist es zweckmäßig, das Differenzgleichungssystem in einer kompakten Matrix - Vektor Darstellung zu formulieren. Hierzu betrachtet man zunächst die Differenzgleichungen für eine Zeile $j = \text{const}$.

$$\begin{array}{l} i = 1 \quad u_{1,j} \quad -\Theta_x (\quad + u_{2,j}) \quad -\Theta_y (u_{1,j-1} + u_{1,j+1}) = \delta^2 f_{1,j} + \Theta_x \cdot u_{0,j} \\ \vdots \\ i \quad u_{i,j} \quad -\Theta_x (u_{i-1,j} + u_{i+1,j}) \quad -\Theta_y (u_{i,j-1} + u_{i,j+1}) = \delta^2 f_{i,j} \\ \vdots \\ i = im \quad u_{im,j} \quad -\Theta_x (u_{im-1,j} + \quad) \quad -\Theta_y (u_{im,j-1} + u_{im,j+1}) = \delta^2 f_{im,j} + \Theta_x \cdot u_{im+1,j} \end{array}$$

Die bekannten Größen, $f_{i,j}$ und die Randwerte $u_{0,j}$, $u_{im+1,j}$, werden auf die rechte Seite geschrieben. Die gesamte Zeile $j = \text{const}$. mit den Gleichungen für $1 \leq i \leq im$ lässt sich in kompakter Form zu einer einzelnen Gleichung zusammenfassen, mit:

- (im) - dimensionalen Vektoren

$$\vec{U}_j = \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{im,j} \end{pmatrix} \quad \vec{f}_j = \begin{pmatrix} f_{1,j} \\ f_{2,j} \\ \vdots \\ f_{im,j} \end{pmatrix} \quad \vec{w}_j = \begin{pmatrix} u_{0,j} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{im+1,j} \end{pmatrix}$$

- quadratischen Matrizen der Ordnung (im)

$$E_i = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad L_i = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ 1 & 0 & & & \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & 0 \\ & & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L_i^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & & 0 & 1 \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

Damit reduziert sich das System auf einen Spaltenvektor mit jm Elementen

$$\begin{array}{l} j = 1 \quad [E_i - \Theta_x (L_i + L_i^T)] \vec{U}_1 \quad -\Theta_y (\quad + \vec{U}_2) = \delta^2 (\vec{f}_1 + \frac{1}{\Delta x^2} \vec{w}_1 + \frac{1}{\Delta y^2} \vec{U}_0) \\ \vdots \\ j \quad [E_i - \Theta_x (L_i + L_i^T)] \vec{U}_j \quad -\Theta_y (\vec{U}_{j-1} + \vec{U}_{j+1}) = \delta^2 (\vec{f}_j + \frac{1}{\Delta x^2} \vec{w}_j) \\ \vdots \\ j = jm \quad [E_i - \Theta_x (L_i + L_i^T)] \vec{U}_{jm} \quad -\Theta_y (\vec{U}_{jm-1} + \quad) = \delta^2 (\vec{f}_{jm} + \frac{1}{\Delta x^2} \vec{w}_{jm} + \frac{1}{\Delta y^2} \vec{U}_{jm+1}) \end{array}$$

Die Struktur dieser Gleichungen erlaubt eine weitere Zusammenfassung für den gesamten Lösungsvektor \mathbf{U} , der als Komponenten die (im) - dimensionalen Vektoren \vec{U}_j enthält. Die folgenden Definitionen von Kompaktvektoren und Matrizen werden benötigt:

- Kompaktvektoren mit (im) - dimensionalen Komponenten

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \vec{U}_1 \\ \vec{U}_2 \\ \vdots \\ \vec{U}_{jm} \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \vec{f}_1 + \frac{1}{\Delta x^2} \vec{w}_1 + \frac{1}{\Delta y^2} \vec{U}_0 \\ \vec{f}_2 + \frac{1}{\Delta x^2} \vec{w}_2 + 0 \\ \vdots + \\ \vec{f}_{jm} + \frac{1}{\Delta x^2} \vec{w}_{jm} + \frac{1}{\Delta y^2} \vec{U}_{jm+1} \end{pmatrix}$$

- Quadratische Matrizen der Ordnung $(im \cdot jm)$

$$E = \begin{pmatrix} E_i & & & \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & E_i \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} L_i & & & \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & & L_i \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ E_i & 0 & & \\ & \cdot & & \\ & & E_i & 0 \\ & & & E_i & 0 \end{pmatrix}$$

Die transponierte Matrix von B ist B^T , die Matrix L^T entspricht der Matrix L , jedoch mit den Elementen L_i^T .

Damit lässt sich das gesamte System von $im \cdot jm$ Gleichungen darstellen:

$$\boxed{A \cdot \mathbf{U} = \delta^2 \mathbf{F}}$$

Hierbei ist \mathbf{U} der Lösungsvektor, \mathbf{F} der Vektor der bekannten Größen und A ist die Lösungsmatrix mit den Anteilen

$$A = E - \Theta_x(L + L^T) - \Theta_y(B + B^T)$$

1.4.3 Prinzip der Iterationsverfahren

Direkte Verfahren invertieren die vollständige Lösungsmatrix des Differenzgleichungssystems ohne Iteration. Man erhält den Lösungsvektor aus:

$$\mathbf{U} = A^{-1} \delta^2 \mathbf{F}$$

Der wesentlichste Algorithmus hierfür ist das Gaußsche Eliminationsverfahren, das in verschiedenen Varianten verwendet wird. Für große Systeme ($im \cdot jm \gg 1$) besteht jedoch ein sehr großer Bedarf an Rechenzeit und Speicherplatz, außerdem besteht die Gefahr der Akkumulation von Rundungsfehlern.

Die Iterationsverfahren, bei denen eine vereinfachte Matrix invertiert wird, sind für Lösungen größerer Systeme effektiver. Infolge der Entkopplung der einzelnen Iterationsschritte sind stabile Iterationsverfahren nicht empfindlich gegenüber Rundungsfehlern.

Zur Entwicklung eines Iterationsverfahrens spaltet man die Lösungsmatrix A auf in

$$A = N - P$$

Die Teilmatrix N hat eine einfachere Struktur und wird direkt gelöst, während die Matrix P auf einen genäherten Lösungsvektor angewendet wird. Für das System der Differenzgleichungen $A \cdot \mathbf{U} = \delta^2 \mathbf{F}$ folgt damit die Iterationsvorschrift mit ν als Iterationszähler.

$$N \mathbf{U}^\nu = P \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F}$$

Die Korrekturform dieser Iterationsvorschrift wird mit der Differenz der Lösungsvektoren $\Delta \mathbf{U}^\nu = \mathbf{U}^\nu - \mathbf{U}^{\nu-1}$ (Korrekturgröße) gebildet.

$$N \Delta \mathbf{U}^\nu = \delta^2 \mathbf{F} - A \mathbf{U}^{\nu-1} = -Res(\mathbf{U}^{\nu-1})$$

Das Gleichungssystem $Res(\mathbf{U}^{\nu-1}) = A \mathbf{U}^{\nu-1} - \delta^2 \mathbf{F}$ wird als Residuum bezeichnet. Mit der Iterationsvorschrift erhält man eine Folge von Lösungsvektoren \mathbf{U}^ν , beginnend mit einem Startvektor $\mathbf{U}^{(0)}$. Das Ziel der Iteration ist es, der exakten Lösung des Differenzenproblems beliebig nahe zu kommen, d.h. die Konvergenz des Iterationsverfahrens zu erreichen. In praktischen Rechnungen wird hierzu eine Konvergenzschranke vorgegeben, bei deren Unterschreitung die Iteration abgebrochen wird. Diese Schranke hängt z.B. von der gewünschten Genauigkeit ab. Die Konvergenzschranke kann in verschiedenen Formen vorgegeben werden, z.B.:

$$\begin{aligned} \max |\mathbf{U}^\nu - \mathbf{U}^{\nu-1}| &\leq \varepsilon_1 \max |\mathbf{U}^{\nu-1}| \\ \max |Res(\mathbf{U}^\nu)| &\leq \varepsilon_2 \max |Res(\mathbf{U}^{(0)})| \end{aligned}$$

1.4.4 Konsistenz und Stabilität der Iterationsverfahren

Der typische Iterationsablauf, d.h. die von einer Anfangslösung ausgehende schrittweise Lösung, entspricht der Lösung eines Anfangswertproblem. Betrachtet man die Iterationsschritte als „Zeitschritte“ eines durch die Iterationsvorschrift gegebenen „Zeitverlaufes“, dann kann man ein Iterationsverfahren als Anfangswertproblem auffassen. Somit lassen sich auch die vorher behandelten Konsistenz- und Stabilitätsuntersuchungen der Anfangswertprobleme auf ein Iterationsverfahren übertragen.

Zur Darstellung des Iterationsverhaltens wird von der Iterationsvorschrift ausgegangen.

$$N \mathbf{U}^\nu = P \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F}$$

Man definiert eine künstliche Zeit $\tau = \nu \cdot \Delta\tau$ mit dem Iterationszähler ν und entwickelt den Lösungsvektor \mathbf{U}^ν mittels einer Taylorreihe um $\nu - 1$

$$\mathbf{U}^\nu = \mathbf{U}^{\nu-1} + \Delta\tau \left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} \right|_{\nu-1} + \dots$$

Die quasi-zeitabhängige Form des Iterationsverfahrens erhält man durch Einsetzen der Reihenentwicklung in die Iterationsvorschrift:

$$N \Delta\tau \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} = \delta^2 \mathbf{F} - (N - P) \mathbf{U} = -(A \mathbf{U} - \delta^2 \mathbf{F})$$

Die rechte Seite der Gleichung repräsentiert die diskretisierte Poissongleichung, die im konvergierten („stationären“) Zustand gleich Null sein muß ($A \cdot \mathbf{U} = \delta^2 \mathbf{F}$).

Die Konsistenzuntersuchung läßt sich aufteilen in die Untersuchung des diskretisierten Randwertproblem und in die des Iterationsverfahrens. Das Randwertproblem, d.h. die diskretisierte Poissongleichung für den Punkt (i, j) ergibt nach Umformung und Einsetzen der Taylorreihen in x und y Richtung

$$u_{xx} + u_{yy} + f + \frac{\Delta x^2}{12} u_{xxxx} + \frac{\Delta y^2}{12} u_{yyyy} + \dots = 0$$

Aus der Gleichung folgt, daß die Diskretisierung der Poissongleichung von $O(\Delta x^2, \Delta y^2)$ genau ist und für verschwindende Schrittweiten $\Delta x, \Delta y$ konsistent ist.

Die Konsistenzuntersuchung des Iterationsverfahrens muß nachweisen, daß die konvergente Lösung unabhängig vom Iterationsverfahren ist. Dies ist der Fall für die quasi-zeitabhängige Form des Iterationsverfahrens. Die linke Seite ($N \Delta \tau \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau}$) verschwindet für $\Delta \tau \rightarrow 0$, was gleichbedeutend ist mit $\nu \rightarrow \infty$ für ein festes, beliebiges τ .

Die Stabilitätsuntersuchung eines Iterationsverfahrens kann mit den Analysen für Anfangswertprobleme erfolgen. Zur Untersuchung mit der von Neumannschen Stabilitätsanalyse ersetzt man in der Iterationsvorschrift die Variable $u_{i,j}^\nu$ durch eine Fourierkomponente

$$u_{i,j}^\nu = V^\nu \cdot e^{I(k_x x + k_y y)}$$

Die Amplitude V^ν beschreibt hier das Verhalten einer Störung von Iterationsschritt zu Iterationsschritt. Stabilität ist dann gegeben, wenn die Amplitude nicht anwächst, d.h. wenn

$$|G| \leq 1$$

Ein Beispiel hierzu wird später gegeben.

Auf die Konvergenz eines Iterationsverfahrens, hin zur exakten Differenzlösung des Randwertproblems, kann aus der Betrachtung des künstlichen Anfangswertproblems mit Hilfe des Laxschen Äquivalenzsatzes geschlossen werden. Eine etwas andere, quantitative Konvergenzanalyse, die den Vergleich verschiedener Iterationsverfahren für die Poissongleichung ermöglicht, wird in einem späteren Abschnitt angegeben.

1.4.5 Darstellung wichtiger Iterationsverfahren

Für die Lösung elliptischer Gleichungen existiert eine Anzahl von verschiedenen Iterationsverfahren. Man kann sie grob einteilen in sogenannte klassische Verfahren und in neuere, weiterentwickelte Verfahren.

Klassische Iterationsverfahren sind z.B.

- Jacobi-Iteration (Gesamtschrittverfahren)
- Gauß-Seidel-Punktiteration (Einzelschrittverfahren)
- Beschleunigte Gauß-Seidel-Punktiteration
- Gauß-Seidel-Linieniteration
- Beschleunigte Gauß-Seidel-Linieniteration
- Linieniteration mit alternierender Richtung

Neuere Iterationsverfahren bzw. -konzepte sind z.B.

- Angenäherte Faktorisierungsmethoden
- Fourier-Lösungsverfahren

- Konjugierte Gradientenmethoden
- Mehrgittermethoden

In den folgenden Abschnitten wird auf die sogenannten klassischen Verfahren eingegangen. Diese sind auch derzeit noch in Anwendungen stark genutzt und bilden oft die Grundlage für das Verständnis der weiterentwickelten Methoden.

Jacobi-Iterationsverfahren

Das Jacobi-Verfahren ist das einfachste Iterationsverfahren. Es hat eine relativ schlechte Konvergenzrate. (Die Konvergenzrate, die später definiert wird, ist ein Maß für die Anzahl der nötigen Iterationsschritte um den Anfangsfehler auf eine vorgegebene Schranke zu reduzieren.) Das Jacobi-Verfahren wird jedoch wegen der einfachen Struktur oft als Vergleichsverfahren benutzt. Ausgehend von der Iterationsvorschrift

$$N \mathbf{U}^\nu = P \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F}$$

wird für die Jacobi-Iteration die einfachste Matrix, die Einheitsmatrix E , als zu invertierende Matrix N definiert.

$$N = E \quad \text{und} \quad P = N - A = \Theta_x(L + L^T) + \Theta_y(B + B^T)$$

Die Matrixformulierung der Jacobi-Iteration ergibt sich somit zu:

$$E \mathbf{U}^\nu = [\Theta_x(L + L^T) + \Theta_y(B + B^T)] \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F}$$

Die Formulierung zeigt, daß für die Jacobi-Iteration der neue Wert \mathbf{U}^ν jeweils aus den benachbarten alten Werten $\mathbf{U}^{\nu-1}$ berechnet wird.

Die punktweise Formulierung des Jacobi-Verfahrens ergibt den Algorithmus des numerischen Lösungsablaufes für $1 \leq i \leq im; 1 \leq j \leq jm$

$$u_{i,j}^\nu = \Theta_x(u_{i-1,j}^{\nu-1} + u_{i+1,j}^{\nu-1}) + \Theta_y(u_{i,j-1}^{\nu-1} + u_{i,j+1}^{\nu-1}) + \delta^2 f_{i,j}$$

Die Korrekturform des Jacobi-Verfahrens lautet:

$$\begin{aligned} \Delta u_{i,j}^\nu &= -Res(u_{i,j}^{\nu-1}) \\ u_{i,j}^\nu &= u_{i,j}^{\nu-1} + \Delta u_{i,j}^\nu \end{aligned}$$

mit dem Residuum $Res(u_{i,j}^{\nu-1})$ der Poissongleichung

$$Res(u_{i,j}^{\nu-1}) = u_{i,j}^{\nu-1} - \Theta_x(u_{i-1,j}^{\nu-1} + u_{i+1,j}^{\nu-1}) - \Theta_y(u_{i,j-1}^{\nu-1} + u_{i,j+1}^{\nu-1}) - \delta^2 f_{i,j}$$

Zur Untersuchung der Stabilität mit der von Neumann Analyse wird der Fourieransatz

$$u_{i,j}^\nu = V^\nu e^{Ik_x x} \cdot e^{Ik_y y} = V^\nu e^{I\alpha i} \cdot e^{I\beta j}$$

in die punktweise Iterationsvorschrift eingeführt. Nach Umformung erhält man daraus den Verstärkungsfaktor G zu

$$G = \Theta_x(e^{-I\alpha} + e^{I\alpha}) + \Theta_y(e^{-I\beta} + e^{I\beta}) = 2\Theta_x \cdot \cos \alpha + 2\Theta_y \cdot \cos \beta$$

Eine Abschätzung des Betrages für $0 \leq \alpha \leq \pi; 0 \leq \beta \leq \pi$ ergibt

$$|G| \leq 1$$

Das Jacobi-Verfahren ist somit uneingeschränkt stabil.

Gauß-Seidel-Punktiterationsverfahren

Das Gauß-Seidel-Punktiterationsverfahren gehört ebenfalls zu den einfacheren Iterationsverfahren. Es hat jedoch eine um den Faktor 2 bessere Konvergenzrate gegenüber dem Jacobi-Verfahren. Das Verfahren benutzt die in den Nachbarpunkten neu ermittelten Werte, sobald sie zur Verfügung stehen. Damit wird das Verfahren richtungsabhängig, d.h. es hängt von der Bearbeitungsreihenfolge ab. Durchläuft man die Gitterpunkte z.B. von $i = 1$ bis $i = im$ und von $j = 1$ bis $j = jm$, dann sind für den Aufpunkt (i, j) die Werte links, $(i - 1, j)$, und darunter, $(i, j - 1)$, bereits auf der neuen Iterationsstufe ν . Damit ergeben sich die Iterationsmatrizen N und P zu

$$\begin{aligned} N &= E - \Theta_x L - \Theta_y B \\ P &= N - A = \Theta_x L^T + \Theta_y B^T \end{aligned}$$

Die Matrixformulierung des Gauß-Seidel-Punktiterationsverfahrens lautet somit:

$$(E - \Theta_x L - \Theta_y B) \mathbf{U}^\nu = (\Theta_x L^T + \Theta_y B^T) \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F}$$

Die punktweise Formulierung des Gauß-Seidel-Verfahrens ergibt den Algorithmus des numerischen Lösungsablauf für $i = 1, \dots, im; j = 1, \dots, jm$

$$u_{i,j}^\nu = \Theta_x (u_{i-1,j}^\nu + u_{i+1,j}^{\nu-1}) + \Theta_y (u_{i,j-1}^\nu + u_{i,j+1}^{\nu-1}) + \delta^2 f_{i,j}$$

Die Korrekturform des Verfahrens ist dann:

$$\begin{aligned} \Delta u_{i,j}^\nu &= -Res(u_{i,j}^{\nu-1}) + \Theta_x \Delta u_{i-1,j}^\nu + \Theta_y \Delta u_{i,j-1}^\nu \\ u_{i,j}^\nu &= u_{i,j}^{\nu-1} + \Delta u_{i,j}^\nu \end{aligned}$$

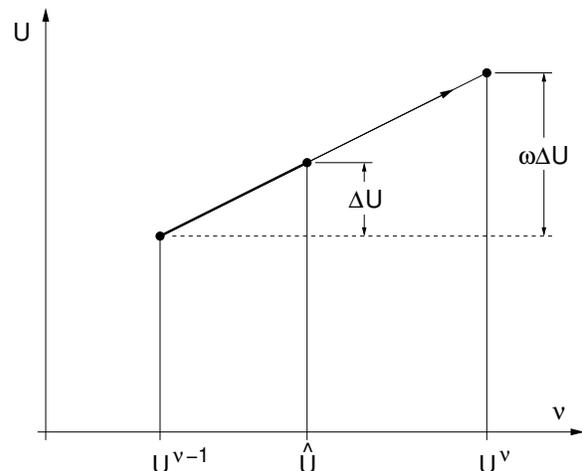
mit dem Residuum $Res(u_{i,j}^{\nu-1})$ der Poissongleichung

$$Res(u_{i,j}^{\nu-1}) = u_{i,j}^{\nu-1} - \Theta_x (u_{i-1,j}^{\nu-1} + u_{i+1,j}^{\nu-1}) - \Theta_y (u_{i,j-1}^{\nu-1} + u_{i,j+1}^{\nu-1}) - \delta^2 f_{i,j}$$

Die Stabilitätsuntersuchung des Gauß-Seidel-Iterationsverfahrens ergibt uneingeschränkte Stabilität.

Beschleunigtes Gauß-Seidel-Punktiterationsverfahren

Beschleunigte Iterationsverfahren, in der Literatur auch überrelaxierte oder extrapolierte Verfahren genannt, haben in der Regel eine wesentlich bessere Konvergenzrate als das Ausgangsverfahren. Die Idee hierbei ist, den neuen aus der Iterationsvorschrift berechneten Wert als Zwischenwert, hier \tilde{U} genannt, zu benutzen. Aus dem Zwischenwert \tilde{U} und dem alten Wert $U^{\nu-1}$ wird ein neuer Wert U^ν mittels linearer Extrapolation ermittelt. Wieweit extrapoliert wird, hängt von dem Beschleunigungs- oder Relaxationsfaktor ω ab.



Der neue Wert \mathbf{U}^ν ergibt sich somit aus der Extrapolation zu:

$$\mathbf{U}^\nu = \mathbf{U}^{\nu-1} + \omega (\tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{U}^{\nu-1})$$

Der Ablauf der beschleunigten Gauß-Seidel-Punktiteration vollzieht sich in 2 Schritten:

1. Schritt: Gauß-Seidel-Punktiteration für den Zwischenwert

$$E \tilde{\mathbf{U}} - (\Theta_x L + \Theta_y B) \mathbf{U}^\nu = (\Theta_x L^T + \Theta_y B^T) \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F}$$

2. Schritt: Überrelaxation (Extrapolation)

$$E \mathbf{U}^\nu = E \mathbf{U}^{\nu-1} + \omega E (\tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{U}^{\nu-1})$$

Beide Schritte können durch Elimination von $\tilde{\mathbf{U}}$ zusammengefaßt werden.

$$[E - \omega (\Theta_x L + \Theta_y B)] \mathbf{U}^\nu = [(1 - \omega) E + \omega (\Theta_x L^T + \Theta_y B^T)] \mathbf{U}^{\nu-1} + \omega \delta^2 \mathbf{F}$$

Die punktweise Formulierung des Gauß-Seidel-Verfahrens ergibt den Algorithmus des numerischen Lösungsablauf für $i = 1, \dots, im; j = 1, \dots, jm$

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,j} &= \Theta_x (u_{i-1,j}^\nu + u_{i+1,j}^{\nu-1}) + \Theta_y (u_{i,j-1}^\nu + u_{i,j+1}^{\nu-1}) + \delta^2 f_{i,j} \\ u_{i,j}^\nu &= u_{i,j}^{\nu-1} + \omega (\tilde{u}_{i,j} - u_{i,j}^{\nu-1}) \end{aligned}$$

Zusammengefasst ergeben beide Schritte

$$u_{i,j}^\nu = (1 - \omega) u_{i,j}^{\nu-1} + \omega [\Theta_x (u_{i-1,j}^\nu + u_{i+1,j}^{\nu-1}) + \Theta_y (u_{i,j-1}^\nu + u_{i,j+1}^{\nu-1}) + \delta^2 f_{i,j}]$$

Die zusammengefaßte Korrekturform des Verfahrens lautet:

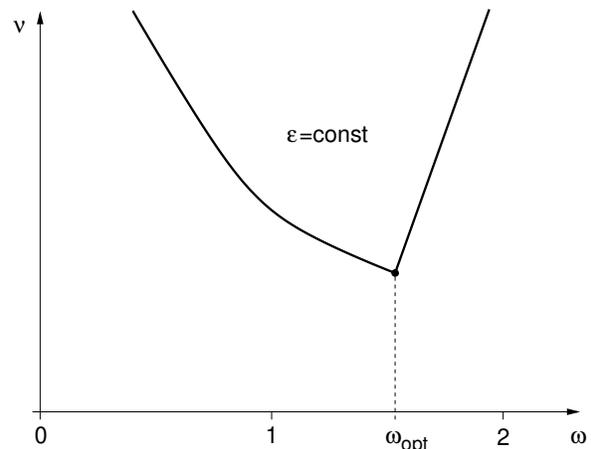
$$\begin{aligned} \Delta u_{i,j}^\nu &= -\omega (Res(u_{i,j}^{\nu-1}) - \Theta_x \Delta u_{i-1,j}^\nu - \Theta_y \Delta u_{i,j-1}^\nu) \\ u_{i,j}^\nu &= u_{i,j}^{\nu-1} + \Delta u_{i,j}^\nu \end{aligned}$$

mit dem Residuum $Res(u_{i,j}^{\nu-1})$ der Poissongleichung

$$Res(u_{i,j}^{\nu-1}) = u_{i,j}^{\nu-1} - \Theta_x (u_{i-1,j}^{\nu-1} + u_{i+1,j}^{\nu-1}) - \Theta_y (u_{i,j-1}^{\nu-1} + u_{i,j+1}^{\nu-1}) - \delta^2 f_{i,j}$$

Die Stabilitätsuntersuchung des beschleunigten Gauß-Seidel-Iterationsverfahrens weist Stabilität nach für Werte des Relaxationsfaktors $0 \leq \omega \leq 2$. Werte $\omega < 1$ bedeuten Unterrelaxation (manchmal für nichtlineare Probleme nötig), $\omega = 1$ entspricht der Punktrelaxation und $\omega > 1$ bedeutet Überrelaxation.

Die Anzahl der Iterationen um eine vorgegebene Konvergenzschranke ε zu erreichen, ist in der Skizze in Abhängigkeit von ω gezeigt. Die beste Konvergenzrate für die Lösung der Poissongleichung wird für einen Wert ω_{opt} erreicht, der zwischen 1 und 2 liegt.



Der optimale Wert ω_{opt} hängt wesentlich von den Schrittweiten ab. Aus einer Konvergenzanalyse erhält man für die diskrete Poissongleichung mit Dirichletschen Randbedingungen den optimalen Wert

$$\omega_{opt} = 2 \left(1 - \pi \cdot \delta \cdot \sqrt{2(1/a^2 + 1/b^2)} \right) = 2 \left(1 - \pi \cdot \sqrt{2(\Theta_x/(im+1)^2 + \Theta_y/(jm+1)^2)} \right)$$

Für andere Randbedingungen und andere Koeffizienten der Differentialgleichung kann sich dieser Wert jedoch noch ändern. In diesen Fällen kann der Wert von ω_{opt} durch numerische Tests gefunden werden. Da die Konvergenz des Verfahrens stark von ω abhängt, sollte für effektive Rechnungen der Wert nahe des optimalen Relaxationsfaktors ω_{opt} liegen!

Beschleunigtes Gauß-Seidel–Linieniterationsverfahren

Die Konvergenzrate wird höher, je mehr Anteile der Lösungsmatrix A in der Iterationsmatrix N berücksichtigt werden. Bei den Linieniterationsverfahren werden die Variablen auf den Gitterpunkten einer Linie $x = const.$ oder $y = const.$ gleichzeitig geändert und damit der Matrix N zugeordnet. Dadurch entsteht ein gekoppeltes, tridiagonales Gleichungssystem, daß mit einem Gaußschen Eliminationsverfahren gelöst wird. Die Linieniteration ist übertragbar auf das Prinzip der Jacobi-, Gauß-Seidel- und beschleunigte Gauß-Seidel-Iteration.

Die beschleunigte Gauß-Seidel–Linieniteration soll im folgenden als Beispiel eines Linieniterationsverfahrens erläutert werden. Für dieses Beispiel soll die Kopplung auf einer Linie in x -Richtung erfolgen, d.h. für $1 \leq i \leq im$ mit $j = const.$. Die Abarbeitung der Linien erfolgt von $j = 1$ bis $j = jm$. Im ersten Schritt wird ein Zwischenwert mit dem Gauß-Seidel–Linieniterationsverfahren ermittelt, im zweiten Schritt wird der endgültige Wert \mathbf{U}^ν durch Überrelaxation berechnet.

1. Schritt: Gauß-Seidel–Linieniteration für den Zwischenwert

$$[E - \Theta_x(L + L^T)] \tilde{\mathbf{U}} = \Theta_y(B\mathbf{U}^\nu + B^T\mathbf{U}^{\nu-1}) + \delta^2 \mathbf{F}$$

2. Schritt: Überrelaxation (Extrapolation)

$$\mathbf{U}^\nu = \mathbf{U}^{\nu-1} + \omega(\tilde{\mathbf{U}} - \mathbf{U}^{\nu-1})$$

Die punktweise Formulierung des Gauß-Seidel–Linieniterationsverfahrens ergibt den Algorithmus des numerischen Lösungsablauf für $i = 1, \dots, im; j = 1, \dots, jm$.

$$-\Theta_x \tilde{u}_{i-1,j} + \tilde{u}_{i,j} - \Theta_x \tilde{u}_{i+1,j} = \Theta_y (u_{i,j-1}^\nu + u_{i,j+1}^{\nu-1}) + \delta^2 f_{i,j}$$

$$u_{i,j}^\nu = u_{i,j}^{\nu-1} + \omega(\tilde{u}_{i,j} - u_{i,j}^{\nu-1})$$

Für die Korrekturform ergibt sich folgender Algorithmus:

$$-\Theta_x \Delta u_{i-1,j}^\nu + \Delta u_{i,j}^\nu - \Theta_x \Delta u_{i+1,j}^\nu = -\omega(Res(u_{i,j}^{\nu-1}) - \Theta_y \Delta u_{i,j-1}^\nu)$$

$$u_{i,j}^\nu = u_{i,j}^{\nu-1} + \Delta u_{i,j}^\nu$$

Das Gauß-Seidel–Linieniterationverfahren, formuliert für die Variablen selbst oder als Korrekturform, führt auf die Lösung eines tridiagonalen Gleichungssystem. Dieses kann mit Hilfe des Gaußschen Eliminationsverfahrens gelöst werden.

Die Gauß-Seidel–Linieniteration ist stabil für den Relaxationsfaktor $0 \leq \omega \leq 2$. Der optimale Relaxationsfaktor der Poissongleichung mit Dirichlet'schen Randbedingungen ist

$$\begin{aligned}\omega_{opt} &= 2 \left(1 - \Delta y \cdot \pi \cdot \sqrt{1/a^2 + 1/b^2} \right) && \text{für Linie in x-Richtung} \\ \omega_{opt} &= 2 \left(1 - \Delta x \cdot \pi \cdot \sqrt{1/a^2 + 1/b^2} \right) && \text{für Linie in y-Richtung}\end{aligned}$$

Für eine bessere Konvergenz ist zu empfehlen, die gekoppelte Linie für die Richtung mit der kleineren Schrittweite zu wählen.

Linieniteration in alternierender Richtung

Die Linieniterationsverfahren mit einer Linie von gekoppelten Punkten übertragen in dieser Richtung die Informationen direkt. In der anderen Richtung jedoch erfolgt der Informationstransport nur schrittweise von Linie zu Linie. Dieses verzögert die Konvergenz. Deshalb ist es günstiger während des Iterationsablaufes die Richtung der Kopplung alternierend zu wechseln. Dies führt zu den Linieniterationsverfahren mit alternierender Richtung. Dieses Prinzip kann wiederum auf die Jacobi–Iteration als auch auf die Gauß-Seidel–Iteration angewendet werden.

Eines ersten dieser Verfahren wurde veröffentlicht in:

Peaceman , Rachford: SIAM – Journal, 3, 1955.

Dieses Verfahren (Alternating Direction Implicit Method (ADI)) basiert auf der Jacobi–Linieniteration und Überrelaxation mit abwechselnder Linie in x- und y- Richtung. Der Algorithmus wird im folgenden als Beispiel angeben.

1. Linieniteration in x- Richtung

$$\begin{aligned}[E - \Theta_x (L + L^T)] \cdot \tilde{\mathbf{U}}^{\nu-1/2} &= \Theta_y (B + B^T) \cdot \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F} \\ \mathbf{U}^{\nu-1/2} &= \mathbf{U}^{\nu-1} + \omega (\tilde{\mathbf{U}}^{\nu-1/2} - \mathbf{U}^{\nu-1})\end{aligned}$$

2. Linieniteration in y- Richtung

$$\begin{aligned}[E - \Theta_y (B + B^T)] \cdot \tilde{\mathbf{U}}^\nu &= \Theta_x (L + L^T) \cdot \mathbf{U}^{\nu-1/2} + \delta^2 \mathbf{F} \\ \mathbf{U}^\nu &= \mathbf{U}^{\nu-1/2} + \omega (\tilde{\mathbf{U}}^\nu - \mathbf{U}^{\nu-1/2})\end{aligned}$$

Die punktweise Formulierung ergibt folgendes System:

1. Linieniteration in x- Richtung

$$\begin{aligned}-\Theta_x \tilde{u}_{i-1,j}^{\nu-1/2} + \tilde{u}_{i,j}^{\nu-1/2} - \Theta_x \tilde{u}_{i+1,j}^{\nu-1/2} &= \Theta_y (u_{i,j-1}^{\nu-1} + u_{i,j+1}^{\nu-1}) + \delta^2 f_{i,j} \\ u_{i,j}^{\nu-1/2} &= u_{i,j}^{\nu-1} + \omega (\tilde{u}_{i,j}^{\nu-1/2} - u_{i,j}^{\nu-1})\end{aligned}$$

2. Linieniteration in y- Richtung

$$\begin{aligned}
-\Theta_y \tilde{u}_{i,j-1}^\nu + \tilde{u}_{i,j}^\nu - \Theta_y \tilde{u}_{i,j+1}^\nu &= \Theta_x (u_{i-1,j}^{\nu-1/2} + u_{i+1,j}^{\nu-1/2}) + \delta^2 f_{i,j} \\
u_{i,j}^\nu &= u_{i,j}^{\nu-1/2} + \omega (\tilde{u}_{i,j}^\nu - u_{i,j}^{\nu-1/2})
\end{aligned}$$

Dieses Verfahren ist stabil für alle Relaxationsparameter ω . Zur Verbesserung der Konvergenz verwendet man für jede Richtung einen optimierten Relaxationsparameter.

1.4.6 Konvergenz von Iterationsverfahren

Bei der Konvergenzbetrachtung von Anfangswertproblemen (Kapitel 3 dieser Vorlesung) wird die Annäherung der numerischen Lösung an die exakte Lösung der Differentialgleichung bei verschwindenden Schrittweiten gefordert. Dies gilt im Prinzip auch für Randwertprobleme, wie die hier betrachtete Lösung der Poissongleichung. Löst man die diskretisierte Poissongleichung mit einem direkten Verfahren und besitzt das System eine eindeutige Lösung, dann genügt die Konsistenz der räumlichen Diskretisierung (Abbruchfehler gegen Null) zur Konvergenz der exakten Differenzlösung gegen die exakte Lösung der Poissongleichung bei kleiner werdenden Schrittweiten Δx und Δy . Für die hier untersuchte Lösung der Poissongleichung ist die Konvergenz der exakten Differenzlösung gegeben und wird im folgenden vorausgesetzt.

Für die Konvergenz eines Iterationsverfahrens mit schrittweiser Lösung einer genähereten Matrix, muß zusätzlich sicher gestellt werden, daß die iterative Lösung gegen die exakte Lösung des Differenzproblems für Iterationszahlen $\nu \rightarrow \infty$ strebt. Dieses Problem wird im folgenden untersucht.

Eine qualitative Möglichkeit des Nachweises der Konvergenz eines Iterationsverfahrens besteht mit Hilfe des Laxschen Satzes. Betrachtet man ein Iterationsverfahren als künstliches Anfangswertproblem, dann sind Stabilität und Konsistenz des Iterationsverfahrens hinreichend für Konvergenz. Die Aussage reicht jedoch nicht aus, die verschiedenen Iterationsverfahren zu bewerten. Deshalb soll in diesem Abschnitt eine Konvergenzbetrachtung mittels der Untersuchung des diskreten Eigenwertproblems der Iterationsmatrizen gezeigt werden. Diese erlaubt die Berechnung der Konvergenzrate, mit der die Verfahren quantitativ verglichen werden können.

Definitionen

Die exakte Differenzlösung der diskretisierten Poissongleichung ergibt sich aus der direkten Invertierung von A

$$\mathbf{U} = A^{-1} \delta^2 \mathbf{F}$$

Erfolgt die Lösung mit einem Iterationsverfahren

$$N \mathbf{U}^\nu = P \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F} \quad \text{mit} \quad A = N - P$$

dann erhält man zu jedem Iterationsschritt ν eine Näherungslösung

$$\mathbf{U}^\nu = N^{-1} (P \mathbf{U}^{\nu-1} + \delta^2 \mathbf{F})$$

Die Konvergenz eines Iterationsverfahrens ist dann gegeben, wenn die Lösung des Iterationsproblem es gegen die exakte Lösung des Differenzenproblem es strebt, d.h.

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} (\mathbf{U}^\nu - \mathbf{U}) = 0$$

Definiert man den Konvergenzfehler mit

$$\mathbf{e}^\nu = \mathbf{U}^\nu - \mathbf{U}$$

und setzt diesen in die Iterationsvorschrift ein, dann erhält man für den Fehler

$$\mathbf{e}^\nu = N^{-1} (P \mathbf{e}^{\nu-1}) = M \mathbf{e}^{\nu-1} \quad \text{mit} \quad M = N^{-1} P$$

Schrittweises Einsetzen bis zu einem gegebenen Startfehler \mathbf{e}^0 ergibt

$$\mathbf{e}^\nu = (M)^\nu \mathbf{e}^0$$

Hinreichend für Konvergenz ist dann, wenn der Konvergenzfehler für $\nu \rightarrow \infty$ verschwindet, bzw. wenn

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} (M)^\nu = 0$$

Eine Matrix M , die dieser Bedingung genügt, nennt man eine konvergente Matrix. Für eine konvergente Matrix gilt, daß die Absolutbeträge aller Eigenwerte λ_i dieser Matrix kleiner als 1 sind. Diese Bedingung wird häufig mittels des Spektralradius $\varrho(M)$ ausgedrückt, d.h. es ist

$$\varrho(M) \equiv \max_i |\lambda_i| < 1$$

Daraus folgt mit einer beliebigen Norm $\|\cdot\|$ für M

$$\|M\| < 1$$

Eine Abschätzung der Iterationgleichung des Konvergenzfehlers mittels einer Norm führt auf die Ungleichung

$$\|\mathbf{e}^\nu\| \leq \|M\|^\nu \|\mathbf{e}^0\|$$

Ersetzt man die Norm von M durch den Spektralradius, so erhält man den wichtigen Zusammenhang zwischen Konvergenzfehler und Spektralradius.

$$\|\mathbf{e}^\nu\| \leq [\varrho(M)]^\nu \|\mathbf{e}^0\|$$

Fordert man für eine iterative Rechnung, daß die Amplitude des Fehlers um mindestens den Faktor 10^{-m} reduziert wird, d.h. $\|\mathbf{e}^\nu\|/\|\mathbf{e}^0\| = [\varrho(M)]^\nu \leq 10^{-m}$, dann folgt aus der Ungleichung die Mindestanzahl der erforderlichen Iterationsschritte.

$$\nu \geq \frac{m}{-\log \varrho(M)} = \frac{m}{R}$$

Die Konvergenzrate $R = -\log \varrho(M)$ ist ein wichtiges Maß für Effektivität eines Iterationsverfahrens. Ein Verfahren ist umso besser, je größer die Konvergenzrate R ist, d.h. je weniger Iterationen benötigt werden, um eine Reduktion des Anfangsfehlers um 10^{-m} zu erreichen.

Berechnung des diskreten Eigenwertproblems

Die Eigenwerte der Matrix M bestimmt man aus der Lösung des homogenen Eigenwertproblems der Matrix M :

$$M \mathbf{W} = \lambda E \mathbf{W} \quad \text{mit } \mathbf{W} = 0 \quad \text{auf den Rändern}$$

Hierbei ist \mathbf{W} die Eigenlösung zum Eigenwert λ . Sie entspricht der nichttrivialen Lösung dieses Randwertproblems.

Am Beispiel der Lösungsmatrix A soll die Lösung dieses Eigenwertproblems gezeigt werden. Setzt man $M = A$, dann ergibt sich das folgende Eigenwertproblem:

$$A \mathbf{W} = \lambda^A E \mathbf{W} \quad \text{mit } \mathbf{W} = 0 \quad \text{auf den Rändern}$$

Die Differenzgleichung für einen Punkt (i, j) mit $1 \leq i \leq im$, $1 \leq j \leq jm$ lautet

$$w_{i,j} - \Theta_x (w_{i-1,j} + w_{i+1,j}) - \Theta_y (w_{i,j-1} + w_{i,j+1}) = \lambda^A w_{i,j}$$

Die lineare Differenzgleichung kann durch einen Separationsansatz erfüllt werden. (Trennung in einen x- und y-abhängigen Anteil)

$$w_{i,j} = \varphi_i \cdot \psi_j = (a e^{I\alpha i} + b e^{-I\alpha i}) \cdot (c e^{I\beta j} + d e^{-I\beta j})$$

Die Koeffizienten a bis d werden aus den Randbedingungen ($w = 0$) bestimmt. Zum Beispiel erhält man für

$$\varphi_i = a e^{I\alpha i} + b e^{-I\alpha i} = (a + b) \cos \alpha i + I(a - b) \sin \alpha i$$

- $i = 0$: $\varphi_i = 0 \rightarrow 0 = a + b$
- $i = im + 1$: $\varphi_{im+1} = 0 \rightarrow 0 = (a - b) I \sin [\alpha(im + 1)]$
 \rightarrow erfüllt für $\alpha(im + 1) = p\pi$ mit $p = (0), 1, 2, \dots, im, (im + 1)$

Analog dazu erfüllt man die Randbedingungen für ψ_j und erhält somit die Eigenlösung $w_{i,j}$:

$$w_{i,j} = \varphi_i \cdot \psi_j = 2a \sin(\alpha i) \cdot 2c \sin(\beta j) = a(e^{I\alpha i} - e^{-I\alpha i}) \cdot c(e^{I\beta j} - e^{-I\beta j})$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{p\pi}{im+1} \quad p = 1, 2, \dots, im \quad \text{und} \quad \beta = \frac{q\pi}{jm+1} \quad q = 1, 2, \dots, jm$$

Diese Lösung $w_{i,j}$ wird in die Differenzgleichung des Eigenwertproblems eingesetzt.

Die Eigenwerte der Lösungsmatrix A ergeben sich nach Umformung zu

$$\lambda_{p,q}^A = 4\Theta_x \sin^2\left(\frac{\pi \cdot p}{2(im+1)}\right) + 4\Theta_y \sin^2\left(\frac{\pi \cdot q}{2(jm+1)}\right) \quad p = 1, 2, \dots, im \quad q = 1, 2, \dots, jm$$

Zur Umformung wurde benutzt $2\Theta_x + 2\Theta_y = 1$ und $\sin^2(\alpha/2) = \frac{1}{2}(1 - \cos \alpha)$.

Konvergenz der Jacobi-Iteration

Die Berechnung der Konvergenzrate R wird beispielhaft nur für die Jacobi-Iteration gezeigt.

Das Jacobi-Verfahren ist definiert durch

$$N = E \quad \text{und} \quad P = N - A = \Theta_x(L + L^T) + \Theta_y(B + B^T)$$

Für die Konvergenzrate wird der maximale Eigenwert von $M = N^{-1}P$ benötigt. Multipliziert man das Eigenwertproblem $M\mathbf{W} = \lambda E\mathbf{W}$ mit $N = E$ und ersetzt P durch $P = E - A$, dann erhält man

$$A\mathbf{W} = (1 - \lambda^J)\mathbf{W}$$

Das Eigenwertproblem für die gesamte Lösungsmatrix A ist

$$A\mathbf{W} = \lambda^A\mathbf{W}$$

Ein Vergleich ergibt sofort

$$\lambda^J = 1 - \lambda^A$$

Da die Eigenwerte für A bereits berechnet wurden, erhält man für die Jacobi-Iteration

$$\lambda^J = 1 - 4\Theta_x \sin^2\left(\frac{\pi \cdot p}{2(im+1)}\right) - 4\Theta_y \sin^2\left(\frac{\pi \cdot q}{2(jm+1)}\right) \quad p = 1, \dots, im \quad q = 1, \dots, jm$$

Den maximalen Eigenwert findet man für $p = q = 1$. Damit ergibt sich der Spektralradius $\varrho(M^J)$ der Jacobi-Iteration zu:

$$\varrho(M^J) = 1 - \Theta_x \frac{\pi^2}{(im+1)^2} - \Theta_y \frac{\pi^2}{(jm+1)^2}$$

Hierbei wurde der Sinus für kleine Argumente ($im \gg 1$, $jm \gg 1$) entwickelt ($\sin x \approx x$).

Die Konvergenzrate, $R = -\log \varrho(M^J)$, des Jacobi-Verfahrens erhält man mit $\log x \approx 1 - x$ zu

$$R(M^J) = \pi^2 \left(\frac{\Theta_x}{(im+1)^2} + \frac{\Theta_y}{(jm+1)^2} \right) = \pi^2 \delta^2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)$$

Damit ergibt sich die Mindestanzahl an Iterationen, um den Konvergenzfehler um 10^{-m} zu reduzieren

$$\nu = \frac{m}{R} = f(\Delta x, \Delta y, im, jm)$$

Nimmt man als Beispiel an, daß $\Delta x = \Delta y$ und $im = jm$, dann erhält man für die notwendigen Iterationen

$$\nu = \frac{2m}{\pi^2} (im+1)^2 \sim im^2$$

Es zeigt sich, daß mit zunehmender Punktzahl die Anzahl der notwendigen Iterationen quadratisch steigt!

Vergleich der Konvergenzraten von Iterationsverfahren

In ähnlicher Weise, wie für die Jacobi-Iteration aufgeführt, können die Konvergenzraten anderer Iterationsverfahren bestimmt werden. Die Konvergenzraten der hier behandelten Verfahren für die Differenzlösung der Poissongleichung mit Dirichletschen Randbedingungen sind in nachfolgender Tabelle aufgeführt.

	R	R/R_J	ω
1) Punktiteration			
Jacobi	$R_J = \delta^2 \pi^2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)$	1	1
Gauß-Seidel	$R_{GS} = 2 R_J$	2	1
beschleunigter Gauß-Seidel (optimiert)	$R_{BGS} = 2 \delta \pi \sqrt{2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{R_J}}$	$\omega_{opt} = 2 - R_{BGS}$
2) Linieniteration (Linie in x-Richtung)			
Jacobi	$R_{LJ} = \frac{\Delta y^2}{2} \pi^2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)$	$1 + \frac{\Delta y^2}{\Delta x^2}$	1
Gauß-Seidel	$R_{LGS} = 2 R_{LJ}$	$2 \left(1 + \frac{\Delta y^2}{\Delta x^2} \right)$	1
beschleunigter Gauß-Seidel (optimiert)	$R_{BLGS} = 2 \Delta y \pi \sqrt{2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{R_J}} \sqrt{\left(1 + \frac{\Delta y^2}{\Delta x^2} \right)}$	$\omega_{opt} = 2 - R_{BLGS}$
3) Linieniteration (Linie in y-Richtung)			
Jacobi	$R_{LJ} = \frac{\Delta x^2}{2} \pi^2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)$	$1 + \frac{\Delta x^2}{\Delta y^2}$	1
Gauß-Seidel	$R_{LGS} = 2 R_{LJ}$	$2 \left(1 + \frac{\Delta x^2}{\Delta y^2} \right)$	1
beschleunigter Gauß-Seidel (optimiert)	$R_{BLGS} = 2 \Delta x \pi \sqrt{2 \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right)}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{R_J}} \sqrt{\left(1 + \frac{\Delta x^2}{\Delta y^2} \right)}$	$\omega_{opt} = 2 - R_{BLGS}$

Folgende Definitionen sind hierbei verwendet worden:

$$a = (im + 1) \Delta x \quad b = (jm + 1) \Delta y \quad \delta^2 = \frac{\Delta x^2 \cdot \Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}$$

Für die Auswahl eines Verfahrens für ein vorgegebenes Problem ist zu beachten:

- Die Konvergenzrate R sollte möglichst hoch sein, da $\nu = \frac{m}{R}$
- Es sollte möglichst ein beschleunigtes Verfahren mit optimiertem Relaxationsfaktor ω_{opt} verwendet werden, da die Iterationszahl nichtoptimierter Verfahren i.a. höher ist und quadratisch mit der Punktzahl steigt.

- Der Rechenaufwand pro Gitterpunkt ist proportional der Iterationszahl und der Anzahl der Gleitkommaoperationen (=FLOPs) eines Verfahrens. Da implizite Linieniterationsverfahren mehr Operationen pro Punkt benötigen (ca. Faktor 3 mehr), ist abzuschätzen, ob ein Linien- oder ein Punktverfahren günstiger ist.
- Für die Übertragung der Randbedingungen ins Feld (insbesondere anderer als Dirichletsche Bedingungen) sind i.a. die Linienverfahren günstiger, da auf einer Linie der Informationstransport direkt erfolgt. Die beste Konvergenz erzielt man mit Linieniterationsverfahren in alternierender Richtung.

Für mehr Details zur Bestimmung der Konvergenzraten siehe:

E. Isaacson, H. B. Keller: Analyse numerischer Verfahren. Verlag Deutsch, Zürich, 1973

Kapitel 2

Numerische Strömungsmechanik II

2.1 Numerische Lösung parabolischer, partieller Differentialgleichungen

2.1.1 Einführung

Eine wichtige Klasse von Gleichungen der Strömungsmechanik ist von parabolischem Typ, siehe auch Kapitel 1 und 2 dieses Scripts. Kennzeichen dieser Gleichungen ist, daß die Lösung des charakteristischen Polynoms eine Doppelwurzel für die Charakteristiken ergibt (siehe Kap. 2). Ihre Lösungen beschreiben Phänomene, bei denen die Informationsausbreitung mit unendlicher Signalgeschwindigkeit in einem Halbraum der unabhängigen Variablen erfolgt. Betrachtet man die allgemeine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung

$$a u_{xx} + 2b u_{xy} + c u_{yy} + F(u_x, u_y, u, x, y) = 0$$

dann ergeben sich die Charakteristiken zu

$$\frac{dy}{dx}|_{1,2} = \frac{b}{a} \pm \frac{1}{a} \sqrt{b^2 - ac}$$

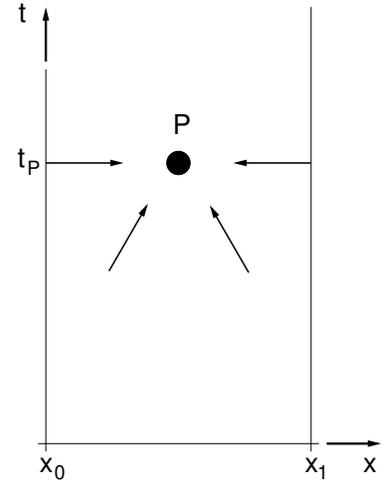
Die Gleichung ist dann parabolisch, wenn die Diskriminante $b^2 - ac$ verschwindet. Damit ergibt sich eine Doppellösung für die Charakteristiken zu $\frac{dy}{dx}|_{1,2} = \frac{b}{a}$. Die meisten Gleichungen der Strömungsmechanik in kartesischen Koordinaten treten in ihrer Normalform auf, d.h. die Mischableitung in obiger Gleichung verschwindet ($b = 0$). Die Gleichung ist dann parabolisch, wenn dann zusätzlich eine der zweiten Ableitungen verschwindet, d.h. wenn $a = 0$ oder $c = 0$. Beispiele hierfür sind die Wärmeleitungsgleichung (Fourier-Gleichung)

$$u_t = \nu u_{xx}$$

oder der Impulssatz der Grenzschichtgleichungen:

$$u u_x = \nu u_{yy} - v u_y - p_x$$

Betrachtet man z.B. die Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit ihrer Charakteristik $\frac{dt}{dx}|_{1,2} = 0$ im $x - t$ Raum für einen Punkt (x_P, t_P) , so ergibt sich aus der Charakteristik der Einflußbereich für diesen Punkt als der untere Halbraum. In der Richtung der Zeit t ist ein Anfangswertproblem zu lösen, bei dem die Lösung von einer Anfangsbedingung, z.B. zur Zeit $t = 0$, bis zur Zeit t_P fortschreitet. Gleichzeitig sieht man, daß für die x -Richtung ein Randwertproblem vorliegt, da entsprechend der zweiten Ableitung u_{xx} Randwerte links und rechts des Punktes vorgeschrieben werden müssen. Die Lösung eines solchen Anfangs-Randwertproblem es ist typisch für parabolische, partielle Differentialgleichungen, und gilt auch für komplexere Gleichungssysteme, wie z.B. für die Navier-Stokes Gleichungen.



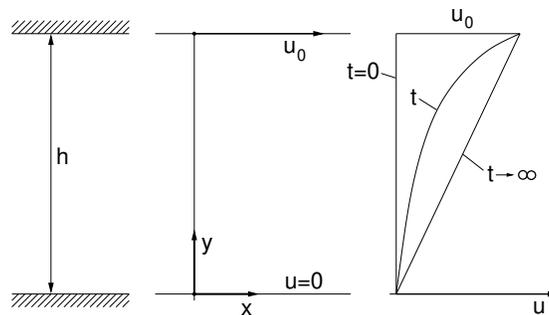
Die numerische Lösung mittels finiter Differenzen kann sowohl mit impliziten, als auch mit expliziten Schemata erfolgen. Die direkte, implizite Lösung ist dem Randwertproblem besser angepaßt, da die Informationsausbreitung mit unendlich hoher Geschwindigkeit erfolgt. Der Zeitschritt ist nicht durch numerische Instabilität eingeschränkt. Bei einer expliziten Lösung parabolischer, partieller Differentialgleichungen wird im Prinzip durch die numerische Approximation eine hyperbolische Differentialgleichung mit einer endlichen, von den Schrittweiten abhängigen Signalgeschwindigkeit gelöst (ein Beispiel ist in Kap. 3, Hirt'sche Stabilitätsanalyse angegeben). Das explizite Schema benötigt wesentlich weniger Rechenoperationen pro Zeitschritt als das implizite, der maximal verwendbare Zeitschritt ist jedoch begrenzt.

Die Lösung parabolischer, partieller Differentialgleichungen soll im folgenden durch zwei Beispiele demonstriert werden.

2.1.2 Lösung der Fourier-Gleichung

Anhand eines einfachen Strömungsproblem, der zeitlichen Entwicklung einer Couette-Strömung, soll die Lösung der Fourier-Gleichung demonstriert werden.

Zwischen zwei parallelen, unendlich ausgedehnten Platten befindet sich ein inkompressibles Fluid (Dichte ρ , Zähigkeit η) in Ruhe. Zur Zeit $t = 0$ wird eine Platte plötzlich auf konstante Geschwindigkeit u_0 beschleunigt. Die zeitliche Entwicklung der Grenzschicht zwischen den Platten bis zur asymptotischen, stationären Lösung soll mit einer Differenzlösung der vereinfachten Navier-Stokes Gleichungen bestimmt werden.



Wegen der Annahme paralleler Strömung und unendlich ausgedehnter Platten ist die Quergeschwindigkeit $v = 0$. Alle Gradienten in Strömungsrichtung verschwinden, d.h. $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ für $f = u, v, p$. Mit diesen Annahmen reduzieren sich die Navier-Stokes Gleichungen eines inkompressiblen Fluids auf eine einzige Gleichung vom Typ der Fourier-Gleichung. Diese lautet:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

Die Randbedingungen dieses Problem für $t \geq 0$ sind dann:

$$y = 0 \quad u = 0 \quad \text{und} \quad y = h \quad u = u_0$$

Als Anfangsbedingung zur Zeit $t = 0$ wird angenommen:

$$0 \leq y < h \quad u = 0 \quad \text{und} \quad y = h \quad u = u_0$$

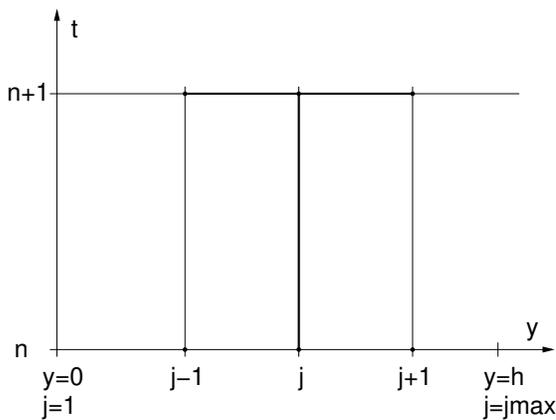
Für dieses lineare parabolische Anfangs-Randwertproblem kann zum Vergleich eine analytische Lösung entwickelt werden. Diese lautet:

$$u = u_0 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \{erfc[2n\eta_h + \eta] - erfc[2(n+1)\eta_h - \eta]\}$$

$$erfc(arg) = 1 - erf(arg) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{arg} exp(-z^2) dz$$

mit $\eta = \frac{y}{2\sqrt{\nu t}}$ und $\eta_h = \frac{h}{2\sqrt{\nu t}}$. Die stationäre Lösung für $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, ergibt ein lineares Geschwindigkeitsprofil $u = u_0 \cdot \frac{y}{h}$.

Die numerische Lösung erfolgt in einem Gitter mit $(j_{max} - 1)$ (konstanten) Ortschaftweiten Δy und den Zeitschrittweiten Δt .



$$\Delta y = \frac{h}{(j_{max}-1)}$$

$$y = (j - 1) \Delta y \quad 1 \leq j \leq j_{max}$$

$$t = (n - 1) * \Delta t \quad 1 \leq n \leq n_{max}$$

$$u(y, t) = u_j^n$$

Die numerischen Randbedingungen der Couetteströmung sind dann:

$$y = 0 (j = 1) : \quad u_1^n = 0 \quad \text{und} \quad y = h (j = j_{max}) : \quad u_{j_{max}}^n = u_0$$

Die Differenzlösung der Differentialgleichung erfolgt mit einem allgemeinen Schema, das durch einen Verfahrensparameter Θ zwischen explizitem und implizitem Schema geschaltet werden kann. Mit der Abkürzung (numerische Diffusionszahl) $\sigma = \nu \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$ lautet die diskretisierte Gleichung:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + (1 - \Theta) \sigma (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) + \Theta \sigma (u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1})$$

Für $\Theta = 0$ erhält man ein explizites Schema $O(\Delta y^2, \Delta t)$, für $\Theta = 1$ ein implizites Schema $O(\Delta y^2, \Delta t)$ und für $\Theta = 1/2$ das implizite Crank-Nicholson Schema $O(\Delta y^2, \Delta t^2)$. Damit sind die wichtigsten Schemata zusammengefaßt.

Die implizite Lösung führt auf ein gekoppeltes, tridiagonales Gleichungssystem für den unbekanntem Lösungsvektor u_j^{n+1} $j = 2, \dots, j_{max} - 1$. In vielen Fällen, insbesondere bei nichtlinearen Gleichungen, wird das Gleichungssystem nicht nach der Unbekannten u_j^{n+1} , sondern nach deren zeitlicher Korrektur $\Delta u_j^n = u_j^{n+1} - u_j^n$ aufgelöst. Der Vorteil liegt darin, daß hierbei die stationäre Lösung (Ortsoperator) unabhängig von der Form der Lösungsmatrix wird und diese somit vereinfacht oder iterativ gelöst werden kann.

Die diskretisierte Gleichung, formuliert für die zeitliche Korrektur $\Delta u^n = u_j^{n+1} - u_j^n$ und sortiert, ergibt dann:

$$[-\Theta\sigma] \Delta u_{j-1}^n + (1 + 2\Theta\sigma) \Delta u_j^n + [-\Theta\sigma] \Delta u_{j+1}^n = \sigma (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n)$$

Diese Differenzengleichung führt auf ein tridiagonales Gleichungssystem der Form:

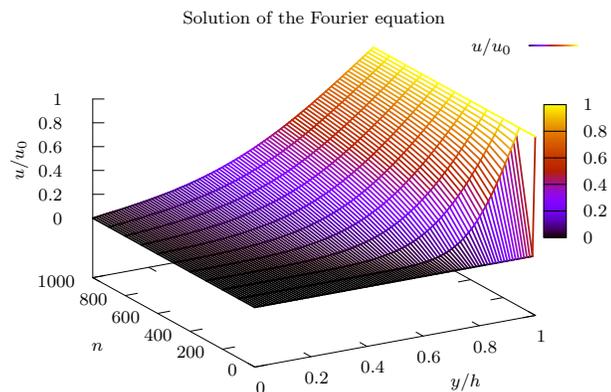
$$a_j \Delta u_{j-1}^n + b_j \Delta u_j^n + c_j \Delta u_{j+1}^n = r_j$$

Die Lösung mit der Gaußschen Eliminationsmethode (Thomas-Algorithmus) wurde im ersten Teil der Vorlesung behandelt. Hat man somit die Lösung für Δu^n ermittelt, können die neuen Variablen u_j^{n+1} berechnet werden.

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta u^n$$

Der detaillierte Lösungsweg in Form eines FORTRAN Programmes und Ergebnisse werden in der entsprechenden Übung behandelt.

Die Abbildung zeigt als Beispiel für die Couette-Strömung die Lösung des Geschwindigkeitsverlaufes $\frac{U}{U_0} = f\left(\frac{y}{H}\right)$ für verschiedene Zeitschritte n , berechnet mit dem implizitem Schema $\Theta = 1$ und $\sigma = 1$.



2.1.3 Grenzschichtgleichungen

Als Beispiel für Systeme parabolischer, partieller Differentialgleichungen soll im folgenden die numerische Lösung der Grenzschichtgleichungen für zweidimensionale, inkompressible Strömungen behandelt werden.

Die Grenzschichtapproximation nach Prandtl ist eine wichtige Näherung der Navier-Stokes Gleichungen. Danach kann die aufwendige Lösung der Navier-Stokes Gleichungen zur Berechnung der reibungsbehafteten Strömung um einen Körper aufgespalten werden in die Lösung zweier einfacherer Gleichungssysteme. Danach ergibt die Lösung der reibungsfreien Außenströmung (Potential- oder Eulergleichungen) die Druckverteilung auf dem Körper. Für diese Druckverteilung kann dann die reibungsbehaftete Strömung in der Grenzschicht durch Lösung der Grenzschichtgleichungen bestimmt werden.

Voraussetzung für die Grenzschichtapproximation sind große Reynoldszahlen $Re \gg 1$ und

anliegende Grenzschichten mit einer Dicke δ sehr viel kleiner als die Körperlänge L , i.a. $\delta \sim L/\sqrt{Re}$. Unter diesen Annahmen erfolgt die Herleitung der Grenzschichtgleichungen aus den Navier-Stokes Gleichungen mittels geeigneter Normierung aller Variablen und anschließendem Grenzübergang $Re \rightarrow \infty$.

Für eine zweidimensionale, inkompressible Grenzschicht werden folgende normierte, dimensionslose Variable eingeführt:

$$\begin{aligned} x &= x^*/L, & y &= y^*/L * \sqrt{Re}, & u &= u^*/u_\infty, & v &= v^*/u_\infty * \sqrt{Re}, \\ \eta &= \eta^*/\eta_\infty, & \rho &= \rho^*/\rho_\infty = 1, & p &= p^*/(\rho_\infty u_\infty^2) \end{aligned}$$

Als Bezugsgrößen werden i.a. die konstanten Werte der ungestörten Anströmung (Index ∞) gewählt. Die Reynoldszahl Re wird dann mit diesen Bezugsgrößen gebildet.

$$Re = \frac{\rho_\infty u_\infty L}{\eta_\infty}$$

Nach dem Grenzübergang $Re \rightarrow \infty$ ergeben sich somit die Grenzschichtgleichungen in dimensionsloser Form.

$$\begin{aligned} u_x + v_y &= 0 \\ u u_x + v u_y + p_x &= (\eta u_y)_y \\ p_y &= 0 \end{aligned}$$

Die Zähigkeit η ist für laminare Strömung eine Materialgröße und meist nur eine Funktion der Temperatur, d.h. $\eta = \eta(T)$. Für turbulente Strömung ist eine zusätzliche Schließungsannahme für die Reynoldsen Spannungen einzuführen. Diese wird oft über einen Wirbelviskositätsansatz approximiert, so daß eine effektive Zähigkeit η_{eff} eingeführt werden kann, die sich aus einem laminaren und einem turbulenten Anteil zusammensetzt, d.h. $\eta_{eff} = \eta_{lam} + \eta_{turb}$. Die Lösungseigenschaften der Grenzschichtgleichungen ändern sich durch einen solchen turbulenten Schließungsansatz nicht, so daß der hier gezeigte Lösungsweg auch für turbulente Grenzschichten gilt. Einzelheiten der Grenzschichtgleichungen und ihrer Lösung sind in der Fachliteratur zu finden, z.B. in *H. Schlichting: Grenzschichttheorie. Verlag G. Braun, Karlsruhe.*

Der Druck p ist normal zur Grenzschicht konstant ($p_y = 0$), seine Verteilung $p(x)$ längs zur Grenzschicht ist durch die reibungsfreie Außenströmung bestimmt und somit bekannt. Am Grenzschichtrand $\delta(x)$ erreicht die Strömungsgeschwindigkeit $u(x, y)$ den Wert der reibungsfreien Strömung $u_e(x)$. Als Verknüpfungsbedingung zur Außenströmung müssen dort alle Gradienten in y -Richtung verschwinden, d.h. $u_y = u_{yy} = \dots = 0$. Daraus ergibt sich sofort eine Kopplung von Druck p und Außengeschwindigkeit u_e am Grenzschichtrand.

$$u_e u_{e,x} + p_x = 0$$

Eine Integration liefert den bekannten Zusammenhang der Bernoulli-Gleichung zwischen Druck und Außengeschwindigkeit, $p + u_e^2/2 = const.$.

Für die Integration der Grenzschichtgleichungen ist es zweckmäßig, den Druck durch die

Außengeschwindigkeit u_e auszudrücken. Man erhält damit das zu lösende Gleichungssystem für die Unbekannten u und v zu:

$$\begin{array}{r} u_x + v_y = 0 \\ u u_x + v u_y - u_e u_{e,x} = (\eta u_y)_y \end{array}$$

Das Gleichungssystem ist von parabolischem Typ und führt auf ein Anfangswertproblem für die x -Richtung (diese entspricht der Zeit t bei der Fourier-Gleichung) und ein Randwertproblem für die y -Richtung. Das Randwertproblem für die y -Richtung erfordert die Vorgabe von zwei Randbedingungen für u und eine für v (entsprechend u_{yy} und v_y).

Die Randbedingungen für eine Grenzschicht können wie folgt angenommen werden:

- Wand $y = 0$: $u(x, y = 0) = u_W(x)$ und $v(x, y = 0) = v_W(x)$

Damit können z.B. die folgenden Fälle simuliert werden:

$u_W = v_W = 0$ undurchdringliche, haftende Wand

$v_W < 0$ Absaugung der Grenzschicht

$u_W > 0, v_W > 0$ gerichtetes Ausblasen in die Grenzschicht

- Rand $y = \delta$: $u(x, \delta) = u_e(x)$

Zusätzlich kann noch die Verknüpfungsbedingung $u_y(x, \delta) = 0$ verwendet werden,

um den Grenzschichttrand δ festzulegen, z.B. in der Form:

$$y = \delta \quad \text{wenn} \quad \left| \frac{u_e - u}{u_e} \right| < \epsilon_{Rand} \ll 1$$

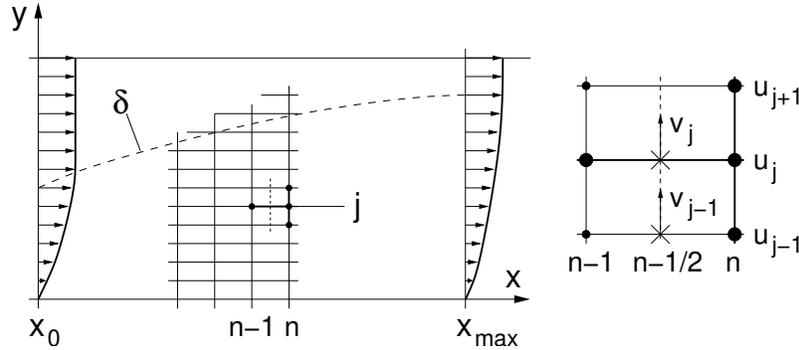
Die Anfangsbedingung für $x = x_0$

erfordert lediglich die Vorgabe des Geschwindigkeitsprofils $u(y)$, d.h.

$$x = x_0 : \quad u(x_0, y) = u_0(y)$$

Die Quergeschwindigkeit $v(x_0, y)$ ist damit eindeutig festgelegt.

Die Lösung des Anfangs-Randwertproblems der Grenzschichtgleichungen erfolgt durch ein sogenanntes Fortsetzungs- oder Marschierverfahren. Aus der Anfangsbedingung bei x_0 , und den Grenzschichtgleichungen wird eine neue Lösung für $x_0 + \Delta x$ bestimmt. Diese Lösung wird im nächsten Schritt zur Anfangsbedingung für die Lösung bei $x_0 + 2\Delta x$, usw.



Die Entwicklung einer numerischen Lösung hierfür soll im folgenden anhand eines einfachen, aber effektiven impliziten Lösungsschemas (Laasonen Schema) gezeigt werden.

Die numerische Lösung erfolgt auf einer Linie $x = x_n$ mit der Anfangsbedingung auf x_{n-1} . In y -Richtung mit $y_j = (j - 1) * \Delta y$ werden konstante Schrittweiten Δy verwendet. Die Anzahl der Punkte j_{max} und Δy werden durch die Anfangsbedingung festgelegt. Da die Grenzschichtdicke im Verlauf von x jedoch wachsen kann, wird diese für jeden neuen x -Schritt bestimmt und gegebenenfalls weitere Punkte in y -Richtung hinzugefügt.

Der Impulssatz wird in dem Punkt $P(x_n, y_j)$ mittels Rückwärtsdifferenz für u_x und zentralen Differenzen für die y -Ableitungen entwickelt. Dies ergibt ein Schema der Genauigkeit $O(\Delta x, \Delta y^2)$. Der diskretisierte Impulssatz lautet:

$$R_1 = u_j^{n-1} \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta x} + v_j^{n-1/2} \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta y} - u_e^{n-1} \frac{u_e^n - u_e^{n-1}}{\Delta x} - \left(\eta_{j+1/2}^{n-1} \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta y} - \eta_{j-1/2}^{n-1} \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta y} \right) / \Delta y = 0$$

Für alle auftretenden Koeffizienten werden die bekannten Werte auf x_{n-1} verwendet, nur die Quergeschwindigkeit v wird für den Ort $x_{n-1/2}$ mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung neu gelöst. Für die Kontinuitätsgleichung ist es deshalb zweckmäßig, diese im Punkte $P(x_{n-1/2}, y_{j-1/2})$ zu entwickeln.

$$R_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta x} + \frac{u_{j-1}^n - u_{j-1}^{n-1}}{\Delta x} \right) + \frac{v_j^{n-1/2} - v_{j-1}^{n-1/2}}{\Delta y} = 0$$

Die beiden Differenzgleichungen $R_1 = 0$ und $R_2 = 0$, zusammengefaßt in einen sogenannten Residuenvektor $\vec{Res} = \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \end{pmatrix}$ bilden ein gekoppeltes, algebraisches Gleichungssystem für die Unbekannten $\vec{V}_j = \begin{pmatrix} u^n \\ v^{n-1/2} \end{pmatrix}$ für die Punkte $(j - 1, j, j + 1)$. Die diskretisierten Grenzschichtgleichungen können somit zusammengefaßt werden:

$$\vec{Res}(\vec{V}) = 0$$

Der Residuenvektor $\vec{Res}(\vec{V})$ koppelt die Variablen der Nachbarpunkte $j - 1, j, j + 1$, d.h. es ist

$$\vec{Res}(\vec{V}) = \vec{Res}(\vec{V}_{j-1}, \vec{V}_j, \vec{V}_{j+1}) = 0$$

Da dieses System nichtlinear gekoppelt ist, wird die Lösung iterativ mit einem Newtonschen Iterationsverfahren durchgeführt. Mit einer Taylorreihenentwicklung nach dem Iterationsindex ν

$$Res(\vec{V}^{\nu+1}) = Res(\vec{V}^\nu) + \frac{\partial Res}{\partial \vec{V}}|^\nu \cdot (\vec{V}^{\nu+1} - \vec{V}^\nu) = 0$$

ergibt sich die Iterationsgleichung:

$$\sum_{k=j-1}^{j+1} \frac{\partial Res}{\partial \vec{V}_k} \cdot (\vec{V}_k^{\nu+1} - \vec{V}_k^\nu) = -Res(\vec{V}_j^\nu)$$

Das System ausgeschrieben, mit $\Delta \vec{V}_k^\nu = \vec{V}_k^{\nu+1} - \vec{V}_k^\nu$, ergibt ein tridiagonales Gleichungssystem für die Vektoren $\Delta \vec{V}^\nu$, wobei die Koeffizienten 2×2 Matrizen sind (Block-Tridiagonalsystem).

$$\bar{\bar{A}}_j \Delta \vec{V}_{j-1}^\nu + \bar{\bar{B}}_j \Delta \vec{V}_j^\nu + \bar{\bar{C}}_j \Delta \vec{V}_{j+1}^\nu = -Res(\vec{V}_j^\nu)$$

Hierbei sind $\bar{\bar{A}}$, $\bar{\bar{B}}$ und $\bar{\bar{C}}$ die sogenannten Jacobimatrizen, deren Elemente sich aus der Differentiation der beiden Gleichungen $R_1 = 0$ und $R_2 = 0$ nach den einzelnen Variablen $(u^n, v^{n-1/2})$ für den betreffenden Punkt $(j-1, j, j+1)$ ergeben. Zum Beispiel ist

$$\bar{\bar{B}}_j = \frac{\partial Res}{\partial \vec{V}_j} = \frac{\partial(R_1, R_2)}{\partial(u_j^n, v_j^{n-1/2})} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} b_{11} &= \frac{\partial R_1}{\partial u_j^n} = u_j^{n-1}/\Delta x + (\eta_{j+1/2}^{n-1/2} + \eta_{j-1/2}^{n-1/2})/\Delta y^2 & b_{12} &= \frac{\partial R_1}{\partial v_j^{n-1/2}} = (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)/(2\Delta y) \\ b_{21} &= \frac{\partial R_2}{\partial u_j^n} = 1/(2\Delta x) & b_{22} &= \frac{\partial R_2}{\partial v_j^{n-1/2}} = 1/\Delta y \end{aligned}$$

Dieses Block-Tridiagonalsystem wird ähnlich, wie bereits für skalare Gleichungen gezeigt, mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren (Thomas-Algorithmus) gelöst. Hierzu definiert man einen Rekursionsansatz mit der Matrix $\bar{\bar{E}}$ und dem Vektor \vec{F} :

$$\Delta \vec{V}_j^\nu = \bar{\bar{E}}_j \cdot \Delta \vec{V}_{j+1}^\nu + \vec{F}_j$$

Ersetzt man damit $\Delta \vec{V}_{j-1}^\nu$ so erhält man die Rekursionskoeffizienten zu:

$$\begin{aligned} \bar{\bar{E}}_j &= (\bar{\bar{A}}_j \cdot \bar{\bar{E}}_{j-1} + \bar{\bar{B}}_j)^{-1} \cdot (-\bar{\bar{C}}_j) \\ \vec{F}_j &= (\bar{\bar{A}}_j \cdot \bar{\bar{E}}_{j-1} + \bar{\bar{B}}_j)^{-1} \cdot (-Res - \bar{\bar{A}}_j \cdot \vec{F}_{j-1}) \end{aligned}$$

Die Rekursionskoeffizienten berechnet man schrittweise für $j = 2, \dots, j_{max} - 1$, beginnend mit der Randbedingung $\vec{V}_{j=1} = \begin{pmatrix} u_W^n \\ v_W^{n-1/2} \end{pmatrix}$ an der Wand, d.h. $\Delta \vec{V}_{j=1}^\nu = 0$ und somit $\bar{\bar{E}}_j = 0$, $\vec{F}_j = 0$.

Somit können die Variablen u und v bestimmt werden. Bevor diese jedoch berechnet werden, muß noch überprüft werden, ob der Integrationsbereich so groß ist, daß $y_{max} =$

$(jmax - 1) * \Delta y > \delta$. Der Grenzschichttrand δ wird dadurch definiert, daß dort die Geschwindigkeit u bis auf eine kleine, vorgegebene Abweichung $\epsilon_{Rand} \sim 10^{-3}$ ihren Außenwert u_e erreicht:

$$y = \delta \quad \text{wenn} \quad \left| \frac{u_e^n - u_{jmax-1}^{n,\nu+1}}{u_e^n} \right| < \epsilon_{Rand}$$

mit $u_e^n - u_{jmax-1}^{n,\nu+1} = u_e^n - u_{jmax-1}^{n,\nu} - f_{1,jmax-1}$.

Falls diese Abfrage nicht erfüllt ist, wird ein weiterer Schritt Δy hinzugefügt, d.h. es wird $jmax = jmax + 1$ gesetzt. Für diesen neuen Punkt werden die Rekursionskoeffizienten berechnet und erneut nach dem Rand abgefragt. Ist die Abfrage erfüllt, dann werden die Variablen für die Iteration $\nu + 1$ bestimmt.

Die Korrekturvariablen $\Delta \vec{V}_j^\nu$ erhält man aus dem Rekursionsansatz für $j = jmax - 1, \dots, 2$ mit der Randbedingung $u_{jmax}^n = u_e^n$, d.h. mit $\Delta \vec{V}_{jmax}^\nu = 0$. (Eine Randbedingung für v_{jmax} ist nicht gegeben und wird nicht benötigt.) Die Variablen selbst bestimmt man dann aus:

$$\vec{V}_j^{n,\nu+1} = \vec{V}_j^{n,\nu} + \Delta \vec{V}_j^\nu$$

Die iterative Lösung am Ort x^n wird wiederholt, bis die Gleichung $\vec{Res}^n = 0$ bis auf eine vorgegebene Schranke erfüllt wird, d.h. wenn

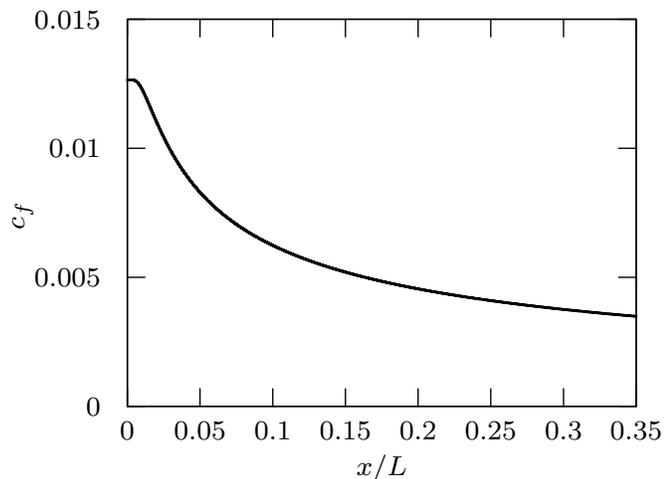
$$\max |R_1, R_2| \leq \epsilon_{Res}$$

Ist die Schranke erfüllt, kann die Rechnung für den nächsten x -Schritt in gleicher Weise fortgesetzt werden.

Der hier vorgeführte Lösungsweg zur impliziten Lösung eines gekoppelten Gleichungssystems wird in ähnlicher Form auch für die implizite Lösung der Euler- und Navier-Stokes Gleichungen benutzt.

Der detaillierte Lösungsweg in Form eines FORTRAN Programmes und Ergebnisse werden in der entsprechenden Übung behandelt.

Die Abbildung zeigt als Beispiel für die numerische Berechnung von Strömungsgrenzschichten den Verlauf des Reibungswertes $c_f = \frac{\tau_w}{\frac{\rho}{2} U_\infty^2}$ über der Länge x/L einer ebenen Platte bei laminarer Strömung mit $Re = 10^6$.



2.2 Numerische Lösung skalarer, hyperbolischer Differentialgleichungen

2.2.1 Einführung

Hyperbolische, partielle Differentialgleichungen haben reelle Charakteristiken, längs derer sich die Informationen ausbreiten (charakteristische Lösung, Verträglichkeitsbedingung). Die Charakteristiken bestimmen den Einflußbereich einer Lösung und sind somit auch für die numerischen Lösungsverfahren entscheidend. Ihre Herleitung wurden in Kapitel 2 behandelt.

Hyperbolische Differentialgleichungen können in verschiedenen Formen auftreten. Ein Beispiel für eine skalare Gleichung 1. Ordnung ist die Konvektionsgleichung

$$w_t + \lambda w_x = 0$$

Diese Gleichung besitzt eine Charakteristik $\frac{dx}{dt}|_1 = \lambda$, die die Steigung der charakteristischen Grundkurve bildet.

Die Wellengleichung

$$u_{tt} - a_0^2 u_{xx} = 0$$

und die Störpotentialgleichung für Überschall

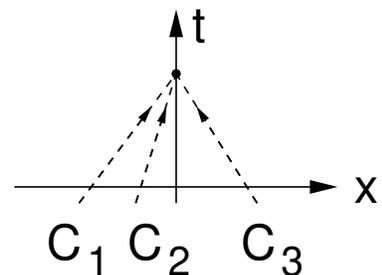
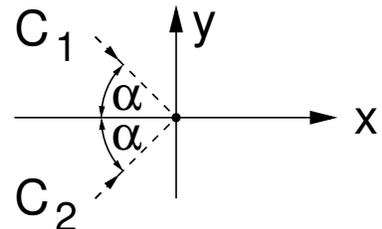
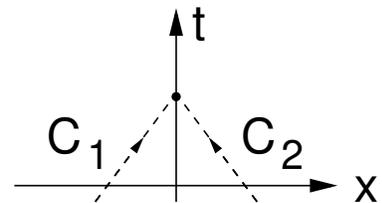
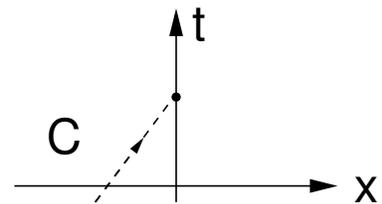
$$(Ma_\infty^2 - 1) \Phi_{xx} - \Phi_{yy} = 0$$

sind Beispiele für skalare Gleichungen 2. Ordnung. Diese Gleichungen haben zwei reelle Charakteristiken, hier $\frac{dx}{dt}|_{1,2} = \pm a_0$ bzw. $\frac{dy}{dx}|_{1,2} = \pm 1/\sqrt{(Ma_\infty^2 - 1)}$. Der Einflußbereich der Lösung wird durch die beiden Charakteristiken begrenzt.

Systeme von Differentialgleichungen können ebenfalls von hyperbolischem Typ sein, ein wichtiges Beispiel hierfür sind die zeitabhängigen Euler Gleichungen einer kompressiblen Strömung. Für eindimensionale Strömungen lauten diese (siehe Kapitel 1):

$$U_t + F_x = 0$$

Dieses System führt auf drei reelle Charakteristiken $\frac{dx}{dt}|_1 = u$ und $\frac{dx}{dt}|_{2,3} = u \pm a$. Die äußeren Charakteristiken bilden den Einflußbereich.



Der endliche Einflußbereich hyperbolischer Differentialgleichungen führt auf die Lösung eines Anfangswertproblems. Hierbei wird die Lösung, ausgehend von einer Anfangsbedingung auf einer nicht-charakteristischen Kurve, längs der Charakteristiken fortgesetzt (Charakteristikenverfahren). Da der Integrationsbereich i.a. endlich ist, müssen an den

Rändern des Bereiches Randbedingungen vorgeben werden. Somit erhält man ähnlich wie für parabolische Gleichungen ein kombiniertes Anfangs–Randwertproblem. Die Anzahl der vorzugebenden Randbedingungen richtet sich dabei nach der Anzahl der Charakteristiken, die vom Rand ins Innere des Lösungsgebietes weisen.

Bei der Formulierung eines numerischen Differenzenschemas ist die Erfassung des Einflussbereiches einer hyperbolischen Differentialgleichung eine notwendige Bedingung für eine konvergente Lösung. Dies wird in der sogenannten CFL Bedingung im nächsten Abschnitt formuliert.

Eine weitere Problematik der numerischen Lösung hyperbolischer Differentialgleichungen entsteht durch die charakteristische Lösung, die Wellentransport mit konstanter Amplitude längs der Charakteristiken beschreibt. Während der numerischen Rechnung entstehen jedoch Störungen durch Diskretisierungs- und Rundungsfehler, die sich dann im ganzen Feld ausbreiten und sich der exakten Lösung überlagern. Um dieses zu vermeiden müssen die Störungen numerisch durch sogenannte Dämpfungsterme unterdrückt werden. Die numerischen Dämpfungsterme werden dem Differenzenschema entweder hinzugefügt, wie bei zentralen Differenzen, oder sie sind in der Diskretisierung enthalten, wie bei Upwindschemata. Diese Problematik wird in einem weiteren Abschnitt diskutiert.

Die wichtigsten Diskretisierungsschemata für hyperbolische Differentialgleichungen werden zunächst für eine skalare Modellgleichung aufgeführt.

Für das System der Euler Gleichungen werden in einem gesonderten Kapitel die verschiedenen Formen und Lösungseigenschaften untersucht und numerische Lösungsverfahren vorgestellt.

2.2.2 Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) Bedingung

Die CFL Bedingung ist eine notwendige Bedingung, die bei der Formulierung von Differenzenschemata für hyperbolische, partielle Differentialgleichungen eingehalten werden muss. Die Bedingung lautet:

Für die Konvergenz numerischer Lösungen von Anfangswertproblemen hyperbolischer, partieller Differentialgleichungen ist notwendige Bedingung, daß der numerische Abhängigkeitsbereich eines Differenzenschemas den Abhängigkeitsbereich der Differentialgleichung einschließt.

Der Abhängigkeitsbereich der Differentialgleichung ist durch die Charakteristiken vorgegeben, während der numerische Abhängigkeitsbereich eines Differenzenschemas durch die Schrittweiten (Differenzenstern) festgelegt wird. Die CFL Bedingung fordert danach, daß die Schrittweiten so gewählt werden, daß die Charakteristiken innerhalb des Differenzensternes liegen und somit die charakteristische Lösung voll erfaßt wird.

Für eine zeitabhängige Gleichung ist die Charakteristik durch $\left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$ gegeben und der numerische Abhängigkeitsbereich durch das Schrittweitenverhältnis $\frac{\Delta x}{\Delta t}$. Die CFL Bedingung wird dann ausgedrückt durch:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \geq \left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$$

Diese Bedingung wird oft in Form einer dimensionslosen Kennzahl, der Courantzahl C , geschrieben:

$$C = \left. \frac{dx}{dt} \right|_C \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} = \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

Die Courantzahl C kann auch als Verhältnis von exakter Informationsgeschwindigkeit $\left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$ zu numerischer Informationsgeschwindigkeit $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ bezeichnet werden.

Für Gleichungen mit mehreren Charakteristiken, wie z.B. den Euler Gleichungen mit $\left. \frac{dx}{dt} \right|_C = (u, u + a, u - a)$, muß der betragsmäßig größte Wert gewählt werden, d.h.:

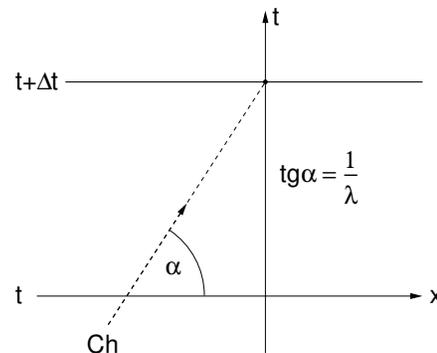
$$C = \max \left(\left| \left. \frac{dx}{dt} \right|_C \right| \right) \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} = (|u| + a) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

Die Aussage der CFL Bedingung soll im folgenden anhand einer skalaren Modellgleichung gezeigt werden.

Beispiel :

Betrachtet wird die skalare Konvektionsgleichung:

$$w_t + \lambda w_x = 0 \quad \text{mit} \quad \lambda = \text{const.} > 0$$

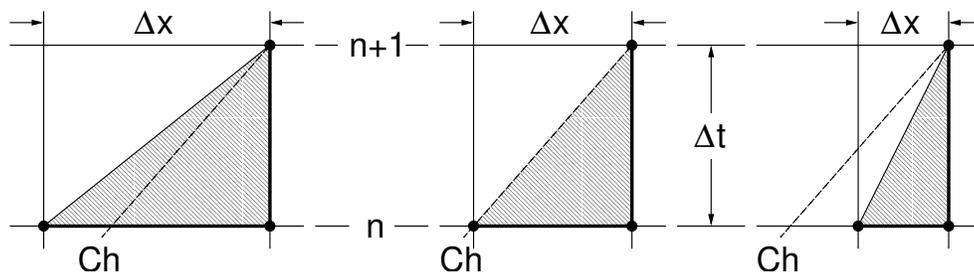


Die Gleichung hat die Charakteristik $\left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$ und damit die exakte Lösung $w(x, t) = w(x - \lambda t)$. Der Abhängigkeitsbereich ist die Gerade $x - \lambda t = \text{const.}$ Die Courantzahl ist definiert als $C = \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

Differenzenschemata:

a) explizites Schema, Rückwärtsdifferenz für w_x

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_i^n - w_{i-1}^n}{\Delta x} = 0$$



CFL Bed. erfüllt

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} > \left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$$

$$C < 1$$

CFL Bed. erfüllt

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$$

$$C = 1$$

CFL Bed. nicht erfüllt

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} < \left. \frac{dx}{dt} \right|_C = \lambda$$

$$C > 1$$

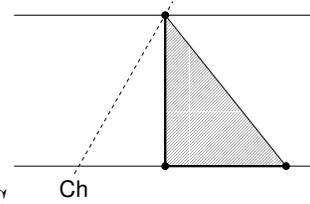
von Neumann Stabilitätsanalyse: Schema stabil für $C \leq 1$

b) explizites Schema, Vorwärtsdifferenz für w_x

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^n - w_i^n}{\Delta x} = 0$$

CFL Bedingung: nicht erfüllt

von Neumann Stabilitätsanalyse: Schema instabil für alle C



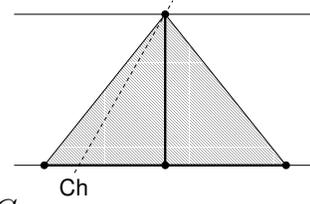
c) explizites Schema, zentrale Differenz für w_x

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^n - w_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

CFL Bedingung: erfüllt für $C \leq 1$

von Neumann Stabilitätsanalyse: Schema instabil für alle C

\implies d.h. CFL Bedingung nur notwendig, nicht hinreichend!



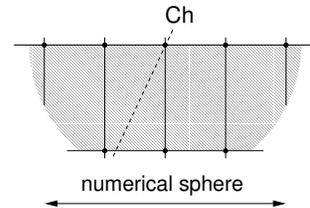
d) implizites Schema, zentrale Differenz für w_x

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^{n+1} - w_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0$$

CFL Bedingung: immer erfüllt

\implies Werte w^{n+1} über x gekoppelt

von Neumann Stabilitätsanalyse: uneingeschränkt stabil für alle C



2.2.3 Numerische Dämpfung

Unter numerischer Dämpfung versteht man dissipative Effekte der numerischen Diskretisierungsfehler. Die Dissipation bewirkt eine Glättung (Verschmierung) der Lösung, ähnlich der Wirkung der Zähigkeit. Sie hat auf numerische Lösungen hyperbolischer, partieller Differentialgleichungen einen merklichen Einfluß, da die exakte, charakteristische Lösung nur Wellentransport, aber keine Dissipation zuläßt. Durch die numerische Dämpfung der Diskretisierung kann die Lösung verfälscht werden.

Unerwünschte Auswirkungen der numerischen Dämpfung
auf die numerische Lösung hyperbolischer Probleme sind z.B.:

- Ausschmieren der Lösung
- künstliche Wirbelproduktion und Zerfall
- künstliche Entropieänderungen

Die numerische Dämpfung sollte daher auf ein Minimum reduziert werden.

Zum anderen entstehen jedoch bei jeder numerischen Rechnung Störungen, z.B. durch Rundungsfehler, die durch das Schema verstärkt werden können und sich der exakten Lösung

überlagern. Um ein Ausbreiten dieser Störungen im ganzen Lösungsfeld zu vermeiden, müssen diese während der Rechnung ausgedämpft werden. Hierzu nutzt man wiederum die numerische Dämpfung aus.

Erwünschte Auswirkung der numerischen Dämpfung
auf die numerische Lösung hyperbolischer Probleme ist:

- Ausdämpfen von numerischen Störungen im Lösungsfeld

Ohne eine gewisse Dämpfung durch die Diskretisierung kann somit keine genaue numerische Lösung erzielt werden. Daraus folgt:

Numerische Dämpfung so klein wie möglich und so groß wie nötig !

Die Einhaltung dieser Forderung ist sehr wichtig für die Stabilität und Genauigkeit der numerischen Lösung. Sie erfordert jedoch gute numerische Kenntnisse und viel Erfahrung.

Um die Wirkung der numerischen Dämpfung zu diskutieren, wird wiederum eine skalare Modellgleichung betrachtet.

Beispiel für numerische Diskretisierungsfehler:

Betrachtet wird die skalare Konvektionsgleichung:

$$w_t + \lambda w_x = 0 \quad \text{mit} \quad \lambda = \text{const.} > 0$$

Die exakte Lösung für eine periodische Testfunktion $w(x, t) = V(t) \cdot e^{Ikx}$ mit der Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ ergibt sich zu:

$$w(x, t) = V_0 \cdot e^{Ik(x-\lambda\Delta t)}$$

Als typische Eigenschaft hyperbolischer Gleichungen beschreibt die Lösung den Transport längs der charakteristischen Grundkurve $(x - \lambda\Delta t) = \text{const.}$, jedoch keine Amplitudenänderung, d.h. es bleibt $V(t) = V_0$.

Zum Vergleich soll eine numerische Lösung betrachtet werden, die mit einem expliziten Upwindschema berechnet wird.

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_i^n - w_{i-1}^n}{\Delta x} = 0$$

Entwickelt man das Differenzenschema mittels Taylorreihen um $x_i = i \cdot \Delta x$ und $t_n = n \cdot \Delta t$ und ersetzt mit der Differentialgleichung $w_{tt} = \lambda^2 w_{xx} + \dots$, so ergibt sich die partielle Differentialgleichung der numerischen Approximation zu (siehe auch Kap. 3):

$$w_t + \lambda w_x = c_2 \Delta x \cdot w_{xx} + c_3 \Delta x^2 \cdot w_{xxx} - c_4 \Delta x^3 \cdot w_{xxxx} + \dots$$

Für diese Gleichung ergibt sich die Lösung der periodischen Testfunktion zu:

$$w(x, t) = V_0 \cdot e^{Ik(x-\lambda\Delta t)} \cdot e^{-Ic_3\Delta x^2 k^3 \cdot \Delta t} \cdot e^{-(c_2\Delta x k^2 + c_4\Delta x^3 k^4) \cdot \Delta t}$$

Diese Lösung zeigt die Auswirkung typischer Diskretisierungsfehler, die in ähnlicher Form bei nahezu allen numerischen Verfahren hyperbolischer Gleichungen auftreten.

Die Fehleranteile sind im einzelnen:

- Dispersive Fehler $\sim e^{-I(c_3\Delta x^2 k^3)\cdot\Delta t}$ vom Term $\sim c_3\Delta x^2 w_{xxx}$
Diese Fehler bewirken eine Phasenverschiebung, d.h. eine Abweichung von der charakteristischen Grundkurve, ohne jedoch die Amplitude zu beeinflussen.
- Dissipative Fehler $\sim e^{-(c_2\Delta x k^2)\cdot\Delta t}$ vom Term $\sim c_2\Delta x w_{xx}$
Diese Fehler beeinflussen die Amplitude und haben ähnliche Wirkung wie die Reibungsterme. Da der Term von $O(\Delta x)$ groß ist, sollte dieser Anteil durch Diskretisierungen höherer Ordnung möglichst vermieden werden.
- Dissipative Fehler $\sim e^{-(c_4\Delta x^3 k^4)\cdot\Delta t}$ vom Term $\sim c_4\Delta x^3 w_{xxxx}$
Dieser Fehler beeinflusst ebenfalls die Amplitude, hat jedoch nur auf die kurzwelligen Lösungsanteile eine wesentliche Wirkung, da die Amplitudenänderung sehr stark von der Wellenzahl abhängt ($\sim k^4$!). Man bezeichnet deshalb diesen Term oft als Hochfrequenzdämpfungsterm.

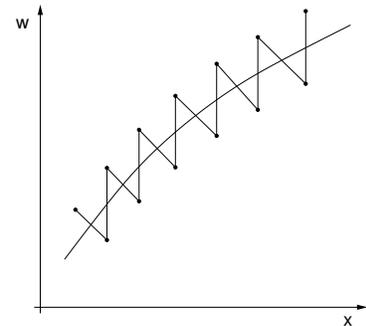
Die unterschiedlichen Eigenschaften der dissipativen Diskretisierungsfehler werden bei der Formulierung numerischer Dämpfung zur Unterdrückung von Störungen ausgenutzt.

Hochfrequenzdämpfungsterme:

Rundungsfehler erzeugen Schwankungen von Gitterpunkt zu Gitterpunkt, d.h. es sind kurzweilige Störungen. Zur Glättung dieser Störungen werden deshalb Terme verwendet, die durch eine diskretisierte 4. Ableitung entstehen.

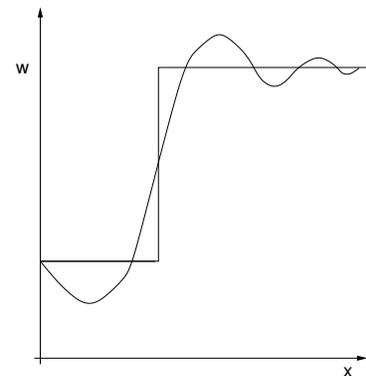
Hochfrequenzdämpfungsterm: $D^{(4)} = \varepsilon^{(4)}\Delta x^3 w_{xxxx}$

Der Faktor $\varepsilon^{(4)}$, meist eine Konstante, dient hierbei der Anpassung und Minimierung der Dämpfung.



Stoßdämpfungsterme:

In Lösungen hyperbolischer Gleichungen können auch Diskontinuitäten, z.B. Verdichtungsstöße auftreten. Sind diese im Lösungsfeld eingebettet, so entstehen sehr starke Änderungen der Variablen über einige Schrittweiten. Hierdurch werden die Diskretisierungsfehler, insbesondere der nichtlinearen Terme sehr groß und die Lösung zeigt starkes Über- oder Unterschwingen in der Nähe einer Diskontinuität. Um diese Schwingungen zu glätten, bedarf es eines starken Dämpfungsterms. Man verwendet deshalb hierzu den reibungsähnlichen Term $\sim \Delta x w_{xx}$, der jedoch durch einen Faktor $\varepsilon^{(2)}$, abhängig von der Lösung, so gesteuert wird, daß dieser Term in Gebieten geringer Änderungen verschwindet.



Stoßdämpfungsterm: $D^{(2)} = \varepsilon^{(2)}\Delta x w_{xx}$

Die Dämpfungsterme zur Kontrolle numerischer Störungen werden entweder dem Schema hinzugefügt (zentrale Schemata) oder sie sind bei geeigneter Diskretisierung schon im Schema enthalten (Upwindschemata). Im Rahmen dieser Vorlesung werden einige Beispiele im Kap. 8 angegeben, weitergehende Einzelheiten der Formulierung können jedoch hier nicht behandelt werden. Diese Formulierungen sind Gegenstand neuerer numerischer Entwicklungen und sind in der Fachliteratur zu finden.

2.2.4 Wichtige Differenzenschemata für die skalare Konvektionsgleichung

Zur Darstellung numerischer Lösungsverfahren und ihrer Analyse wird die skalare Konvektionsgleichung verwendet.

$$w_t + \lambda w_x = 0$$

Diese Gleichung entspricht in ihrer Struktur der charakteristischen Form der Euler Gleichungen, so daß damit ein Zusammenhang zu den wichtigen Euler Gleichungen gegeben ist. Aus den bisher behandelten Grundlagen ergeben sich Forderungen an die Lösungsverfahren, die im folgenden zusammengefaßt sind:

1. Konvergenz

Für lineare Anfangswertprobleme kann Konvergenz durch den Lax'schen Satz nachgewiesen werden, d.h. *Konsistenz+Stabilität=Konvergenz*. Für nichtlineare Gleichungen und Randwertprobleme ist der Nachweis meist nicht mathematisch zu erbringen. Die Richtigkeit der Lösung wird oft durch Vergleiche mit anderen Lösungen und mit dem Experiment nachgewiesen.

2. CFL Bedingung

Diese notwendige Forderung, daß der numerische Abhängigkeitsbereich größer, bzw. gleich dem charakteristischen Bereich ist, läßt sich für skalare Gleichungen mit nur einer Charakteristik eindeutig erfüllen. Probleme entstehen aber dann, wenn mehrere Charakteristiken mit wechselndem Vorzeichen auftreten, wie z.B. bei den Euler Gleichungen. Zur Berücksichtigung der unterschiedlichen charakteristischen Ausbreitungsrichtungen müssen dann spezielle Formulierungen der Ausgangsgleichungen und der Diskretisierung verwendet werden (z.B. „Flux-Splitting“ \implies siehe Kap. 7 und 8 über Euler Gleichungen).

3. Genauigkeit

Für Anwedungen numerischer Rechnungen ist i.a. mindestens eine Genauigkeit von 2. Ordnung ($O(\Delta^2)$) im Ortsraum anzustreben, um die numerischen Zähigkeitseffekte der Diskretisierungsfehler $\sim w_{xx}$ in glatten Gebieten zu vermeiden.

4. Oszillationsfreie Lösungen

Um oszillationsfreie Lösungen in glatten Gebieten zu erreichen, müssen kurzweilige Fehlerkomponenten durch geeignete Hochfrequenzdämpfungsterme unterdrückt werden.

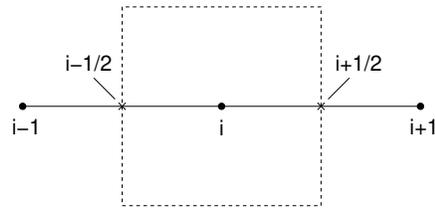
5. Diskontinuitäten

Diskontinuitäten (z.B. Verdichtungsstöße) sind Lösungen nichtlinearer, hyperbolischer Gleichungen. Sie treten vor allem bei gasdynamischen Strömungen auf. Im Integrationsgebiet eingebettete Diskontinuitäten können durch Differenzenverfahren nicht exakt (als Sprung) aufgelöst werden, da die Verfahren Differenzierbarkeit fordern. Numerisch kann jedoch eine solche Diskontinuität auf wenigen Schrittweiten oszillationsfrei dargestellt werden, wenn das Verfahren dafür geeignet ist („shock capturing“ Methoden). Hierzu gehört die Berücksichtigung der charakteristischen Ausbreitungsrichtung und die Formulierung von Stoßdämpfungstermen.

Die Erfüllung dieser Forderungen kann durch verschiedenste Differenzenschemata erfolgen. Für die diskrete Formulierung der Konvektionsgleichung $w_t + \lambda w_x = 0$ wird eine sogenannte konservative Formulierung, wie sie für die Euler Gleichungen notwendig ist, verwendet.

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1/2}^n - w_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0$$

Der Ort $i \pm 1/2$ entspricht dabei dem Ort der Bilanzfläche (Zellwand) zwischen den Punkten i und $i \pm 1$, an dem die Eulerflüsse formuliert werden müssen.



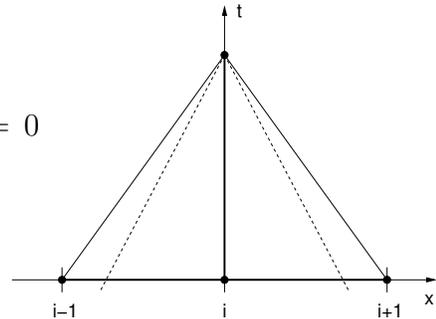
Zentrale Schemata

Zentrale Schemata sind häufig verwendete Schemata zur Lösung der Euler und Navier-Stokes Gleichungen. Eine räumliche Zentraldifferenz erhält man für das obige konservative Schema durch die Formulierung gemittelter Werte

$$w_{i\pm 1/2} = \frac{1}{2}(w_i + w_{i\pm 1})$$

Damit erhält man das zentrale Schema:

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^n - w_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$$



Typische Merkmale solcher zentraler Schemata sind:

- 2. Ordnung im Raum, $O(\Delta x^2)$, mit nur 3 Ortspunkten
- Erfassung von Stromauf- und Stromabflüssen, von positiven und negativen Charakteristiken.
- Zentrale Differenzen führen zur Entkopplung von gerad- und ungeradzahligen Punkten. Zum Beispiel führt die stationäre Lösung $w_{i+1} = w_{i-1}$ auf zwei entkoppelte Lösungen, nämlich $w_1 = w_3 = w_5 = \dots$ und $w_2 = w_4 = w_6 = \dots$. Unterscheidet sich eine dieser Lösungen von der anderen durch einen Fehler ε , so entsteht eine oszillierende Gesamtlösung.
- Zentrale Ortsdifferenzen haben keine dissipativen Abbruchfehler

$$\frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2\Delta x} = w_x + w_{xxx} \cdot \frac{\Delta x^2}{6} + \dots$$

- Hochfrequenzdämpfungsterme $\sim w_{xxxx}$ müssen deshalb zu der zentralen Ortsdifferenz addiert werden, um kurzweilige Störungen zu dämpfen.

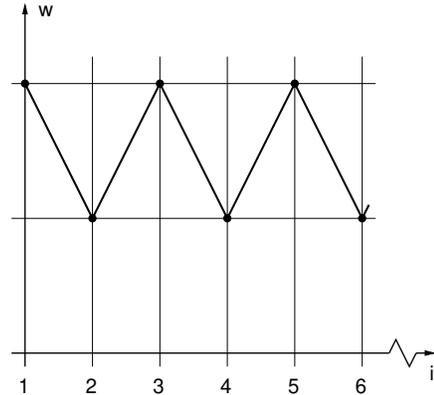
$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2\Delta x} + D^{(4)}(w) = 0$$

Der Dämpfer 4. Ordnung wird meist in folgender Form definiert:

$$D^{(4)}(w) = \varepsilon^{(4)} \frac{1}{\Delta t} \Delta x^4 \cdot w_{xxxx} = \varepsilon^{(4)} \frac{1}{\Delta t} \cdot (w_{i+2} - 4w_{i+1} + 6w_i - 4w_{i-1} + w_{i-2})$$

Hierbei ist $\varepsilon^{(4)}$ eine Konstante, die i.a. die Größenordnung $O(10^{-2})$ hat.

Für die folgenden zentralen Schemata wird dieser Dämpfungsterm nicht extra aufgeführt.



Explizite, zentrale Schemataa) Einfachstes, zentrales Schema

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^n - w_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

Konsistenz : $w_t + \lambda w_x = -w_{tt} \frac{\Delta t}{2} - \lambda w_{xxx} \frac{\Delta x^2}{6} + \dots = O(\Delta t, \Delta x^2)$

Stabilität : (von Neumann Analyse) \rightarrow instabil !

(trotz Erfüllung der CFL Bedingung bei $C \leq 1$)

Erklärung der Instabilität durch Hirtsche Stabilitätstheorie

mit $w_{tt} = -\lambda w_{xt} = \lambda^2 w_{xx}$ folgt

$$w_t + \lambda w_x = -\lambda^2 \frac{\Delta t}{2} w_{xx} - \lambda w_{xxx} \frac{\Delta x^2}{6} + \dots$$

d.h. negative numerische Zähigkeit $\nu_{num} = -\lambda^2 \frac{\Delta t}{2}$ bedeutet Anfachung!

b) Lax - Keller Schema

Um ein einfaches, aber stabiles Schema zu erhalten, wird im Schema a) der Wert w_i^n durch den Mittelwert $\bar{w}_i^n = \frac{w_{i+1}^n + w_{i-1}^n}{2}$ ersetzt.

$$\frac{w_i^{n+1} - \frac{1}{2}(w_{i+1}^n + w_{i-1}^n)}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^n - w_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

Konsistenz : $w_t + \lambda w_x = -w_{tt} \frac{\Delta t}{2} + \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\Delta x}{\Delta t} w_{xx} - \lambda w_{xxx} \frac{\Delta x^2}{6} + \dots = O(\Delta t, \Delta x)$

Stabilität : stabil für $C = |\lambda| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$

Erklärung der Stabilität durch Hirtsche Stabilitätstheorie

$$w_t + \lambda w_x = \lambda^2 \frac{\Delta t}{2} (1/C^2 - 1) w_{xx} + \dots$$

$$\implies \nu_{num} = \lambda^2 \frac{\Delta t}{2} (1/C^2 - 1) \geq 0 \text{ für } C \leq 1$$

\Rightarrow kaum verwendetes Schema wegen $O(\Delta x)$!

c) Lax - Wendroff Schema

Das Lax - Wendroff Schema ist ein genaues und stabiles Zentralschema und sein Konzept ist deshalb auch Ausgangspunkt für weitere Verfahren. Hierbei wird der destabilisierende Term $\lambda^2 \frac{\Delta t}{2} w_{xx}$ des Schemas a) durch einen zusätzlichen, gleichgroßen Term kompensiert.

Die Herleitung erfolgt aus der Taylorreihe für w_i^{n+1} :

$$w_i^{n+1} = w_i^n + w_t|_i^n \Delta t + w_{tt}|_i^n \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) = w_i^n - \lambda w_x|_i^n \Delta t + \lambda^2 w_{xx}|_i^n \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3)$$

Der Zusatzterm $\sim w_{xx}$ wird zentral diskretisiert, so daß die Ortsgenauigkeit $O(\Delta x^2)$ erhalten bleibt und die Zeitgenauigkeit auf $O(\Delta t^2)$ erhöht wird. Damit erhält man das Lax - Wendroff Schema zu:

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^n - w_{i-1}^n}{2\Delta x} - \lambda^2 \frac{\Delta t}{2} \frac{w_{i-1}^n - 2w_i^n - w_{i+1}^n}{\Delta x^2} = 0$$

Konsistenz : $w_t + \lambda w_x = -\lambda w_{xxx} \frac{\Delta x^2}{6} - \frac{\Delta t^2}{6} w_{ttt} + \dots = O(\Delta t^2, \Delta x^2)$

Stabilität : stabil für $C = |\lambda| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$

Nachteil Der Zusatzterm verlangt aufwendige Matrixoperationen bei Systemen, wie z.B. für die Euler Gleichungen $U_t + F_x = 0$. Mit der Jacobi Matrix $\bar{A} = \frac{\partial F}{\partial U}$ ergibt sich für den Zusatzterm

$$\implies \frac{\Delta t}{2} U_{tt} = -\frac{\Delta t}{2} F_{xt} = -\frac{\Delta t}{2} (F_t)_x = -\frac{\Delta t}{2} (\bar{A} U_t)_x = +\frac{\Delta t}{2} (\bar{A} F_x)_x$$

Für Systeme ist es deshalb günstiger, das Schema in zwei Schritten abzuarbeiten. Dies führt auf das Prädiktor - Korrektor Schema von Mac Cormack.

d) Prädiktor - Korrektor Schema (Mac Cormack, 1969)

Das Prädiktor - Korrektor Schema nach Mac Cormack ist ein oft angewendetes Schema zur Lösung der Euler und Navier-Stokes Gleichungen. Das Zwei-Schritt Schema besitzt für lineare Gleichungen die gleichen Eigenschaften wie das Lax-Wendroff Schema c), erfordert jedoch bei Gleichungssystemen keine zusätzlichen Matrixoperationen. Die Stabilitäts- und Konsistenzigenschaften sind die gleichen, wie die für das Lax-Wendroff Schema. Man erhält dieses aus dem Zwei-Schritt Schema durch Einsetzen der Zwischenvariable \tilde{w} aus dem 1. Schritt in den 2. Schritt.

1. Schritt (Prädiktor-Schritt)

$$\tilde{w}_i = w_i^n - \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} (w_i^n - w_{i-1}^n)$$

2. Schritt (Korrektor-Schritt)

$$w_i^{n+1} = \frac{1}{2}(w_i^n + \tilde{w}_i) - \frac{1}{2} \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i)$$

Die Vorwärts- bzw. Rückwärtsdiskretisierungen sind für die Schritte vertauschbar. Die Erweiterung auf zwei und drei Dimensionen erfolgt in analoger Weise.

e) Runge-Kutta Mehrschrittschema

Das Runge-Kutta Verfahren zur Lösung von Anfangswertproblemen gewöhnlicher Differentialgleichungen kann auf partielle Differentialgleichungen übertragen werden.

Für die Integration nach Runge-Kutta formuliert man die semi-diskrete Differentialgleichung

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -Res(w)$$

wobei das Residuum $Res(w)$ den diskretisierten Operator der Ortsableitungen darstellt. Dieses kann z.B. den Ortsoperator der gesamten Euler Gleichungen darstellen, oder wie hier, den der skalaren Konvektionsgleichung.

$$Res(w) = \lambda \frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2\Delta x} = \lambda w_x + O(\Delta x^2)$$

Die Lösung für einen Zeitschritt Δt erfolgt in mehreren expliziten Teilschritten, die durch den Schrittindex k gekennzeichnet sind. Für das Runge-Kutta Verfahren existieren viele Varianten der Mehrschrittformulierung. Zur Lösung partieller Differentialgleichungen der Strömungsmechanik hat sich das folgende N -Schritt Schema bewährt (minimaler Speicherbedarf). Für die Integration zwischen $t = n \Delta t$ und $t + \Delta t = (n + 1) \Delta t$ gilt:

$$\begin{aligned} w_i^{(0)} &= w_i^n \\ w_i^{(1)} &= w_i^{(0)} - \alpha_1 \cdot \Delta t \cdot Res(w^{(0)}) \\ &\vdots \\ w_i^{(k-1)} &= w_i^{(0)} - \alpha_{k-1} \cdot \Delta t \cdot Res(w^{(k-2)}) \\ w_i^{(k)} &= w_i^{(0)} - \alpha_k \cdot \Delta t \cdot Res(w^{(k-1)}) \\ &\vdots \\ w_i^{(n+1)} &= w_i^{(N)} \end{aligned}$$

Die Anzahl der Schritte N wird i.a. zwischen 3 und 5 gewählt.

Konsistenz : Die Konsistenz soll im folgenden anhand eines 3-Schritt Verfahrens ($N = 3$) gezeigt werden. Hierzu eliminiert man die Variablen $w^{(k)}$ der Zwischenschritte und erhält damit unter Annahme von linearen Ortsoperatoren $Res(w)$, d.h. $Res(a + b) = Res a + Res b$, die Differenzengleichung

$$w^{n+1} = w^n - \alpha_3 \Delta t Res(w^n) + \alpha_3 \alpha_2 \Delta t^2 Res(Res(w^n)) - \alpha_3 \alpha_2 \alpha_1 \Delta t^3 Res(Res(Res(w^n)))$$

Mit einer Taylorreihe

$$w^{n+1} = w^n + w_t^n \Delta t + w_{tt}^n \frac{\Delta t^2}{2} + w_{ttt}^n \frac{\Delta t^3}{6} + \dots$$

und mit Hilfe der Ausgangsgleichung

$$\begin{aligned} w_t^n &= -Res(w^n) = -(\lambda w_x + O(\Delta x^2)) \\ w_{tt}^n &= (-Res(w^n))_t = -Res(w_t^n) = Res(Res(w^n)) \\ w_{ttt}^n &= -Res(Res(Res(w^n))) \end{aligned}$$

ergibt sich die Differentialgleichung der Differenzenapproximation zu:

$$w_t + \lambda w_x = (\alpha_3 - 1) w_t^n + (\alpha_3 \alpha_2 - \frac{1}{2}) w_{tt}^n \Delta t + (\alpha_3 \alpha_2 \alpha_1 - \frac{1}{6}) w_{ttt}^n \Delta t^2 + O(\Delta t^3) + O(\Delta x^2)$$

Diese Gleichung zeigt, daß das Runge-Kutta Verfahren für $\underline{\alpha_3 = 1}$ konsistent in der Zeit ist. Die Genauigkeit in der Zeit richtet sich nach der Wahl der restlichen α -Faktoren. Die Koeffizienten ($\alpha_k \leq 1$) können so bestimmt werden, daß der Abbruchfehler in der Zeit minimal wird, d.h. daß größte Zeitgenauigkeit von der Ordnung $O(\Delta t^N)$ erreicht wird. Für das obige Beispiel erhält man hierfür die Werte $\alpha_k = \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 1$ oder allgemein:

$$\alpha_k = \frac{1}{N - k + 1} \quad \text{mit } k = 1, 2, \dots, N$$

Stabilität : Den Stabilitätsfaktor $G = \frac{V^{n+1}}{V^n}$ nach der von Neumannschen Stabilitätsanalyse erhält man ebenfalls durch Einsetzen der Zwischenschritte. Mit dem Fourieransatz $w_i^{(k)} = V^{(k)} e^{I\theta i}$ und der Abkürzung $\Delta t \text{Res}(w^{(k)}) \rightarrow V^{(k)} e^{I\theta i} \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x} I \sin \theta = V^{(k)} e^{I\theta i} z$ ergibt sich für das 3-Schritt Schema:

$$G = 1 - \alpha_3 z + \alpha_3 \alpha_2 z^2 - \alpha_3 \alpha_2 \alpha_1 z^3$$

Die Abschätzung der Stabilitätsgrenze ist sehr aufwendig und wird i.a. numerisch durchgeführt.

Eine interessante Möglichkeit ist es hierbei, die Koeffizienten α_k für maximale Stabilität zu optimieren. Die theoretisch erreichbare Stabilitätsgrenze ergibt sich für ein N -Schritt Schema zu:

$$C_{max} = (|\lambda| \frac{\Delta t}{\Delta x})_{max} = N - 1$$

Ein Satz von Koeffizienten für maximale Stabilität eines oft verwendeten, zentralen 5-Schritt Schemas $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ mit $C_{max} = 4$ ist z.B.:

$$\alpha_k = 0.25, 0.166, 0.375, 0.5, 1$$

Das Runge-Kutta Verfahren in dieser Form ist zur Zeit eines der meist verwendeten expliziten Lösungsverfahren für die Euler und Navier-Stokes Gleichungen kompressibler Strömungen.

Implizite, zentrale Schemata

Implizite Schemata haben im Gegensatz zu expliziten Verfahren keine Zeitschrittbeschränkungen durch numerische Instabilitäten. Dafür ist jedoch der Rechenaufwand pro Zeitschritt wesentlich größer, so daß implizite Verfahren dann gewählt werden, wenn wesentlich größere Zeitschritte, als die eines expliziten Verfahrens, benutzt werden können. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn Konvergenz zur stationären Lösung gefordert ist.

a) Implizites Schema für 1-D Gleichungen

Ein implizites Schema ergibt sich dann, wenn auch der Ortsoperator für die neue Zeit $(n + 1)\Delta t$ formuliert wird. Für die skalare Konvektionsgleichung lautet ein solches Schema:

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1}^{n+1} - w_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0$$

Das Schema führt auf ein tridiagonales Gleichungssystem für w^{n+1} mit $C = \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

$$[-C/2] \cdot w_{i-1}^{n+1} + [1] \cdot w_i^{n+1} + [C/2] \cdot w_{i+1}^{n+1} = w_i^n$$

Die Auflösung eines solchen gekoppelten Gleichungssystems erfolgt mit der bekannten Gaußschen Eliminationsmethode (Thomas-Algorithmus).

Konsistenz: $w_t + \lambda w_x = \frac{\Delta t}{2} w_{tt} - \lambda w_{xxx} \frac{\Delta x^2}{6} + \dots = O(\Delta t, \Delta x^2)$

Stabilität: unbegrenzt stabil für alle C

In der Literatur werden implizite Verfahren meist in der sogenannten Korrekturschreibweise formuliert. Mit der Definition der Korrekturvariablen

$$\Delta w_i^n = w_i^{n+1} - w_i^n$$

und der zusätzlichen Definition eines Differenzenoperators δ_x

$$\delta_x w_i = \frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2\Delta x}$$

kann das implizite Schema geschrieben werden als

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t \lambda \delta_x) \Delta w_i^n &= -\Delta t \lambda \delta_x w_i^n \\ w_i^{n+1} &= w_i^n + \Delta w_i^n \end{aligned}$$

Die Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems erfolgt für die Korrekturvariable.

b) Implizite Schemata für mehrdimensionale Gleichungen

Die Formulierung für zwei oder drei Dimensionen erfolgt in ähnlicher Weise, wie für eine Dimension. Definiert man als Modellgleichung eine zweidimensionale Konvektionsgleichung der Form

$$w_t + \lambda_x w_x + \lambda_y w_y = 0$$

und diskretisiert man die y -Richtung ebenfalls zentral

$$\delta_y w_{i,j} = \frac{w_{i,j+1} - w_{i,j-1}}{2\Delta y}$$

so erhält man mit der Korrekturvariablen

$$\Delta w_{i,j}^n = w_{i,j}^{n+1} - w_{i,j}^n$$

das implizite Schema für zwei Dimensionen:

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t (\lambda_x \delta_x + \lambda_y \delta_y)) \Delta w_{i,j}^n &= -\Delta t (\lambda_x \delta_x + \lambda_y \delta_y) w_{i,j}^n \\ w_{i,j}^{n+1} &= w_{i,j}^n + \Delta w_{i,j}^n \end{aligned}$$

Die Auflösung des zweidimensionalen, gekoppelten Gleichungssystems erfordert jedoch großen Rechenzeit- und Speicherbedarf für die i.a. großen Punktzahlen bei strömungsmechanischen Rechnungen. Deshalb versucht man meist solche mehrdimensionalen Systeme näherungsweise zu lösen.

Eine Möglichkeit der näherungsweisen Lösung ist die Anwendung von Iterationsverfahren, wie sie für elliptische Gleichungen verwendet werden (z.B. Gauß-Seidel Verfahren). Solche iterative Verfahren finden zunehmende Verwendung bei der Lösung der Euler und Navier-Stokes Gleichungen. Eine Voraussetzung für solche iterative Verfahren ist eine diagonal-dominante Lösungsmatrix. Solche Matrizen werden jedoch i.a. nur durch Verwendung von Upwindverfahren erreicht, dann aber erhält man sehr effektive Lösungsverfahren für stationäre Probleme. Für zeitgenaue Probleme sind Iterationsverfahren meist nicht geeignet, da sie nicht konsistent in der Zeit sind.

Eine andere Möglichkeit der näherungsweisen Lösung ist die Methode der angenäherten Faktorisierung. Diese erlaubt auch zeit-konsistente Lösungen und zentrale Diskretisierung.

c) Implizite angenäherte Faktorisierung (Beam, Warming 1970)

Die angenäherte Faktorisierung erlaubt die Zerlegung eines mehrdimensionalen, impliziten Schemas in eine Sequenz von eindimensionalen Schritten. Dies erspart Rechenzeit, da jeder eindimensionale Schritt als tridiagonales System gelöst werden kann. Ausgangspunkt ist das oben formulierte zweidimensionale, implizite Schema. Die linke (implizite) Seite kann näherungsweise in zwei Faktoren zerlegt werden:

$$(1 + \Delta t \lambda_x \delta_x)(1 + \Delta t \lambda_y \delta_y) \Delta w_{i,j}^n = (1 + \Delta t \lambda_x \delta_x + \Delta t \lambda_y \delta_y + O(\Delta t^2)) \Delta w_{i,j}^n$$

Unter Vernachlässigung des letzten Termes (Faktorisierungsfehler $O(\Delta t^2)$) kann das implizite Schema jetzt geschrieben werden:

$$(1 + \Delta t \lambda_x \delta_x)(1 + \Delta t \lambda_y \delta_y) \Delta w_{i,j}^n = -\Delta t (\lambda_x \delta_x + \lambda_y \delta_y) w_{i,j}^n$$

Definiert man eine Zwischenvariable $\Delta \tilde{w}_{i,j}^n$:

$$\Delta \tilde{w}_{i,j}^n = (1 + \Delta t \lambda_y \delta_y) \Delta w_{i,j}^n$$

dann kann das Schema für einen Zeitschritt in Teilschritten gelöst werden:

1. Schritt

$$(1 + \Delta t \lambda_x \delta_x) \Delta \tilde{w}_{i,j}^n = -\Delta t (\lambda_x \delta_x + \lambda_y \delta_y) w_{i,j}^n$$

Für $\Delta \tilde{w}_{i,j}^n$ wird ein tridiagonales Gleichungssystem in x -Richtung gelöst.

2. Schritt

$$(1 + \Delta t \lambda_y \delta_y) \Delta w_{i,j}^n = \Delta \tilde{w}_{i,j}^n$$

Für $\Delta w_{i,j}^n$ wird ein tridiagonales Gleichungssystem in y -Richtung gelöst.

3. Schritt

$$w_{i,j}^{n+1} = w_{i,j}^n + \Delta w_{i,j}^n$$

Die Methode der angenäherten Faktorisierung ist ein wichtiges implizites Lösungsverfahren für Systeme, wie z.B. für die Euler Gleichungen. Ein Nachteil dieser Methode wird durch den Faktorisierungsfehler verursacht. Dieser Fehler bewirkt eine Verringerung der Konvergenzgeschwindigkeit bei großen Zeitschritten, so daß in der Praxis maximale Courantzahlen von nur $C = O(10)$ verwendet werden können.

Upwindschemata

Upwindschemata, teilweise auch advektive Schemata genannt, nutzen räumliche Diskretisierungen, bei denen die Differenzenapproximation einseitig aus der Richtung der Charakteristik gebildet wird (Informationen aus der „Windrichtung“ \implies upwind). Dadurch wird das charakteristische Verhalten hyperbolischer Gleichungen besser als bei zentralen Differenzen wiedergegeben. Aus diesem Grunde werden Upwindverfahren zunehmend für die Simulation gasdynamischer Strömungen mittels numerischer Lösungen der Euler Gleichungen verwendet.

Typische Merkmale von Upwindschemata sind:

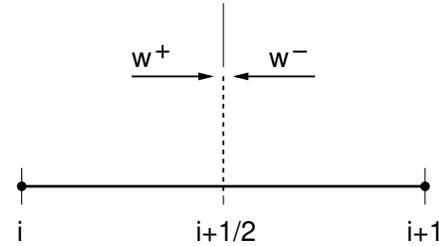
- Die Ortsdiskretisierung ist unterschiedlich für positive und negative Charakteristiken.
- In Gleichungssystemen mit mehreren Charakteristiken unterschiedlichen Vorzeichens erfordert dies eine Aufspaltung der Flußformulierung in die unterschiedlichen Einflußbereiche und entsprechende Upwinddiskretisierung (siehe Euler Gleichungen \implies Flux-Splitting).
- Upwindverfahren 1. Ordnung genau ergeben oszillationsfreie Lösungen, auch für Diskontinuitäten. Wegen des Abbruchfehlers $O(\Delta x)$ sind die Lösungen jedoch zu ungenau (verschmiert).
- Upwindverfahren höherer Ordnung genau können mit Hilfe von Extrapolationsansätzen konstruiert werden.
- Auf Grund der einseitigen Differenzenformulierungen enthalten Upwindverfahren dissipative Abbruchfehler $\sim w_{xx}$ (nur bei 1. Ordnung) und Anteile $\sim w_{xxxx}$. Künstliche Dämpfungsterme werden nicht benötigt, die Stärke der Dämpfung ist durch die Diskretisierung festgelegt.
- Upwindverfahren höherer Ordnung genau erfordern zusätzliche Diskretisierungselemente, damit Diskontinuitäten oszillationsfrei und scharf abgebildet werden können (TVD-Verfahren, Limiter, ...). Für Einzelheiten muß auf die Fachliteratur verwiesen werden.

a) Upwindschemata 1. Ordnung

Ausgangspunkt bildet die konservative Diskretisierung der skalaren Konvektionsgleichung $w_t + \lambda w_x = 0$:

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \lambda \frac{w_{i+1/2}^n - w_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0$$

Da die Diskretisierung je nach Vorzeichen der Charakteristik unterschiedlich ist, werden im folgenden die Werte auf $i \pm 1/2$ als $w_{i\pm 1/2}^+$ bei positiven und $w_{i\pm 1/2}^-$ bei negativen Charakteristiken bezeichnet. Ist die Charakteristik $\frac{dx}{dt} = \lambda > 0$, dann werden die Werte $w_{i\pm 1/2}$ durch die Knotenwerte aus der Richtung der Charakteristik (von links) ersetzt, d.h.



$$w_{i+1/2}^+ = w_i \quad \text{und} \quad w_{i-1/2}^+ = w_{i-1}$$

Damit ergibt sich ein explizites Schema mit einer räumlichen Rückwärtsdifferenz.

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \frac{\lambda}{\Delta x} (w_i^n - w_{i-1}^n) = 0$$

Analog dazu werden für negative Charakteristiken $\frac{dx}{dt} = \lambda < 0$ die Werte $w_{i\pm 1/2}$ durch die Knotenwerte aus der Richtung der Charakteristik (von rechts) ersetzt, d.h.

$$w_{i+1/2}^- = w_{i+1} \quad \text{und} \quad w_{i-1/2}^- = w_i$$

Damit ergibt sich ein explizites Schema mit einer räumlichen Vorwärtsdifferenz.

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{\Delta t} + \frac{\lambda}{\Delta x} (w_{i+1}^n - w_i^n) = 0$$

Konsistenz $w_t + \lambda w_x = -w_{tt} \frac{\Delta t}{2} + |\lambda| \cdot w_{xx} \frac{\Delta x}{2} + \dots = O(\Delta t, \Delta x)$

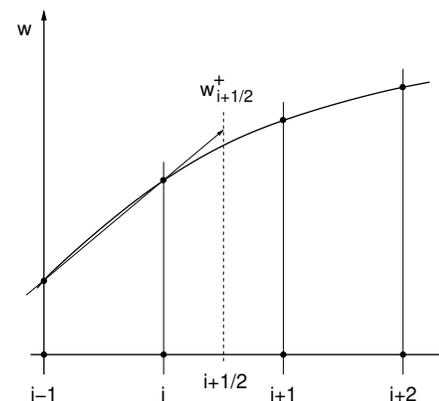
Stabilität stabil für $C = \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$

b) Upwindschemata höherer Ordnung

Upwindschemata höherer Ordnung erhält man durch Extrapolation der Variablen über mehrere Knotenwerte auf die „Zellwände“ $i \pm 1/2$. Die gesuchten Werte $w_{i\pm 1/2}^\pm$ können dann durch ein Polynom aus den benachbarten Werten dargestellt werden. Für ein Schema von 2. bzw. 3. Ordnung genau benötigt man für ein Polynom 4 Stützstellen, z.B.:

$$w_{i+1/2}^+ = P(w_{i-2}, w_{i-1}, w_i, w_{i+1})$$

$$w_{i+1/2}^- = P(w_{i-1}, w_i, w_{i+1}, w_{i+2})$$



Ein häufig verwendeter Polynomansatz von *van Leer* basiert auf einem Legendre Polynom. Dieser Extrapolationsansatz lautet:

$$\begin{aligned}(w_{i+1/2})^+ &= w_i + \frac{1}{4}\varphi \cdot [(1 + \kappa)(w_{i+1} - w_i) + (1 - \kappa)(w_i - w_{i-1})] \\ (w_{i+1/2})^- &= w_{i+1} - \frac{1}{4}\varphi \cdot [(1 + \kappa)(w_{i+1} - w_i) + (1 - \kappa)(w_{i+2} - w_{i+1})]\end{aligned}$$

Diese Ansätze werden in das konservative Diskretisierungsschema eingesetzt. Zur Steuerung dieses Polynomes werden zwei Parameter benutzt.

- Der Schaltparameter φ schaltet das Schema zwischen 1. Ordnung ($\varphi = 0$) und mindestens 2. Ordnung ($\varphi = 1$).
Hinweis: Der Schaltparameter φ wird in sogenannten TVD-Schemata dazu verwendet, den numerischen Dämpfungsterm $\sim w_{xx}$ so zu steuern, daß Verdichtungsstöße sehr scharf aufgelöst werden können. Man bezeichnet φ dann als Limiterfunktion, die abhängig von den benachbarten Gradienten zwischen den Werten 1 und 0 variiert.
- Der Diskretisierungsparameter κ bestimmt das Schema. Die folgenden Formulierungen des Schemas sind damit möglich:

$$\begin{aligned}\varphi = 0 & \quad \Rightarrow \quad O(\Delta x) \quad \text{1. Ordnung upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = -1 & \Rightarrow O(\Delta x^2) \quad \text{voll upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = 0 & \Rightarrow O(\Delta x^2) \quad \text{”halb” upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = 1/3 & \Rightarrow O(\Delta x^3) \quad \text{”halb” upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = 1 & \Rightarrow O(\Delta x^2) \quad \text{zentral}\end{aligned}$$

Die Genauigkeit des Upwindverfahrens höherer Ordnung kann durch eine Abbruchfehleranalyse überprüft werden. Als Beispiel hierzu soll der Abbruchfehler der Differenz $\frac{w_{i+1/2}^+ - w_{i-1/2}^+}{\Delta x}$ für $\lambda > 0$ berechnet werden. Hierzu wird für die Werte $w_{i\pm 1/2}^+$ die obige Extrapolationsbeziehung eingesetzt und die einzelnen Differenzen werden in Taylorreihen entwickelt. Damit ergibt sich für den räumlichen Abbruchfehler $\tau = (w_x - \frac{w_{i+1/2}^+ - w_{i-1/2}^+}{\Delta x})$ die folgende Beziehung:

$$\tau = (1 - \varphi) \frac{\Delta x}{2} w_{xx} - [1 - \frac{3}{2}\varphi(1 - \kappa)] \frac{\Delta x^2}{6} w_{xxx} - [3\varphi(1 - \kappa) - (1 - \varphi)] \frac{\Delta x^3}{24} w_{xxxx} + \dots$$

Die Beziehung zeigt zunächst, daß für $\varphi \neq 1$ die Differenz erster Ordnung genau ist und daß die numerische Zähigkeit $\nu_{num} = (1 - \varphi) \frac{\Delta x}{2}$ über den Parameter φ gesteuert wird. Für $\varphi = 1$ ist die Differenz für alle Parameter κ mindestens von 2. Ordnung genau. Sie erreicht Genauigkeit von 3. Ordnung, wenn der Term $\sim w_{xxx}$ verschwindet, d.h. wenn $\kappa = \frac{1}{3}$.

Die Formulierung von Upwindverfahren in dieser Form bildet die Grundlage für viele moderne Lösungsverfahren der Euler Gleichungen.

Die Upwinddiskretisierung kann sowohl in expliziten, als auch in impliziten Verfahren implementiert werden. Diese Lösungsverfahren entsprechen den Verfahren, die hier für

zentrale Differenzen vorgestellt wurden. Als explizite Methode wird hierbei oft das Runge-Kutta Verfahren verwendet, implizit werden die Methode der angenäherten Faktorisierung und Iterationsverfahren benutzt.

2.2.5 Skalare, hyperbolische Gleichungen 2. Ordnung

Neben den Gleichungen 1. Ordnung vom Typ der Konvektionsgleichung spielen in der Strömungsmechanik auch hyperbolische, partielle Differentialgleichungen 2. Ordnung eine große Rolle. Die Wellengleichung

$$u_{tt} - a_0^2 u_{xx} = 0$$

und die Störpotentialgleichung für Überschall

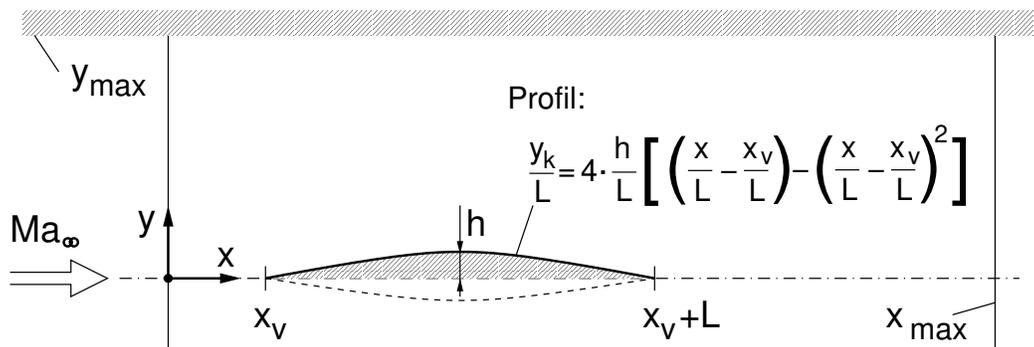
$$(Ma_\infty^2 - 1) \Phi_{xx} - \Phi_{yy} = 0$$

sind Beispiele für skalare Gleichungen 2. Ordnung.

Zur Demonstration der numerischen Lösung solcher Gleichungen soll im folgenden die Lösung der hyperbolischen Störpotentialgleichung für Überschallanströmung betrachtet werden.

Formulierung eines Strömungsproblem es der Störpotentialgleichung

Mit Hilfe einer Differenzlösung der Störpotentialgleichung soll das Strömungsfeld um ein mit Überschall ($Ma_\infty > 1$) angeströmtes symmetrisches Profil der Kontur $y_k(x)$ und der Tiefe L berechnet werden. Das Profil befindet sich in einem Kanal der Höhe $2y_{max}$ mit geraden Wänden. Da das Problem symmetrisch zur Achse des Kanales ist, wird lediglich eine Hälfte des Strömungsproblem es betrachtet. Der Integrationsbereich ist in der Abbildung dargestellt.



Unter der Annahme kleiner Dicke des Profils, d.h. $h \ll L$, und damit kleiner Störungen der Anströmung durch das Profil kann die Strömung durch die Störpotentialgleichung beschrieben werden. Diese lautet:

$$-\beta^2 \varphi_{xx} + \varphi_{yy} = 0 \quad \text{mit} \quad \beta^2 = Ma_\infty^2 - 1 \quad \text{und} \quad Ma_\infty > 1$$

Die Geschwindigkeiten und der Druckbeiwert sind Funktionen des Störpotentials φ . Es ist

$$\frac{u - u_\infty}{u_\infty} = \varphi_x, \quad \frac{v}{u_\infty} = \varphi_y, \quad c_p = -2 \cdot \varphi_x$$

Die hyperbolische Störpotentialgleichung beschreibt ein Anfangs-Randwertproblem mit der x -Kordinate als Richtung des Anfangswertproblem.

Die Anfangsbedingungen bei $x = 0$ erfordern wegen der zweiten Ableitung φ_{xx} die Vorgabe von zwei Größen am Einströmrand, hier:

$$x = 0: \quad u = u_\infty \rightarrow \varphi_x(0, y) = 0 \quad \text{und} \quad v = 0 \rightarrow \varphi_y(0, y) = 0$$

Die Randbedingungen bei $y = 0$ (Symmetrielinie) und $y = y_{max}$ (Kanalwand) für das Strömungsproblem sind:

$$\begin{array}{lll} y = 0 & x_v \leq x \leq x_v + L & \varphi_y(x, 0) = \frac{dy_k}{dx} = y'_k(x) \\ y = 0 & x < x_v \quad x > x_v + L & \varphi_y(x, 0) = 0 \\ y = y_{max} & 0 \leq x \leq x_{max} & \varphi_y(x, y_{max}) = 0 \end{array}$$

Eine exakte Lösung der Strömung kann mit Hilfe der Charakteristiken für $y_{max} \rightarrow \infty$ (freie Anströmung) bestimmt werden. Die Charakteristiken der Gleichung sind:

$$\frac{dy}{dx} = \pm \frac{1}{\beta} = \pm \sqrt{\frac{1}{Ma_\infty^2 - 1}} = \pm \tan \alpha \quad \alpha = \text{Machscher Winkel}$$

Mit einer Transformation $d\xi = dy - \frac{1}{\beta} dx$ und $d\eta = dy + \frac{1}{\beta} dx$ erhält man die Normalform der Potentialgleichung zu

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi \partial \eta} = 0 \quad \text{mit der Lösung} \quad \varphi(x, y) = \varphi_1(\xi) + \varphi_2(\eta).$$

Für die hier interessierende Lösung auf der Profilloberseite ergibt sich mit der Randbedingung $\varphi_y = \varphi_\xi \cdot 1 = y'_k(x)$ das Potential φ und der Druckbeiwert c_p zu:

$$\varphi(x, y) = \varphi(\xi) = \varphi\left(y - \frac{1}{\beta} x\right) \quad \text{und} \quad c_p = -2 \varphi_x = -2 \varphi_\xi \cdot \left(-\frac{1}{\beta}\right) = \frac{2}{\beta} y'_k(x)$$

Numerische Lösung der Störpotentialgleichung

Die Lösung erfolgt im Integrationsbereich $0 \leq x \leq x_{max}$ und $0 \leq y \leq y_{max}$ in einem kartesischen Gitter mit konstanten Schrittweiten Δx und Δy . Damit ist $x_i = (i - 1) \Delta x$ und $y_j = (j - 1) \Delta y$.

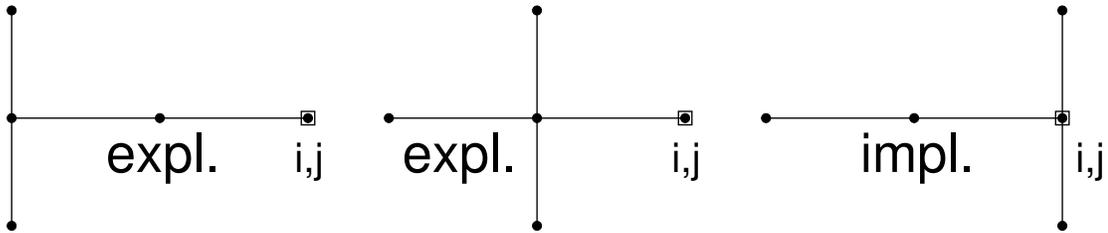
Die Diskretisierung der Störpotentialgleichung in dem Aufpunkt (i, j) erfolgt mittels zentraler Differenzen für φ_{yy}

$$\varphi_{yy}|_{i,j} \rightarrow \frac{1}{\Delta y^2} (\varphi_{i,j-1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j+1}) + O(\Delta y^2) \equiv (\delta_{yy} \varphi)_{i,j} + O(\Delta y^2)$$

und Rückwärtsdifferenzen für φ_{xx}

$$\varphi_{xx}|_{i,j} \rightarrow \frac{1}{\Delta x^2} (\varphi_{i-2,j} - 2\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i,j}) + O(\Delta x) \equiv (\delta_{xx} \varphi)_{i,j} + O(\Delta x)$$

Je nach Anordnung der Differenz $(\delta_{yy} \varphi)$ zum Aufpunkt (i, j) erhält man unterschiedliche explizite oder implizite Schemata der Ordnung $O(\Delta x, \Delta y^2)$:



$$-\beta^2 (\delta_{xx} \varphi)_{i,j} + (\delta_{yy} \varphi)_{i-2,j} = 0 \quad -\beta^2 (\delta_{xx} \varphi)_{i,j} + (\delta_{yy} \varphi)_{i-1,j} = 0 \quad -\beta^2 (\delta_{xx} \varphi)_{i,j} + (\delta_{yy} \varphi)_{i,j} = 0$$

Die vollständige Beschreibung des diskreten Problems erfordert noch die Diskretisierung der Anfangs- und Randbedingungen.

Die Randbedingungen sind Gradientenbedingungen der Form $\varphi_y = y'_k(x)$. Eine Approximation des Randwertes von φ erhält man durch Ersetzen des Gradienten durch eine Differenz, gebildet mit dem nächst inneren Punkt.

Für das Profil bei $y = 0$ ($j = 1$) gilt $\varphi_y|_1 = y'_k(x_i)$. Eine Approximation ergibt sich mittels einer Taylorreihe für φ des wandnächsten Punktes $j = 2$ um den Wert bei $j = 1$:

$$\varphi_2 = \varphi_1 + \varphi_y|_1 \Delta y + \varphi_{yy}|_1 \Delta y^2/2 + \dots$$

Durch Abruch der Reihe nach dem 2. Term erhält man eine Randbedingung 1. Ordnung, die der Einfachheit halber im folgenden verwendet wird:

$$\varphi_{i,1} = \varphi_{i,2} - y'_k(x_i) \cdot \Delta y$$

Eine höhere Ordnung erzielt man durch Ersetzen des 3. Termes mittels der Potentialgleichung, d.h. $\varphi_{i,1} = \varphi_{i,2} - y'_k(x_i) \cdot \Delta y + \beta^2 \cdot \frac{\Delta y^2}{2} (\delta_{xx} \varphi)_{i,1}$

Die Diskretisierung der Randbedingungen auf der Symmetrielinie und auf der Kanalwand erfolgt analog mit $y'_k(x_i) = 0$.

Die Anfangsbedingung bei $x = 0$ fordert $\varphi_x = 0$ und $\varphi_y = 0$. Die Integration von $\varphi_y = 0$ ergibt $\varphi = const. = 0$. Mit einer Randapproximation 1. Ordnung für $\varphi_x = 0$ erhält man somit als Anfangsbedingung auf den beiden ersten Spalten $i = 1$ und $i = 2$:

$$x = 0: \quad \varphi_x = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_{1,j} = 0, \quad \varphi_{2,j} = 0$$

Im folgenden werden die Lösungen eines expliziten und des impliziten Schemas näher beschrieben. Auf Grund des Anfangswertproblems in Richtung der x -Achse können die Lösungsverfahren der hyperbolischen Potentialgleichung als Fortsetzungs- oder Marschierverfahren in x -Richtung formuliert werden. Ausgehend von der Anfangsbedingung auf den Punkten $i = 1$ und $i = 2$ wird die Lösung auf $i = 3$ berechnet. Die Lösung auf $i = 2$ und $i = 3$ bildet dann wieder die Anfangsbedingung für den nächsten Punkt, usw.

Explizites Schema

Das zweite explizite Schema

$$-\beta^2 (\delta_{xx} \varphi)_{i,j} + (\delta_{yy} \varphi)_{i-1,j} = 0$$

ergibt nach Einsetzen der Differenzen die Bestimmungsgleichung für die Unbekannte $\varphi_{i,j}$

$$\varphi_{i,j} = 2\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i-2,j} + C^2 (\varphi_{i-1,j-1} - 2\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i-1,j+1})$$

Die Abkürzung $C = |\frac{1}{\beta}| \cdot \frac{\Delta x}{\Delta y}$ ist hierbei die Courantzahl. Die CFL Bedingung ist eine notwendige Bedingung, die von dem expliziten Schema eingehalten werden muß. Die Forderung, daß die Charakteristiken der Gleichung innerhalb des numerischen Einflußbereiches liegen müssen, ergibt für die Courantzahl (siehe Skizze):

$$C = |\frac{1}{\beta}| \cdot \frac{\Delta x}{\Delta y} < 1$$

Die Stabilitätsanalyse nach von Neumann, hinreichend für ein lineares und konsistentes Anfangswertproblem, bestätigt die CFL Bedingung. Somit ist das Verfahren stabil für

$$\Delta x \leq \beta \cdot \Delta y$$

Implizites Schema

Das implizite Schema

$$-\beta^2 (\delta_{xx} \varphi)_{i,j} + (\delta_{yy} \varphi)_{i,j} = 0$$

führt nach Umformung auf ein tridiagonales Gleichungssystem

$$[C^2] \varphi_{i,j-1} + [-2C^2 - 1] \varphi_{i,j} + [C^2] \varphi_{i,j+1} = \varphi_{i-2,j} - 2\varphi_{i-1,j}$$

bzw. mit den üblichen Abkürzungen auf:

$$a_j \varphi_{i,j-1} + b_j \varphi_{i,j} + c_j \varphi_{i,j+1} = RS_j$$

Die Lösung mit dem Thomas - Algorithmus über den Rekursionsansatz

$$\varphi_j = E_j \cdot \varphi_{j+1} + F_j$$

führt nach Einsetzen in die Differenzgleichung auf die Koeffizienten

$$E_j = \frac{-c_j}{a_j E_{j-1} + b_j} \quad , \quad F_j = \frac{RS_j - a_j F_{j-1}}{a_j E_{j-1} + b_j}$$

Die Randwerte für E und F bei $j = 1$ erhält man mit der Randbedingung $\varphi_1 = \varphi_2 - y'_k \cdot \Delta y$ und dem Rekursionsansatz $\varphi_1 = E_1 \varphi_2 + F_1$ zu:

$$E_1 = 1 \quad \text{und} \quad F_1 = -y'_k \cdot \Delta y$$

Damit können die Rekursionskoeffizienten für $j = 2, \dots, jmax - 1$ bestimmt werden. Zur Berechnung der neuen Größen φ_j benötigt man den Randwert φ_{jmax} . Dieser ergibt sich wiederum aus der Randbedingung $\varphi_{jmax} = \varphi_{jmax-1}$ und dem Rekursionsansatz $\varphi_{jmax-1} = E_{jmax-1} \varphi_{jmax} + F_{jmax-1}$ zu:

$$\varphi_{jmax} = \frac{F_{jmax-1}}{1 - E_{jmax-1}}$$

Damit werden die neuen Variablen für $j = jmax - 1, \dots, 2$ berechnet und die Lösung kann für ein neuen Wert x_i fortgesetzt werden.

Die CFL Bedingung und auch die Stabilitätsanalyse ergeben für das implizite Schema keine Beschränkung für die Courantzahl $C = \left| \frac{1}{\beta} \right| \cdot \frac{\Delta x}{\Delta y}$ und somit ein uneingeschränkt stabiles Schema.

Die detaillierte Lösung und ein entsprechendes FORTRAN Programm wird in der Vorlesung gegeben.

2.3 Formulierung der Euler Gleichungen

2.3.1 Einführung

Die Euler Gleichungen beschreiben die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie einer reibungsfreien und wärmeleitungsfreien Strömung. Die Euler Gleichungen sind Vereinfachungen der Navier-Stokes Gleichungen, gebildet durch Vernachlässigung der Reibungs- und Wärmeleitungsterme. Auf Grund dieser Vereinfachung können nur Normalkräfte auf Körper, d.h. Druckkräfte, mittels der Euler Gleichungen bestimmt werden. Der Druck der reibungsfreien Strömung ist physikalisch aussagekräftig, solange der Einfluß der Reibung auf die Druckverteilung vernachlässigt werden kann. Dies ist z.B. der Fall in Grenzschichtströmungen bei hohen Reynoldszahlen, da hierbei der Druck durch die reibungsfreie Außenströmung bestimmt wird. Somit können durch Lösung der Eulergleichungen der Auftrieb und der Wellenwiderstand in wichtigen Strömungsbereichen ermittelt werden. Die Euler Gleichungen gelten ohne Einschränkung für Unterschall, Transschall oder Überschall und erlauben die Berechnung der gasdynamischen Vorgänge. Aus diesen Gründen ist die numerische Lösung der Euler Gleichungen ein wichtiges Hilfsmittel der Entwurfsaerodynamik in Luft- und Raumfahrt.

Mathematisch bilden die zeitabhängigen Euler Gleichungen ein System von nichtlinearen, hyperbolischen, partiellen Differentialgleichungen. Die verschiedenen Formen der Euler Gleichungen spielen für die Lösungen eine große Rolle und werden deshalb im folgenden Abschnitt behandelt.

Nichtlineare, hyperbolische Gleichungen besitzen zwei unterschiedliche Klassen von Lösungen, stetige und unstetige Lösungen. Stetige (kontinuierliche) Lösungen sind glatte, differenzierbare Lösungen. Stetige Lösungen können z.B. mit Hilfe der Charakteristiken bestimmt werden. Unstetige (diskontinuierliche) Lösungen sind sprunghafte Lösungen, wie z.B. die Verdichtungsstöße. Die allgemeine Lösung hierfür aus der integralen, konservativen Form der Euler Gleichungen wird in einem Abschnitt gezeigt.

Die numerischen Lösungsverfahren für die Euler Gleichungen bauen auf den Verfahren auf, die für skalare Gleichungen dargestellt wurden. Erschwerend kommt jedoch hinzu, daß mehrere Charakteristiken, z.T. mit unterschiedlichen Vorzeichen, berücksichtigt werden müssen und das diese Verfahren stetige und unstetige Lösungen erfassen sollen. Dieses erfordert spezielle numerische Flußformulierungen, einschließlich numerischer Dämpfung. Beispiele einiger wichtiger Diskretisierungen werden diskutiert.

2.3.2 Formen der Euler Gleichungen

Zur Berechnung der reibungsfreien, kompressiblen Strömung eines thermisch und kalorisch idealen Gases mit Hilfe der Euler Gleichungen sind folgende Beziehungen notwendig:

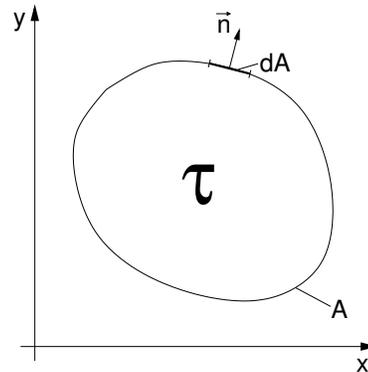
- Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie
- thermische Zustandsgleichung : $p = \rho R T$
- kalorische Zustandsgleichung : $c_v = c_v(T), \quad c_p = c_p(T), \quad R = c_p - c_v$
- Anfangs- und Randbedingungen

Im folgenden wird auf die verschiedenen Formen der Erhaltungsgleichungen eingegangen.

Integrale Form

Diese Form ist die physikalische Ausgangsform der Euler Gleichungen, da sie direkt die Bilanz in einem Kontrollvolumen beschreibt.

Für ein abgeschlossenes Element mit dem Volumen $\tau(t)$ und der Oberfläche $A(t)$ ergibt die Erhaltung von Masse (ρ) Impuls ($\rho \vec{v}$) und Energie (ρE) pro Volumeneinheit in einem Absolutsystem:



Masse :	$\int_{\tau} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\tau + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0$
Impuls :	$\int_{\tau} \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} d\tau + \oint_A [\rho \vec{v} \vec{v} + p I] \cdot \vec{n} dA = 0$
Energie :	$\int_{\tau} \frac{\partial \rho E}{\partial t} d\tau + \oint_A [\rho E \vec{v} + p \vec{v}] \cdot \vec{n} dA = 0$

Hierbei ist E die Gesamtenergie $E = e + \vec{v}^2 / 2$, I ist der Einheitstensor und \vec{n} ist der Normalenvektor auf der Oberfläche A .

Die drei Erhaltungsgleichungen können zu einem System zusammengefaßt werden:

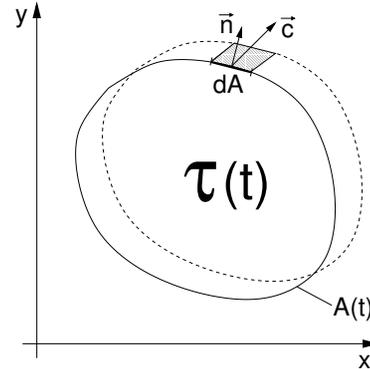
$$\int_{\tau} \frac{\partial U}{\partial t} d\tau + \oint_A \vec{H} \cdot \vec{n} dA = 0$$

Hierbei ist U der Vektor der Erhaltungsgrößen und \vec{H} ist der verallgemeinerte Flußvektor über die Kontrollfläche.

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \vec{v} \\ \rho E \end{pmatrix} \quad \vec{H} = \begin{pmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} \vec{v} + p I \\ \rho \vec{v} E + p \vec{v} \end{pmatrix}$$

Erhaltungsgleichungen im Relativsystem

Für die Berechnung instationärer Probleme ist es oft zweckmäßig, die Erhaltungsgleichungen in einem mitbewegten System zu formulieren. Zu ihrer Herleitung wird angenommen, daß sich das Bilanzvolumen τ mit der Geschwindigkeit \vec{c} relativ zum ortsfesten Bezugssystem bewegt. Die zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen im Volumen τ in einem mit \vec{c} bewegten System ist dann gleich der zeitlichen Änderung im ortsfesten System (lokale Beschleunigung) zuzüglich des durch die Verschiebung des Volumens bewirkten Transportes der Erhaltungsgrößen.



$$\frac{d}{dt} \int_{\tau(t)} U d\tau = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{\tau(t+\Delta t)} U(t+\Delta t) d\tau - \int_{\tau(t)} U(t) d\tau \right] = \int_{\tau(t)} \frac{\partial U}{\partial t} d\tau + \oint_A U \vec{c} \cdot \vec{n} dA$$

Die Zeitableitung im mitbewegten System ist definiert als

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla$$

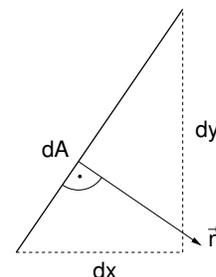
Die Erhaltungsgleichungen im Relativsystem lauten somit:

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau} U d\tau + \oint_A (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA = 0$$

Für den Sonderfall eines mit der Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} mitbewegten Koordinatensystems, d.h. $\vec{c} = \vec{v}$, wird diese Zeitableitung zur bekannten substantiellen Ableitung $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla$.

Integrale Form in kartesischen Koordinaten

Die integralen Gleichungen in einem zweidimensionalen, kartesischen Koordinatensystem (x, y, t) ergeben sich für ein Volumen $\tau = \tau(x, y)$ durch komponentenweise Darstellung der Vektoren:



$$\vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \vec{H} = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \quad \vec{c} = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \end{pmatrix}, \quad \vec{n} dA = \begin{pmatrix} dy \\ -dx \end{pmatrix}$$

Die integrale Form der Erhaltungsgleichungen ist dann

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau} U d\tau + \oint_A (F - U c_x) dy - \oint_A (G - U c_y) dx = 0$$

mit dem Vektor der Erhaltungsgrößen U und den kartesischen Komponenten F und G des Flußvektors.

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v u \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{pmatrix}$$

Divergenzform

Eine konservative, differentielle Form (Divergenzform) der Eulergleichungen erhält man durch Anwendung des Gaußschen Integralsatzes.

$$\oint_A \vec{H} \cdot \vec{n} dA = \int_{\tau} \nabla \cdot \vec{H} d\tau$$

Ersetzt man in der Integralform der Euler Gleichungen das Oberflächenintegral durch ein Volumenintegral und fordert einen verschwindenden Integranden für beliebige Volumina, dann erhält man die Divergenzform der Euler Gleichungen.

$$\boxed{\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{H} = 0}$$

Die differentielle Form der Erhaltung von Masse, Impuls und Energie ist im einzelnen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + p I) &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v} (\rho E + p) &= 0 \end{aligned}$$

Divergenzform in kartesischen Koordinaten

Die Gleichungen in einem zweidimensionalen, kartesischen Koordinatensystem (x, y, t) ergeben sich durch komponentenweise Darstellung der Vektoren:

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \vec{H} = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \quad \vec{c} = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \end{pmatrix}, \quad \nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}$$

Die Divergenzform der Erhaltungsgleichungen in kartesischen Koordinaten lautet dann:

$$\boxed{\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = 0}$$

mit dem Vektor der Erhaltungsgrößen U und den kartesischen Komponenten F und G des Flußvektors.

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v u \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{pmatrix}$$

Quasi-konservative Form und Jacobi-Matrizen

Zur Entwicklung von numerischen Lösungsverfahren und zur Analyse der konservativen Gleichungen werden die Jacobi-Matrizen der Flüsse benötigt. Durch die Jacobi- bzw. Funktional-Matrizen wird der funktionale Zusammenhang zwischen der Änderung der Flüsse und der Änderung der Erhaltungsgrößen ausgedrückt. Die Jacobi-Matrizen werden durch die partiellen Ableitungen der einzelnen Komponenten der Flüsse nach den Komponenten des Vektors der Erhaltungsgrößen gebildet. Für die Divergenzform

$$U_t + F_x + G_y = 0$$

mit den Flüssen F und G als Funktion der Erhaltungsgrößen U

$$F(U) = \begin{pmatrix} F_1(U) \\ F_2(U) \\ F_3(U) \\ F_4(U) \end{pmatrix} \quad G(U) = \begin{pmatrix} G_1(U) \\ G_2(U) \\ G_3(U) \\ G_4(U) \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix}$$

erhält man die Jacobi-Matrizen $\overline{\overline{A}}$ und $\overline{\overline{B}}$ der Flüsse F und G :

$$\begin{aligned} \overline{\overline{A}} &= \frac{\partial F}{\partial U} = \frac{\partial (F_1, F_2, F_3, F_4)}{\partial (U_1, U_2, U_3, U_4)} \quad \text{mit} \quad a_{kl} = \frac{\partial F_k}{\partial U_l} \quad (k, l = 1, \dots, 4) \\ \overline{\overline{B}} &= \frac{\partial G}{\partial U} = \frac{\partial (G_1, G_2, G_3, G_4)}{\partial (U_1, U_2, U_3, U_4)} \quad \text{mit} \quad b_{kl} = \frac{\partial G_k}{\partial U_l} \quad (k, l = 1, \dots, 4) \end{aligned}$$

Die quasi-konservative Form wird mit Hilfe der Jacobi-Matrizen formuliert. Diese Gleichungen haben nicht mehr die Divergenzform, jedoch bleiben die Erhaltungsgrößen weiterhin die abhängigen Variablen. Die Änderung der Flüsse wird dabei durch die Änderung der Erhaltungsgrößen ausgedrückt, d.h.:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial U} \cdot \frac{\partial U}{\partial x} = \overline{\overline{A}} \frac{\partial U}{\partial x} \quad \text{und} \quad \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial G}{\partial U} \cdot \frac{\partial U}{\partial y} = \overline{\overline{B}} \frac{\partial U}{\partial y}$$

Die quasi-konservative Form ergibt sich somit aus der Divergenzform zu

$$U_t + \overline{\overline{A}}U_x + \overline{\overline{B}}U_y = 0$$

Einen Sonderfall bilden die Euler Gleichungen eines idealen Gases. In diesem Falle sind die nichtlinearen Flüsse der Euler Gleichungen homogene Funktionen ersten Grades in Bezug auf die Erhaltungsgrößen. Dadurch werden die Flüsse lineare Funktionen der Erhaltungsgrößen, gekoppelt über die Jacobi-Matrix.

$$F(U) = \frac{\partial F}{\partial U} \cdot U = \overline{\overline{A}}U \quad \text{und} \quad G(U) = \frac{\partial G}{\partial U} \cdot U = \overline{\overline{B}}U$$

Beispiel:

Die Herleitung der Jacobi-Matrizen soll im folgenden für die eindimensionalen Euler Gleichungen gezeigt werden. Betrachtet werden die Euler Gleichungen $U_t + F_x = 0$ mit den konservativen Variablen:

$$U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix}$$

Der Fluß $F(U)$ ist dann

$$F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_2 \\ U_2^2/U_1 + p(U) \\ U_2/U_1 \cdot (U_3 + p(U)) \end{pmatrix}$$

mit dem Druck $p(U) = (\kappa - 1)[U_3 - 1/2 \cdot U_2^2/U_1]$.

Für die Jacobi-Matrix $\overline{\overline{A}}$ mit den Elementen $a_{kl} = \frac{\partial F_k}{\partial U_l}$ folgt

$$\overline{\overline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{(3-\kappa)}{2}u^2 & (3-\kappa)u & \kappa-1 \\ u((\kappa-1)u^2 - \kappa E) & \kappa E - \frac{3}{2}(\kappa-1)u^2 & \kappa u \end{pmatrix}$$

Nichtkonservative Formen

Bisherige Formen der Euler Gleichungen, Integral- und Divergenzform, bauten auf den Erhaltungsgrößen U , d.h. auf Masse, Impuls und Energie, als abhängige Variable auf. Sie beschreiben damit direkt das Erhaltungsprinzip der Mechanik. Wählt man dagegen abhängige Variable, die nicht die Erhaltungsgrößen sind, so bezeichnet man die entsprechenden Gleichungen als nichtkonservative Formen der Euler Gleichungen. Diese lassen sich nicht in Integral- und Divergenzform angeben, es treten immer variablenabhängige Koeffizienten vor den Differentialen auf. Für die numerische Lösung der Eulergleichungen haben diese Formen geringe Bedeutung, jedoch erlauben diese oft in einfacherer Weise Aussagen über Lösungseigenschaften zu erhalten.

Viele der nichtkonservativen Formen lassen sich in der Lagrangeschen Schreibweise formulieren, die die Strömung in einem mitbewegten System beschreibt. Die Zeitableitung wird hierbei zur substantiellen Ableitung.

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \quad \text{bzw. in } (x, y, t) \quad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y}$$

Zwei Beispiele nichtkonservativer Formen werden im folgenden angegeben, wobei die Gleichungen in Vektorschreibweise bzw. in kartesischen Koordinaten (x, y, t) angegeben werden.

- Abhängige Variable $V = (\rho, \vec{v}, E)^T$:

$$\begin{array}{rcl}
 \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} & = & 0 \\
 \frac{d\vec{v}}{dt} + 1/\rho \nabla p & = & 0 \\
 \frac{dE}{dt} + 1/\rho \nabla \cdot (p\vec{v}) & = & 0
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{rcl}
 \frac{d\rho}{dt} + \rho (u_x + v_y) & = & 0 \\
 \frac{du}{dt} + 1/\rho p_x & = & 0 \\
 \frac{dv}{dt} + 1/\rho p_y & = & 0 \\
 \frac{dE}{dt} + 1/\rho ((pu)_x + (pv)_y) & = & 0
 \end{array}$$

- Abhängige Variable $V = (\rho, \vec{v}, p)^T$:

$$\begin{array}{rcl}
 \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \vec{v} & = & 0 \\
 \frac{d\vec{v}}{dt} + 1/\rho \nabla p & = & 0 \\
 \frac{dp}{dt} + \rho a^2 \nabla \cdot \vec{v} & = & 0
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{rcl}
 \frac{d\rho}{dt} + \rho (u_x + v_y) & = & 0 \\
 \frac{du}{dt} + 1/\rho p_x & = & 0 \\
 \frac{dv}{dt} + 1/\rho p_y & = & 0 \\
 \frac{dp}{dt} + \rho a^2 (u_x + v_y) & = & 0
 \end{array}$$

Charakteristische Form

Die Euler Gleichungen sind ein hyperbolisches System von partiellen Differentialgleichungen mit reellen Charakteristiken. Die charakteristische Form der Euler Gleichungen ist eine spezielle Form der nichtkonservativen Gleichungen, gebildet mit den charakteristischen Variablen. Entsprechend der Definition der charakteristischen Lösung, d.h. eine von der Nachbarlösung unabhängige Lösung, erhält man ein entkoppeltes Gleichungssystem für die Euler Gleichungen. Die Lösung jeder Gleichung ist dann die charakteristische Lösung (Verträglichkeitsbedingung) für die jeweilige Charakteristik. Diese charakteristische Form ist der Ausgangspunkt für die Entwicklung von Charakteristikenverfahren und numerischen Differenzenverfahren der Euler Gleichungen.

Das hyperbolische System lässt sich durch Diagonalisierung der Systemmatrix in eine charakteristische Form überführen. Die Systemmatrix ist hierbei die Matrix, die vor den Ortsableitungen der abhängigen Variablen steht, vor den Zeitableitungen steht die Einheitsmatrix. Die Eigenwerte λ_i der Systemmatrix sind dann identisch mit den charakteristischen Richtungsableitungen, d.h. $\lambda_i = \frac{dx}{dt}|_i$.

Die Herleitung einer charakteristischen Form kann nur für die eindimensionalen, zeitabhängigen Eulergleichungen durchgeführt werden. Eine vollständige Diagonalisierung mehrdimensionaler Gleichungen ist nicht möglich, da die Diagonaltransformationen der Matrizen vor den Ortsableitungen der verschiedenen Richtungen unterschiedlich sind.

Ausgangspunkt für die Diagonalisierung bildet eine der nichtkonservativen Formen der eindimensionalen Euler Gleichungen. Falls die konservative Divergenzform diagonalisiert werden soll, ist von dieser zunächst die quasi-konservative Form zu bilden. Man erhält mit dem Vektor der abhängigen Variablen V , der Systemmatrix $\overline{\overline{A}}$ und der Einheitsmatrix I die folgende Gleichung:

$$I V_t + \overline{\overline{A}} V_x = 0$$

Die Diagonaltransformation der Matrix $\overline{\overline{A}}$ auf eine Diagonalmatrix Λ mit den reellen Eigenwerten λ_i als diagonale Elemente erfolgt mit Hilfe der Eigenvektormatrix T und der Inversen T^{-1} .

$$\Lambda = T^{-1} \overline{\overline{A}} T \quad \text{mit} \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte λ_i der Matrix $\overline{\overline{A}}$ sind $\lambda_i = \frac{dx}{dt}|_i = (u, u+a, u-a)$, $i = 1, 2, 3$.
Die Eigenwerte berechnet man aus der Determinante

$$|\overline{\overline{A}} - \lambda_i I| = 0$$

Die Berechnung der Eigenvektormatrix $T = (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$, deren Spalten von den Eigenvektoren \vec{x}_i der Eigenwerte λ_i gebildet werden, erfolgt aus der Lösung des Gleichungssystems

$$(\overline{\overline{A}} - \lambda_i I) \vec{x}_i = 0 \quad i = 1, 2, 3$$

Die Transformation der Euler Gleichungen auf die charakteristische Form wird durch linksseitige Multiplikation mit T^{-1} erreicht.

$$\begin{aligned} T^{-1} V_t + T^{-1} \overline{\overline{A}} T T^{-1} V_x &= 0 \\ T^{-1} V_t + \Lambda T^{-1} V_x &= 0 \end{aligned}$$

Mit der Definition der charakteristischen Variablen W

$$dW = T^{-1} dV$$

erhält man die charakteristische Form:

$$W_t + \Lambda W_x = 0$$

bzw.

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial w_i}{\partial x} = 0 \quad i = 1, 2, 3$$

Die Herleitung der charakteristischen Form soll im folgenden für zwei Ausgangsformen der Euler Gleichungen demonstriert werden. Für die Herleitung aus der nichtkonservativen Form sind die Matrixoperationen einfacher, die Herleitung aus der konservativen Form ist jedoch für die Entwicklung von Upwindschemata wichtig.

1. Beispiel:

Ausgangsform sei eine einfacher zu lösende, nichtkonservative Form mit $V = (\rho, u, p)$.

$$\begin{aligned}\rho_t + u \rho_x + \rho u_x &= 0 \\ u_t + u u_x + (1/\rho) p_x &= 0 \\ p_t + u p_x + \rho a^2 u_x &= 0\end{aligned}$$

Zusammengefaßt ergibt dieses System:

$$V_t + \bar{a} V_x = 0 \quad \text{mit} \quad V = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix} \quad \bar{a} = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & 1/\rho \\ 0 & \rho a^2 & u \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte erhält man aus $|\bar{a} - \Lambda| = 0$ zu $\lambda_1 = u$, $\lambda_2 = u + a$, $\lambda_3 = u - a$. Die Eigenvektoren $\vec{x}_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3)^T$ mit $i = 1, 2, 3$ bestimmen sich aus dem Gleichungssystem $(\bar{a} - \lambda_i I) \vec{x}_i = 0$.

$$\begin{aligned}(u - \lambda_i) x_i^1 + \rho x_i^2 + 0 &= 0 \\ 0 + (u - \lambda_i) x_i^2 + 1/\rho x_i^3 &= 0 \\ 0 + \rho a^2 x_i^2 + (u - \lambda_i) x_i^3 &= 0\end{aligned}$$

Das Gleichungssystem für x_i^1, x_i^2, x_i^3 ist überbestimmt; deshalb ist jeweils eine Komponente frei wählbar.

$$\begin{aligned}\lambda_1 = u \quad x_1^1 = -\frac{1}{a^2} \quad (\text{gewählt}) &\rightarrow x_1^2 = 0, \quad x_1^3 = 0 \\ \lambda_2 = u + a \quad x_2^3 = \frac{1}{2} \quad (\text{gewählt}) &\rightarrow x_2^2 = \frac{1}{2\rho a}, \quad x_2^1 = \frac{1}{2a^2} \\ \lambda_3 = u - a \quad x_3^3 = \frac{1}{2} \quad (\text{gewählt}) &\rightarrow x_3^2 = -\frac{1}{2\rho a}, \quad x_3^1 = \frac{1}{2a^2}\end{aligned}$$

Die Eigenvektormatrizen $T = T(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$ und T^{-1} ergeben sich zu:

$$T = \begin{pmatrix} -\frac{1}{a^2} & \frac{1}{2a^2} & \frac{1}{2a^2} \\ 0 & \frac{1}{2\rho a} & -\frac{1}{2\rho a} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad T^{-1} = \begin{pmatrix} -a^2 & 0 & 1 \\ 0 & \rho a & 1 \\ 0 & -\rho a & 1 \end{pmatrix}$$

Die charakteristischen Variablen folgen aus $dW = T^{-1} dV$

$$dW = \begin{pmatrix} dw_1 \\ dw_2 \\ dw_3 \end{pmatrix} = T^{-1} \cdot \begin{pmatrix} d\rho \\ du \\ dp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a^2 d\rho + dp \\ \rho a du + dp \\ -\rho a du + dp \end{pmatrix}$$

Damit erhält man die charakteristische Form der Euler Gleichungen

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial w_i}{\partial x} = 0$$

Diese ergibt als Einzelgleichungen

$$\begin{aligned}(p_t - a^2 \rho_t) + u \quad (p_x - a^2 \rho_x) &= 0 \\ (p_t + \rho a u_t) + (u + a) \quad (p_x + \rho a u_x) &= 0 \\ (p_t - \rho a u_t) + (u - a) \quad (p_x - \rho a u_x) &= 0\end{aligned}$$

2. Beispiel

Ausgangsform ist die Divergenzform der 1-D Euler Gleichungen.

$$U_t + F_x = 0 \quad \text{mit} \quad U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u E + up \end{pmatrix}$$

Zur Herleitung der charakteristischen Form muß die Divergenzform zunächst in die quasi-konservative Form überführt werden (siehe vorn).

$$U_t + \bar{\bar{A}} U_x = 0 \quad \text{mit} \quad \bar{\bar{A}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{(3-\kappa)}{2} u^2 & (3-\kappa) u & \kappa - 1 \\ u((\kappa-1)u^2 - \kappa E) & \kappa E - \frac{3}{2}(\kappa-1)u^2 & \kappa u \end{pmatrix}$$

Die Diagonalisierung der Jacobi-Matrix $\bar{\bar{A}}$ mittels einer Eigenvektormatrix R erfolgt in gleicher Weise mit:

$$\Lambda = R^{-1} \bar{\bar{A}} R \quad dW = R^{-1} dU \quad \Lambda = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+a & 0 \\ 0 & 0 & u-a \end{pmatrix}$$

Die Eigenvektormatrix R der konservativen Form ergibt sich mit den Abkürzungen

$$a_1 = -\frac{1}{a^2} \quad , \quad a_2 = \frac{1}{2a^2} \quad , \quad b_1 = \frac{\kappa-1}{2} M^2 \quad , \quad b_2 = \kappa - 1 \quad , \quad M = \frac{u}{a}$$

$$R = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_2 \\ a_1 u & a_2(u+a) & a_2(u-a) \\ a_1 u^2/2 & a_2(H+au) & a_2(H-au) \end{pmatrix} \quad R^{-1} = \begin{pmatrix} a^2(b_1-1) & -a(b_2 M) & b_2 \\ a^2(b_1-M) & -a(b_2 M-1) & b_2 \\ a^2(b_1+M) & -a(b_2 M+1) & b_2 \end{pmatrix}$$

Die charakteristische Form ist die gleiche, wie im 1. Beispiel berechnet.

$$W_t + \Lambda W_x = 0 \quad \text{mit} \quad dW = R^{-1} dU = \begin{pmatrix} -a^2 d\rho + dp \\ \rho a du + dp \\ -\rho a du + dp \end{pmatrix}$$

Die charakteristische Form der Euler Gleichungen ist Ausgangspunkt für das Charakteristikenverfahren und für die Entwicklung von Differenzenverfahren, insbesondere Upwindverfahren. Letztere werden in einem speziellen Abschnitt diskutiert.

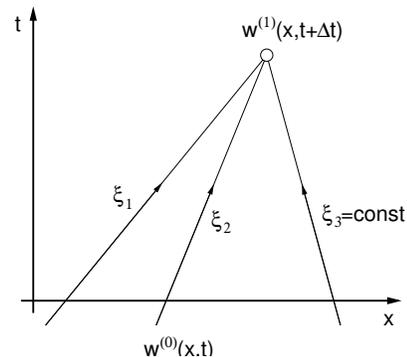
Die Charakteristikenverfahren nutzen die Lösung längs einer Charakteristik zur Berechnung der Strömung. Man transformiert hierbei die charakteristische Form auf charakteristische Koordinaten (\Rightarrow kanonische Form) und integriert die resultierende Gleichung. Mit einer Koordinatentransformation $d\xi_i = dx - \lambda_i dt$ und $d\tau_i = dt$ folgt

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial w_i}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dw_i}{d\tau_i} = 0$$

Damit ist

$$dw_i = 0 \quad \text{längs} \quad d\xi_i = dx - \lambda_i dt = 0$$

Für eine gegebene Anfangsbedingung $w_i^{(o)}$ auf einer nichtcharakteristischen Kurve können neue Werte in einem benachbarten Punkt $P(x, t)$ bestimmt werden.



2.3.3 Diskontinuierliche Lösungen der Euler Gleichungen

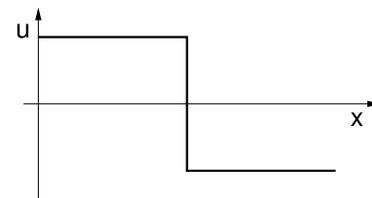
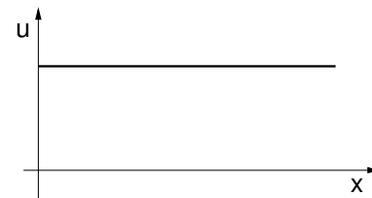
Nichtlineare, hyperbolische, partielle Differentialgleichungen haben zwei Klassen von Lösungen, stetige, kontinuierliche Lösungen und unstetige, diskontinuierliche Lösungen. Entsprechend den Anforderungen an die Differenzierbarkeit der Lösungen spricht man auch von starken, d.h. stetigen und von schwachen, d.h. unstetigen Lösungen der Gleichungen (siehe z.B.: *Courant, Hilbert: Mathematische Methoden der Physik*). Die stetige Lösung kann aus der konservativen oder nichtkonservativen Form berechnet werden, z.B. mit Hilfe der Charakteristiken. Die unstetige Lösung, die einen Sprung der Variablen beschreibt, kann **nur** aus der konservativen Form bestimmt werden. Die zwei verschiedenen Lösungsformen können an einem einfachen Beispiel gezeigt werden.

Beispiel: Betrachtet wird die nichtlineare, hyperbolische Modellgleichung $u_t + uu_x = 0$. Die stationäre, stetige Lösung dieser nichtkonservativen Form ergibt sich aus:

$$uu_x = 0 \quad \rightarrow \quad u_x = 0 \quad \rightarrow \quad u = \text{const.} \quad \rightarrow \text{stetig}$$

Betrachtet man dagegen die stationäre Lösung der konservativen Form $u_t + (\frac{u^2}{2})_x = 0$ derselben Gleichung, so ergibt die Integration:

$$\left(\frac{u^2}{2}\right)_x = 0 \quad \rightarrow \quad u^2 = \text{const.} \quad \rightarrow \quad u = \pm\sqrt{\text{const.}} \quad \rightarrow \text{unstetig}$$



Die Lösung der konservativen Form beschreibt somit einen Sprung der Variablen!

Die Entstehung der Diskontinuität kann auch über die Charakteristiken erklärt werden. Nichtlineare, hyperbolische Gleichungen besitzen Charakteristiken, deren Steigung von der Lösung selbst abhängt, d.h. die Steigung ändert sich im Lösungsfeld (in diesem Beispiel $\frac{dx}{dt} = u$). Das bedeutet aber, daß sich Charakteristiken gleicher Art schneiden können. In diesem Falle ist die Lösung nicht mehr eindeutig; es entsteht eine sprunghafte, diskontinuierliche Lösung.

Das gleiche Lösungsverhalten, jedoch komplexer, zeigen die Euler Gleichungen, die ein nichtlineares System hyperbolischer Gleichungen bilden. Die reibungsfreie Strömung, die durch die Euler Gleichungen beschrieben wird, kann verschiedene Arten von Diskontinuitäten aufweisen.

Die bekannteste Diskontinuität ist der Verdichtungsstoß, der eine sprunghafte Kompression eines Gases beschreibt. Die unstetige Lösung ergibt in diesem Falle die Sprungbedingungen über den Stoß, oft auch als Rankine-Hugoniot Beziehungen bezeichnet. Solche Stöße können stationär bei Überschallströmung auftreten, z.B. in einer Lavaldüse oder an einem Profil. Sie sind aber auch instationär in Unterschallströmung möglich, wie z.B. in einem Stoßwellenrohr.

Eine andere Art der Diskontinuität ist die Kontaktdiskontinuität, die Gase unterschiedlicher Sorte oder Zustandes trennt (siehe Stoßwellenrohr). Eine weitere Diskontinuität wird durch die Trennfläche zwischen zwei Strömungen unterschiedlicher Tangentialgeschwindigkeit gebildet. Diese als Tangentialdiskontinuität bezeichnete Unstetigkeit tritt z.B. im „reibungsfreien“ Nachlauf hinter einem Profil auf. Über die Tangential- und Kontaktdiskontinuität ist der Druck und die Normalgeschwindigkeit gleich.

Diese Beispiele zeigen die Bedeutung unstetiger Lösungen bei Strömungsproblemen. Numerisch können solche unstetigen Lösungen große Probleme bereiten, da die meisten numerischen Lösungsverfahren Differenzierbarkeit der Lösung fordern (Taylorreihen), die hierbei nicht gegeben ist. Die Problematik wurde bereits in dem Abschnitt über numerische Dämpfung angesprochen, Lösungsbeispiele werden noch später in diesem Kapitel angegeben. Wesentlich für die numerische Lösung ist:

Die Berechnung von Strömungen mit Diskontinuitäten erfordert die Lösung der konservativ formulierten Gleichungen!

Zur Berechnung der Strömungsvorgänge ist es wichtig, die exakte Lösung über eine Diskontinuität zu kennen.

Unstetige Lösungen der Euler Gleichungen

Eine allgemeine Lösung für eine mitbewegte Diskontinuität kann für die Euler Gleichungen in relativ einfacher Weise bestimmt werden. Hierzu betrachtet man ein Kontrollvolumen τ . Dieses Kontrollvolumen sei durch eine Diskontinuität C getrennt, über die die Variablen unstetig verlaufen. Die Geschwindigkeit der Diskontinuität sei \vec{c} . Das Erhaltungsprinzip fordert, daß in jedem Teilvolumen τ_1 und τ_2 und im Gesamtvolumen $\tau = \tau_1 + \tau_2$ Masse, Impuls und Energie erhalten bleiben. Die daraus resultierende Bedingung ist die diskontinuierliche Lösung oder Sprungbedingung.

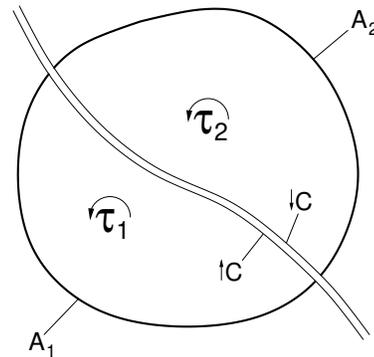
Für ein beliebiges Gebiet wird die Erhaltung durch die integrale Form der Euler Gleichungen in einem mit der Geschwindigkeit \vec{c} bewegten System beschrieben.

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau} U d\tau + \oint_A (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA = 0$$

Die Erhaltungsgleichungen werden für jedes Kontrollvolumen formuliert:

Gesamtvolumen $\tau = \tau_1 + \tau_2$ mit der Oberfläche $A = A_1 + A_2$:

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau_1 + \tau_2} U d\tau + \oint_{A_1 + A_2} (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA = 0$$



Teilvolumen τ_1 mit der Oberfläche $A_1 + \uparrow C$:

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau_1} U d\tau + \int_{A_1} (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA + \int_{\uparrow C} (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA = 0$$

Teilvolumen τ_2 mit der Oberfläche $A_2 + \downarrow C$:

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau_2} U d\tau + \int_{A_2} (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA + \int_{\downarrow C} (\vec{H} - U \vec{c}) \cdot \vec{n} dA = 0$$

Die Bilanz über die zwei Teilvolumina muß gleich der des Gesamtvolumens sein. Daraus ergibt sich die gesuchte Sprungbedingung über die Diskontinuität C :

$$\int_{\downarrow C} (\vec{H} - U \vec{c})_2 \cdot \vec{n} dA + \int_{\uparrow C} (\vec{H} - U \vec{c})_1 \cdot \vec{n} dA = \int_{\downarrow C} \left\{ (\vec{H} - U \vec{c})_2 - (\vec{H} - U \vec{c})_1 \right\} \cdot \vec{n} dA = 0$$

Solche unstetigen Lösungen werden oft mit der Definition „Sprung einer Funktion f “ geschrieben, d.h. $[f] \equiv f_2 - f_1$. Damit lautet die allgemeine Lösung über eine Diskontinuität:

$$\boxed{[\vec{H} - U \vec{c}] \cdot \vec{n} dA = 0}$$

Zur Verdeutlichung soll diese Beziehung für ein kartesisches Koordinatensystem (x, y, t) angegeben werden. Die Komponenten der Vektoren sind dann:

$$\vec{H} = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \quad \vec{c} = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \end{pmatrix}, \quad \vec{n} dA = \begin{pmatrix} dy \\ -dx \end{pmatrix}$$

Für die Sprungbedingung $[\vec{H} - U \vec{c}] \cdot \vec{n} dA = 0$ erhält man damit:

$$\left\{ (F - U c_x) \frac{dy}{dx} \Big|_C - (G - U c_y) \right\}_2 = \left\{ (F - U c_x) \frac{dy}{dx} \Big|_C - (G - U c_y) \right\}_1$$

Hiermit läßt sich z.B. die Sprungbedingung über einen gekrümmten, laufenden Verdichtungsstoß formulieren.

Beispiel:

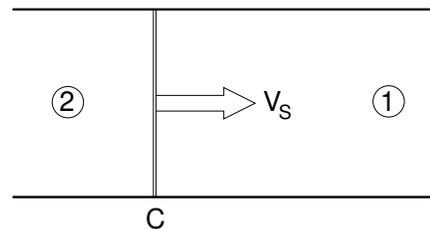
1-D, laufender Stoß mit Stoßgeschwindigkeit v_s :

$$\implies c_x = v_s, \quad c_y = 0, \quad \frac{dy}{dx} \Big|_C = \infty$$

Die Sprungbeziehung ist dann $[F - U \cdot v_s] = 0$ und ergibt die Erhaltung über den Stoß:

$$\begin{aligned} \{\rho(u - v_s)\}_2 &= \{\rho(u - v_s)\}_1 \\ \{\rho u(u - v_s) + p\}_2 &= \{\rho u(u - v_s) + p\}_1 \\ \{\rho(u - v_s)E + up\}_2 &= \{\rho(u - v_s)E + up\}_1 \end{aligned}$$

Bei Vorgabe von v_s und dem Zustand 1 kann daraus z.B. der Zustand 2 hinter dem Stoß ermittelt werden.



Beispiel:

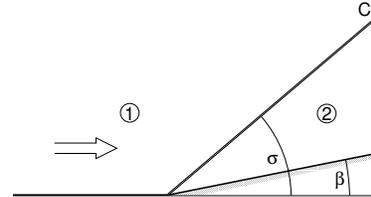
2-D, stationärer Stoß mit dem Stoßwinkel σ

$$\implies \vec{c} = 0 \quad , \quad \left. \frac{dy}{dx} \right|_C = \tan \sigma$$

Die Sprungbeziehung ist $\{F \cdot \tan \sigma - G\}_2 = \{F \cdot \tan \sigma - G\}_1$

und ergibt die Erhaltung über den Stoß:

$$\begin{aligned} \{\rho u \tan \sigma - \rho v\}_1 &= \{\rho u \tan \sigma - \rho v\}_2 \\ \{(\rho u^2 + p) \tan \sigma - \rho uv\}_1 &= \{(\rho u^2 + p) \tan \sigma - \rho uv\}_2 \\ \{\rho uv \tan \sigma - (\rho v^2 + p)\}_1 &= \{\rho uv \tan \sigma - (\rho v^2 + p)\}_2 \\ \{\rho uH \tan \sigma - \rho vH\}_1 &= \{\rho uH \tan \sigma - \rho vH\}_2 \end{aligned}$$



2.4 Numerische Lösung der Euler Gleichungen

Die Darstellung wichtiger Lösungsverfahren erfolgt zunächst für die eindimensionalen, zeitabhängigen Euler Gleichungen. Alle hier behandelten Verfahren bauen auf einer konservativen Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen für ein kleines, diskretes Kontrollvolumen auf. Man kann hierbei zwischen Ortsdiskretisierung und Zeitdiskretisierung unterscheiden. Die Ortsdiskretisierung beschreibt die Änderung der Flüsse über dem Kontrollvolumen. Als wichtige Ortsdiskretisierungen der Euler Gleichungen werden die zentrale Formulierung der Flüsse, einschließlich der Dämpfungsterme und Upwindformulierungen mit charakteristischer Flusssplittung (Flux-Splitting) vorgestellt. Für die Zeitdiskretisierungen, die im wesentlichen die Lösungsmethode definieren, werden einige Ansätze zur Formulierung expliziter und impliziter Verfahren aufgeführt. Die numerische Lösung der Euler Gleichungen soll anhand eines instationären Strömungsproblem, der Strömung in einem Stoßwellenrohr, demonstriert werden.

Die Übertragung dieser Lösungsverfahren auf mehrdimensionale Probleme ist i.a. ohne größere Änderung möglich, da bei mehreren Dimensionen in jeder Koordinatenrichtung im Prinzip ein quasi-eindimensionales Problem formuliert wird. Die Vorgehensweise zur Ortsdiskretisierung wird anhand zweidimensionaler kartesischer und auch krummliniger Netze gezeigt.

2.4.1 Formulierung der eindimensionalen Euler Gleichungen

Die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie einer reibungsfreien Strömung wird durch die zeitabhängigen Euler Gleichungen beschrieben, die im folgenden für eindimensionale Strömungen angegeben werden. Für die numerische Lösung können diese Gleichungen sowohl in der Integral- als auch in der Divergenzform verwendet werden. Die Integralform dieser Gleichungen lautet:

$$\int_{\tau} U_t d\tau + \oint_A F \cdot dy = 0$$

und die konservative Divergenzform ist:

$$U_t + F_x = 0$$

Hierbei ist U der Vektor der konservativen Variablen und $F(U)$ ist der Vektor der Flüsse.

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix}$$

Im folgenden wird ein kalorisch und thermisch ideales Gas angenommen. Für ein solches Gas ergibt sich für den Druck p und die Schallgeschwindigkeit a :

$$p = (\kappa - 1) \rho \left(E - \frac{1}{2} u^2 \right) \quad a = \sqrt{\kappa \frac{p}{\rho}} \quad \kappa = \frac{c_p}{c_v} = const.$$

2.4.2 Ortsdiskretisierung der Flüsse

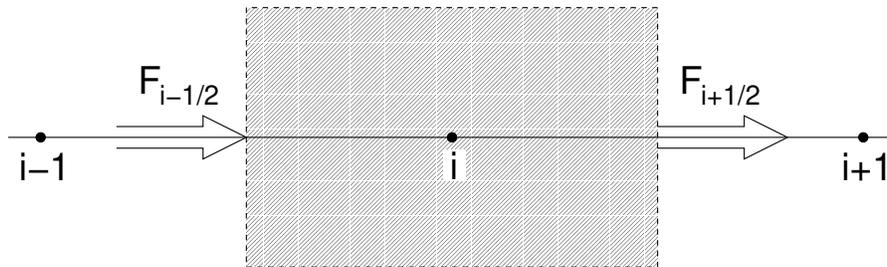
Konservative Diskretisierung

Der Integrationsbereich in der $x-t$ Ebene wird durch ein Gitter mit $t_n = (n-1) \cdot \Delta t$ und $x_i = (i-1) \cdot \Delta x$ aufgeteilt. Die Ortsschrittweite Δx sei konstant. Sie ergibt sich aus der Integrationslänge x_{max} und der maximalen Punktzahl i_{max} zu $\Delta x = \frac{x_{max}}{i_{max}-1}$.

Die Zeitschrittweite Δt ist entweder durch die numerische Stabilität oder durch Genauigkeitsanforderungen festgelegt. Im allgemeinen wird sie durch eine vorgebene konstante Courantzahl C bestimmt, d.h.

$$\Delta t = C \cdot \frac{\Delta x}{|\lambda|_{max}} \quad \text{mit} \quad |\lambda|_{max} = \max_i (|u|, |u-a|, |u+a|) = \max_i (|u| + a)$$

Die maximale Größe der Courantzahl C hängt vom Verfahren (Stabilität) ab, bei instationären Problemen ist sie selbst bei impliziten Verfahren aus Gründen der Zeitgenauigkeit begrenzt, oft nur von der Größenordnung $C = O(1)$.



Konservative Diskretisierung erfordert, daß das Erhaltungsprinzip auch für die diskretisierten Gleichungen gilt. Ausgehend von den integralen Erhaltungsgleichungen definiert man ein Kontrollvolumen $\tau = \Delta x \cdot \Delta y$ um den Punkt i , für das die Erhaltungsgleichungen formuliert werden. Die Variablen in dem Kontrollvolumen τ seien über das Volumen τ gemittelte, somit in einer Zelle konstante Werte. Damit erhält man für die zeitliche Änderung:

$$\int_{\tau} U_t d\tau \longrightarrow \frac{\Delta U_i}{\Delta t} \cdot \Delta x \Delta y$$

Hierbei ist $\frac{\Delta U_i}{\Delta t}$ die diskretisierte Zeitableitung im Punkt i , die später durch die Lösungsmethode noch definiert wird.

Die zeitliche Änderung der konservativen Variablen ist im Gleichgewicht mit der Änderung der Flüsse über das Kontrollvolumen. Die Orte der Flächennormalen $dA = \Delta y$ für die Flüsse in x -Richtung sind mit $i \pm 1/2$ bezeichnet, geometrisch werden sie in der Mitte zwischen Punkt i und den Punkten $i \pm 1$ angenommen. (Der Wert von Δy spielt für eindimensionale Probleme keine Rolle.) Für den eindimensionalen Fall ergibt die Flußbilanz:

$$\oint_A F \cdot \vec{n} dA \longrightarrow (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \Delta y$$

Damit erhält man die diskretisierte Integralform zu:

$$\frac{\Delta U_i}{\Delta t} \cdot \Delta x \Delta y + (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \Delta y = 0$$

Dividiert man diese noch durch das Volumen $\tau = \Delta x \cdot \Delta y$, so erhält man die Differenzenform der Euler Gleichungen.

$$\boxed{\frac{\Delta U_i}{\Delta t} + \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x} = 0}$$

Diese Differenzenform ergibt sich ebenfalls aus der Divergenzform der Euler Gleichungen mit der Differenzenbildung:

$$U_t \longrightarrow \frac{\Delta U_i}{\Delta t} \quad F_x \longrightarrow \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x}$$

Dieses simple Beispiel zeigt, daß sowohl Integral- als Divergenzform der Euler Gleichungen zur gleichen Differenzenform führen, wenn in der diskreten Form das Erhaltungsprinzip bewahrt bleibt. Dies gilt auch für mehrdimensionale Probleme. Wichtig für mehrdimensionale Probleme ist besonders, daß durch die konservative Diskretisierung, wie hier gezeigt, die Metrik korrekt festgelegt wird.

Die konservative Differenzenform ist die Ausgangsbasis für die verschiedenen Lösungsverfahren. Im folgenden Abschnitt werden zunächst die unterschiedlichen Ortsdiskretisierungen für die Flüsse $F_{i\pm 1/2}$, wie z.B. zentrale und Upwinddiskretisierungen behandelt.

Numerische Flußfunktion

Die Flüsse $F_{i\pm 1/2}$ an der Zellwand des Kontrollvolumens sind Funktionen der konservativen Variablen auf den benachbarten Stützpunkten und müssen deshalb über Interpolationspolynome für die Punkte $i \pm 1/2$ genähert werden. Man bezeichnet deshalb den diskreten Fluß auch als numerische Flußfunktion oder numerischer Fluß $\tilde{F}_{i\pm 1/2}$. Der numerische Fluß für den Punkt $i + 1/2$ ist z.B.:

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \tilde{F}_{i+1/2}(U_{i-1}, U_i, U_{i+1}, U_{i+2})$$

Das Ziel der Ortsdiskretisierung ist es, für die numerischen Flüsse $\tilde{F}_{i\pm 1/2}$ an den Zellwänden des Kontrollvolumens τ numerische Approximationen zu finden, so daß das Schema konsistent im Ortsraum ist.

Konsistenz bedeutet, daß die Änderung des numerischen Flusses im Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0$ zur Divergenz des exakten Flusses F führt, d.h.

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}}{\Delta x} = F_x$$

Verschiedene Ortsdiskretisierungen, wie z.B. zentrale und Upwinddifferenzen, wurden bereits in einem vorhergehenden Kapitel für hyperbolische, skalare Gleichungen diskutiert

(Kap. 6). Im Prinzip können die dort aufgeführten Schemata auf die Euler Gleichungen übertragen werden. Hierbei muß jedoch berücksichtigt werden, daß die Euler Gleichungen ein System bilden, daß ihre Flüsse $F(U)$ nichtlineare Funktionen sind und daß mehrere Charakteristiken (Eigenwerte) existieren, die unterschiedliche Vorzeichen haben können. Dadurch ist die Ortsdiskretisierung nicht mehr eindeutig, es gibt verschiedene Möglichkeiten konsistenter Diskretisierungen. Dies gilt insbesondere für Upwindverfahren.

Um eine Systematik für die Herleitung von numerischen Flußformulierungen zu zeigen, wird im folgenden von der charakteristischen Form der Euler Gleichungen ausgegangen. Diese bildet ein System entkoppelter, hyperbolischer Gleichungen, ähnlich den vorn behandelten skalaren Modellgleichungen. Gleichzeitig erlaubt die charakteristische Form eine eindeutige Aufspaltung nach dem Vorzeichen der Charakteristik (Eigenwerte) und somit eine eindeutige Formulierung von Upwindverfahren. Durch Rücktransformation der diskretisierten charakteristischen Form in die konservative Form können somit geeignete Formulierungen der numerischen Flüsse gefunden werden.

Ausgangsform für diese Betrachtung bildet die Divergenzform der Euler Gleichungen

$$U_t + F_x = 0$$

für die eine konsistente Approximation der folgenden Form gefunden werden soll:

$$\frac{\Delta U_i}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}}{\Delta x} = 0$$

Die Euler Gleichungen lassen sich, wie in Kap. 7 beschrieben, mit Hilfe einer Diagonaltransformation

$$\bar{A} = \frac{\partial F}{\partial U} \quad \Lambda = R^{-1} \bar{A} R \quad dW = R^{-1} dU \quad \Lambda = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+a & 0 \\ 0 & 0 & u-a \end{pmatrix}$$

auf die charakteristische Form transformieren.

$$W_t + \Lambda W_x = 0$$

Dieses charakteristische Gleichungssystem kann analog zur konservativen Form diskretisiert werden.

$$\frac{\Delta W_i}{\Delta t} + \Lambda \frac{W_{i+1/2} - W_{i-1/2}}{\Delta x} = 0$$

Auf diese diskretisierte, charakteristische Form können die verschiedenen Schemata, die für skalare hyperbolische Gleichungen hergeleitet wurden, angewendet werden.

Die Rückführung in die konservative Form erfolgt durch die konservative Rücktransformation. Für diese Transformation der Differenzgleichung wird näherungsweise angenommen, daß das Charakteristikenfeld lokal eingefroren ist. Das bedeutet, daß alle Koeffizienten, wie Λ, R, \bar{A} , an einem Punkte (x_i, t_n) als konstant angenommen werden. Damit kann man die Transformationsbeziehungen auch für Differenzen Δf definieren:

$$\Delta W = R^{-1} \Delta U \quad , \quad A = R \Lambda R^{-1} \quad , \quad \Delta F = A \Delta U$$

Zentrale Schemata

Zentrale Schemata der Ordnung $O(\Delta x^2)$ ergeben sich durch Mittelwertbildung für den Zellwandwert, z.B. für $W_{i+1/2}$ ist der Mittelwert:

$$W_{i+1/2} = \frac{1}{2} (W_i + W_{i+1})$$

Damit erhält man ein zentrales Schema der Form

$$\frac{\Delta W_i}{\Delta t} + \Lambda \frac{W_{i+1} - W_{i-1}}{2\Delta x} = 0$$

Durch die näherungsweise Rücktransformation mit lokal konstanten Matrizen in die konservative Form ergibt sich der numerische Fluß eines zentralen Schemas je nach Aufspaltung zu

$$\tilde{F}_{i+1/2} = F\left(\frac{U_i + U_{i+1}}{2}\right) \quad \text{bzw.} \quad \tilde{F}_{i+1/2} = \frac{F(U_i) + F(U_{i+1})}{2}$$

Beide Formen sind konsistent im Limit $\Delta x \rightarrow 0$ und approximieren eine Zentraldifferenz im linearen Falle. Unterschiede entstehen durch die nichtlineare Flußfunktion. In der Praxis werden beide Formen verwendet.

Zusätzliche numerische Dämpfungsterme werden bei zentralen Schemata zur Dämpfung numerischer Schwingungen benötigt, wie bereits in Kap. 6 diskutiert. Lösungen der Euler Gleichungen, die auch Diskontinuitäten, wie z.B. Verdichtungsstöße einschließen, erfordern neben den *Hochfrequenz-Dämpfungstermen* $D^{(4)} \sim U_{xxxx}$, solche zur Unterdrückung von nichtlinearen Schwingungen in der Nähe von Stoßlösungen (*Stoß-Dämpfungsterme* $D^{(2)} \sim U_{xx}$). Zur einheitlichen konservativen Darstellung in einer numerischen Flußformulierung definiert man die Dämpfungsterme in ähnlicher Weise wie die Flüsse:

$$D_i(U) = \frac{d_{i+1/2}(U) - d_{i-1/2}(U)}{\Delta x}$$

Somit ergibt sich der numerische Fluß eines zentralen Schemas, einschließlich der Dämpfungsterme zu:

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (F(U_i) + F(U_{i+1})) + d_{i+1/2}^{(4)}(U) - d_{i+1/2}^{(2)}(U)$$

Der Vollständigkeit halber wird im folgenden eine detaillierte Formulierung der Dämpfungsterme angegeben, wie sie in Rechnungen häufig verwendet wird.

(A. Jameson, W. Schmidt, E. Turkel: *Numerical Solutions of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes*. AIAA paper AIAA-81-1259, 1981)

- Der Stoß-Dämpfungsterm $D^{(2)} \sim U_{xx}$
unterdrückt nichtlineare Schwingungen in Nähe der Stoßlösung.

$$d_{i+1/2}^{(2)}(U) = \frac{\Delta x}{\Delta t} \varepsilon_{i+1/2}^{(2)} (U_{i+1} - U_i)$$

Dieser Term verursacht eine starke Dissipation, die für eine schwingungsfreie Lösung über einen Stoß benötigt wird. Damit jedoch außerhalb eines Stoßes diese Dissipation nicht wirksam wird, wird dieser Term über die Änderung des Druckes gesteuert und ist somit klein bei schwachen Änderungen des Druckgradienten.

$$\varepsilon_{i+1/2}^{(2)} = \kappa^{(2)} \max(\nu_i, \nu_{i+1}) \quad \text{mit} \quad \nu_i = \frac{|p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}|}{p_{i-1} + 2p_i + p_{i+1}}$$

Mit der Konstanten $\kappa^{(2)}$ wird der Dämpfungsterm angepaßt, sie hat üblicherweise einen Wert $\kappa^{(2)} = O(1)$.

- Der Hochfrequenz-Dämpfungsterm $D^{(4)} \sim U_{xxxx}$
unterdrückt kurzweilige Schwingungen in glatten Lösungen, z.B. solche infolge Rundungsfehler.

$$d_{i+1/2}^{(4)}(U) = \frac{\Delta x}{\Delta t} \varepsilon_{i+1/2}^{(4)} (U_{i+2} - 3U_{i+1} + 3U_i - U_{i-1})$$

In Nähe der Stoßlösung verursacht dieser Dämpfungsterm jedoch eine Aufweitung des Stoßes und wird deshalb dort, d.h. wo der Stoß-Dämpfungsterm groß wird, unterdrückt (blended damping).

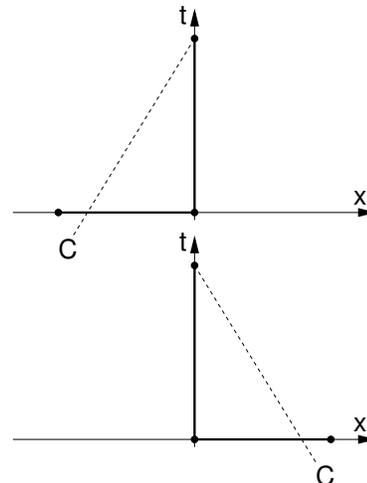
$$\varepsilon_{i+1/2}^{(4)} = \max(0, (\kappa^{(4)} - \varepsilon_{i+1/2}^{(2)}))$$

Die Konstante $\kappa^{(4)} = O(10^{-2})$ dient der Anpassung des Hochfrequenz-Dämpfungsterms.

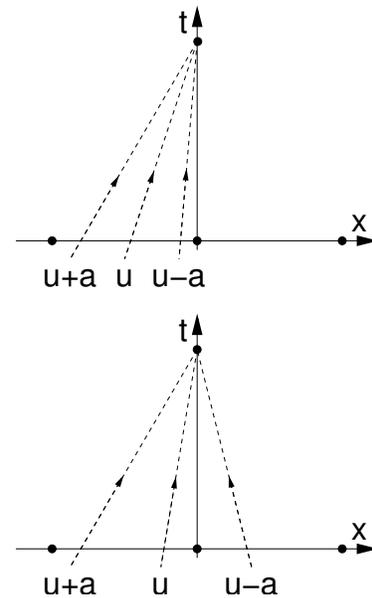
Upwindschemata

Upwindschemata berücksichtigen bei der Differenzenbildung die charakteristische Einflußrichtung. Die Ortsdifferenzen werden jeweils aus der Richtung gebildet, aus der die Informationen längs der Charakteristiken transportiert werden. Hierdurch wird die exakte, charakteristische Lösung numerisch besser repräsentiert.

Dies gilt auch für die numerische Lösung der Euler Gleichungen. Insbesondere dann, wenn starke gasdynamische Wellenvorgänge, wie Stöße und Expansionen, das Strömungsfeld bestimmen, zeigen Upwindverfahren i.a. eine bessere numerische Auflösung des Strömungsfeldes. Die Konstruktion von Upwindverfahren für die Euler Gleichungen ist jedoch wesentlich komplizierter, als zum Beispiel für skalare hyperbolische Gleichungen, da nichtlineare Flüsse und unterschiedliche Charakteristiken zu berücksichtigen sind.



Die Euler Gleichungen haben im Orts-Zeitraum drei unterschiedliche, reelle Charakteristiken (Eigenwerte) $\lambda_i = \frac{dx}{dt}|_i = u, u-a, u+a$. In Überschallströmungen ($u > a$) haben alle drei Charakteristiken das gleiche Vorzeichen, im Unterschall hat jedoch eine Charakteristik immer ein anderes Vorzeichen, als die anderen beiden. Das bedeutet, daß hierfür unterschiedliche Diskretisierungen (Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzen) für ein Upwindverfahren nötig sind. Für den konservativen Fluß F ist die Zuordnung jedoch nicht ohne weiteres gegeben, da sich der Fluß aus Anteilen der verschiedenen Charakteristiken zusammensetzt. Für ein Upwindverfahren muß der numerische Fluß deshalb geeignet aufgespalten werden, so daß die einzelnen Anteile der verschiedenen Einflußrichtungen berücksichtigt werden können (\implies flux-splitting).



Eine Aufspaltung in Anteile mit positiven und negativen Eigenwerten (Einflußrichtungen) und die Bildung von Upwinddifferenzen kann eindeutig für die charakteristische Form der Euler Gleichungen erfolgen. Davon ausgehend kann dann jedoch durch Rücktransformation in die konservative Form eine näherungsweise Aufspaltung der Flüsse F in Anteile mit positiven und negativen Eigenwerten und Bildung von Upwinddifferenzen erfolgen. Wegen der Nichtlinearität sind verschiedene konservative Upwindverfahren möglich. Zwei wesentliche Konzepte für die Herleitung von Upwindverfahren sollen im folgenden diskutiert werden, ohne jedoch im Rahmen dieser Vorlesung auf zu viele Details eingehen zu können. Die beiden Konzepte sind die *Flußvektor Aufspaltung (Flux-Vector Splitting)* und die *Flußdifferenzen Aufspaltung (Flux-Difference Splitting)*.

Ausgangspunkt für die Herleitung bildet die charakteristische Form der Euler Gleichungen. Nimmt man an, daß die Eigenwertmatrix Λ sowohl positive als auch negative Eigenwerte besitzt, so kann man diese in entsprechende Anteile Λ^\pm aufspalten.

$$\Lambda = \Lambda^+ + \Lambda^- \quad \text{mit} \quad \Lambda^+ > 0, \quad \Lambda^- < 0$$

Damit lautet die charakteristische Form

$$W_t + \Lambda^+ W_x + \Lambda^- W_x = 0$$

Die Diskretisierung nach dem Prinzip der Upwindverfahren erfolgt durch Rückwärtsdifferenzen für Λ^+ und Vorwärtsdifferenzen für Λ^- . Damit ist

$$\frac{\Delta W_i}{\Delta t} + \Lambda^+ \frac{W_i - W_{i-1}}{\Delta x} + \Lambda^- \frac{W_{i+1} - W_i}{\Delta x} = 0$$

Diese diskretisierte Form ist der Ausgangspunkt für die verschiedenen konservativen Flußaufspaltungen.

Flux-Vector Splitting

Das Ziel ist hierbei, den numerischen Fluß \tilde{F} in Anteile F^\pm aufzuspalten, die jeweils nur Anteile positiver bzw. negativer Eigenwerte enthalten und deren Summe gerade wieder den Gesamtfluß F ergeben, d.h. $F = F^+ + F^-$. Durch linksseitige Multiplikation der diskreten, charakteristischen Form mit R und mit

$$R\Lambda^\pm \Delta W = R\Lambda^\pm R^{-1} R\Delta W = A^\pm \Delta U = \Delta F^\pm(U)$$

erhält man die konservative Form zu:

$$\frac{\Delta U_i}{\Delta t} + \frac{F^+(U_i) - F^+(U_{i-1})}{\Delta x} + \frac{F^-(U_{i+1}) - F^-(U_i)}{\Delta x} = 0$$

Formuliert man diese Differenzgleichung mit der Flußfunktion $\tilde{F}_{i\pm 1/2}$, so erhält man den numerischen Fluß z.B. für die Zellwand $i + 1/2$ des Kontrollvolumens zu:

$$\tilde{F}_{i+1/2} = F^+(U_i) + F^-(U_{i+1})$$

Um eine allgemeinere Schreibweise für die Zellwände $i \pm 1/2$ einzuführen, definiert man links-extrapolierte Werte $U_{i+1/2}^+$ für positive Eigenwerte Λ^+ mit

$$U_{i+1/2}^+ = U_i \quad , \quad U_{i-1/2}^+ = U_{i-1}$$

und analog rechts-extrapolierte Werte $U_{i+1/2}^-$ für negative Eigenwerte Λ^- mit

$$U_{i+1/2}^- = U_{i+1} \quad , \quad U_{i-1/2}^- = U_i$$

Mit diesen Definitionen U^\pm wird der numerische Fluß für die Zellwand $i + 1/2$

$$\tilde{F}_{i+1/2} = F^+(U_{i+1/2}^+) + F^-(U_{i+1/2}^-)$$

Wegen der Nichtlinearität der Flußfunktionen sind wiederum verschiedene konsistente Aufspaltungen des Flußvektors möglich.

Das Konzept von Steger und Warming für Flux-Vector Splitting nutzt direkt die oben angegebene konservative Rücktransformation aus. Man erhält die aufgespaltenen Flüsse aus

$$F^\pm(U) = A^\pm U = R\Lambda^\pm R^{-1} RW$$

Hierbei werden die positiven und negativen Eigenwerte wie folgt definiert:

$$\Lambda^\pm = \frac{1}{2} (\Lambda \pm |\Lambda|)$$

Die Beziehungen für die Flüsse F^\pm können somit aus entsprechenden Matrix- und Vektormultiplikationen berechnet werden. Da dieses Konzept von Steger und Warming in der Literatur nicht so oft angewendet wird, werden Details hier nicht aufgeführt.

Steger, J.L., Warming, R.F.: Flux-vector splitting of the inviscid gas dynamic equations with applications to finite-difference methods. J. Comp. Phys., vol 40, pp 263-293, (1981)

Das Konzept von van Leer für Flux-Vector Splitting wird wesentlich häufiger zur Lösung der Euler Gleichungen benutzt.

van Leer, B.: *Flux-vector splitting for the Euler equations. Lecture Notes in Physics vol. 170, pp. 507-512, (1982).*

Die aufgespaltenen Flüsse F^\pm werden hierbei durch einen Polynomansatz für die Machzahl $Ma = \frac{u}{a}$ approximiert. Als wesentliche Forderungen werden berücksichtigt, daß die Eigenwerte der entsprechenden Jacobi-Matrizen $\frac{\partial F^+}{\partial U}$ positiv, bzw. für $\frac{\partial F^-}{\partial U}$ negativ sind, daß der Gesamtfluß erhalten bleibt ($F = F^+ + F^-$) und daß ein stetiger Übergang für F^+ und F^- bei der Machzahl $Ma = \frac{u}{a} = \pm 1$ gegeben ist. Anwendungen haben gezeigt, daß mit diesem Konzept effektive implizite Verfahren und gute Auflösung von Verdichtungsstößen erreicht werden können. Die Formulierung der Flüsse F^\pm wird im folgenden ohne Herleitung angegeben, wobei noch einige neuere Modifikation berücksichtigt wurden.

Schwane, R., Hänel, D.: *An implicit flux-vector splitting scheme for the computation of viscous hypersonic flow. AIAA-paper No. 89-0274, (1989).*

Die Flüsse für Unterschall $-a \leq u \leq a$ lauten:

$$\begin{aligned} F_1^\pm &= \pm 1/4\rho a(u/a \pm 1)^2 \\ F_2^\pm &= F_1^\pm \cdot (u + \frac{p}{\rho a}(-u/a \pm 2)) \quad \text{für } -a \leq u \leq a \\ F_3^\pm &= F_1^\pm \cdot H_t \end{aligned}$$

Für Überschall, d.h. $u > a$ bzw. $u < -a$ wird der Fluß nicht aufgespalten, da alle Eigenwerte gleiches Vorzeichen haben.

$$\begin{aligned} F^+ &= F \quad F^- = 0 \quad \text{für } u > a \\ F^+ &= 0 \quad F^- = F \quad \text{für } u < -a \end{aligned}$$

Die Schallgeschwindigkeit a ist hierbei $a = \sqrt{\kappa \frac{p}{\rho}}$ und $H_t = E + \frac{p}{\rho}$ ist die Totalenthalpie.

Eine Erweiterung auf höhere Genauigkeit des Upwindschema ist i.a. für eine genauere Beschreibung der Strömung in praktischen Rechnungen notwendig. Das Upwindschema mit Flux-Vector Splitting, wie oben beschrieben, verwendet nur drei Ortspunkte $i-1, i, i+1$ und ist somit nur erster Ordnung genau, $O(\Delta x)$. Das Schema ist somit sehr dissipativ.

Eine Verbesserung der Genauigkeit erzielt man jedoch dadurch, daß man die links- bzw. rechtsextrapolierten Werte $U_{i+1/2}^\pm$ nicht durch die direkten Nachbarwerte U_i und U_{i+1} ausdrückt, sondern diese mittels eines Polynoms über mehrere Stützstellen auf die Zellwand extrapoliert. Für ein Schema von 2. Ordnung genau genügt lineare Extrapolation der Variablen auf die Zellwand, für 3. Ordnung genau ist quadratische Extrapolation zu formulieren. Im allgemeinen setzt man für die links- bzw. rechtsextrapolierten Werte $U_{i+1/2}^\pm$ ein Polynom mit 4 Stützstellen an, d.h.

$$\begin{aligned} U_{i+1/2}^+ &= P^+(U_{i-2}, U_{i-1}, U_i, U_{i+1},) \\ U_{i+1/2}^- &= P^-(U_{i-1}, U_i, U_{i+1}, U_{i+2}) \end{aligned}$$

Ein häufig verwendeter Polynomansatz für Upwindverfahren wurde von *van Leer* angegeben (MUSCL extrapolation \Rightarrow Monotonic Upstream Schemes for Conservation Laws). *van Leer, B.: Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second-order sequel to Godunov's method. J. Comp. Phys. vol.32, pp.101-136, (1979).*

Dieser Ansatz wurde bereits in Kap. 6 aufgeführt. Für die konservativen Variablen U lautet dieser:

$$\begin{aligned}(U_{i+1/2}^+)^+ &= U_i + \frac{1}{4} \varphi_i \cdot [(1 + \kappa)(U_{i+1} - U_i) + (1 - \kappa)(U_i - U_{i-1})] \\ (U_{i+1/2}^-)^- &= U_{i+1} - \frac{1}{4} \varphi_{i+1} \cdot [(1 + \kappa)(U_{i+1} - U_i) + (1 - \kappa)(U_{i+2} - U_{i+1})]\end{aligned}$$

Mit diesen extrapolierten Werten wird der numerische Fluß formuliert.

$$\tilde{F}_{i+1/2} = F^+(U_{i+1/2}^+) + F^-(U_{i+1/2}^-)$$

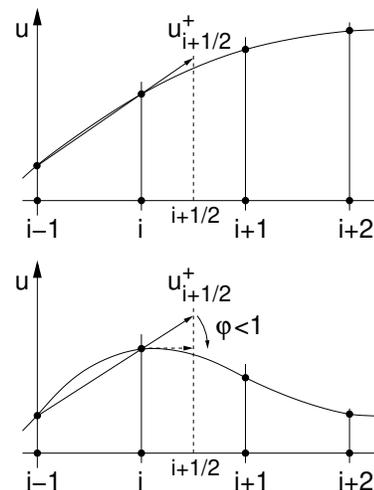
Mit Hilfe des Schaltparameter φ und des Diskretisierungsparameters κ kann das Schema variiert werden.

$$\begin{aligned}\varphi = 0 & \quad \Rightarrow \quad O(\Delta x) \quad \text{1. Ordnung upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = -1 & \Rightarrow O(\Delta x^2) \quad \text{voll upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = 0 & \Rightarrow O(\Delta x^2) \quad \text{"halb" upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = 1/3 & \Rightarrow O(\Delta x^3) \quad \text{"halb" upwind} \\ \varphi = 1 \quad \kappa = 1 & \Rightarrow O(\Delta x^2) \quad \text{zentral}\end{aligned}$$

Eine wichtige Rolle für Upwindschemata höherer Ordnung, insbesondere für die Auflösung von Stößen, spielt der Schaltparameter φ . Für $\varphi = 0$ ist das Schema von erster Ordnung und somit stark dissipativ, während für $\varphi = 1$ das Schema von höherer Ordnung genau ist. Diese Eigenschaft kann man durch Steuerung von φ ausnutzen, um numerische Schwingungen zu unterdrücken.

Bei starken Änderungen von U , z.B. in Nähe von Stößen, und vor allem in der Nähe von Extrema kann die Extrapolation von U^\pm zu Über- oder Unterschätzen des Zellwandwertes führen. Dies würde zu unerwünschten Schwingungen der numerischen Lösung führen. Um dieses zu vermeiden, wird die Extrapolation durch Verringerung des Schaltparameters φ begrenzt (limitiert). Deshalb bezeichnet man den Schaltparameter φ auch als Limitierfunktion φ_i (flux limiter, slope limiter). Die Limitierung der Extrapolation erfolgt lokal durch die Lösung selbst, indem die Limitierfunktion φ_i durch die Änderungen von U links und rechts vom Punkt i ausgedrückt wird.

$$\varphi_i = \varphi(U_{i+1} - U_i, U_i - U_{i-1})$$



Die Limiterfunktion φ_i in der obigen Definition variiert zwischen den Werten $\varphi = 0$ und $\varphi = 1$, d.h. zwischen einem Schema 1. Ordnung und einem mindestens 2. Ordnung. Ein Schema 1. Ordnung generiert eine numerische Dissipation $\sim U_{xx}$ und unterdrückt somit Schwingungen. Diese Dissipation unterstützt somit die geometrische Limitierung. Damit wird erreicht, daß in Gebieten starker Änderungen, z.B. bei einem Verdichtungsstoß, die Lösung glatt ist und außerhalb davon durch ein Schema höherer Genauigkeit bestimmt wird.

Die Limiterfunktion φ_i ist eine nichtlineare Funktion der Variablenänderungen. Die Formulierung der Abhängigkeit von den Änderungen kann mathematisch nach der Theorie monotoner (Differenzen-)Funktionen erfolgen. Besonders erfolgreich war hierbei die Annahme abnehmender Totalvariation (TVD = Total Variation Diminishing). Mit Hilfe dieser Theorien wurden wesentliche Grundlagen zur Entwicklung von hochauflösenden Differenzenschemata geschaffen.

(siehe Literatur von *Harten, Osher, Sweby usw.*)

Die rigorose Herleitung nach diesen Theorien ist zwar nur für skalare, eindimensionale Gleichungen möglich, ihre Übertragung auf Systeme und mehrdimensionale Gleichungen hat jedoch ebenfalls zu verbesserten Schemata geführt.

Als Beispiele von häufig verwendeten Limiterfunktionen φ_i , entwickelt aus der TVD Theorie, werden die Limiter nach *van Albada*, *van Leer* und nach *Roe* angegeben. Mit den Abkürzungen $\Delta^+ = U_{i+1} - U_i$ und $\Delta^- = U_i - U_{i-1}$ sind diese:

$$\begin{aligned}\varphi_i|_{Alb} &= \frac{2\Delta^+ \cdot \Delta^-}{(\Delta^+)^2 + (\Delta^-)^2} \\ \varphi_i|_{Roe} &= \begin{cases} \min\left(\left|\frac{2\Delta^+}{\Delta^+ + \Delta^-}\right|, \left|\frac{2\Delta^-}{\Delta^+ + \Delta^-}\right|, 1\right) \\ 0 \quad \text{falls } \text{sign}(\Delta^+) \neq \text{sign}(\Delta^-) \end{cases}\end{aligned}$$

Zusammenfassend sind für die Formulierung des hier beschriebenen Upwindverfahren mit Flux-Vector Splitting die folgenden Schritte, ausgehend von einer bekannten Verteilung U_i , zu berechnen:

- Berechne Limiterfunktion φ_i
- Berechne die links- bzw. rechtsextrapolierten Werte $U_{i+1/2}^\pm$
- Berechne die aufgespaltenen Flüsse $F^\pm(U_{i+1/2}^\pm)$
- Berechne den numerischen Fluß $\tilde{F}_{i+1/2} = F^+(U_{i+1/2}^+) + F^-(U_{i+1/2}^-)$
und implementiere diesen in eine vorgebene Lösungsmethode.

Die Extrapolation kann anstatt mit konservativen Variablen auch mit einem anderen Satz von Variablen, wie z.B. mit ρ, u, p , durchgeführt werden.

Die hier angegebene Formulierung zeigt einen prinzipiellen Weg, verschiedene weitere Varianten für Flux-Vector Splitting können in der Literatur gefunden werden.

Flux-Difference Splitting

Das Konzept des Flux-Difference Splitting wurde ursprünglich von *Roe* formuliert in:
Roe, P.L.: Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes. J. Comp. Phys., Vol.43 (1981).

Im Unterschied zum Flux-Vector Konzept wird bei diesem Konzept der numerische Fluß aufgespalten in einen zentral formulierten Flußanteil plus einem Upwindterm. Der Upwindterm wird zum zentralen Fluß hinzu addiert, so daß mit zunehmendem Wert der Charakteristik der numerische Fluß zu einer einseitigen Upwindformulierung wird. Gleichzeitig dient der Upwindterm als Dämpfungsterm, um die bei zentralen Differenzen auftretenden numerischen Schwingungen zu dämpfen.

Ausgangspunkt für die Herleitung dieses Konzeptes ist die diskretisierte, charakteristische Form der Euler Gleichung

$$\frac{\Delta W_i}{\Delta t} + \Lambda^+ \frac{W_i - W_{i-1}}{\Delta x} + \Lambda^- \frac{W_{i+1} - W_i}{\Delta x} = 0$$

Die positiven und negativen Eigenwerte Λ^\pm werden ersetzt durch

$$\Lambda^\pm = \frac{1}{2} (\Lambda \pm |\Lambda|)$$

Nach Umformung ergibt sich folgende Differenzgleichung:

$$\frac{\Delta W_i}{\Delta t} + \frac{1}{2} \Lambda \frac{(W_{i+1} + W_i) - (W_i + W_{i-1})}{\Delta x} - \frac{1}{2} |\Lambda| \frac{(W_{i+1} - W_i) - (W_i - W_{i-1})}{\Delta x} = 0$$

Die erste Ortsdifferenz entspricht einer Zentraldifferenz, die zweite Differenz ist der Upwindterm. Für $\Lambda > 0$ ergibt sich insgesamt eine Rückwärtsdifferenz, für $\Lambda < 0$ eine Vorwärtsdifferenz.

Die konservative Form

$$\frac{\Delta U_i}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}}{\Delta x} = 0$$

erhält man wiederum mittels linksseitiger Multiplikation mit der Eigenvektormatrix R . Der numerische Fluß ergibt sich dann zu

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (F(U_i) + F(U_{i+1})) - \frac{1}{2} |A(\bar{U}_{i+1/2})| (U_{i+1} - U_i)$$

Die Matrix $|A|$ entspricht in ihrer Struktur der Jacobi-Matrix $A = \frac{\partial F}{\partial U} = R\Lambda R^{-1}$, jedoch gebildet mit den Absolutwerten der Eigenwerte, d.h.:

$$|A| = R |\Lambda| R^{-1}$$

Diese Matrix ist am Ort der Zellwand $i+1/2$ zu formulieren. Sie wird deshalb aus Mittelwerten $\bar{U}_{i+1/2} = \bar{U}(U_i, U_{i+1})$ gebildet. Es kann hierbei das arithmetische Mittel $\bar{U}_{i+1/2} = \frac{U_i + U_{i+1}}{2}$ verwendet werden. Bessere Stoßauflösung wird jedoch mit einer Mittelung nach *Roe* erzielt. Die Mittelwerte werden dabei so bestimmt, daß bei einem stationären Stoß zwischen den

Punkten i und $i + 1$ die Mittelwerte \bar{U} gerade die Stoßbedingungen erfüllen. Damit wird $\bar{U}_{i+1/2}$ so bestimmt, daß gilt

$$A(\bar{U}_{i+1/2}) \cdot (U_{i+1} - U_i) = F_{i+1} - F_i$$

Hieraus ergeben sich die Mittelwerte der Geschwindigkeit \bar{u} und der Totalenthalpie \bar{H}_t zu

$$\bar{u}_{i+1/2} = \frac{D u_{i+1} + u_i}{D + 1} \quad , \quad \bar{H}_{ti+1/2} = \frac{D H_{ti+1} + H_{ti}}{D + 1} \quad , \quad D = \sqrt{\rho_{i+1} / \rho_i}$$

Mit $H_t = \frac{\kappa p}{(\kappa-1)\rho} + \frac{1}{2}u^2$ und $a^2 = \kappa \frac{p}{\rho}$ erhält man alle nötigen Werte zur Berechnung von $|A|$.

Ein Problem bei der Formulierung des numerischen Flusses tritt dann auf, wenn ein Eigenwert λ der Upwindmatrix $|A|$ gegen Null geht. Damit verschwindet für diesen Eigenwert ein Anteil des Upwindtermes $|A|\Delta U$ und die Differenzgleichung wird für diesen Anteil nicht-dissipativ, da nur die zentrale Differenz übrigbleibt. In diesem Falle ist die Richtung der Entropieänderung über eine Diskontinuität nicht festgelegt, wodurch unphysikalische Lösungen, z.B. Expansionsstöße auftreten können. Numerisch können durch den fehlenden Anteil im Upwindterm außerdem Schwingungen auftreten. Hinzu kommt, daß die Elemente $|\lambda_k|$ der Diagonalmatrix $|\Lambda|$ bei $\lambda_k = 0$ nicht differenzierbar sind, wodurch die Konvergenz insbesondere der impliziten Verfahren verschlechtert wird. Aus diesen Gründen ersetzt man die Matrix $|\Lambda|$ bei der Bestimmung von $|A|$ i.a. durch eine genäherte Diagonalmatrix $Q(\lambda)$, die bei $\lambda_k = 0$ nicht verschwindet und differenzierbar bleibt. Ein Beispiel einer solchen Matrix mit einer Verfahrenskonstante, dem sogenannten Entropiekorrekturfaktor $\delta = O(10^{-1})$, ist:

$$|\Lambda| \rightarrow Q(\lambda) = \text{diag} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{2}(\frac{\lambda^2}{\delta} + \delta) & |\lambda| < \delta \\ |\lambda| & |\lambda| \geq \delta \end{array} \right.$$

Mit dieser Funktion wird die Upwindmatrix $|A|$ gebildet, d.h.

$$|A| = R Q(\lambda) R^{-1}$$

Der numerische Fluß $\tilde{F}_{i+1/2}$ für das Flux-Difference Splitting führt in der hier beschriebenen Form auf ein Upwindschema 1. Ordnung, wie sofort aus der Anzahl der benutzten Stützpunkte, nämlich nur drei, zu erkennen ist.

Eine Erweiterung auf höhere Genauigkeit ist für Anwendungen notwendig.

Die MUSCL-Extrapolation, wie beim Flux-Vector Splitting gezeigt, ist eine Möglichkeit dazu. Hierbei ersetzt man die Werte U_i und U_{i+1} im numerischen Fluß durch die links- bzw. rechtsextrapolierten Werte $U_{i+1/2}^+$ und $U_{i+1/2}^-$ nach der vorn angegebenen Extrapolationsvorschrift. Damit wird der numerische Fluß des Flux-Difference Splitting

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(F(U_{i+1/2}^+) + F(U_{i+1/2}^-)) - \frac{1}{2}|A(\bar{U}_{i+1/2})|(U_{i+1/2}^- - U_{i+1/2}^+)$$

Der modifizierte Flußansatz nach Harten (modified flux approach) ist eine andere Möglichkeit, die Genauigkeit des Schemas zu erhöhen. Dieser Ansatz wird für das Flux-Difference Splitting meist verwendet.

Harten, A.: On a Class of High Resolution Total-Variation-Stable Finite-Difference Schemes. SIAM J. Numer. Anal., Vol.21 (1983).

In dem modifizierten Flußansatz wird zu dem bestehenden numerischen Fluß von 1. Ordnung ein zusätzlicher Flußterm $g_{i+1/2}$ hinzugefügt.

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(F(U_i) + F(U_{i+1})) - \frac{1}{2}|A(\bar{U}_{i+1/2})|(U_{i+1} - U_i) + g_{i+1/2}$$

Dieser Flußterm $g_{i+1/2}$ wird so gewählt, daß der Upwindterm 1. Ordnung in Gebieten glatter, kontinuierlicher Lösungen nahezu kompensiert wird, so daß das Schema von 2. Ordnung genau wird. In Nähe von Stößen jedoch, wo Upwinddifferenzen und erhöhte numerische Dissipation für eine bessere Auflösung der Stöße benötigt werden, soll der Flußterm $g_{i+1/2}$ verschwinden, so daß das ursprüngliche Upwindschema 1. Ordnung dort erhalten bleibt. Die prinzipielle Forderung für den zusätzlichen Flußterm ist demnach:

$$\begin{array}{llll} g_{i+1/2} \rightarrow \frac{1}{2}|A|_{i+1/2}(U_{i+1} - U_i) & \rightarrow & \text{in glatten Gebieten} & O(\Delta x^2) \\ g_{i+1/2} \rightarrow 0 & \rightarrow & \text{bei Extrema, Stöße} & O(\Delta x) \end{array}$$

Die Steuerung des Flußterms $g_{i+1/2}$ geschieht durch eine Limiterfunktion φ , wie sie bereits für das Flux-Vector Splitting beschrieben wurde.

In einer stark vereinfachten Form läßt sich der Flußterms $g_{i+1/2}$ wie folgt formulieren:

$$g_{i+1/2} = \varphi_{i+1/2} \cdot \frac{1}{2}|A|_{i+1/2} \Delta^+ Q_i \quad 0 \leq \varphi \leq 1$$

Beispiele für die Limiterfunktion φ sind für Flux-Vector Splitting angegeben. Bei starken Änderungen der Variablen (Extrema, Stöße) geht φ gegen Null, während bei geringen Änderungen φ nahe Eins ist.

Die hier aufgezeigte, vereinfachte Form zeigt das wesentliche Prinzip für den modifizierten Flußansatz in Flux-Difference Verfahren höherer Ordnung. In Anwendungen sind noch Verfeinerungen des Konzeptes nötig. Eine Darstellung verschiedener Formulierungen dieses Konzeptes kann z.B. gefunden werden in:

Yee, H. C., Warming, R.F., Harten A.: Implicit Total Variation Diminishing (TVD) Schemes for Steady-State Calculations. J. of Comput. Physics, vol 57, pp 327-360, (1985).

Yee, H. C.: A Class of High-Resolution Explicit and Implicit Shock-Capturing Methods. Lecture Series 1989-04, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode-St-Genese, Belgium, (1989).

2.4.3 Zeitdiskretisierung (Lösungsmethoden)

In dem vorigen Abschnitt wurde die Ortsdiskretisierung der Flüsse betrachtet und in der allgemeinen konservativen Differenzengleichung für die numerische Flußfunktion dargestellt. Diese Gleichung ist der Ausgangspunkt für die verschiedenen Lösungsverfahren, die durch die Diskretisierung in der Zeit festgelegt werden. Diese Verfahren unterscheiden sich im wesentlichen durch die Diskretisierung der Zeitableitung U_t und durch die Zeitebene auf der die Ortsdiskretisierungen durchgeführt wird (z.B. implizit, explizit).

Man kann hierbei zwischen Verfahren unterscheiden, bei denen die Ortsdiskretisierung abhängig bzw. unabhängig von der Zeitdiskretisierung ist. Besteht eine Abhängigkeit, dann ist die stationäre Lösung noch vom gewählten Zeitschritt abhängig. Ein Beispiel hierfür ist das Mac Cormack Verfahren (Lax-Wendroff Methode). Diese Abhängigkeit ist oft ein Nachteil, deshalb werden meist Verfahren verwendet mit unabhängiger Zeit- und Ortsdiskretisierung. Vorteile sind: vom Zeitschritt unabhängige stationäre Lösungen, mögliche Konvergenzverbesserung durch iterative Verfahren bei stationären Lösungen und getrennte Behandlung von Orts- und Zeitdiskretisierung. Beispiele hierzu, die im folgenden diskutiert werden, sind das explizite Runge-Kutta Verfahren und implizite Verfahren in Korrekturschreibweise.

Prädiktor-Korrektor-Schema nach Mac Cormack, 1969

Das Mac Cormack-Verfahren ist ein Beispiel von Verfahren, bei denen Zeitdiskretisierung und Ortsdiskretisierung nicht unabhängig voneinander sind.

Das Prädiktor-Korrektor-Schema nach Mac Cormack war eines der ersten erfolgreichen Schemata zur Lösung der Navier-Stokes und Euler Gleichungen und ist auch zur Zeit ein noch häufig verwendetes Verfahren. Für skalare Gleichungen besitzt dieses Verfahren die gleichen Eigenschaften wie das Lax-Wendroff-Verfahren (siehe Kapitel 6). Es entspricht somit einem zentralen, expliziten Verfahren der Genauigkeit $0(\Delta t^2, \Delta x^2)$.

Für die Euler-Gleichungen $U_t + F_x = 0$ lautet das Zweischrittverfahren:

1. Schritt (Prädiktor):

$$\tilde{U}_i = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F(U_i) - F(U_{i-1}))$$

2. Schritt (Korrektor-Schritt):

$$U_i^{n+1} = \frac{1}{2} (\tilde{U}_i + U_i^n) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} (F(\tilde{U}_{i+1}) - F(\tilde{U}_i))$$

Hierbei ist \tilde{U}_i eine Zwischenvariable, die zeitlich zwischen t_n und t_{n+1} liegt. Da das Schema zu einer zentralen Formulierung führt, müssen i.a. Dämpfungsterme für die Hochfrequenzdämpfung und für Verdichtungsstöße hinzugefügt werden. Dieses kann z.B. in einem dritten Schritt erfolgen. Nimmt man die Variablen U_i^{n+1} aus dem Korrekturschritt als vorläufige Variable $\tilde{\tilde{U}}_i$ an, so lautet der dritte Schritt:

3. Schritt (Dämpfung):

$$U_i^{n+1} = \tilde{U}_i - D^{(4)}(\tilde{U}) + D^{(2)}(\tilde{U})$$

Die Dämpfungsterme vierter und zweiter Ordnung entsprechen den vorn definierten Termen.

Das Verfahren ist entsprechend der linearen Stabilitätsanalyse stabil für

$$C = (|u| + a) \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

In der Praxis werden Werte von C von etwas kleiner 1 benutzt.

Das Verfahren kann ohne weitere Änderung auch auf mehrdimensionale Probleme erweitert werden, indem man die Flüsse und auch die Dämpfungsterme in den anderen Koordinatenrichtungen in entsprechender Weise hinzufügt.

Das Mac Cormack-Verfahren ist ein effektives und einfaches Verfahren für instationäre Probleme. Ein Nachteil besteht bei stationären Lösungen, da bei diesem Verfahren Zeitdiskretisierung und Ortsdiskretisierung gekoppelt sind, so daß diese noch vom Zeitschritt abhängen. Setzt man den Prädiktorschritt in den Korrektorschritt ein und nimmt konstante Jacobi-Matrizen A an, so erhält man näherungsweise das Einschritt-Lax-Wendroff Verfahren:

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{\Delta t}{2} A \frac{F_{i-1} - 2F_i + F_{i+1}}{\Delta x^2} = 0$$

Wie man leicht sieht, hängt somit die stationäre Lösung, d.h. wenn $U_i^{n+1} = U_i^n$, noch vom Zeitschritt Δt ab. Dies kann zu Genauigkeitsproblemen bei stationären Lösungen führen.

Runge-Kutta Mehrschrittschema

Das Runge-Kutta Mehrschrittschema ist das z.Z. vielleicht meist verwendete explizite Verfahren zur Lösung der Erhaltungsgleichungen kompressibler Medien. Eine der ersten Anwendungen dieses Verfahrens auf die Euler Gleichungen wurde veröffentlicht in:

A. Jameson, W. Schmidt, E. Turkel: Numerical Solutions of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes. AIAA paper AIAA-81-1259, 1981

Das Runge-Kutta Verfahren ist mit einigen Modifikationen sehr flexibel anwendbar, aus der Literatur sind Anwendungen bekannt für die ein- und mehrdimensionalen Euler und Navier-Stokes Gleichungen mit zentraler oder Upwinddiskretisierung und für stationäre und auch zeitgenaue Lösungen.

Das Verfahren wurde bereits in Kap. 6 für skalare Gleichungen beschrieben. Für Systeme von Gleichungen kann es in gleicher Weise verwendet werden. Ausgangspunkt ist das konservative Differenzenschema, für das eine Lösung U^{n+1} zur Zeit t_{n+1} als Funktion der Anfangsbedingung U^n gesucht wird.

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}}{\Delta x} = 0$$

Hierbei sind $\tilde{F}_{i\pm 1/2}$ die zentral oder upwind-diskretisierten numerischen Flüsse. Als Abkürzung wird der Residuenvektor $Res_i(U)$ eingeführt, der die stationären Ortsoperatoren der einzelnen Gleichungen repräsentiert. Dieser kann auch aus mehrdimensionalen Anteilen bestehen. Für den eindimensionalen Fall ist das Residuum definiert zu:

$$Res_i(U) = \frac{\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}}{\Delta x}$$

Damit lautet die zu lösende Differenzgleichung:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = -Res_i(U)$$

Analog zu dem ursprünglichen Runge-Kutta Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen erfolgt die Integration für einen Zeitschritt Δt in mehreren expliziten Teilschritten, die durch den Schrittindex k gekennzeichnet sind. Zur Lösung partieller Differentialgleichungen der Strömungsmechanik hat sich wegen des minimalen Speicherbedarfs das folgende N -Schrittschema bewährt:

$$\begin{aligned} U_i^{(0)} &= U_i^n \\ U_i^{(1)} &= U_i^{(0)} - \alpha_1 \cdot \Delta t \cdot Res_i(U^{(0)}) \\ &\vdots \\ U_i^{(k-1)} &= U_i^{(0)} - \alpha_{k-1} \cdot \Delta t \cdot Res_i(U^{(k-2)}) \\ U_i^{(k)} &= U_i^{(0)} - \alpha_k \cdot \Delta t \cdot Res_i(U^{(k-1)}) \\ &\vdots \\ U_i^{n+1} &= U_i^{(N)} \end{aligned}$$

Die Anzahl der Schritte N wird i.a. zwischen 3 und 5 gewählt. Die Koeffizienten ($\alpha_k \leq 1$) können so bestimmt werden, daß der Abbruchfehler in der Zeit minimal ist, d.h. daß größte Zeitgenauigkeit von der Ordnung $O(\Delta t^N)$ erreicht wird. Aus einer Taylorreihenentwicklung erhält man dafür

$$\alpha_k = \frac{1}{N - k + 1} \quad \text{mit} \quad k = 1, 2, \dots, N$$

Eine andere Möglichkeit ist es, die Koeffizienten für maximalen, stabilen Zeitschritt zu optimieren. Die theoretisch erreichbare Stabilitätsgrenze ist dabei

$$C_{max} = \min_i \left((|u_i| + a) \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \right) = N - 1$$

Ein typischer Satz von bewährten Koeffizienten für ein 5-Schritt Schema $O(\Delta t^2)$ mit zentralen Differenzen ist:

$$\alpha_k = 0.25, 0.166, 0.375, 0.5, 1 \quad \text{für} \quad C_{max} = 4$$

und für Upwinddifferenzen

$$\alpha_k = .059, .14, .273, .5, 1. \quad \text{für} \quad C_{max} = 3.5$$

Mit dem angegebenen Algorithmus und entsprechenden Koeffizienten kann die explizite Lösung für zeitgenaue wie auch asymptotisch stationäre Probleme erfolgen.

Für stationäre Probleme ist die Begrenzung des Zeitschrittes Δt bzw. der Courantzahl C infolge numerischer Instabilitäten uneffektiv. Da jedoch hierfür Zeitgenauigkeit des Verfahrens nicht gefordert wird, kann durch eine künstliche Beschleunigung des Verfahrens die Konvergenzgeschwindigkeit zur stationären Lösung hin vergrößert werden. Zwei wichtige Möglichkeiten hierzu werden im folgenden aufgeführt.

Die Verwendung lokaler Zeitschritte erlaubt bei vorgegebener Courantzahl den maximal möglichen Zeitschritt für jeden Gitterpunkt. Während bei zeitgenauen Rechnungen ein einziger Zeitschritt, und zwar aus Stabilitätsgründen der kleinste im gesamten Integrationsbereich verwendet wird, ändert sich bei Verwendung lokaler Zeitschritte dieser von Ort zu Ort. Der Wert des Zeitschrittes ergibt sich aus dem lokalen Wert des Ortsschrittes und des maximalen Eigenwertes zu:

$$\Delta t_i = C \frac{\Delta x_i}{(|u| + a)_i}$$

Die Lösung im nichtstationären Zustand ist nicht mehr konsistent in der Zeit, die stationäre Lösung $Res(U) = 0$ wird jedoch durch den Zeitschritt nicht beeinflusst, da $U^{(k)}$ gegen U^{n+1} strebt. Da aber auf jedem Gitterpunkt die größtmögliche numerische Ausbreitungsgeschwindigkeit ausgenutzt wird, erhält man eine Beschleunigung der Rechnung für stationäre Lösungen bei lokaler Ausnutzung der Stabilitätsschranke eines expliziten Schemas. Der Vorteil ist besonders groß, wenn die Ortsschrittweiten stark variieren.

Die implizite Residuenglättung (implicit residual smoothing) erlaubt für stationäre Lösungen die Verwendung einer größeren Courantzahl C , als die durch die Stabilität vorgeschriebene Courantzahl C_{expl} . Die Idee ist hierbei, das in einem k -ten Runge-Kutta Schritt verwendete Residuum $Res(U^{(k)})$ implizit zu mitteln, so daß die numerische Ausbreitungsgeschwindigkeit vergrößert wird und die örtliche Verteilung des Residuums geglättet wird. Als einfache Glättungsvorschrift wird die implizit formulierte Diffusionsgleichung (Fouriergleichung) mit dem geglätteten Residuum \bar{Res}^k als Variable verwendet.

$$\bar{Res}_i^k - \varepsilon \left(\bar{Res}_{i-1}^k - 2\bar{Res}_i^k + \bar{Res}_{i+1}^k \right) = Res_i^{(k-1)}$$

Aus dem geglätteten Residuum \bar{Res}_i^k wird der neue Wert U^k in dem k -ten Runge-Kutta Schritt berechnet, d.h.

$$U_i^{(k)} = U_i^{(0)} - \alpha_k \cdot \Delta t \cdot \bar{Res}_i^k$$

Mit der Abkürzung $\delta_{xx} \bar{Res}_i^k = (\bar{Res}_{i-1}^k - 2\bar{Res}_i^k + \bar{Res}_{i+1}^k)$ kann der k -te Glättungs- und Runge-Kutta Schritt zusammen gefaßt werden zu:

$$\begin{aligned} (1 - \varepsilon \delta_{xx}) \Delta \bar{U}^k &= -\alpha_k \cdot \Delta t \cdot Res_i(U^{(k-1)}) \\ U_i^{(k)} &= U_i^{(0)} + \Delta \bar{U}_i^k \end{aligned}$$

Die Lösung des skalaren tridiagonalen Systems erfolgt mit dem Thomas-Algorithmus und beansprucht bei Systemen von Gleichungen einen relativ kleinen Anteil an der Rechenzeit. Der Glättungsparameter ε wird hierbei aus numerischen Gründen gewählt, so daß schnellste Konvergenz zum stationären Zustand erreicht wird. Eine Stabilitätsanalyse des Runge-Kutta Verfahrens mit Residuenglättung ergibt uneingeschränkte Stabilität für:

$$\varepsilon \geq \frac{1}{4} \left[\left(\frac{C}{C_{expl}} \right)^2 - 1 \right]$$

Günstige Konvergenz in praktischen Rechnungen wurden für Courantzahlen ca. zwei- bis dreimal größer, als ihr expliziter Wert C_{expl} und mit Werten für ε aus obiger Beziehung unter Annahme des Gleichheitszeichen erzielt. Die Glättung kann in jedem Runge-Kutta Schritt angewendet werden, für die Euler Gleichungen reicht jedoch oft Glättung in jedem 2. Schritt.

Anmerkung: Für mehrdimensionale Probleme wird die Glättung in jeder Richtung durchgeführt, z.B. in 2-D:

$$\begin{aligned}(1 - \varepsilon \delta_{xx}) \Delta \bar{U}^k &= -\alpha_k \cdot \Delta t \cdot Res_i(U^{(k-1)}) \\(1 - \varepsilon \delta_{yy}) \Delta \bar{U}^k &= \Delta \bar{U}^k \\U_i^{(k)} &= U_i^{(0)} + \Delta \bar{U}_i^k\end{aligned}$$

Implizite Schemata für die Euler-Gleichungen

In impliziten Schemata werden die Variablen der Ortsdifferenzen zu Unbekannten auf der neuen Zeitebene t_{n+1} Hierdurch entsteht ein im Ortsraum gekoppeltes Gleichungssystem. Die Lösungsmatrix kann direkt durch einen Eliminationsalgorithmus invertiert werden oder näherungsweise, bzw. iterativ gelöst werden. Der Vorteil impliziter Formulierung ist die im allgemeinen uneingeschränkte numerische Stabilität, wodurch große Zeitschritte gewählt werden können. In den meisten Fällen sind implizite Schemata der nichtlinearen Erhaltungsgleichungen wesentlich robuster gegenüber starken Änderungen des Strömungsfeldes, z.B. bei starken Stößen in hypersonischer Strömung. Als Nachteil steht dagegen ein wesentlich komplexerer Algorithmus und ein großer Rechenaufwand pro Zeitschritt zur Lösung des Gleichungssystems.

Die Vorgehensweise zur Entwicklung eines impliziten Schemas wurde bereits in einen vorhergehenden Kapitel für skalare Modellgleichungen gezeigt. Die implizite Lösung des Systems der konservativen Euler-Gleichungen erfolgt in analoger Weise. Im Unterschied zu skalaren Gleichungen tritt jedoch zusätzlich zu der Kopplung im Ortraum eine Kopplung der Variablen U zwischen den einzelnen Gleichungen des Systems auf. Diese Kopplung entsteht durch die Abhängigkeit der Flüsse $F = F(U)$ von den konservativen Variablen U . In einem impliziten Schema der Euler Gleichungen wird die Abhängigkeit des Flusses F von den Variablen U mittels der Jacobi-Matrizen der Flüsse berücksichtigt. Die Entwicklung von impliziten Schemata für solche Systeme soll im folgenden gezeigt werden.

Für die konservativ diskretisierten Euler-Gleichungen $U_t + F_x$ lautet der Ansatz eines impliziten Verfahrens mit einer Rückwärtsdifferenz $O(\Delta t)$ in der Zeit:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2}^{n+1} - \tilde{F}_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x} = 0$$

Der numerische Fluß $\tilde{F}_{i\pm 1/2}^{n+1} = \tilde{F}(U_{i\pm 1/2}^{n+1})$ ist eine Funktion der Unbekannten U^{n+1} der benachbarten Stützpunkte. Der numerische Fluß kann durch zentrale Formulierung einschließlich Dämpfungsterme oder durch Upwindformulierung definiert sein. Um ein Schema

in allgemeiner Form darzustellen, definiert man den Residuenvektor $Res(U)$, der den stationären Ortsoperator darstellt. Für obiges Schema ist das Residuum:

$$Res(U) = \frac{\tilde{F}_{i+1/2} - \tilde{F}_{i-1/2}}{\Delta x}$$

Damit läßt sich das implizite Schema wie folgt schreiben:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + Res(U^{n+1}) = 0$$

Um die Abhängigkeit des Residuums von U^{n+1} darzustellen, wird dieses in eine Taylor-Reihe um die Zeit t_n entwickelt.

$$Res(U^{n+1}) = Res(U^n) + \frac{\partial Res(U^n)}{\partial t} \Delta t + \dots$$

Die Zeitableitung des Residuums kann als zeitliche Entwicklung der Variablen U dargestellt werden:

$$\frac{\partial Res(U)}{\partial t} \Delta t = \frac{\partial Res(U)}{\partial U} \cdot \frac{\partial U}{\partial t} \Delta t = \frac{\partial Res(U)}{\partial U} (U^{n+1} - U^n) + \dots$$

Führt man noch die Definition der Korrekturvariablen $\Delta U^n \equiv U^{n+1} - U^n$ ein, so erhält man das implizite Schema zu:

$$\frac{\Delta U_i^n}{\Delta t} + \frac{\partial Res(U)}{\partial U} \cdot \Delta U = -Res(U^n)$$

Die Funktionalmatrix $\frac{\partial Res(U)}{\partial U}$ beschreibt die Abhängigkeit des Residuums von den konservativen Variablen U auf den einzelnen Stützpunkten. Entsprechend der Definition des Residuums setzt sich die Matrix aus den Anteilen der numerischen Flüsse zusammen.

$$\frac{\partial Res(U)}{\partial U} \Delta U^n = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\partial \tilde{F}_{i+1/2}}{\partial U} \Delta U_{i+1/2}^n - \frac{\partial \tilde{F}_{i-1/2}}{\partial U} \Delta U_{i-1/2}^n \right)$$

Die Anteile $\frac{\partial \tilde{F}}{\partial U}$ entsprechen den bekannten Jacobi-Matrizen der Flüsse nach den konservativen Variablen. Die Herleitung eines impliziten Verfahrens für die konservativen Euler-Gleichungen soll im folgenden anhand eines zentralen Schemas gezeigt werden.

Beispiel:

Der numerische Fluß für ein zentrales Schema ist:

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (F(U_i) + F(U_{i+1}))$$

Die Abhängigkeit des numerischen Flusses $\tilde{F}_{i+1/2} = \tilde{F}(U_i, U_{i+1})$ von U ergibt sich somit zu

$$\frac{\partial \tilde{F}_{i+1/2}}{\partial U} \Delta U^n = \frac{\partial \tilde{F}(U_i, U_{i+1})}{\partial (U_i, U_{i+1})} \Delta U^n =$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial F(U_i)}{\partial U_i} \Delta U_i^n + \frac{\partial F(U_{i+1})}{\partial U_{i+1}} \Delta U_{i+1}^n \right) = \frac{1}{2} \left(\bar{\bar{A}}_i \cdot \Delta U_i^n + \bar{\bar{A}}_{i+1} \cdot \Delta U_{i+1}^n \right)$$

Mit einer analogen Entwicklung für $\tilde{F}_{i-1/2}$ und mit der Definition des Residuums $Res(U) = \frac{1}{2\Delta x} (F(U_{i+1}) - F(U_{i-1}))$ erhält man das implizite Schema

$$\frac{\Delta U_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{2\Delta x} \left(\bar{\bar{A}}_{i+1} \cdot \Delta U_{i+1}^n - \bar{\bar{A}}_{i-1} \cdot \Delta U_{i-1}^n \right) = -Res(U^n)$$

Sortiert man die Unbekannten ΔU , so erhält man ein block-tridiagonales Gleichungssystem der Form

$$\bar{\bar{a}}_i \cdot \Delta U_{i-1}^n + \bar{\bar{b}}_i \cdot \Delta U_i^n + \bar{\bar{c}}_i \cdot \Delta U_{i+1}^n = -Res(U^n)$$

mit $\bar{\bar{a}}_i = -\frac{1}{2\Delta x} \bar{\bar{A}}_{i-1}$, $\bar{\bar{b}}_i = \frac{1}{\Delta t} \cdot I$, $\bar{\bar{c}}_i = \frac{1}{2\Delta x} \bar{\bar{A}}_{i+1}$

Dieses Gleichungssystem ist ähnlich dem für skalare Gleichungen, jedoch mit dem Unterschied, daß die Koeffizienten $\bar{\bar{a}}, \bar{\bar{b}}, \bar{\bar{c}}$ Blockmatrizen vom Rang der Jacobi-Matrizen $\bar{\bar{A}}$ (hier 3x3 Matrizen) sind. Die Auflösung des Gleichungssystems erfolgt mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren (Thomas-Algorithmus). Mit Hilfe eines Rekursionsansatzes

$$\Delta U_i^n = \bar{\bar{E}}_i \cdot \Delta U_{i+1}^n + \bar{\bar{F}}_i$$

erhält man die Rekursionsmatrix $\bar{\bar{E}}_i$ und den Vektor $\bar{\bar{F}}_i$ durch Einsetzen in das Schema.

$$\bar{\bar{E}}_i = (\bar{\bar{a}}_i \bar{\bar{E}}_{i-1} + \bar{\bar{b}}_i)^{-1} \cdot \bar{\bar{c}}_i \quad \text{und} \quad \bar{\bar{F}}_i = (\bar{\bar{a}}_i \bar{\bar{E}}_{i-1} + \bar{\bar{b}}_i)^{-1} \left(-Res(U^n) - \bar{\bar{a}}_i \cdot \bar{\bar{F}}_{i-1} \right)$$

Mit den Randbedingungen auf $i = 1$ können die Koeffizienten für $i = 2, 3, \dots, i_{max}$ bestimmt werden. Die neuen Variablen berechnet man mit den Randbedingungen auf $i = i_{max}$ zu

$$\begin{aligned} \Delta U_i^n &= \bar{\bar{E}}_i \cdot \Delta U_{i+1}^n + \bar{\bar{F}}_i \\ U_i^{n+1} &= U_i^n + \Delta U_i^n \end{aligned}$$

Dieses Beispiel zeigt das Prinzip der Lösung eines impliziten Schemas für Systeme von Differenzgleichungen.

Die Verwendung von Upwind-Schemata höherer Ordnung bzw. von zentralen Verfahren mit Dämpfer führt i.a. auf einen Ortsoperator, der durch Werte auf fünf Stützstellen gebildet wird, d.h. durch $U_{i-2}, U_{i-1}, U_i, U_{i+1}, U_{i+2}$. Damit folgt für das Residuum

$$Res(U) = Res(U_{i-2}, U_{i-1}, U_i, U_{i+1}, U_{i+2})$$

Analog zu der vorhergehenden Herleitung entsteht damit ein über fünf Variable gekoppeltes Gleichungssystem, ein sogenanntes penta-diagonales System

$$\bar{\bar{d}}_i \Delta U_{i-2} + \bar{\bar{a}}_i \Delta U_{i-1} + \bar{\bar{b}}_i \Delta U_i + \bar{\bar{c}}_i \Delta U_{i+1} + \bar{\bar{e}}_i \Delta U_{i+2} = -Res(U^n)$$

Die Auflösung eines solchen Systems kann ebenfalls mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren erfolgen und sollte für zeitgenaue Rechnungen auch durchgeführt werden. Der

Aufwand ist jedoch höher, als für ein tridiagonales System.

Für Probleme, bei denen Zeitgenauigkeit nicht erforderlich ist, wie z.B. für stationäre Lösungen, vereinfacht man deshalb oft den impliziten Operator (=linke Seite der impliziten Differenzgleichung). Dieses ist möglich, da die stationäre Lösung $Res(U^n) = 0$ sich dann einstellt, wenn die Korrekturvariablen ΔU^n verschwinden. Damit wird die stationäre Lösung unabhängig davon, auf welchem Wege das implizite Schema gegen $\Delta U^n = 0$ konvergiert. Eine häufig angewendete Näherung für den impliziten Operator ist es, die Ortsdifferenzen des impliziten Operators mit einem Schema erster Ordnung genau zu formulieren, jedoch die Ortsoperatoren im Residuum $Res(U^n)$, die die räumliche Genauigkeit der Lösung definieren, mittels Differenzen höherer Genauigkeit zu approximieren. Die Ortsoperatoren erster Ordnung für die linke Seite sind nur eine Funktion der Variablen auf den Punkten $i - 1, i, i + 1$, wodurch ein vereinfachtes tridiagonales Gleichungssystem der folgenden Form entsteht

$$\bar{a}_i \cdot \Delta U_{i-1}^n + \bar{b}_i \cdot \Delta U_i^n + \bar{c}_i \cdot \Delta U_{i+1}^n = -Res(U_{i-2}, U_{i-1}, U_i, U_{i+1}, U_{i+2},)$$

Ein Beispiel hierzu ist das vorn gezeigte implizite Schema für eine Zentralfdifferenz, jedoch mit den Dämpfungstermen $D^{(2)}$ und $D^{(4)}$, wie vorn beschrieben. Der numerische Fluß für das Residuum $Res(U)$ lautet dann:

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (F(U_i) + F(U_{i+1})) + d^{(4)}(U) + d^{(2)}(U)$$

Da der Dämpfungsterm $D^{(4)} = d_{i+1/2}^{(4)} - d_{i-1/2}^{(4)}$ die Werte auf fünf Gitterpunkte berücksichtigt, ersetzt man die Dämpfungsterme $D^{(4)}$ und $D^{(2)}$ für den impliziten Teil durch einen näherungsweisen Term $D_I^{(2)}$, so daß der Fluß für die Bildung des impliziten Operators vereinfacht wird:

$$(\tilde{F}_{i+1/2})_{impl} = \frac{1}{2} \left(F(U_i) + F(U_{i+1}) - \varepsilon_I \frac{1}{\Delta t} (U_{i+1} - U_i) \right)$$

Die Jacobi-Matrizen haben dann die Form:

$$\frac{\partial \tilde{F}_{i+1/2}}{\partial U} \Delta U = \frac{1}{2} \left(\bar{A}_i \cdot \Delta U_i + A_{i+1} \cdot \Delta U_{i+1} \right) - \varepsilon_I / \Delta t (\Delta U_{i+1} - \Delta U_i)$$

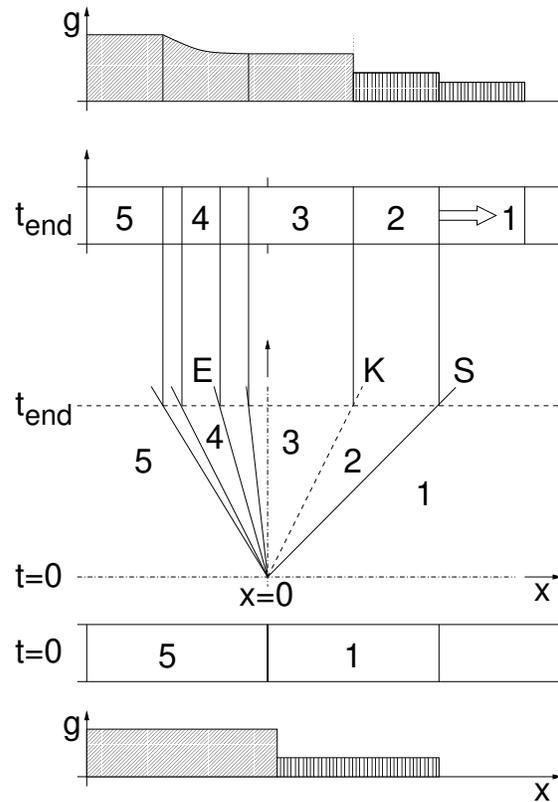
Entsprechend verfährt man mit Upwind-Verfahren. Das Residuum wird hierbei mit einer Upwinddiskretisierung höherer Ordnung formuliert, während für die Bildung des impliziten Operators das entsprechende Verfahren erster Ordnung verwendet wird.

Eine Erweiterung des impliziten Verfahrens für die Euler-Gleichungen in mehreren Dimensionen erfolgt meist näherungsweise, wie für die skalaren Gleichungen angegeben. Als wichtige Lösungsmethode wird für mehrdimensionale Gleichungen die Methode der angenäherten Faktorisierung und Iterationsverfahren nach dem Prinzip der Gauß-Seidel-Punkt- oder Linieniteration verwendet. Für Einzelheiten hierzu muß auf die Fachliteratur verwiesen werden.

2.4.4 Berechnung eines eindimensionalen Strömungsproblem – Stoßrohrströmung

Die numerische Berechnung der Strömung in einem Stoßwellenrohr wird oft als Testproblem zur Darstellung und dem Vergleich verschiedener Lösungsverfahren der Euler-Gleichungen verwendet. Dieses Testproblem beinhaltet wesentliche Strömungsvorgänge kompressibler, reibungsfreier Strömung, wie Stoßwellen, Kontaktdiskontinuitäten und Expansionswellen.

Das physikalische Problem umfaßt die Strömung und die Wellenvorgänge in einem Stoßwellenrohr. In einem geraden Rohr, das durch eine Membran getrennt ist, ist links der Membran der Hochdruckteil mit Gas vom Zustand (5) und rechts der Niederdruckteil mit Gas im Zustand (1) gefüllt. Nach dem Platzen der Membran läuft in den Niederdruckteil eine Stoßwelle S, gefolgt von der Kontaktdiskontinuität K, die die Trennfläche zwischen den beiden Gasen im Hoch- und Niederdruckteil bildet. Der Druck im Hochdruckteil wird durch eine instationäre Expansionswelle reduziert. Für die folgende Beispielrechnung wird angenommen, daß gleiche Gase im Hoch- und Niederdruckteil verwendet werden.



Die analytische Berechnung erfolgt bei vorgegebenen Zuständen (1) und (5) durch die Kopplung der Strömungszustände über den laufenden Verdichtungsstoß, über die Kontaktdiskontinuität und über die Expansionswelle bis zum Hochdruckteil.

Für den laufenden Stoß mit der Geschwindigkeit V_s gelten die Sprungbeziehungen $[H - V_s U]_1^2 = 0$. Nach Umformung der Sprungbeziehungen erhält man den Zustand (2) als Funktion der noch unbekanntenen Stoß-Mach-Zahl $M_s = \frac{v_s}{a_1}$ (Rankine-Hugoniot-Beziehung). Es ist z.B.:

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{2\kappa M_s^2 - (\kappa - 1)}{\kappa + 1}, \quad \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\kappa + 1) M_s^2}{2 + (\kappa - 1) M_s^2}, \quad \frac{u_2}{a_1} = \frac{2(M_s^2 - 1)}{(\kappa + 1) M_s}$$

Die Kontaktfläche läuft als Materialgrenze mit der Strömungsgeschwindigkeit u_2 . Aus der Sprungbedingung $[H - u_2 U]_2^3 = 0$ folgt konstanter Druck und Geschwindigkeit über der Kontaktfläche, d.h. $p_3 = p_2$ und $u_3 = u_2$. Alle anderen Größen ändern sich über der Diskontinuität in Abhängigkeit vom Anfangszustand.

Vom Zustand (3) hinter der Kontaktfläche bis zum Zustand (5) des Hochdruckteils ist die Strömung isentrop und die Totalenthalpie H_5 und H_3 sind gleich, d.h.

$$H_5 = c_p T_5 = H_3 = c_p T_3 + u_3^2/2 \quad , \quad \frac{p_5}{p_3} = \left(\frac{T_5}{T_3}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}} = \left(\frac{\rho_3}{\rho_5}\right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}$$

Durch Kopplung der einzelnen Beziehungen kann die Stoß-Mach-Zahl aus den Zuständen (1) und (5) berechnet werden. Für gleiches Gas ($\kappa_5 = \kappa_1 = \kappa$) erhält man die Stoßmachzahl M_S iterativ aus:

$$\frac{p_5}{p_1} = \left(1 + \frac{2\kappa}{\kappa + 1} (M_s^2 - 1)\right) / \left(1 - \frac{a_1}{a_5} \cdot \frac{M_s^2 - 1}{\frac{\kappa+1}{\kappa-1} M_s}\right)^{\frac{2\kappa}{\kappa-1}}$$

Damit können die Zustände (2) und (3) vollständig berechnet werden.

Innerhalb der instationären Expansionswelle, Zustand (4), bleibt Isentropie erhalten, jedoch nicht die Gleichheit der Totalenthalpie. Den Zustand in der Expansionswelle (4) berechnet man mit der Charakteristikentheorie. Die charakteristische Lösung (siehe Kap. 7) ist:

$$dp \pm \rho a du = 0 \quad \text{für} \quad \frac{dx}{dt} = u \pm a$$

Mit Hilfe der Isentropenbeziehung, $dp = a^2 d\rho$ und der Gasgleichung $p = \rho RT$ können diese Lösungen integriert werden. Man erhält:

$$\frac{2}{\kappa - 1} a \pm u = const \quad \text{für} \quad \frac{dx}{dt} = u \pm a$$

Die Charakteristiken $\frac{dx}{dt} = u - a$ bilden Strahlen mit der Gleichung $x - (u - a)t = 0$, die vom Ursprung der Membran ($t = 0, x = 0$) ausgehen und auf denen $\frac{2}{\kappa-1}(a - u) = const$ gilt. Diese Strahlen werden von den anderen Charakteristiken mit $\frac{dx}{dt} = u + a$ geschnitten, die alle von links aus dem Zustand (5) kommen. Für diese gilt:

$$\frac{2}{\kappa - 1} a + u = \frac{2}{\kappa - 1} \cdot a_5$$

Aus der Strahlengleichung $x - (u - a) \cdot t = 0$ erhält man damit die Zustände in der Expansionswelle, z.B.

$$\frac{u}{a_5} = \frac{2}{\kappa + 1} \left(1 + \frac{x}{a_5 t}\right) \quad , \quad \frac{a}{a_5} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \left(1 + \frac{x}{a_5 t}\right)$$

Die anderen Gasgrößen erhält man aus der Isentropenbeziehung. Die Grenzcharakteristiken der Expansionswelle sind links $x - a_5 t = 0$ und rechts $x - (u_3 - a_3)t = 0$.

Die numerische Lösung erfolgt für Anfangszustände, die einem Testproblem aus der Literatur entnommen wurde:

Yee, H. C.: A Class of High-Resolution Explicit and Implicit Shock-Capturing Methods. Lecture Series 1989-04, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode-St-Genese, Belgium, (1989).

Danach werden folgende Anfangsbedingungen bei $t = 0$ vorgeschrieben:

$$\begin{array}{llllll} x \leq 0 : & u_5 = 0 & \rho_5 = 1,4 \frac{kg}{m^3} & T_5 = 2438 \text{ K} & p_5 = 9,88 \cdot 10^5 \frac{N}{m^2} \\ x > 0 & u_1 = 0 & \rho_1 = 0,14 \frac{kg}{m^3} & T_1 = 2452 \text{ K} & p_1 = 9,93 \cdot 10^4 \frac{N}{m^2} \end{array}$$

Der Integrationsbereich beträgt $-7m \leq x \leq +7m$. Die numerische Auflösung erfolgt mit $imax = 141$ Punkten, hieraus ergibt sich eine konstante Schrittweite von $\Delta x = 0,1m$. Die Darstellung der Ergebnisse erfolgt nach einer Zeit $t_{end} = 4 \cdot 10^{-3} sec$. Zu dieser Zeit befinden sich Stoß und Expansionswelle gerade noch innerhalb des Integrationsbereiches.

Als Randbedingung wird links und rechts eine feste Wand angenommen. Für eine feste Wand gilt $u = 0$. Aus dem Impulssatz folgt daraus $p_x = 0$, was numerisch durch Ersetzen des Wandwertes durch den nächstinneren Punkt approximiert wird.

Der Zeitschritt Δt wird aus der Courant-Zahl C berechnet, die für die einzelnen Verfahren vorgegeben wird.

$$\Delta t = C \cdot \Delta x / \max_i |\lambda| \quad \text{mit} \quad \max_i |\lambda| = \max_i (|u| + a)$$

Die Lösung der Euler Gleichungen erfolgt mit verschiedenen, expliziten Verfahren, um einige typische Lösungseigenschaften zu demonstrieren.

Die folgenden Bilder zeigen Ergebnisse der numerischen Lösung der Euler Gleichungen für das Stoßrohrproblem, wie oben beschrieben. Die Kreise entsprechen dabei der numerischen Lösung auf den einzelnen Gitterpunkten, die durchgezogene Linie der exakten Lösung über der Lauflänge x zu der vorgegebenen Zeit t_{end} nach dem Platzen der Membran.

Die Abbildungen 2.4.1 a) bis d) zeigen jeweils Dichte, Druck, Mach-Zahl und Geschwindigkeit für das Stoßrohrproblem. Anhand dieser Größen erkennt man die typischen Wellenvorgänge, wie Expansionswelle, Kontaktfläche und Verdichtungsstoß. Zu erkennen ist auch, daß für Druck und Geschwindigkeit die Werte über der Kontaktfläche konstant bleiben. Die numerische Lösung wurde hierbei mit einem Runge-Kutta Verfahren bei einer Courantzahl von $C = 1.5$ ermittelt. Für die Ortsdiskretisierung wurde Flux-Vector Splitting mit Limiter nach van Albada, van Leer verwendet, in der Form wie weiter oben beschrieben.

In den folgenden Abbildungen 2.4.2 a) bis d) ist zur Darstellung der Lösungseigenschaften verschiedener Verfahren der Dichteverlauf dargestellt.

Die Abb. 2.4.2 a) zeigt die Lösung mit dem Lax-Keller Verfahren, als Beispiel eines Verfahrens erster Ordnung genau, $O(\Delta x, \Delta t)$ mit $C = 1$. Der Verlauf zeigt deutlich die Effekte zu hoher numerischer Zähigkeit, die zu Verschmieren der Diskontinuitäten führt.

In Abb. 2.4.2 b) und c) wurde das (zentrale) Mac Cormack Verfahren benutzt mit $C = 0.8$. Ohne Dämpfung zeigt dieses Verfahren sehr starke Schwingungen und in diesem Falle sogar instabil. Mit einem schwachen Stoß-Dämpfungsterm, $\varepsilon^{(2)} = 0.1$ in Abb. b) bleibt die Lösung stabil, zeigt jedoch noch merkbare Schwingungen. Mit stärkeren Dämpfer, $\varepsilon^{(2)} = 0.25$ und zusätzlicher Hochfrequenzdämpfung, $\varepsilon^{(4)} = 0.05$, ist die Lösung in Abb. c) glatter, jedoch noch nicht ganz schwingungsfrei. Diese Verläufe zeigen das typische Verhalten von zentralen Schemata, die bei Diskontinuitäten sorgfältiges Abstimmen der Dämpfungsterme erfordern.

Zum Vergleich ist in Abb. d) noch einmal die Lösung mit Flux-Vector Splitting und Limiter dargestellt. Der Verlauf der Lösung ist glatt und folgt sehr gut den Diskontinuitäten. Die gute Auflösung von Diskontinuitäten ist i.a. kennzeichnend für Upwindverfahren mit TVD Eigenschaften, wie die hier aufgeführten Beispiele von Flux-Vector Splitting und Flux-Difference Splitting. Der Rechenaufwand solcher Schemata ist jedoch um einiges höher, als für zentrale Schemata.

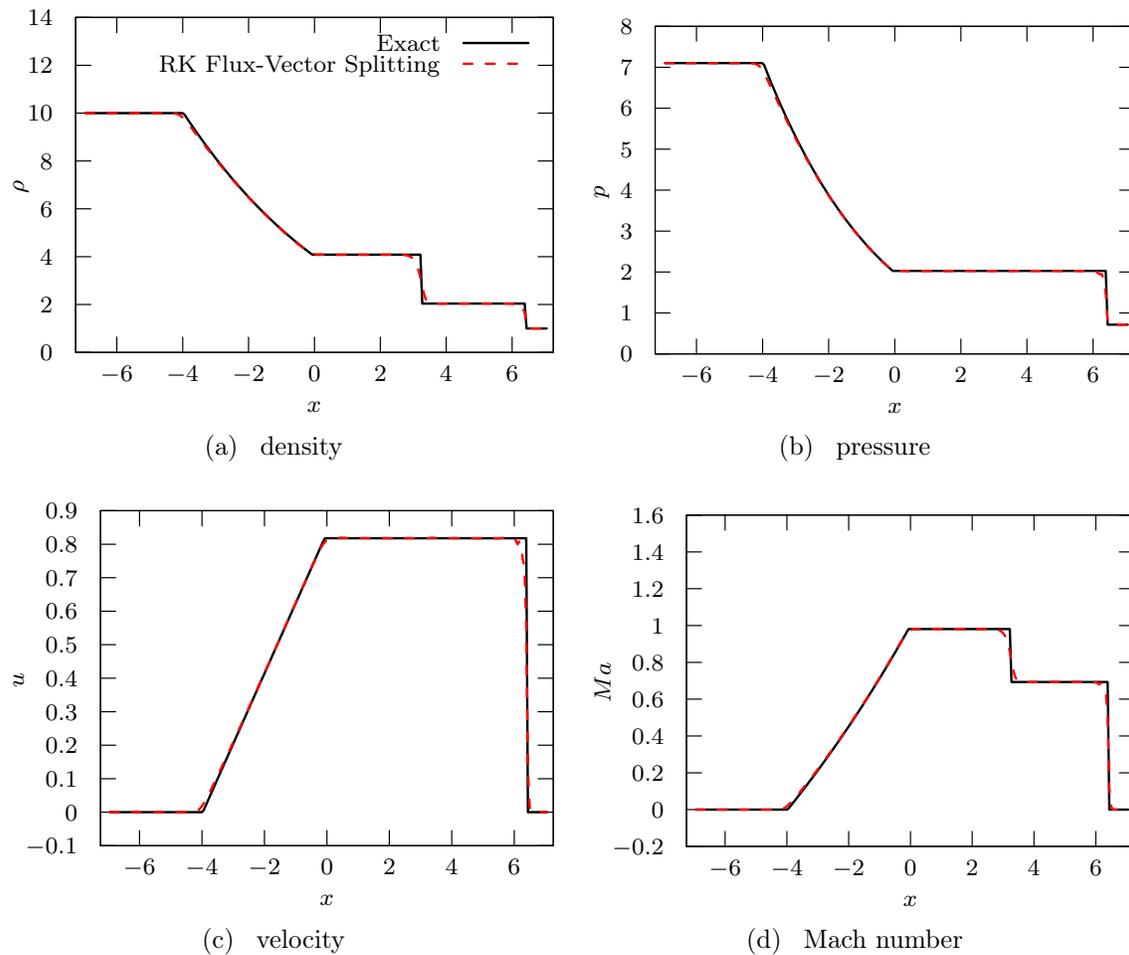
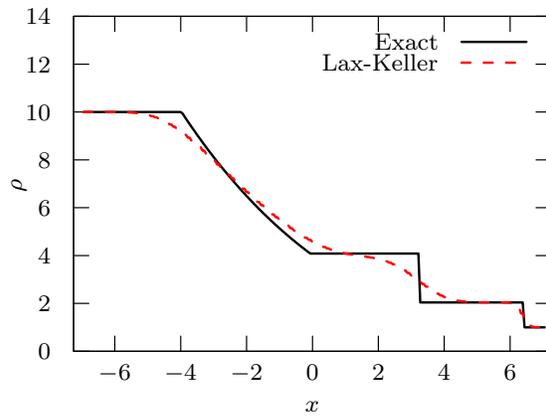
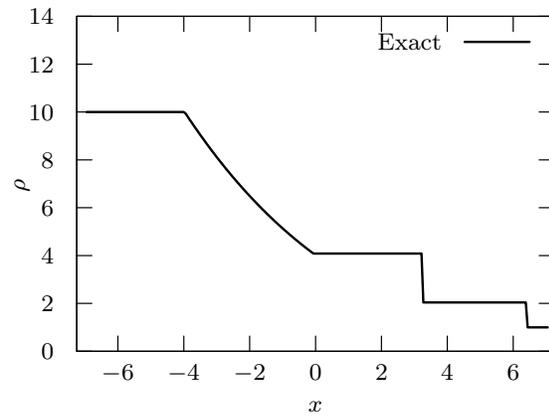


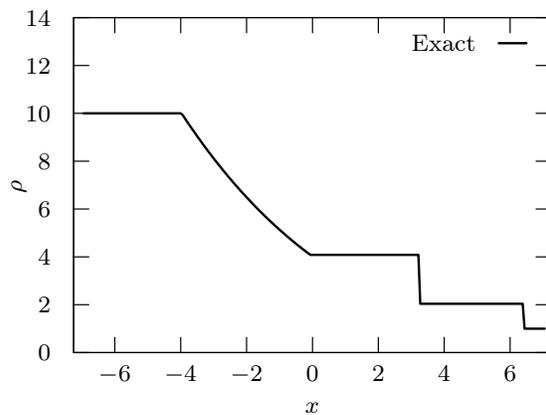
Abbildung 2.4.1: Lösung der Euler Gleichungen für das Stoßrohrproblem. Verlauf von Dichte, Druck, Mach-Zahl und Geschwindigkeit über der Lauflänge x zu einer Zeit t_{end} . Runge-Kutta Verfahren mit Flux-Vector Splitting und Limiter nach van Albada, van Leer.



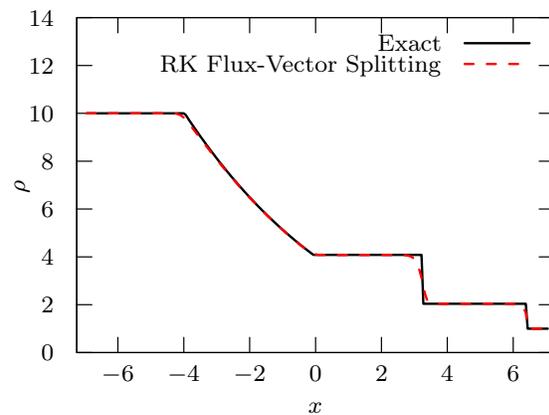
(a) Lax-Keller



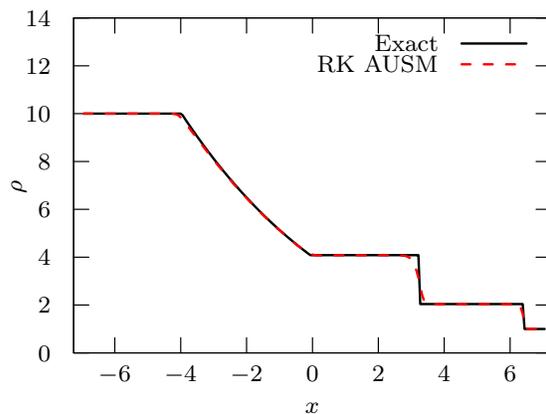
(b) MacCormack (weak damping)



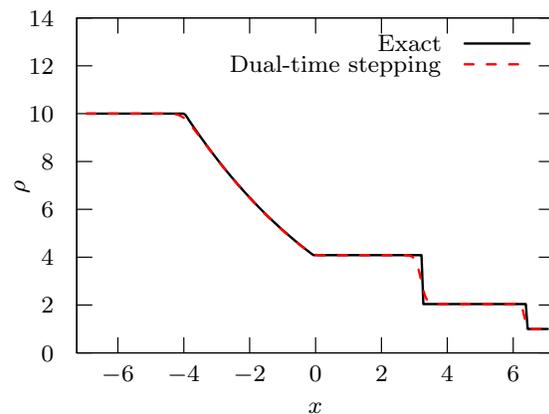
(c) MacCormack (strong damping)



(d) RK flux-vector splitting



(e) RK AUSM



(f) Dual-time stepping

Abbildung 2.4.2: Lösung der Euler Gleichungen für das Stoßrohrproblem. Verlauf der Dichte über der Lauflänge x nach einer Zeit t_{end} . a) Lax-Keller Verfahren mit $C = 1$. b) MacCormack Verfahren mit $C = 0.8$, $\varepsilon^{(2)} = 0.1$ c) MacCormack Verfahren mit $C = 0.8$, $\varepsilon^{(2)} = 0.25$, $\varepsilon^{(4)} = 0.05$ d) Runge-Kutta Verfahren mit Flux-Vector Splitting und Limiter nach van Albada, van Leer. e) Runge-Kutta Verfahren mit Advection Upstream Splitting Method (AUSM) f) Dual-Time Stepping Verfahren mit künstlicher Zeitableitung

2.4.5 Ortsdiskretisierung in mehreren Dimensionen

Die numerische Lösung der eindimensionalen Euler-Gleichungen, wie zuvor behandelt, bildet die Grundlage für die Lösung der Gleichungen in zwei und drei Dimensionen. In den meisten Verfahren hierfür wird in jeder Koordinatenrichtung eine quasi-eindimensionale Flußdiskretisierung formuliert, so daß sich ein mehrdimensionales Verfahren im Prinzip aus eindimensionalen Diskretisierungen zusammensetzt.

Die folgenden Betrachtungen beschränken sich der Einfachheit halber auf zwei Dimensionen im Ortsraum. Die Erweiterung auf drei Dimensionen kann i.a. analog dazu erfolgen. Die Euler-Gleichungen in allgemeiner Integral- bzw. Divergenzschreibweise sind:

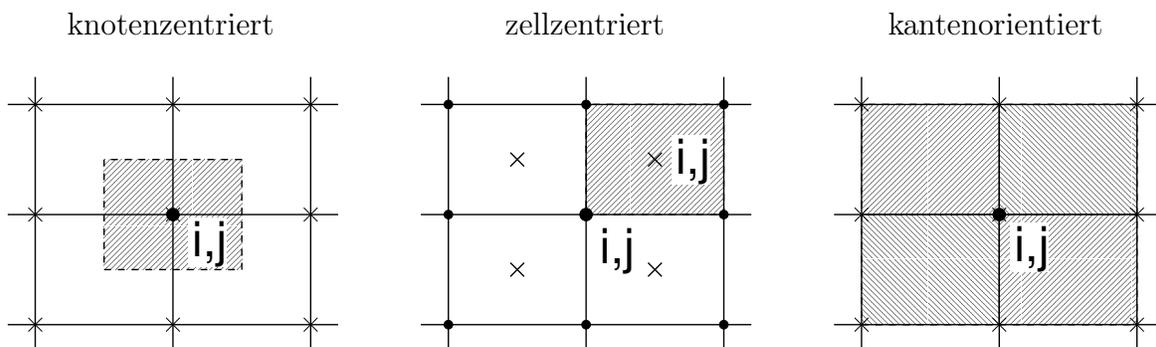
$$\int_{\tau} U_t d\tau + \oint_A \vec{H} \cdot \vec{n} dA = 0 \quad \text{bzw.} \quad U_t + \nabla \cdot \vec{H} = 0$$

Als Referenzsystem wird ein kartesisches, zweidimensionales Koordinatensystem x, y, t verwendet. Mit den kartesischen Komponenten des Flußvektors $\vec{H} = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$, des Nabla-Operators $\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}$ und des Vektors der Flächennormale $\vec{n} dA = \begin{pmatrix} dy \\ -dx \end{pmatrix}$ ergeben sich die Erhaltungsgleichungen in Integral- bzw. Divergenzschreibweise zu:

$$\int_{\tau} U_t d\tau + \oint_A F \cdot dy - \oint_A G \cdot dx = 0 \quad \text{bzw.} \quad U_t + F_x + G_y = 0$$

Beide Formen sind Ausgangspunkt konservativer Diskretisierung der Euler-Gleichungen. Die Formulierung des Erhaltungsprinzips für Masse, Impuls und Energie im diskreten Raum erfolgt an einem kleinen Kontrollvolumen $\tau = 0(\Delta x \cdot \Delta y)$ des Rechengitters.

Die Festlegung des Kontrollvolumens für ein vorgegebenes Gitter ist ein wesentlicher Punkt für die konservative Ortsdiskretisierung. In mehreren Dimensionen kann dieses auf verschiedene Art erfolgen. Die wichtigsten Anordnungen des Kontrollvolumens sind:



Bei der knotenzentrierten Anordnung (node-centered scheme) sind die Variablen U und die Ortskoordinaten (x, y) auf dem gleichen Gitterpunkt definiert. Die Berandungen des Kontrollvolumens werden jeweils in der Mitte zwischen zwei benachbarten Punkten gewählt.

In der zellzentrierten Anordnung (cell-centered scheme) sind nur die Ortskoordinaten auf den Gitterpunkten definiert. Die Variablen U werden im Zentrum der aus vier Gitterpunkten gebildeten Zelle angenommen. Die Indizierung der Variablen $U_{i,j}$ und der Geometrie

$x_{i,j}, y_{i,j}$ gilt dann nicht mehr für den gleichen Ort.

Die kantenorientierte Anordnung (cell-vertex scheme) setzt sich im Prinzip aus vier zellzentrierten Kontrollvolumen zur Berechnung der Werte $U_{i,j}$ im zentralen Punkt $x_{i,j}, y_{i,j}$ zusammen. Variable und Koordinaten sind im gleichen Gitterpunkt definiert.

Alle drei Anordnungen des Kontrollvolumens sind in der Literatur gebräuchlich. Sie unterscheiden sich bei der Formulierung der numerischen Flüsse und der Randbedingungen, ohne daß jedoch eine der Anordnungen wesentliche Nachteile oder Vorteile gegenüber der anderen hat. Die verschiedenen Kontrollvolumina können sowohl in kartesischen als auch in allgemeinen, krummlinigen Gitternetzen angesetzt werden. (Ähnliche Anordnungen gelten auch für triangulierte Gitter mit dreiecksförmigen Zellen. Die Formulierung hierfür überschreitet jedoch den Rahmen dieser Vorlesung.)

Für die folgenden Betrachtungen wird beispielhaft die knotenzentrierte Anordnung des Kontrollvolumens gewählt.

Ortsdiskretisierung in 2-D, kartesischen Gittern

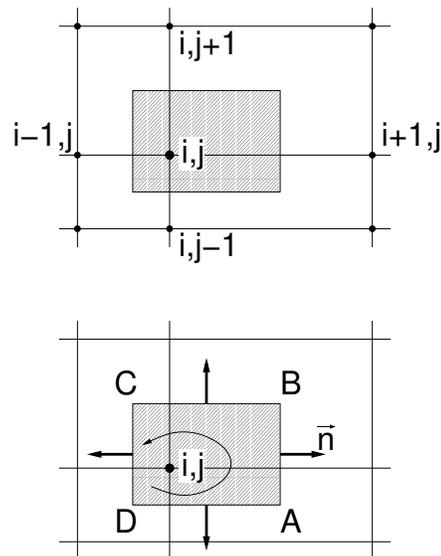
Für die Diskretisierung in einem kartesischen Ortsraum wählt man ein Gitternetz, dessen Punkte in den Achsenrichtungen orientiert sind. Die Indizierung sei $i = 1, 2, \dots, i_{max}$ für die x-Richtung und $j = 1, 2, \dots, j_{max}$ für die y-Richtung. Die Schrittweiten zwischen den Gitterpunkten werden nicht mehr als konstant vorausgesetzt.

Die Diskretisierung mittels der Integralform der Euler Gleichungen bietet eine physikalisch sehr einsichtige Art der Diskretisierung. Da hierbei das Erhaltungsprinzip direkt auf ein kleines, endliches Volumen τ angewendet wird, spricht man bei dieser Diskretisierung von der "Finiten Volumen-Methode".

Zur Formulierung der zeitlichen Änderung der konservativen Größen U im Volumen τ betrachtet man die Variablen $U_{i,j}$ als räumlich über τ gemittelte Größen. Für das Kontrollvolumen τ_{ABCD} ergibt sich

$$\int_{\tau} U_t d\tau \rightarrow \frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \cdot \tau_{ABCD}$$

Die zeitliche Änderung ist im Gleichgewicht mit den Flüssen normal über die Oberfläche von τ . Die Flüsse über eine Zellwand des Kontrollvolumens werden als stückweise konstant vorausgesetzt. Ihr Vorzeichen richtet sich nach dem Normalenvektor, der auswärts gerichtet



als positiv definiert wird. Für die vier Seiten des Kontrollvolumens ergibt das Flußintegral bei vorgegebenen mathematisch positiven Umlaufsinn

$$\oint \vec{H} \cdot \vec{n} dA \approx \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BC} + \hat{H}_{CD} + \hat{H}_{DA}$$

Für ein kartesisches Element vereinfacht sich diese Beziehung, da die Flächennormale jeweils mit einer Koordinatenrichtung zusammenfällt.

$$\oint_A F dy - \oint_A G dx \approx F_{AB} \Delta y_{AB} + F_{CD} \Delta y_{CD} - G_{BC} \Delta x_{BC} - G_{DA} \Delta x_{DA}$$

Entsprechend dem Umlaufsinn ist

$$\Delta y_{AB} = y_B - y_A \quad , \quad \Delta x_{BC} = x_C - x_B \quad , \dots$$

Damit lautet die diskretisierte Integralform der Euler-Gleichung

$$\frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \cdot \tau_{ABCD} + F_{AB} \Delta y_{AB} + F_{CD} \Delta y_{CD} - G_{BC} \Delta x_{BC} - G_{DA} \Delta x_{DA} = 0$$

Für die Formulierung eines Algorithmus ist es i.a. günstiger, die Indizierung mit i, j einzuführen. Damit wird:

$$\Delta x_i = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2} = \Delta x_{DA} = -\Delta x_{BC} \quad , \quad \Delta y_j = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2} = \Delta y_{AB} = -\Delta y_{CD}$$

$$\tau_{i,j} = \tau_{ABCD} = \Delta x_i \cdot \Delta y_j$$

$$\tilde{F}_{i+1/2,j} = F_{AB} \quad , \quad \tilde{F}_{i-1/2,j} = F_{CD}$$

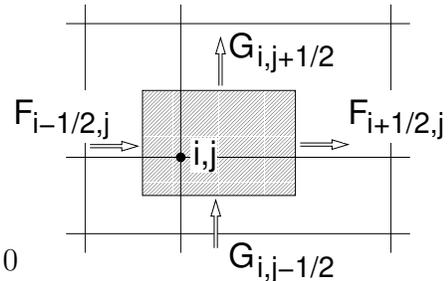
$$\tilde{G}_{i+1/2,j} = G_{BC} \quad , \quad \tilde{G}_{i,j-1/2} = G_{DA}$$

Mit diesen Beziehungen ergibt sich die Integralform zu:

$$\frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \Delta x_i \cdot \Delta y_j + \left(\tilde{F}_{i+1/2,j} - \tilde{F}_{i-1/2,j} \right) \Delta y_j + \left(\tilde{G}_{i,j+1/2} - \tilde{G}_{i,j-1/2} \right) \Delta x_i = 0$$

Für die Diskretisierung der Divergenzform ersetzt man die Ortsableitungen durch Differenzen der zunächst als bekannt vorausgesetzten numerischen Flüsse $\tilde{F}_{i\pm 1/2,j}$ und $\tilde{G}_{i,j\pm 1/2}$ an den Zellwänden. Damit ergibt sich die diskretisierte Form:

$$\frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2,j} - \tilde{F}_{i-1/2,j}}{\Delta x_i} + \frac{\tilde{G}_{i,j+1/2} - \tilde{G}_{i,j-1/2}}{\Delta y_j} = 0$$



Wegen der direkten Differenzenbildung wird diese Vorgehensweise oft als „Finite Differenzen Methode“ bezeichnet.

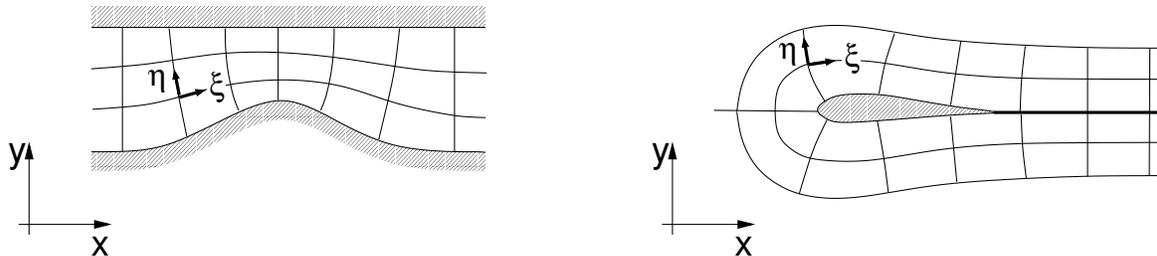
Die selbe Differenzenformulierung erhält man auch aus der oben diskretisierten Integralform durch Division von $\tau_{i,j} = \Delta x_i \cdot \Delta y_j$. Die diskretisierten Euler Gleichungen für zwei Dimensionen haben somit die gleiche Form, wie sie für eindimensionale Gleichungen hergeleitet wurde. Im Unterschied dazu müssen jedoch die numerischen Flußfunktionen $\tilde{F}_{i\pm 1/2,j}$ in x -Richtung und $\tilde{G}_{i,j\pm 1/2}$ in y -Richtung festgelegt werden. Dies erfolgt analog zum eindimensionalen Fall durch Interpolationspolynome in der betreffenden Richtung.

Als Beispiel ergibt sich der zentral diskretisierte Fluß mit künstlicher Dämpfung zu:

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{i+1/2,j} &= F\left(\frac{U_{i,j} + U_{i+1,j}}{2}\right) + d_x^{(4)}(U) - d_x^{(2)}(U) \\ \tilde{G}_{i,j+1/2} &= G\left(\frac{U_{i,j} + U_{i,j+1}}{2}\right) + d_y^{(4)}(U) - d_y^{(2)}(U)\end{aligned}$$

Die Dämpfungsterme $d_x(U)$ und $d_y(U)$ werden durch zweite und vierte Differenzen in x - bzw. y -Richtung ersetzt.

Ortsdiskretisierung in krummlinigen Gittern



Anwendungen der numerischen Strömungsmechanik erfordern meist die Berechnung der Strömung um gekrümmte Oberflächen, wie z.B. Tragflügelprofile, Turbinenschaufeln oder Rumpfe. Bei Verwendung kartesischer Gitter liegen die Oberflächenkonturen irgendwie zwischen den Gitterpunkten und die Diskretisierung der Randbedingungen erfordert Interpolationen, die zu Fehlern führen können. Deshalb verwendet man in den meisten Fällen Gitternetze, die an der Oberflächenkontur orientiert sind. Damit wird eine Gitterlinie, bzw. eine Gitterfläche in 3-D, identisch mit der Kontur. Entlang einer solcher Gitterlinie können die Randbedingungen eindeutig festgelegt werden. Diese konturorientierte Anordnung des Gitters führt im Inneren des Integrationsbereiches zu einer krummlinigen Gitteranordnung, die im allgemeinen auch noch nicht orthogonal ist.

Die grundsätzliche Vorgehensweise zur Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen in einem solchen krummlinigen Gitter wurde bereits mit der konservativen Diskretisierung in eindimensionalen und zweidimensionalen, kartesischen Gittern beschrieben.

Die Gitternetzgenerierung, d.h. die Verteilung der Gitterpunkte im Integrationsbereich ist im Vergleich zu kartesischen Gittern nicht mehr trivial, da durch die allgemeine, krumm-

linige Anordnung mehr Freiheitsgrade zur Anordnung der Netzknoten bestehen. Wesentlicher Grundsatz hierbei ist, daß der Diskretisierungsfehler für die Erhaltungsgleichungen und für die Randbedingungen klein gehalten werden. Einige Gesichtspunkte für die Anordnung eines Gitternetzes sind hierbei:

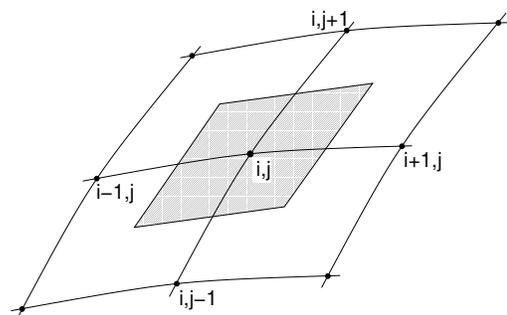
- Vorgegebene Randkonturen des Integrationsbereiches müssen geometrisch korrekt erfaßt werden.
- In Gebieten starker Änderungen der Variablen, z.B. am Rand oder in Nähe eines Stoßes, soll die Gitterpunktanordnung dichter sein.
- Die Schrittweiten zwischen den einzelnen Gitterlinien sollen sich jedoch nur schwach ändern, größere Änderungen führen zu größeren Diskretisierungsfehlern.
- Die Gitterzellen sollen nicht zu stark verzerrt sein, da der Winkel zwischen zwei Zellwänden sich ebenfalls auf den Diskretisierungsfehler auswirkt. Anzustreben sind orthogonale, zumindestens nahezu orthogonale Gitter.
- In einigen geometrischen Anordnungen, vor allem in drei Dimensionen können Gitternetzsingularitäten auftreten. Typisch für solche Singularitäten ist zum Beispiel der Ursprung ($r = 0$) in Zylinderkoordinaten. In Nähe solcher Singularitäten treten irreguläre Gitterzellen auf, die zu großen Diskretisierungsfehlern führen. Für solche Zellen sind spezielle Diskretisierungen durchzuführen, bzw. lassen sich oft durch andere Netzanordnungen solche Singularitäten vermeiden oder reduzieren.

Die Generierung krummliniger Gitternetze kann mittels verschiedener Methoden erfolgen. In einfachen Fällen kann durch algebraische Beziehungen, z.B. durch Vorgabe des Funktionsverlaufes der Gitterlinie zwischen zwei Rändern, die Punkteverteilung festgelegt werden. Für kompliziertere Konturen gibt es spezielle Netzgenerierungsverfahren, die z.B. auf der Lösung von elliptischen Gleichungen für die Punktkoordinaten aufbauen. Die Darstellung solcher Netzgenerierungsverfahren kann der Literatur entnommen werden.

Thompson, J.F., Warsi, Z., Mastin, C.W.: Numerical Grid Generation, Foundations and Applications. Pub. North-Holland, (1985).

Weatherill, N.P.: Mesh Generation in Computational Fluid Dynamics. VKI Lecture Series on Comp. Fluid Dynamics, von Karman Institut for Fluid Dynamics, Rhode-Saint-Genese, March 1989, (1989).

Für die Diskretisierung in krummlinigen Gittern wird ein Gitternetz angenommen, für das die Richtungen der Gitterlinien durch neue Koordinaten definiert werden, z.B. hier mit ξ und η und der Indizierung $\xi_i = i \cdot \Delta\xi$ und $\eta_j = j \cdot \Delta\eta$. Die konservative Diskretisierung in einem solchen Gitter erfordert die Festlegung eines Kontrollvolumens τ um einen Gitterpunkt (i, j) . Verschiedene Anordnungen des Kontrollvolumens wurden bereits zuvor aufgeführt. Für die folgende Diskussion wird eine knotenzentrierte Anordnung des Kontrollvolumens angenommen. In dieser Anordnung sind die Koordinaten $x_{i,j}$, $y_{i,j}$ und die Variablen $U_{i,j}$ auf dem gleichen Gitterpunkt definiert. Das Kontrollvolumen τ wird in der Mitte zwischen dem Punkt i, j und den benachbarten Punkten



Die Diskretisierung in krummlinigen Gittern kann sowohl von der Integral- als auch von der Divergenzform ausgehend, durchgeführt werden. Beide Vorgehensweisen sind in der Literatur gebräuchlich, die korrekte konservative Formulierung beider führt zur gleichen Differenzenapproximation.

Die Diskretisierung mittels der Integralform der Euler-Gleichungen bietet eine physikalisch sehr einsichtige Art der Diskretisierung. Da hierbei das integrale Erhaltungsprinzip direkt auf ein kleines, endliches Volumen τ angewendet wird, spricht man bei dieser Diskretisierung von der "Finiten Volumen-Methode".

Die Ausgangsgleichungen sind die integralen Erhaltungsgleichungen

$$\int_{\tau} U_t d\tau + \oint_A F \cdot dy - \oint_A G \cdot dx = 0$$

Das Kontrollvolumen $\tau = \tau_{ABCD}$ wird durch die Eckpunkte $ABCD$ definiert. In der knotenzentrierten Anordnung ergeben sich die Koordinaten der Zelleckpunkte als arithmetisches Mittel der Koordinaten der umliegenden Gitterpunkte, z.B.

$$x_B = (x_{i,j} + x_{i+1,j} + x_{i+1,j+1} + x_{i,j+1})/4$$

$$y_B = (y_{i,j} + y_{i+1,j} + y_{i+1,j+1} + y_{i,j+1})/4$$

Das Kontrollvolumen (=Fläche in 2-D) τ_{ABCD} kann mittels des Vektorproduktes der Ortsvektoren $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ bestimmt werden, z. B. in der Form:

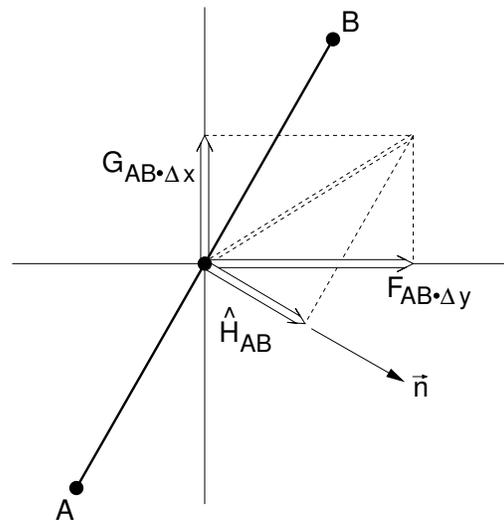
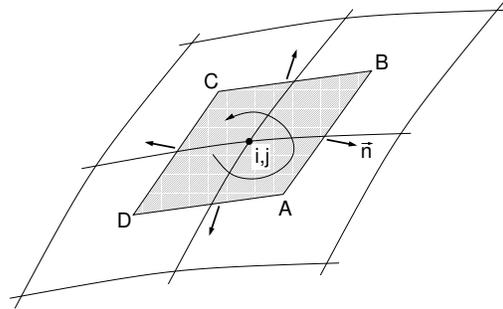
$$\tau_{ABCD} = \frac{1}{2} (\vec{r}_B - \vec{r}_D) \times (\vec{r}_C - \vec{r}_A) = \frac{1}{2} ((x_B - x_D)(y_C - y_A) - (x_C - x_A)(y_B - y_D))$$

Die positiv definierten Normalenvektoren einer Zellwand sind auswärts gerichtet, für die Auswertung des Flußintegrals wird mathematisch positiver Umlaufsinn angenommen.

Die zeitliche Änderung der konservativen Größen im Volumen τ_{ABCD} ist somit

$$\int_{\tau} U_t d\tau \rightarrow \frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \cdot \tau_{ABCD}$$

Die zeitliche Änderung ist im Gleichgewicht mit den Flüssen normal über die Oberfläche von τ . In allgemeiner Form ergibt das Flußintegral für einen vorgegebenen mathematisch positiven Umlaufsinn



$$\oint \vec{H} \cdot \vec{n} dA \approx \sum_{k=1}^4 (H \cdot \vec{n} \Delta A)_k = \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BC} + \hat{H}_{CD} + \hat{H}_{DA}$$

Die Flüsse \hat{H}_k sind hierbei die Normalprojektionen der physikalischen Flüsse, multipliziert mit dem Oberflächenelement ΔA jeder Zellwand. Sie erhält man mit den kartesischen Komponenten des Flusses $\vec{H} = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$ und des Flächennormalenvektors $\vec{n} \Delta A = \begin{pmatrix} \Delta y \\ -\Delta x \end{pmatrix}$ zu:

$$\hat{H}_{AB} = F_{AB} \Delta y_{AB} - G_{AB} \Delta x_{AB} \quad , \quad \hat{H}_{BC} = F_{BC} \Delta y_{BC} - G_{BC} \Delta x_{BC} \quad \text{usw.}$$

Entsprechend dem Umlaufsinn ist

$$\Delta y_{AB} = y_B - y_A \quad , \quad \Delta x_{BC} = x_C - x_B \quad , \dots$$

Man beachte hierbei, daß die Vorzeichenregelung durch die auswärtsgerichteten Flächennormalen und dem mathematisch positiven Umlaufsinn festgelegt ist. Die Flusskomponenten, z.B. F_{AB}, G_{AB} , werden, wie bereits vorher gezeigt, durch Interpolationspolynome zwischen den benachbarten Punkten bestimmt.

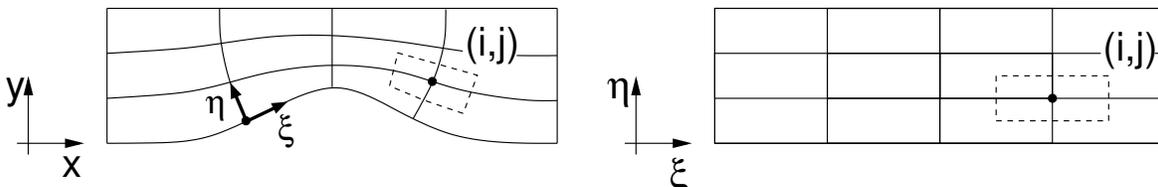
Die diskretisierten Euler Gleichungen für den Punkt (i, j) mit dem Kontrollvolumen τ_{ABCD} lauten somit:

$$\frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \cdot \tau_{ABCD} + \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BC} + \hat{H}_{CD} + \hat{H}_{DA} = 0$$

Die Diskretisierung der Divergenzform (Finite Differenzen Methode) erfordert zunächst die Transformation der Ausgangsgleichungen in kartesischen Koordinaten (x, y, t)

$$U_t + F_x + G_y = 0$$

in das neue krummlinige Koordinatensystem (ξ, η, τ) . Stellt man die physikalische Ebene (x, y) in den neuen Koordinaten (ξ, η) dar, so wird der ursprünglich krummlinige Integrationsbereich als Rechteckbereich mit „äquidistanten“ Schritten $\Delta \xi$ und $\Delta \eta$ abgebildet. In der transformierten Form kann dann die Diskretisierung für ein vorgegebenes Kontrollvolumen erfolgen.



Zur Transformation der Gleichungen wird angenommen, daß jeder Punkt (x, y, t) im physikalischen Raum durch einen Punkt im transformierten Raum (ξ, η, τ) eindeutig abgebildet

wird. Für ein in der Zeit festes Gitter gilt dann:

$$x = x(\xi, \eta) \quad , \quad y = y(\xi, \eta) \quad , \quad t = \tau$$

Die Ableitungen einer Funktion $f(x, y, t)$ in den neuen Koordinaten erhält man mit der Kettenregel zu:

$$\begin{aligned} f_\xi &= f_x x_\xi + f_y y_\xi \\ f_\eta &= f_x x_\eta + f_y y_\eta \\ f_\tau &= f_t \end{aligned}$$

Daraus ergeben sich die Ableitungen nach den kartesischen Koordinaten zu:

$$\begin{aligned} f_x &= \frac{1}{J} (+y_\eta f_\xi - y_\xi f_\eta) \\ f_y &= \frac{1}{J} (-x_\eta f_\xi + x_\xi f_\eta) \\ J &= x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi \end{aligned}$$

Diese Transformation kann auch formal mit Hilfe der Funktional (Jacobi-) Determinanten durchgeführt werden. Hierbei ist

$$J = \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \eta)} = \begin{vmatrix} x_\xi & y_\xi \\ x_\eta & y_\eta \end{vmatrix} = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi$$

$$f_x = \frac{1}{J} \frac{\partial(f, y)}{\partial(\xi, \eta)} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} f_\xi & y_\xi \\ f_\eta & y_\eta \end{vmatrix} = \frac{1}{J} (y_\eta f_\xi - y_\xi f_\eta) \quad f_y = \frac{1}{J} \frac{\partial(x, f)}{\partial(\xi, \eta)} = \frac{1}{J} (-x_\eta f_\xi + x_\xi f_\eta)$$

Ersetzt man damit die kartesischen Ableitungen in der Divergenzform, so erhält man:

$$U_t \cdot J + (y_\eta F_\xi - y_\xi F_\eta) + (-x_\eta G_\xi + x_\xi G_\eta) = 0$$

Die Gleichungen in dieser Form sind jedoch nicht konservativ. Durch Umformulieren der Terme, wie z.B.

$$(y_\eta F)_\xi - (y_\xi F)_\eta = y_\eta F_\xi - y_\xi F_\eta + F \underbrace{(y_{\eta\xi} - y_{\xi\eta})}_0$$

kann die Divergenzform in den neuen Koordinaten wiederhergestellt werden. Somit lautet die transformierte Divergenzform der Euler Gleichungen:

$$U_t \cdot J + (y_\eta F - x_\eta G)_\xi + (-y_\xi F + x_\xi G)_\eta = 0$$

Die Ausdrücke in den Klammern sind die mit der Fläche multiplizierten kontravarianten Flußkomponenten, die den Flüssen normal zur jeweiligen Zellwand entsprechen. Für diese Flüsse werden die Abkürzungen \hat{F} und \hat{G} eingeführt.

$$U_t \cdot J + \hat{F}_\xi + \hat{G}_\eta = 0$$

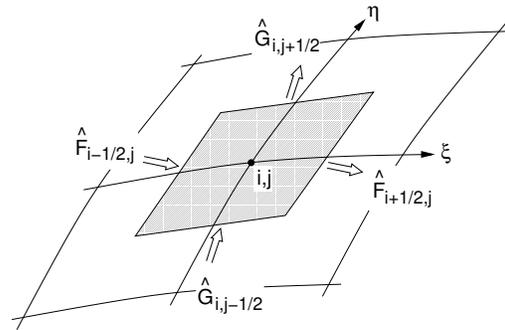
Die Diskretisierung der Gleichungen erfolgt im transformierten Raum (ξ, η) in einem äquidistanten Gitternetz mit $\xi = i\Delta\xi$ und $\eta = j\Delta\eta$. Mittels der Definition der numerischen Flüsse $\tilde{F}_{i\pm 1/2,j}$ und $\tilde{G}_{i,j\pm 1/2}$, die eine Approximation der kontravarianten Flüsse \hat{F} und \hat{G} darstellen, entsteht eine Formulierung analog zu den 1-D und 2-D, kartesischen Beispielen.

$$\frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \cdot J + \frac{\tilde{F}_{i+1/2,j} - \tilde{F}_{i-1/2,j}}{\Delta\xi} + \frac{\tilde{G}_{i,j+1/2} - \tilde{G}_{i,j-1/2}}{\Delta\eta} = 0$$

Die numerischen Flüsse eines allgemeinen, zweidimensionalen Gitters enthalten die physikalischen Flußkomponenten F und G und Metrikterme, wie x_ξ und x_η .

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{i\pm 1/2,j} &= (+y_\eta F - x_\eta G)_{i\pm 1/2,j} \\ \tilde{G}_{i,j\pm 1/2} &= (-x_\xi F + y_\xi G)_{i,j\pm 1/2}\end{aligned}$$

Ihre geometrische Bedeutung und ihre Diskretisierung wird einsichtig durch einen Vergleich mit der diskreten Integralform (Finite Volumen Methode). Da in beiden Fällen das gleiche Kontrollvolumen zugrunde liegt, müssen beide diskreten Formen übereinstimmen. Die Koordinaten (ξ, η) dienen lediglich der Richtungszuweisung, für einen Vergleich wird deshalb willkürlich $\Delta\xi = 1$ und $\Delta\eta = 1$ gesetzt.



Als erstes erkennt man, daß die Jacobi-Determinante J das Kontrollvolumen repräsentiert, d.h.

$$J_{i,j} = \tau_{i,j} = \tau_{ABCD}$$

Die Zellwände AB und CD , bzw. BC und DA entsprechen den Orten $i \pm 1/2, j$, bzw. $i, j \pm 1/2$. Damit ist z.B.

$$\tilde{F}_{i+1/2,j} = (+y_\eta F - x_\eta G)_{i+1/2,j} = \hat{H}_{AB} = \Delta y_{AB} F_{AB} - \Delta x_{AB} G_{AB}$$

Die Metrikoeffizienten $(x_\eta, y_\eta)_{i+1/2,j}$ beschreiben somit die Änderung der Koordinaten längs der Zellwand AB , d.h. längs η bei $\xi = const$. Der numerische Fluß $\tilde{F}_{i+1/2,j}$ ist der mit der Fläche multiplizierte Fluß normal zur Zellwand AB .

In ähnlicher Weise können die anderen Komponenten interpretiert werden. Es ist jedoch auf die Vorzeichenkonvention zu achten. In der Integralform richtet sich das Vorzeichen nach der Flächennormale, in der Divergenzform nach der positiven ξ und η Richtung.

Damit liegt die konservative Diskretisierung in einem allgemeinen, krummlinigen Gitter fest. Welche der beiden Ausgangsformen, Integral- oder Divergenzform, gewählt wird, ist meist subjektiv bedingt. Beide sind in der Literatur vertreten. Die Integralformulierung

ist meist anschaulicher, die Divergenzformulierung mathematisch formaler.

Für die vollständige Ortsdiskretisierung sind die numerischen Flüsse $\tilde{F}_{i\pm 1/2,j}$ und $\tilde{G}_{i,j\pm 1/2}$ als Funktion der konservativen Variablen U auf den Gitterpunkten (i, j) zu formulieren. Die Vorgehensweise ist analog zu der für eindimensionale Probleme. Im Prinzip wird für jede Zellwand die Flußfunktion durch eine eindimensionale Interpolation längs der Koordinate quer zur Zellwand festgelegt. Somit können die verschiedenen eindimensionalen Flußansätze, wie zentrale Flüsse, Flux-Vector und Flux-Difference Splitting übertragen werden.

Beispiel:

Als Beispiel soll eine zentrale Formulierung des diskreten Ortsoperators $Res(U)$ für einen Punkt (i, j) gezeigt werden. Das Residuum $Res(U)$ ist definiert als :

$$Res(U)_{i,j} = \frac{\tilde{F}_{i+1/2,j} - \tilde{F}_{i-1/2,j}}{\Delta\xi} + \frac{\tilde{G}_{i,j+1/2} - \tilde{G}_{i,j-1/2}}{\Delta\eta}$$

mit

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{i\pm 1/2,j} &= (+y_\eta F - x_\eta G)_{i\pm 1/2,j} \\ \tilde{G}_{i,j\pm 1/2} &= (-x_\xi F + y_\xi G)_{i,j\pm 1/2}\end{aligned}$$

Der Vektor der Erhaltungsgrößen U und die kartesischen Komponenten F und G des Flußvektors sind:

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v u \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{pmatrix}$$

Eine zentrale Differenz entsteht durch algebraische Mittelung der Zellwandwerte aus den benachbarten Gitterwerten. Es ist z.B.:

$$U_{i+1/2,j} = \frac{1}{2}(U_{i,j} + U_{i+1,j}) \quad , \quad U_{i,j+1/2} = \frac{1}{2}(U_{i,j} + U_{i,j+1})$$

Ersetzt man die Variablen in den Füßen durch die gemittelten, konservativen Größen, so erhält man für die numerischen Flüsse:

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{i+1/2,j} &= +y_\eta|_{i+1/2,j} F(U_{i+1/2,j}) - x_\eta|_{i+1/2,j} G(U_{i+1/2,j}) \\ \tilde{G}_{i,j+1/2} &= -x_\xi|_{i,j+1/2} F(U_{i,j+1/2}) + y_\xi|_{i,j+1/2} G(U_{i,j+1/2})\end{aligned}$$

Die Metrikkoeffizienten ($\Delta\xi = 1$ und $\Delta\eta = 1$) für ein knotenzentriertes Kontrollvolumen sind dabei z.B.:

$$\begin{aligned}x_\eta|_{i+1/2,j} &= \Delta x_{AB} = \frac{1}{4}(x_{i,j+1} + x_{i+1,j+1} - x_{i,j-1} - x_{i+1,j-1}) \\ x_\xi|_{i,j+1/2} &= -\Delta x_{BC} = \frac{1}{4}(x_{i+1,j} + x_{i+1,j+1} - x_{i-1,j} - x_{i-1,j+1})\end{aligned}$$

Die Berechnung der anderen Flußanteile erfolgt analog. Damit ist das Residuum $Res(U)$ vollständig formuliert. (Auf die Dämpfungsterme wurde der Einfachheit halber verzichtet. Diese werden analog zum eindimensionalen Fall für die einzelnen Richtungen definiert.)

Die diskretisierten Euler Gleichungen lassen sich somit zusammenfassen zu:

$$\frac{\Delta U_{i,j}}{\Delta t} \cdot J + Res(U)_{i,j} = 0$$

Die Auflösung dieses Gleichungssystems kann mit Hilfe der expliziten oder impliziten Lösungsverfahren erfolgen, die für die skalare Modellgleichung, bzw. für die eindimensionalen Euler Gleichungen bereits beschrieben wurden.

LITERATUR ZUR NUMERISCHEN STRÖMUNGSMECHANIKLehrbücher:

- [1] C.Y.Chow: An Introduction to Computational Fluid Mechanics, J. Wiley & Sons, New York, 1979
- [2] G.Jordan-Engeln, F.Reutter: Numerische Mathematik für Ingenieure. BI-Taschenbuch Bd. 104
- [3] E.Isaacson, H.B.Keller: Analyse numerischer Verfahren, Verlag H.Deutsch, Zürich, Frankfurt, 1973
- [4] D.Marsal: Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen. B I Wissenschaftsverlag, 1976
- [5] R.d.Richtmeyer, K.W.Morton: Difference Methods for Initial-Value Problems, Wiley & Sons, NY, 1967
- [6] P.J.Roache: Computational Fluid Dynamics. Hermosa publishers, Albuquerque, 1976
- [7] R.Peyret, T.D.Taylor: Computational Methods for Fluid Flow. Springer Verlag, NY, Heid., Berlin, 1983
- [8] G.D.Smith: Numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen, Studienausgabe, Vieweg-Verlag, Braunschweig, 1970
- [9] R.Courant, D.Hilbert: Methoden der mathematischen Physik, Teil II , Springer Verlag, 1968
- [10] C. A. Fletcher: Computational Techniques for Fluid Dynamics. Vol. I: Fundamental and General Techniques, Vol. II: Specific Techniques for Different Flow Categories. Springer Verlag, 1988
- [11] C. Hirsch: Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol. I: Fundamentals of Numerical Discretization, Vol. II: wird publiziert. J. Wiley & Sons, 1988

