



Technische Universität München
Fakultät für Mathematik

Numerische Methoden für Erhaltungsgleichungen

Bachelorarbeit von Berit Plumhoff

Aufgabensteller:
Prof. Dr. Peter Rentrop
Technische Universität München

Abgabetermin: 23. September 2010

Erklärung

Ich erkläre hiermit, dass ich die Bachelorarbeit selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

München, 23. September 2010

Abstract

This thesis reviews the theory and numerical computation of hyperbolic conservation laws.

For the theory we focus on the linear advection equation, on the Burgers' equation and on the Euler equations of gas dynamics. We discuss the relevant theory behind these equations and compare the applicability of different finite difference schemes in solving these equations. In this paper, we have reviewed the Upwind, the Lax-Friedrich and the Lax-Wendroff methods. These methods are applied to simple cases of the scalar linear advection equation and the Burgers' equation.

Discontinuous initial solutions and the resulting shocks are of particular interest in these considerations.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	1
1.1. Erhaltungsgleichungen	1
1.1.1. Anwendungen	2
1.2. Numerische Schwierigkeiten	3
2. Theorie von Erhaltungsgleichungen	4
2.1. Die lineare Advektionsgleichung	4
2.2. Die Burgers' Gleichung	4
2.3. Schwache Lösungen	5
2.4. Abhängigkeitsbereich	6
2.5. Systeme linearer hyperbolischer Erhaltungsgleichungen	6
2.6. Das Riemann Problem	8
2.6.1. Die Schockgeschwindigkeit	9
2.6.2. Die Entropiebedingung	9
2.7. Die Euler-Gasgleichungen	10
2.7.1. Herleitung der Erhaltungsgleichungen	10
2.7.2. Die Zustandsgleichung für ideale Gase	11
3. Numerische Verfahren	13
3.1. Finite Differenzen Verfahren	13
3.1.1. Upwind Verfahren	14
3.1.2. Lax-Friedrichs Verfahren	15
3.1.3. Lax-Wendroff Verfahren	15
3.2. Der lokale Abbrechfehler	15
3.3. Die CFL-Bedingung	17
3.4. Berechnung unstetiger Lösungen	18
3.4.1. Modifizierte Gleichungen	19
3.4.2. Die Modifizierte Gleichung für Verfahren erster Ordnung	20
3.4.3. Die Modifizierte Gleichung für Verfahren zweiter Ordnung	21
3.5. Fehleranalyse mithilfe der Fouriermethode	21
3.5.1. Fourieranalyse für das Upwind Verfahren	21
3.5.2. Fourieranalyse für das Lax-Wendroff Verfahren	22
4. Numerische Tests	24
4.1. Lösung der Burgers' Gleichung mit dem Upwind Verfahren	24
4.2. Erhaltende Methode	25

A. Physikalischer Anhang	27
A.1. Das Stoßrohr-Problem	27
A.2. Erklärung der Begrifflichkeiten zur Zustandsgleichung	27
B. Mathematischer Anhang	29
B.1. Herleitung der Kreuzungszeit zweier Charakteristiken für die Burger's Gleichung	29
B.2. Herleitung des lokalen Abbrechfehlers	30
C. Simulationen	31
C.1. Matlab Code zur linearen Advektionsgleichung	31
C.2. Matlab Code zur Burger's Gleichung	32
C.3. Matlab Code für das erhaltende Upwind Verfahren	33
Literaturverzeichnis	34

1. Einführung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit numerischen Methoden für Erhaltungsgleichungen. Dabei betrachten wir ausschließlich hyperbolische Erhaltungsgleichungen. Im 1. Kapitel wird ein kurzer Überblick über die Problematik gegeben. In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen von Erhaltungsgleichungen behandelt. Kapitel 3 beschäftigt sich mit drei numerischen Methoden, die für Berechnungen von Erhaltungsgleichungen genutzt werden. In Kapitel 4 werden diese anhand numerischer Tests weiter untersucht. Der Anhang unterteilt sich in drei Bereiche: den physikalischen Appendix A, den mathematischen Appendix B und den Appendix C, in dem die verwendeten Matlab Programme vorgestellt werden.

1.1. Erhaltungsgleichungen

Hyperbolische Erhaltungsgleichungen sind zeitabhängige Systeme partieller Differentialgleichungen (PDE, engl. partial differential equation), die in der Realität meist nichtlinear sind.

Im Eindimensionalen sind sie von der Form:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}f(u(x, t)) = 0 \quad (1.1)$$

Dabei ist $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ ein m -dimensionaler Vektor der Erhaltungsgrößen. Diese sind Masse, Impuls und Energie und werden auch Zustandsvariablen genannt.

Das Vektorfeld $f(u)$ ist die sogenannte Stromfunktion, $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$.

Die j -te Komponente von u , u_j , ist die Dichtefunktionen der j -ten Zustandsvariable. Damit gibt $\int_{x_1}^{x_2} u_j(x, t) dx$ die gesamte Menge der Erhaltungsgröße (z. B. die Gesamtenergie) im Intervall $[x_1, x_2]$ zur Zeit t an.

Dass die Größen erhalten bleiben bedeutet, dass die Gesamtgröße im System konstant bleibt, also

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_j(x, t) dx = const.$$

in Bezug auf t .

Gleichung (1.1) bedeutet, dass wir die Stromgeschwindigkeit jeder Zustandsvariable in (x, t) bestimmen können, wenn wir den Wert von $u(x, t)$ an einer bestimmten Stelle x und zu einem bestimmten Zeitpunkt t kennen.

Um das System lösen zu können, müssen wir außerdem Anfangs- und eventuell Randbedingungen vorgeben. Ein sogenanntes *Cauchy-Problem* ist ein reines Anfangswertproblem. Für die Gleichung (1.1) lautet es zum Beispiel:

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad , \quad -\infty < x < \infty$$

Die Gleichung (1.1) muss für alle $-\infty < x < \infty$ und alle $t \geq 0$ erfüllt sein. Das Cauchy-Problem besteht also aus der partiellen Differentialgleichung zusammen mit den Anfangsbedingungen.

Im Folgenden verwenden wir für die partiellen Ableitungen die Kurzschreibweise $u_t = \frac{\partial}{\partial t}u(x, t)$ bzw. $u_x = \frac{\partial}{\partial x}u(x, t)$.

Hyperbolizität. Dass die Gleichung (1.1) hyperbolisch ist, bedeutet mathematisch: Die $m \times m$ Jakobi-Matrix $f'(u)$ besitzt reelle Eigenwerte λ_p und ist diagonalisierbar für alle u , sie besitzt also m linear unabhängige Eigenvektoren.

Die Hyperbolizität ist eine wichtige Eigenschaft für die Lösbarkeit der PDE. Ist die PDE sogar strikt hyperbolisch, sind also die Eigenwerte paarweise verschieden, so ist die Lösungstheorie auch für nichtlineare Gleichungen bekannt.

Ist das nicht der Fall und ist die Stromfunktion f eine nichtlineare Funktion von u , so kann die exakte Lösung des Systems oft nicht bestimmt werden. Dies ist in der Praxis häufig der Fall. Man verwendet dann numerische Methoden, um eine angenäherte Lösung zu bestimmen.

1.1.1. Anwendungen

In der Praxis gibt es viele Beispiele von Erhaltungsgleichungen. Die bekanntesten sind die *Navier-Stokes Gleichungen*, die fundamentalen Gleichungen der Fluidmechanik. Diese beschreiben die Eigenschaften Masse, Impuls, Energie einer Strömung von Gasen oder Flüssigkeiten. Da Fluide im Allgemeinen eine Viskosität besitzen, tauchen in den Navier-Stokes Gleichungen Terme auf, die verhindern, dass das System hyperbolisch ist.

Ein Beispiel für hyperbolische Erhaltungsgleichungen sind die sogenannten *Euler-Gasgleichungen*. Diese sind im Grunde die Navier-Stokes Gleichungen, bei denen die viskosen Terme vernachlässigt werden, da man bei Gasen davon ausgeht, dass diese keine viskosen Eigenschaften aufweisen. Die Euler-Gasgleichungen finden zum Beispiel Anwendung in der Berechnung der Luftströmung an Flugzeugen.

Bei den Euler-Gasgleichungen besteht der Vektor u aus Gleichung (1.1) aus den drei Zustandsgrößen Masse, Impuls und Energie. Das entspricht in d Dimensionen $d+2$ Gleichungen, da der Impuls durch eine Gleichung in jeder Richtung gegeben ist.

1.2. Numerische Schwierigkeiten

Die numerische Berechnung von Lösungen ist in der Nähe von Unstetigkeiten oft problematisch. Werden zum Beispiel Finite Differenzen Verfahren (siehe Kapitel 3) verwendet, so sind diese ungenau in einer Umgebung um die Unstetigkeitsstelle. Dies liegt daran, dass die Verfahren unter der Annahme einer glatten Lösung entwickelt wurden.

In Kapitel 3 und 4 wird genauer auf verschiedene Näherungsverfahren eingegangen.

Um trotz Unstetigkeiten eine gute Lösung annähern zu können wurden zwei Methoden entwickelt, das *Shock tracking* und das *Shock capturing*. Auf diese können wir hier nicht weiter eingehen, ein Überblick wird jedoch in [1] auf den Seiten 9-12 gegeben.

2. Theorie von Erhaltungsgleichungen

2.1. Die lineare Advektionsgleichung

Eine der bekanntesten Erhaltungsgleichungen ist die sogenannte skalare lineare Advektionsgleichung mit der Anfangsbedingung:

$$u_t + au_x = 0 \quad (2.1)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (2.2)$$

Hierbei ist a ein konstanter Parameter. Wir können leicht die Lösung dieses Problems herleiten:

$$u(x, t) = u_0(x - at) \quad \forall t \geq 0$$

Die Initiallösung bewegt sich also abhängig von a in eine Richtung fort und ist entlang der Kurven $x - at = x(t)$ konstant, da:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u(x(t), t) &= \frac{\partial}{\partial t}u(x(t), t) + \frac{\partial}{\partial x}u(x(t), t)x'(t) \\ &= u_t + au_x \\ &= 0 \end{aligned}$$

Die Kurven $x(t)$ werden die *Charakteristiken* der Gleichung genannt.

2.2. Die Burgers' Gleichung

Das wohl bekannteste Modellproblem für nichtlineare skalare PDE ist die sogenannte *Burgers' Gleichung*:

$$u_t + uu_x = 0 \quad (2.3)$$

Wir können diese Gleichung als Advektionsgleichung betrachten, deren Advektionsgeschwindigkeit u ist. Für die Charakteristiken gilt dann: $x'(t) = u(x(t), t)$ und u ist

entlang der Charakteristiken konstant. Daraus ergibt sich also, dass die Charakteristiken Geraden sind, da ihre Steigung $x'(t)$ konstant ist.

Für kleine t lässt sich die Gleichung eindeutig lösen, da sich hier keine Charakteristiken kreuzen. Für größere t ist dies nicht mehr der Fall, falls es gilt $u_x(x, 0) < 0$ an irgendeinem Punkt x . Die Zeit, zu der sich zwei Charakteristiken kreuzen lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$T_b = \frac{-1}{\min\{u'_0(x)\}} \quad (2.4)$$

Es entsteht zu diesem Zeitpunkt an der Stelle an der die Ableitung der Initiallösung minimal ist, eine Singularität. Der Beweis hierfür ist in Appendix B.1 zu finden.

2.3. Schwache Lösungen

Um das obige Phänomen einer unstetigen, folglich nicht differenzierbaren Lösung zu umgehen, wird der Begriff der *schwachen Lösung* eingeführt.

Wir gehen zurück zur differentiellen Form der Differentialgleichung und formen diese so um, dass von ihrer Lösung weniger Glattheit gefordert wird, verringern also die Höhe der Ableitungen. Für die allgemeine differentielle Form der PDE

$$u_t + f(u)_x = 0 \quad (2.5)$$

gehen wir folgendermaßen vor: Wir multiplizieren mit einer Testfunktion Φ , integrieren über ein gewisses Gebiet und nutzen partielle Integration, um die Ordnung von u zu verringern.

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [\Phi u_t + \Phi f(u)_x] dx dt = 0 \quad (2.6)$$

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [\Phi_t u + \Phi_x f(u)] dx dt = - \int_{-\infty}^\infty \Phi(x, 0) u(x, 0) dx \quad (2.7)$$

Dabei soll gelten $\Phi \in C_0^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$, wobei C_0 die Menge der Funktionen auf einem kompakten Träger bezeichnet. Somit ist Φ stetig differenzierbar und gleich Null außerhalb eines beschränkten Bereiches. Dadurch entfallen die meisten Terme, die während der partiellen Integration entstehen.

Definition 2.1

Eine Funktion $u(x, t)$ wird *schwache Lösung* der Erhaltungsgleichung genannt, wenn die Gleichung (2.7) für alle $\Phi \in C_0^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ gilt.

2.4. Abhängigkeitsbereich

Da wir wissen, dass sich die Lösungen $u(x, t)$ auf Kurven fortbewegen, wissen wir auch, dass die Lösung an einem Punkt (\bar{x}, \bar{t}) von der ursprünglichen Lösung u_0 nur an einem einzigen Punkt abhängt, nämlich gerade dem Nullpunkt der Kurve. Dieser Punkt $D(\bar{x}, \bar{t}) = \bar{x}_0$ heißt der *Abhängigkeitsbereich* des Punktes (\bar{x}, \bar{t}) .

Liegt ein System von Differentialgleichungen vor, so ist der Abhängigkeitsbereich meist ein Intervall. Die Größe des Intervalls ist von \bar{t} abhängig, sie lässt sich jedoch durch

$$D \subset \{x : |x - \bar{x}| \leq a_{max}t\} \quad (2.8)$$

beschränken, wobei a_{max} die maximale Geschwindigkeit darstellt, mit der sich die Information fortbewegen kann. Im Falle der allgemeinen linearen Advektionsgleichung in Abschnitt 2.5 $u_t + Au_x$, wäre a_{max} der maximale Eigenwert λ_p von $A \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$.

Ebenso wird der sogenannte *Einfluss-Bereich* für einen Anfangspunkt x_0 definiert:

$$\{x : |x - x_0| \leq a_{max}t\}$$

Dies ist in der Regel ein Kegel.

Analog zum Abhängigkeitsbereich $D(\bar{x}, \bar{t})$ für die genaue Lösung der Differentialgleichung gibt es auch einen Abhängigkeitsbereich $D_0(\bar{x}, \bar{t})$ für die numerische Lösung. Die Wissenschaftler Courant, Friedrichs und Lewy fanden heraus, dass es eine notwendige Stabilitätsbedingung für jedes numerische Verfahren gibt. Diese besagt, dass der numerische Abhängigkeitsbereich der partiellen Differentialgleichung den analytischen Abhängigkeitsbereich enthält, wenn Zeitschritt k und Gitterweite h gegen Null streben. Sie führten auch die sogenannte *Courant-Zahl* bzw. *CFL-Zahl*

$$\nu = \left| \frac{\max \lambda_p k}{h} \right| \quad (2.9)$$

ein, die als notwendige Stabilitätsbedingung je nach numerischen Näherungsverfahren bestimmte Eigenschaften erfüllen muss.

In Kapitel 3.3 wird die CFL-Bedingung für ein praktisches Verfahren verwendet.

2.5. Systeme linearer hyperbolischer Erhaltungsgleichungen

Um ein System von linearen hyperbolischen Erhaltungsgleichungen zu lösen, kann man auf den skalaren Fall zurückgreifen.

In Abschnitt 2.1 wurde die skalare lineare Advektionsgleichung vorgestellt, wir betrachten nun ein System linearer Advektionsgleichungen:

$$u_t + Au_x = 0 \quad (2.10)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (2.11)$$

dabei ist $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine Matrix mit konstanten Koeffizienten. Da das System hyperbolisch ist kann A mit reellen Eigenwerten diagonalisiert werden. Wir gehen hier sogar davon aus, dass das System *strikt hyperbolisch* ist, also alle m Eigenwerte paarweise voneinander verschieden sind. Es gilt dann:

$$A = RDR^{-1} \quad (2.12)$$

wobei $D = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)$ die Diagonalmatrix der Eigenwerte ist und $R = [r_1 | \dots | r_m]$ die Matrix der Rechtseigenvektoren ist.

Um das System auf den eindimensionalen Fall zurückzuführen, wandeln wir die Gleichung (2.10) in *charakteristische Variablen* um. Dazu setzen wir

$$v = R^{-1}u \quad (2.13)$$

Da R^{-1} aus konstanten Koeffizienten besteht, gilt dann auch $v_t = R^{-1}u_t$ bzw. $v_x = R^{-1}u_x$. Außerdem gilt für die Anfangsdaten $v(x, 0) = R^{-1}u(x, 0)$. Wir multiplizieren die Gleichung (2.10) mit R^{-1} und nutzen aus, dass $R^{-1}A = DR^{-1}$ und erhalten so

$$R^{-1}u_t + DR^{-1}u_x = 0 \quad (2.14)$$

Wir können jetzt die partiellen Ableitungen von v einsetzen und erhalten:

$$v_t + Dv_x = 0 \quad (2.15)$$

Da es sich bei D um eine diagonale Matrix handelt, ist (2.15) äquivalent zu m skalaren, voneinander unabhängigen, linearen PDEs

$$(v_p)_t + \lambda_p(v_p)_x = 0 \quad , p = 1, \dots, m \quad (2.16)$$

deren Lösung wir schon kennen:

$$v_p(x, t) = v_p(x - \lambda_p t, 0) \quad (2.17)$$

Somit erhalten wir durch Rückführen auf u die Lösung des ursprünglichen Systems:

$$u(x, t) = Rv(x, t) \quad (2.18)$$

$$= \sum_{p=1}^m v_p(x, t)r_p \quad (2.19)$$

$$= \sum_{p=1}^m v_p(x - \lambda_p t, 0)r_p \quad (2.20)$$

2.6. Das Riemann Problem

Als *Riemann Problem* bezeichnet man eine Erhaltungsgleichung, deren Initiallösung eine (einzige) Singularität aufweist. Im Falle der Burgers' Gleichung erhält man:

$$u_t + uu_x = 0 \quad (2.21)$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_l & , x < 0 \\ u_r & , 0 < x \end{cases} \quad (2.22)$$

Hier müssen wir für u_l und u_r unterschiedliche Fälle betrachten. Ist $u_l > u_r$ so existiert eine eindeutige schwache Lösung, nämlich

$$u(x, t) = \begin{cases} u_l & , x < st \\ u_r & , x > st \end{cases}$$

wobei $s = \frac{(u_l + u_r)}{2}$ die sogenannte Schockgeschwindigkeit ist. Diese ist für eine schwache Lösung eindeutig.

Im Falle $u_l < u_r$ gibt es unendlich viele schwache Lösungen. Die Lösung des ersten Falles ist auch hier eine Lösung. Sie ist jedoch instabil, da die Charakteristiken aus dem Schock hinausgehen.

Eine weitere Lösung wäre eine Verdünnungswelle

$$u_t + uu_x = 0 \quad (2.23)$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_l & , x < u_l t \\ \frac{x}{t} & , u_l t < x < u_r t \\ u_r & , x > u_r t \end{cases} \quad (2.24)$$

Um in diesem Fall eine physikalisch sinnvolle Lösung zu erhalten wurde die Entropiebedingung eingeführt, die in Abschnitt 2.6.2 näher erläutert wird.

2.6.1. Die Schockgeschwindigkeit

Die Schockgeschwindigkeit s lässt sich durch die sogenannte *Rankine-Hugoniot Bedingung* beschreiben. Betrachten wir eine allgemeine Erhaltungsgleichung mit Riemannproblem.

$$u_t + f(u)_x = 0 \quad (2.25)$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_l & , x < 0 \\ u_r & , 0 < x \end{cases} \quad (2.26)$$

Für beliebiges $M \in \mathbb{R}$ gilt zum einen:

$$\frac{d}{dt} \int_{-M}^M u(x, t) dx = f(u_l) - f(u_r) \quad (2.27)$$

da $u_t = -f(u)_x$ und zum anderen:

$$\int_{-M}^M u(x, t) dx = (M + st)u_l + (M - st)u_r \quad (2.28)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \int_{-M}^M u(x, t) dx = s(u_l - u_r) \quad (2.29)$$

durch einfache Integration und anschließendes Ableiten. Daraus folgt die Bedingung:

$$f(u_l) - f(u_r) = s(u_l - u_r) \quad (2.30)$$

2.6.2. Die Entropiebedingung

Da für den Fall $u_l < u_r$ unendlich viele Lösungen existieren, stellt sich das Problem eine praxisnahe Lösung zu finden.

Die allgemeine Erhaltungsgleichung (2.26) ist nichtlinear, wenn die Ableitung von $\frac{df}{du}$ nach u ungleich Null ist. Daraus folgt, dass f strikt konvex oder konkav sein muss. Man nimmt an, dass $f(u)$ strikt konvex ist. Für beide Fälle ergibt sich aber die *erste Form der Entropie-Bedingung*:

$$f'(u_l) > s > f'(u_r) \quad (2.31)$$

Ist f konvex, so entspricht diese Bedingung:

$$u_l > u_r \quad (2.32)$$

Für nichtkonvexe skalare Funktionen f leitete die ukrainische Mathematikerin Olga Oleinik [4] eine *zweite Form der Entropie-Bedingung* her:

$$\frac{f(u) - f(u_l)}{u - u_l} \geq s \geq \frac{f(u) - f(u_r)}{u - u_r} \quad (2.33)$$

Eine Unstetigkeit, die sowohl die Rankine-Hugoniot Bedingung als auch die Entropiebedingung erfüllt, wird *Schock* genannt. Die Entropiebedingung wird in [1], S. 36–37 ausführlicher behandelt.

2.7. Die Euler-Gasgleichungen

Die Euler-Gasgleichungen haben in einer Dimension die Form:

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{bmatrix}_x = 0 \quad (2.34)$$

dabei bezeichnet ρ die Massendichte, v die Stromgeschwindigkeit, E die totale Energie und p den Druck. Die totale Energie lässt sich beschreiben durch

$$E = \frac{1}{2}\rho v^2 + \rho e$$

wobei e die sogenannte *spezifische innere Energie* ist. Diese wird für ideale Gase proportional zur Temperatur angenommen.

2.7.1. Herleitung der Erhaltungsgleichungen

Die Gleichung für die Erhaltung der Masse kann im eindimensionalen Fall folgendermaßen hergeleitet werden: $\rho(x, t)$ gibt die Massendichte am Punkt x zur Zeit t an. Die Gesamtmasse zum Zeitpunkt t , die sich in einem Intervall $[x_1, x_2]$ befindet, ergibt sich dann aus dem Integral der Dichte auf diesem Intervall $\int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx$.

Nehmen wir an, dass es keine Quelltherme gibt für die Masse und keinerlei Masse einfach verloren gehen kann, dann ist eine Änderung der Masse in obigem Intervall nur möglich, wenn sie durch die Randpunkte hinein- oder hinausfließt. Der Massefluss in einem Punkt x zur Zeit t ist gegeben durch $\rho(x, t)v(x, t)$, wobei v die Strömungsgeschwindigkeit des Gases ist.

Die zeitliche Massenänderung im Intervall entspricht also dem Massenfluss durch x_1 und x_2 :

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx = \rho(x_1, t)v(x_1, t) - \rho(x_2, t)v(x_2, t) \quad (2.35)$$

Diese Darstellung der Erhaltungsgleichung wird *integrale Form* genannt. Durch Umformung und aufgrund der Tatsache, dass x_1 und x_2 sowie die Zeiten beliebig sind, lässt sich die Erhaltungsgleichung auf *differentielle Form* bringen (siehe hierzu [1]):

$$\rho_t + (\rho v)_x = 0 \quad (2.36)$$

Ebenso lassen sich auch die Gleichungen für die Erhaltung des Impulses und der Energie herleiten.

Wie bereits in Abschnitt 1.1.1 erwähnt, erhalten wir für die Euler-Gasgleichungen in d Dimensionen $d + 2$ Gleichungen. Wir besitzen jedoch $d + 3$ Unbekannte (eine pro Richtung für die Geschwindigkeit). Um das System eindeutig lösen zu können benötigen wir also eine weitere Gleichung. Dieses ist das sogenannte *Schließungsproblem*. Hierfür wird die Zustandsgleichung verwendet, die den Zusammenhang von innerer Energie, Druck und Dichte beschreibt.

2.7.2. Die Zustandsgleichung für ideale Gase

In diesem Abschnitt wird die Zustandsgleichung für ideale Gase hergeleitet. Eine genauere Erklärung der verwendeten Begriffe ist im physikalischen Appendix A.2 zu finden. Für die Temperatur eines idealen Gases gilt

$$p = R\rho T$$

wobei $R = 8,314472 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ die Gaskonstante bezeichnet. Die innere Energie wird proportional zur Temperatur angenommen, mit einem Faktor c_v der die *spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen* darstellt:

$$e = c_v T$$

Ein solches Gas heißt *polytrop*.

Wird einem System bei konstantem Volumen Energie hinzugeführt, lässt sich das Verhältnis zwischen der Änderung von spezifischer innerer Energie und Temperatur beschreiben durch

$$de = c_v dT$$

Führen wir allerdings jedoch Energie hinzu und lassen dabei den Druck p aber nicht das Volumen konstant, so wird nicht alle zugeführte Energie in innere Energie umgewandelt. Die verrichtete Volumenarbeit bei Änderung des Volumens $1/\rho$ um $d(1/\rho)$ ist $pd(1/\rho)$. Das Verhältnis zwischen der Änderung von spezifischer innerer Energie und Temperatur wird nun beschrieben durch:

$$de + pd(1/\rho) = c_p dT$$

bzw.

$$d(e + p(1/\rho)) = c_p dT$$

c_p bezeichnet die *spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck*.

Außerdem gilt für die *Enthalpie* im System

$$h = e + \frac{p}{\rho}$$

und für polytrope Gase ist zusätzlich c_p konstant und es folgt

$$h = c_p T$$

Aus dem Gesetz für ideale Gase folgt:

$$c_p - c_v = R$$

und mit dem Verhältnis beider spezifischen Wärmekapazitäten $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ ergibt sich schließlich die Zustandsgleichung für polytrope Gase:

$$e = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho} \quad (2.37)$$

Es gilt also für die totale Energie:

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho v^2 \quad (2.38)$$

Also erhalten wir für die Euler-Gasgleichungen in einer Dimension das geschlossene Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ E \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{bmatrix}_x = 0 \quad (2.39)$$

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho v^2 \quad (2.40)$$

3. Numerische Verfahren

In diesem Kapitel untersuchen wir drei explizite Finite Differenzen (FD) Verfahren zur Approximation der Lösung einer partiellen Differentialgleichung.

Dafür werden zuerst das Rechengebiet und die Zeit diskretisiert. $h \equiv \Delta x$ bezeichnet den Abstand zwischen den Gitterpunkten und $k \equiv \Delta t$ den Zeitschritt. Wir lokalisieren nun jeden Punkt (x_j, t_n) im Gitter, indem wir setzen:

$$\begin{aligned}x_j &= jh, j \in \mathbb{Z} \\t_n &= nk, n \in \mathbb{N}\end{aligned}$$

Wir gehen in dieser Arbeit stets von einem konstanten Gitterabstand aus. Im Allgemeinen ist dieses jedoch nicht notwendig.

3.1. Finite Differenzen Verfahren

Bei der Methode der Finiten Differenzen nähern wir uns der genauen Lösung $u_j^n = u(x_j, t_n)$ in den Gitterpunkten an. Die Näherungslösung wird mit $U_j^n \in \mathbb{R}^m$ gekennzeichnet.

Wir betrachten weiterhin das Cauchy-Problem

$$u_t + Au_x = 0 \tag{3.1}$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \tag{3.2}$$

mit $A \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$.

Da unser Rechengebiet endlich ist (z. B. $a \leq x \leq b$), müssen wir Randbedingungen für das Problem einführen. Die einfachste Möglichkeit besteht in der Einführung periodischer Bedingungen, also:

$$u(a, t) = u(b, t) \quad , \forall t \geq 0$$

Aus der Initiallösung $u_0(x)$ erhalten wir die Daten für unsere anfängliche Näherungslösung U^0 . Nun müssen wir Verfahren finden um aus der aktuellen Lösung U^n die folgende Lösung U^{n+1} zu erhalten. Die drei folgenden Verfahren stellen verschiedene Beispiele hierzu dar. Es handelt sich in diesem Fall ausschließlich um explizite Verfahren. Explizit

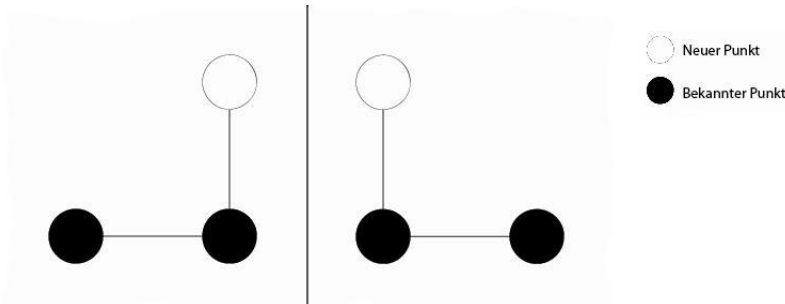


Abbildung 3.1.: Der Differenzenstern des Upwind Verfahrens (links: $a < 0$, rechts: $a > 0$)

heißt, dass wir zur Berechnung der Lösung im nächsten Zeitschritt nur Teile der bekannten Lösung verwenden. Bei impliziten Verfahren verwendet man in der Berechnung auch noch nicht berechnete Terme. Solche Verfahren sind stabiler, benötigen aber mehr Rechenaufwand. Ein Beispiel hierfür ist das implizite Eulerverfahren. Implizite Verfahren sind nicht Gegenstand dieser Arbeit.

3.1.1. Upwind Verfahren

Das erste FD Verfahren, das wir betrachten werden ist das sogenannte Upwind Verfahren.

Hierfür existieren zwei Differenzengleichungen:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} A (U_j^n - U_{j-1}^n) \quad (3.3)$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} A (U_{j+1}^n - U_j^n) \quad (3.4)$$

Welches der beiden obigen Verfahren benutzt wird, hängt von A ab. Für den Fall der skalaren Advektionsgleichung (2.2) kann die einfache Unterscheidung $a > 0$ oder $a < 0$ getroffen werden. Ist $a > 0$ so wird erstere Methode verwendet, andernfalls die zweite. Der Name Upwind Verfahren stammt daher, dass der Differenzenstern in Abbildung 3.1 in die Richtung zeigt, aus der die Informationen kommen.

Handelt es sich bei A um eine Matrix, so können einseitige Verfahren wie die Upwind-Differenzen nur verwendet werden, wenn alle Eigenwerte von A das gleiche Vorzeichen besitzen. Diese Einschränkung können wir aufheben, indem wir A diagonalisieren und die Substitution $v(x, t) = R^{-1}u(x, t)$ wie in Abschnitt 2.5 durchführen. Anschließend verwenden wir eine gemischte Methode mit Unterscheidung von A in positive bzw. negative Eigenwerte.

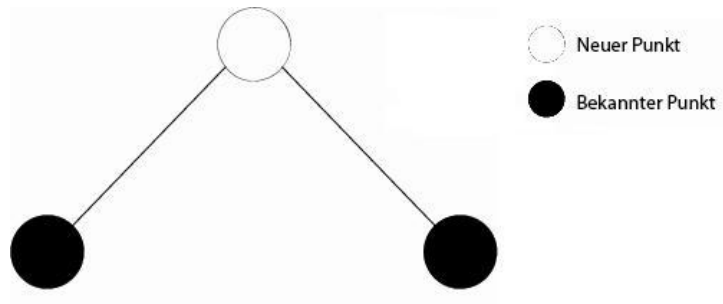


Abbildung 3.2.: Der Differenzenstern des Lax-Friedrichs Verfahrens

3.1.2. Lax-Friedrichs Verfahren

Das Differenzen-Schema des Lax-Friedrichs Verfahren hat die Form:

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2}(U_{j-1}^n + U_{j+1}^n) - \frac{k}{2h}A(U_{j+1}^n - U_{j-1}^n) \quad (3.5)$$

Im Unterschied zum Upwind Verfahren müssen hier nicht für verschiedene A unterschiedliche Methoden verwendet werden, da das Lax-Friedrichs Verfahren Informationen der vorherigen Lösung aus beiden Richtungen abfragt.

3.1.3. Lax-Wendroff Verfahren

Das Lax-Wendroff Verfahren wird über die Taylorreihenentwicklung um den Punkt $(x, t + k)$ hergeleitet. Dabei wird die Taylorreihe nach dem quadratischen Glied abgebrochen und die Ableitungen mithilfe von Finiten Differenzen angenähert.

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{2h}A(U_{j+1}^n - U_{j-1}^n) + \frac{k^2}{2h^2}A^2(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n) \quad (3.6)$$

Hierbei gilt $u_{tt} = A^2 u_{xx}$ (Ableitung der PDE nach t).

Die Abbildungen 3.1, 3.2 und 3.3 zeigen die drei Muster nach denen die oben genannten Verfahren vorgehen. An ihnen kann man ablesen, welche Gitterpunkte verwendet werden um einen Gitterpunkt im nächsten Zeitschritt zu berechnen.

3.2. Der lokale Abbrechfehler

Der lokale Abbrechfehler $L_k(x, t)$ dient zur Untersuchung, wie gut die Finiten Differenzen Verfahren die PDE modellieren.

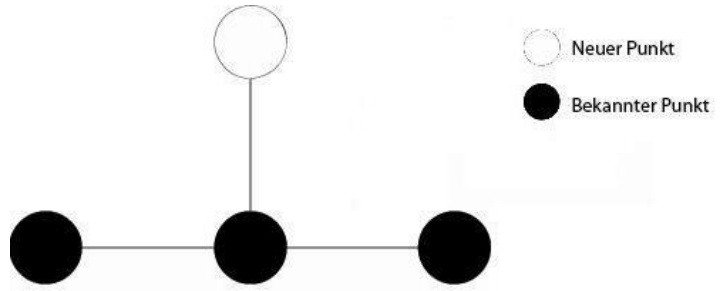


Abbildung 3.3.: Der Differenzenstern des Lax-Wendroff Verfahrens

Definition 3.1

Für allgemeine 2-stufige Methoden ist der *lokale Abbrechfehler* definiert als

$$L_k(x, t) = \frac{1}{k}[u(x, t + k) - U^{n+1}(x)]$$

Dabei ist eine zweistufige Methode eine solche, bei der wir die Lösung im nächsten Zeitschritt direkt mithilfe der Lösung aus dem vorherigen Zeitschritt berechnen. Die Idee dahinter ist zu prüfen, welchen Fehler die genaue Lösung in einer diskretisierten Darstellung der PDE erzeugt. Die diskretisierte Darstellung wäre im Falle des Upwind Verfahrens:

$$\frac{1}{k}[U_j^{n+1} - U_j^n] + \frac{1}{h}A(U_j^n - U_{j-1}^n) = 0 \quad (3.7)$$

Wir setzen anschließend die genaue Lösung an den entsprechenden Punkten ein

$$L_k(x, t) = \frac{1}{k}[u(x, t + k) - u(x, t)] + \frac{1}{h}A(u(x, t) - u(x - h, t)) \quad (3.8)$$

und erhalten durch Taylorreihenentwicklung den lokalen Abbrechfehler (siehe Appendix B.2).

Der lokale Abbrechfehler für die drei vorgestellten Verfahren lautet jeweils:

Upwind:

$$\begin{aligned} L_k(x, t) &= \frac{1}{2}hA\left(\frac{k}{h}A - I\right)u_{xx}(x, t) + O(k^2) \\ &= O(k) \quad k \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Lax-Friedrichs:

$$\begin{aligned} L_k(x, t) &= \frac{1}{2}k(A^2 - \frac{h^2}{k^2}I)u_{xx}(x, t) + O(k^2) \\ &= O(k) \quad k \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Lax-Wendroff:

$$\begin{aligned} L_k(x, t) &= \frac{h^2}{6} A \left(I - \frac{k^2}{h^2} A^2 \right) u_{xxx}(x, t) + O(k^3) \\ &= O(k^2) \quad k \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Allgemein lässt sich der lokale Abbrechfehler begrenzen durch:

$$|L_k(x, t)| \leq C_L k$$

für alle $k < k_0$ und eine Konstante C_L , die von u_0 abhängt.

3.3. Die CFL-Bedingung

Der Abhängigkeitsbereich eines Punktes für ein numerisches Verfahren wurde bereits in Abschnitt 2.4 behandelt. Im Falle des Lax-Friedrichs Verfahrens sieht das folgendermaßen aus: Die Lösung in einem Punkt $u(x_j, t_n)$ hängt von den Lösungen in den beiden Punkten $u(x_{j-1}, t_{n-1})$ und $u(x_{j+1}, t_{n-1})$ ab. Diese hängen ebenfalls von den Lösungen in den Punkten schräg unter ihnen ab und so ergibt sich für den Punkt (x_j, t_n) der numerische Abhängigkeitsbereich wie er in Abbildung 3.4 zu sehen ist.

Für eine feste Gitterweite h und einen festen Zeitschritt k gilt dann für einen fixen

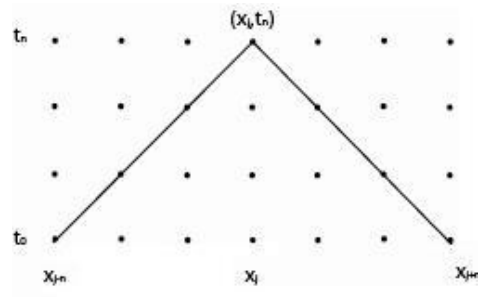


Abbildung 3.4.: Abhängigkeitsbereich für das Lax-Friedrichs Verfahren

Punkt (\bar{x}, \bar{t}) beim Lax-Friedrichs Verfahren:

$$D_k(\bar{x}, \bar{t}) \subset \left\{ x : |x - \bar{x}| \leq \left(\frac{\bar{t}}{k} \right) h \right\} \quad (3.9)$$

und für den Grenzfall gilt dann mit $\frac{k}{h} = r$ fix, dass der Abhängigkeitsbereich der gesamten Menge entspricht:

$$D_0(\bar{x}, \bar{t}) = \left\{ x : |x - \bar{x}| \leq \frac{\bar{t}}{r} \right\} \quad (3.10)$$

Aus der *CFL Bedingung* folgt für ein Drei-Punkte Schema, welches auf ein lineares System von Gleichungen angewendet wird, dass für alle Eigenwerte λ_p von A gilt

$$|(\bar{x} - \lambda_p t) - \bar{x}| \leq \frac{\bar{t}}{r} \quad (3.11)$$

und somit

$$\left| \frac{\lambda_p k}{h} \right| \leq 1 \quad (3.12)$$

Es folgt also für die CFL-Zahl

$$\nu = \left| \frac{\max \lambda_p k}{h} \right| \leq 1 \quad (3.13)$$

3.4. Berechnung unstetiger Lösungen

Im Folgenden wollen wir noch die Eigenheiten der vorgestellten numerischen Methoden bei der Berechnung unstetiger Lösungen betrachten.

Dazu wird das folgende Cauchy-Problem der skalaren linearen Advektionsgleichung verwendet:

$$u_t + au_x = 0 \quad (3.14)$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & , 0 \leq x \leq 0.5 \\ 0 & , 0.5 < x \leq 1 \end{cases} \quad (3.15)$$

$$u(0, t) = u(1, t) \quad , \forall t \geq 0 \quad (3.16)$$

Die Abbildung 3.5 zeigt den Unterschied zwischen Lax-Friedrichs, Upwind und Lax-Wendroff Verfahren. Wir können beobachten, dass das Lax-Wendroff Verfahren als Verfahren zweiter Ordnung Oszillationen an der Unstetigkeitsstelle $x = 0.5$ entwickelt, während die Verfahren erster Ordnung, Lax-Friedrichs und Upwind, die Unstetigkeit stark wegglatzen.

Dabei ist weiter zu beobachten, dass die Oszillationen des Lax-Wendroff Verfahrens bei kleinerem Gitterabstand nicht geringer, sondern größer werden und näher an die Unstetigkeitsstelle heranrücken. In Abbildung 3.6 sieht man den Vergleich für $N = 500$ und $N = 1000$, wobei N die Anzahl der Gitterpunkte bezeichnet.

Interessant ist außerdem, dass die Lösung immer ungenauer wird je weiter wir in der Zeit voranschreiten. In Abbildung 3.7 betrachten wir zum Beispiel den Fall, dass wir bei konstanter Gitterweite 10 und 1000 Iterationen durchführen.

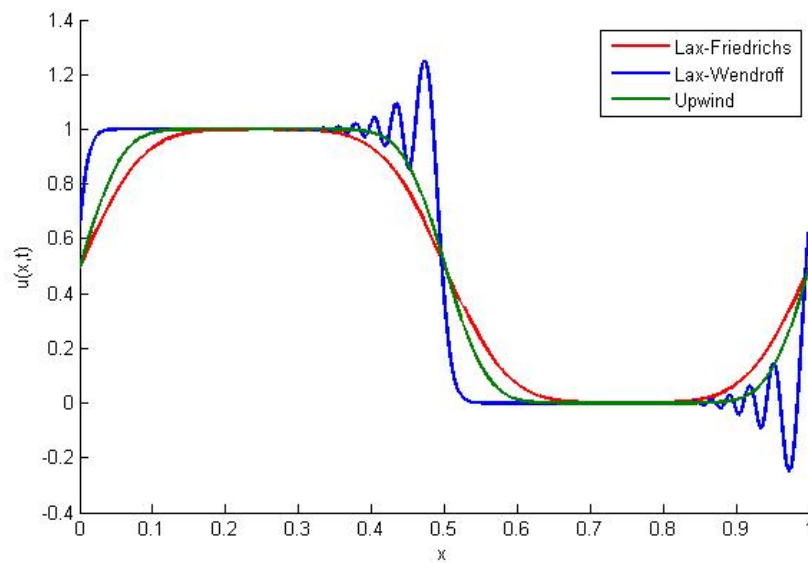


Abbildung 3.5.: Vergleich der drei FD Verfahren

3.4.1. Modifizierte Gleichungen

Eine qualitative Analyse des Verhaltens von Differenzengleichungen liefert Erklärungen für diese Beobachtungen. Dazu werden die Differenzengleichungen durch Differentialgleichungen modelliert, die sogenannten *Modifizierten Gleichungen*.

Dabei wird jedoch nicht die ursprüngliche Differentialgleichung zur Modellierung verwendet, sondern eine Gleichung, die vom numerischen Verfahren besser gelöst wird. Solch eine Gleichung wird mithilfe des lokalen Abbrechfehlers (siehe 3.2) ermittelt.

So ist zum Beispiel das Lax-Friedrichs Verfahren ein Näherungsverfahren erster Ordnung für die ursprüngliche Gleichung $u_t + au_x = 0$, aber für eine Gleichung der Form

$$u_t + au_x = \frac{h^2}{2k} \left(1 - \frac{k^2}{h^2} a^2\right) u_{xx} \quad (3.17)$$

ist es ein Näherungsverfahren zweiter Ordnung. Der Term auf der rechten Seite entspricht dem Term erster Ordnung des lokalen Abbrechfehlers. Berechneten wir also den lokalen Abbrechfehler für die Modifizierte Gleichung, so fiel dieser Term heraus und der Fehler wäre zweiter Ordnung.

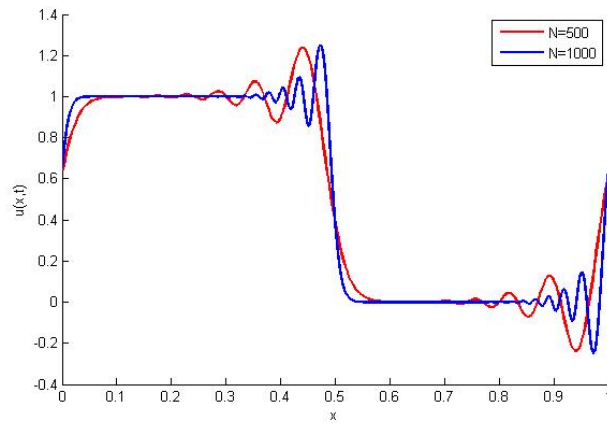


Abbildung 3.6.: Vergleich verschiedener Gittergrößen

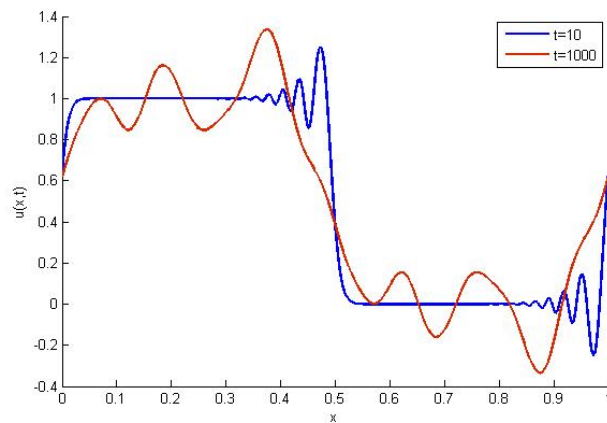


Abbildung 3.7.: Divergenz des Verfahrens

3.4.2. Die Modifizierte Gleichung für Verfahren erster Ordnung

Die modifizierte Gleichung für das Upwind Verfahren hat die Form:

$$u_t + au_x = \frac{1}{2}ha\left(1 - \frac{k}{h}a\right)u_{xx} \quad (3.18)$$

Für ihre jeweilige Modifizierte Gleichung sind das Upwind und das Lax-Friedrichs Verfahren Näherungsverfahren zweiter Ordnung. Beide Gleichungen gehören zu der Klasse der *Advektions-Diffusions-Gleichungen*:

$$u_t + au_x = Du_{xx} \quad (3.19)$$

wobei D die sogenannte Diffusionsmatrix ist. Diffusion sorgt für eine Glättung von Unstetigkeiten, dadurch entstehen die beobachteten Phänomene des Upwind und Lax-Friedrichs Verfahrens. Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass das Upwind Verfahren jedoch weniger diffusiv ist.

3.4.3. Die Modifizierte Gleichung für Verfahren zweiter Ordnung

Das Lax-Wendroff Verfahren besitzt die Modifizierte Gleichung

$$u_t + au_x = \frac{h^2}{6} a \left(\frac{k^2}{h^2} a^2 - 1 \right) u_{xxx} \quad (3.20)$$

und ist zu dieser ein Näherungsverfahren dritter Ordnung. Diese Modifizierte Gleichung ist eine *Dispersionsgleichung* der Form:

$$u_t + au_x = \mu u_{xxx} \quad (3.21)$$

Dispersion bedeutet, dass sich die entstehenden Wellen (bzw. Oszillationen) mit unterschiedlicher Geschwindigkeit fortbewegen, dabei hängt die Geschwindigkeit von der Stärke der Oszillation ab. Die höchsten Spitzen sind am weitesten von der korrekten Position entfernt. Bei Lax-Wendroff ist zu beobachten, dass sich die Oszillationen hinter dem Schock bewegen und ihm folgen, dieses Phänomen wird im nächsten Abschnitt erklärt.

3.5. Fehleranalyse mithilfe der Fouriermethode

Um den Phasen- und Amplitudenfehler von FD Verfahren bewerten zu können, führt man eine Fourieranalyse durch.

3.5.1. Fourieranalyse für das Upwind Verfahren

Wir betrachten für die lineare Advektionsgleichung zunächst das Upwind Verfahren. Außerdem wird der Einfachheit halber angenommen $a = \text{const.} > 0$.

Die Fourierreihe

$$U_j^n = (\lambda)^n e^{ik(j\Delta x)} \quad (3.22)$$

erfüllt das Differenzenschema sofern für den Amplitudenfaktor λ gilt:

$$\lambda \equiv \lambda(k) = 1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (1 - e^{(-ik\Delta x)}) = 1 - \nu(1 - e^{(-ik\Delta x)}) \quad (3.23)$$

Wobei ν die CFL-Zahl aus Abschnitt 3.3 ist. Aus der Bedingung für den Amplitudenfaktor ergibt sich

$$\begin{aligned} |\lambda(k)|^2 &= [(1 - \nu) + \nu \cos k\Delta x]^2 + [\nu \sin k\Delta x]^2 \\ &= (1 - \nu)^2 + \nu^2 + 2\nu(1 - \nu) \cos k\Delta x \\ &= 1 - 2\nu(1 - \nu)(1 - \cos k\Delta x) \end{aligned}$$

also gilt

$$|\lambda(k)|^2 = 1 - 4\nu(1 - \nu) \sin^2 \frac{1}{2} k\Delta x \quad (3.24)$$

Wenn es gilt, dass $0 \leq \nu \leq 1$, so ist $|\lambda(k)| \leq 1$. Alleine im Spezialfall $\nu = 1$ ist die Schwingung ungedämpft.

Auch für die exakte Lösung der PDE kann eine Fourierreihe angegeben werden. Diese ist

$$u(x, t) = e^{i(kx + \omega t)} \quad (3.25)$$

sofern die sogenannte Dispersionsrelation erfüllt ist zwischen Kreisfrequenz ω und Kreiswellenzahl k

$$\omega = -ak \quad (3.26)$$

Diese Schwingung ist ungedämpft, da die Amplitude konstant ist. Die Änderung der Phase in einem Zeitschritt ist gegeben durch $\omega\Delta t$. Die Phase der numerischen Schwingung entspricht hingegen

$$\arg \lambda = -\tan^{-1} \left[\frac{\nu \sin k\Delta x}{(1 - \nu) + \nu \cos k\Delta x} \right] \quad (3.27)$$

Dieses kann mithilfe eines Lemmas umgeformt werden zu:

$$\arg \lambda = -\nu\xi \left[1 - \frac{1}{6}(1 - \nu)(1 - 2\nu)\xi^2 + \dots \right] \quad (3.28)$$

Dabei bezeichnet $\xi = k\Delta x$. Die verwendete Umformung wird ausführlich beschrieben in [5], Seite 95. Ist $\nu = 1$ in Gleichung (3.28), so erhalten wir die exakte Lösung des PDE. Außerdem erfahren wir aus dieser Gleichung, dass der *relative Phasenfehler* von der Ordnung ξ^2 ist. Das Vorzeichen des Phasenfehlers hängt von ν ab und er verschwindet für $\nu = \frac{1}{2}$. Aus Gleichung (3.24) erhalten wir für den *Amplitudenfehler* die Ordnung ξ^2 in einem Zeitschritt und somit global die Ordnung ξ .

3.5.2. Fourieranalyse für das Lax-Wendroff Verfahren

Im Falle des Lax-Wendroff Verfahrens können wir analog vorgehen und erhalten für den Amplitudenfaktor λ

$$|\lambda(k)|^2 = 1 - 4\nu^2(1 - \nu^2) \sin^4 \frac{1}{2} k\Delta x \quad (3.29)$$

Die Herleitung hierfür ist in [5] auf den Seiten 98 und 99 zu finden. Das Schema ist also stabil für $\nu \leq 1$. Ähnlich wie für das Upwind Verfahren ergibt sich für die Phasenänderung des Lax-Wendroff Verfahrens

$$\arg \lambda = -\nu\xi\left[1 - \frac{1}{6}(1 - \nu^2)\xi^2 + \dots\right] \quad (3.30)$$

Aus Gleichung (3.29) folgern wir, dass beim Lax-Wendroff Verfahren zwar auch eine Dämpfung vorhanden ist, jedoch nur von der Ordnung ξ^4 , was im Vergleich zum Upwind Verfahren eine wesentliche Verbesserung ist. Der Phasenfehler ist bei beiden Verfahren von der Ordnung ξ^2 . Beim Lax-Wendroff Verfahren hat dieser jedoch immer das gleiche Vorzeichen.

Die Entstehung von Oszillationen im Lax-Wendroff Verfahren lässt sich erklären, wenn wir folgende Form verwenden:

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2}\nu(1 + \nu)U_{j-1}^n + (1 - \nu^2)U_j^n - \frac{1}{2}\nu(1 - \nu)U_{j+1}^n \quad (3.31)$$

Da aus Stabilitätsgründen gilt $0 \leq \nu \leq 1$ ist der letzte Term in dieser Gleichung negativ. Der Wert von U_j^{n+1} besteht also aus der Summe dreier gewichteter Terme aus dem vorigen Zeitschritt, wobei eines der Gewichte negativ und die anderen beiden positiv sind. Aus diesem Grund kann die numerische Lösung Oszillationen mit inneren Maxima und Minima aufweisen. Dieses ist beim Upwind und Lax-Friedrichs Verfahren nicht der Fall.

4. Numerische Tests

Bei der numerischen Lösung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen können verschiedene Schwierigkeiten auftreten. Zum Beispiel kommt es vor, dass eine Methode gegen eine Funktion konvergiert, die keine schwache Lösung der PDE ist oder die nicht der Entropie Bedingung genügt. Es kann auch vorkommen, dass die Methode instabil ist. Dies kann bei entstehenden Oszillationen der Fall sein.

Im nächsten Abschnitt wird diese Schwierigkeit am Beispiel der Burgers' Gleichung dargestellt.

4.1. Lösung der Burgers' Gleichung mit dem Upwind Verfahren

Im vorigen Kapitel wurde die Advektionsgleichung mithilfe dreier FD Verfahren gelöst. Nun berechnen wir die Lösung eines Riemannproblems der Burgers' Gleichung:

$$u_t + uu_x = 0 \quad (4.1)$$

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & , 0 \leq x \leq 0.5 \\ 0 & , 0.5 < x \leq 1 \end{cases} \quad (4.2)$$

$$u(0, t) = 1 \quad , \forall t \geq 0 \quad (4.3)$$

$$u(1, t) = 0 \quad , \forall t \geq 0 \quad (4.4)$$

Die drei vorgestellten Verfahren haben die Form:

Upwind:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} U_j^n (U_j^n - U_{j-1}^n)$$

Lax-Friedrichs:

$$U_j^{n+1} = U_j^{n-1} - \frac{k}{2h} U_j^n (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n)$$

Lax-Wendroff:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{2h} U_j^n (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n) + \frac{k^2}{2h^2} U_j^{n2} (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n)$$

Lösen wir die Burgers' Gleichung zunächst mit dem Upwind Verfahren, so stellen wir schnell fest, dass die berechneten Lösungen gegen die Initiallösung konvergieren. Diese

ist jedoch keine schwache Lösung des Problems. In Abbildung 4.1 ist die Lösung zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt, sie bewegt sich nicht.

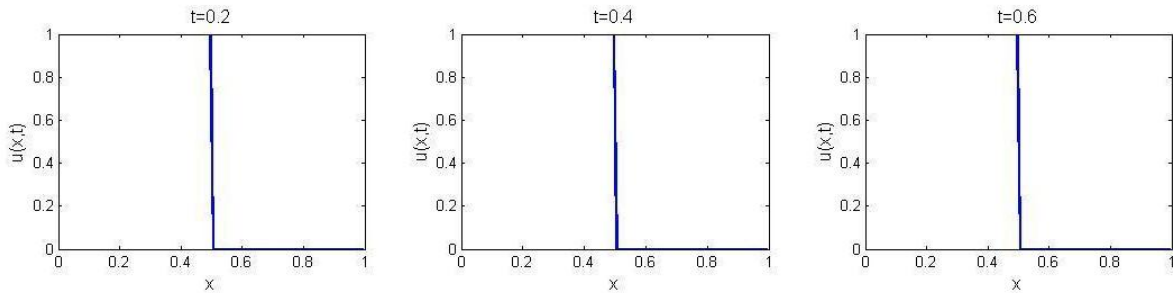


Abbildung 4.1.: Die Lösung der Burgers' Gleichung durch das Upwind Verfahren approximiert

4.2. Erhaltende Methode

Um das unter 4.1 vorgestellte Problem zu beheben, werden *erhaltende Methoden* eingeführt. Ist das Verfahren in erhaltender Form, so kann es nicht gegen eine Lösung konvergieren, die keine Lösung der partiellen Differentialgleichung ist.

Ein erhaltendes Verfahren hat die allgemeine Form:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} [F(U_j^n, U_{j+1}^n) - F(U_{j-1}^n, U_j^n)] \quad (4.5)$$

Dabei ist F die numerische Stromfunktion. Sie ist als Näherung der Stromfunktion f der PDE über einem Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ zu verstehen. In unserem Fall hängt F nur von zwei Variablen ab, sie kann aber durchaus auch von weiteren Variablen abhängen.

Das Upwind Verfahren hat für die Burgers' Gleichung erhaltende Form:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{2h} (U_j^{n2} - U_{j-1}^{n2}) \quad (4.6)$$

Die numerischen Ergebnisse dieses Verfahrens entsprechen unseren Erwartungen und der exakten Lösung. Abbildung 4.2 stellt dieses dar. Dabei wurde die Courant-Zahl auf $CFL = 0.5$ gesetzt.

Im Falle des Lax-Friedrichs Verfahrens entspricht die erhaltende Methode jedoch dem

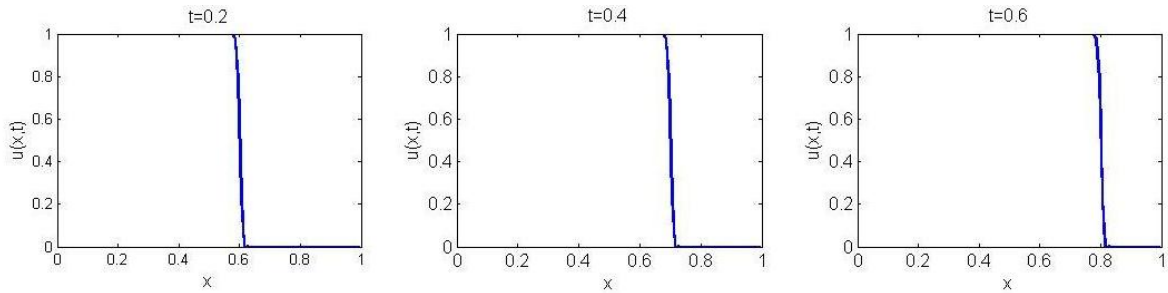


Abbildung 4.2.: Die Lösung des erhaltenden Upwind Verfahrens der Burgers' Gleichung zu verschiedenen Zeiten

allgemeinen Lax-Friedrichs Verfahren selbst. Dieses hat die Form:

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2}(U_{j-1}^n + U_{j+1}^n) - \frac{k}{2h}[f(U_{j+1}^n) - f(U_{j-1}^n)] \quad (4.7)$$

Setzen wir für F :

$$F(U_j^n, U_{j+1}^n) = \frac{h}{2k}(U_j - U_{j+1}) + \frac{1}{2}(f(U_j) + f(U_{j+1})) \quad (4.8)$$

So erhalten wir eine erhaltende Methode der Form (4.5). Dies ist ein großer Vorteil des Lax-Friedrichs Verfahrens. Abbildung 4.3 zeigt, dass das Lax-Friedrichs Verfahren die

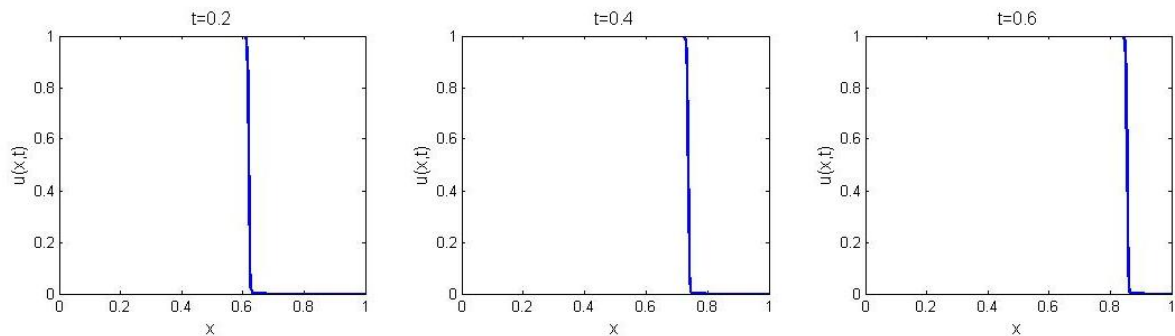


Abbildung 4.3.: Die Lösung des Lax-Friedrichs Verfahrens der Burgers' Gleichung zu verschiedenen Zeiten

Lösung der Burgers' Gleichung richtig approximiert.

A. Physikalischer Anhang

A.1. Das Stoßrohr-Problem

Das sogenannte Stoßrohr-Problem (engl. shock tube problem) ist ein bekanntes Problem zur Darstellung des Verhaltens der Lösungen von Erhaltungsgleichungen. Ein Stoßrohr ist ein Windkanal, der aus zwei Rohren besteht, die anfänglich durch eine Membran getrennt sind.

Auf der einen Seite herrscht höherer Druck und eine höhere Dichte als auf der anderen. Die Strömungsgeschwindigkeit ist anfänglich 0. Bei $t = 0$ wird die Membran entfernt und wir können einen interessanten Übergang beobachten. Es entstehen drei Wellen in verschiedenen Bereichen, in denen die Zustandsgrößen jeweils konstant sind. In Richtung des niedrigeren Drucks breitet sich eine Schockwelle aus, alle Zustandsvariablen weisen eine Unstetigkeitsstelle auf. Anschliessend folgt ein Bereich, in dem sich eine Kontaktunstetigkeit bewegt. Hier sind Geschwindigkeit und Druck konstant, die Dichte jedoch unstetig. Als letztes bewegt sich eine Verdünnungswelle in Richtung des Bereiches, in dem anfänglich der höhere Druck herrschte. Hier sind alle Zustandsvariablen stetig.

A.2. Erklärung der Begrifflichkeiten zur Zustandsgleichung

An dieser Stelle werden einige der in Abschnitt 2.7.2 verwendeten Begriffe näher erläutert.

Ideales Gas: Alle Gasteilchen sind ausdehnungslose Masseteilchen und können sich frei im Raum bewegen. Sie verspüren also keinerlei Kräfte. Energie und Impuls werden durch Stöße der Teilchen untereinander ausgetauscht. Die kinetische Energie erhöht sich durch Wärmezufuhr.

Spezifische Wärmekapazität: Die spezifische Wärmekapazität c gibt an, wieviel Energie einem Stoff pro Kilogramm zugeführt werden muss, damit sich seine Temperatur um ein Kelvin erhöht.

Einheit:

$$[c] = \frac{J}{kgK}$$

Enthalpie: Die Enthalpie h ist ein Maß für die Energie eines thermodynamischen Systems. Sie setzt sich zusammen aus der inneren Energie e und der Volumenarbeit pV , $h = e + pV$. Die Volumenarbeit gibt an, wieviel Energie man einem System zuführen muss bzw. wieviel Energie freigegeben werden muss um das Volumen zu vergrößern bzw. zu verkleinern.

Polytropie: Gilt für ein Gas $pV^n = \text{const.}$ für beliebiges n , so heißt dieses Polytrop. Polytrope Gase besitzen eine feste Wärmekapazität, die sich durch c_v , c_p und n ergibt.

B. Mathematischer Anhang

B.1. Herleitung der Kreuzungszeit zweier Charakteristiken für die Burger's Gleichung

Es gilt

$$u_t + uu_x = 0 \quad (\text{B.1})$$

da wir wissen, dass u entlang der Charakteristiken $x(t)$ konstant ist und es gilt $x'(t) = u(x(t), t)$, folgt dass die Charakteristiken Geraden sind.

Die Charakteristiken lassen sich dann beschreiben als

$$x = \xi + u(\xi, 0)t \quad (\text{B.2})$$

Nehmen wir an, dass die Steigung der Anfangslösung an irgendeiner Stelle negativ ist. Da wir u_0 als stetig annehmen ist die Steigung sogar auf einem offenen Intervall (a, b) negativ. Wählen wir ξ_1 und ξ_2 in diesem Intervall, sodass $u'(\xi_1, 0) > u'(\xi_2, 0)$. Die Zeit, zu der sich die Charakteristiken von ξ_1 und ξ_2 kreuzen errechnet sich aus:

$$\begin{aligned} \xi_1 + u(\xi_1, 0)T = x_1(T) &= x_2(T) = \xi_2 + u(\xi_2, 0)T \\ \Rightarrow T &= \frac{\xi_2 - \xi_1}{u(\xi_1, 0) - u(\xi_2, 0)} \\ \Rightarrow T &= -\frac{\xi_2 - \xi_1}{u(\xi_2, 0) - u(\xi_1, 0)} \end{aligned}$$

Im Grenzfall bedeutet das:

$$\lim_{\xi_1 \rightarrow \xi_2} T = -\frac{1}{u'(\xi_2, 0)} \quad (\text{B.3})$$

Der Schock tritt an der Stelle auf, an der die Zeit bis sich zwei Charakteristiken kreuzen minimal ist. Da $u'(\xi_2, 0) < 0$ ist das genau dann der Fall, wenn $u'(\xi_2, 0)$ minimal ist. Daraus folgt die Behauptung

$$T_b = \frac{-1}{\min\{u'_0(x)\}} \quad (\text{B.4})$$

B.2. Herleitung des lokalen Abbrechfehlers

Wir werden in diesem Abschnitt die Herleitung des lokalen Abbrechfehlers für das Upwind Verfahren am Beispiel der linearen Advektionsgleichung betrachten. Die lineare Advektionsgleichung ist von der Form:

$$u_t + Au_x = 0$$

Ein wichtige, im folgenden oft verwendete Äquivalenz ist:

$$u_{tt} = -Au_{xt} = -A(-Au_x)_x = A^2u_{xx} \quad (\text{B.5})$$

Hier wird u als ausreichend glatt angenommen, damit die Ableitungen vertauschbar sind. Einsetzen in die Formel für den lokalen Abbrechfehler aus Abschnitt 3.2 liefert dann zum Beispiel für das Upwind Verfahren:

$$L_k(x, t) = \frac{1}{k}[u(x, t+k) - u(x, t)] + \frac{1}{h}A(u(x, t) - u(x-h, t)) \quad (\text{B.6})$$

Nun wenden wir auf die rechte Seite die Taylorformel an und fassen zusammen:

$$\begin{aligned} L_k(x, t) &= \frac{1}{k}\left[u + ku_t + \frac{1}{2}k^2u_{tt} + \dots\right] + \frac{1}{h}A\left(u - (u - hu_x + \frac{1}{2}h^2u_{xx} - \dots)\right) \\ &= u_t + Au_x + \frac{k}{2}u_{tt} + \frac{h}{2}Au_{xx} + O(k^2) \end{aligned}$$

Da u die exakte Lösung der PDE ist, also $u_t + Au_x = 0$ gilt, und mit der Äquivalenz (B.5) folgt:

$$L_k(x, t) = \frac{1}{2}hA\left(\frac{k}{h}A - I\right)u_{xx} + O(k^2) \quad (\text{B.7})$$

Die Herleitungen des lokalen Abbrechfehlers für das Lax-Friedrichs und das Lax-Wendroff Verfahren funktionieren analog. Beim Lax-Wendroff Verfahren hebt sich jedoch die Ableitung zweiter Ordnung heraus, es bleibt $O(k^2)$. Deshalb ist es ein Verfahren zweiter Ordnung.

C. Simulationen

Nachfolgend der Matlab Code zu den vorgestellten Verfahren.

C.1. Matlab Code zur linearen Advektionsgleichung

Upwind Verfahren:

```
function unew = upwind(u, t_max, dt, dx, a)
t = 0;
N = length(u);
unew = u;

while (t < t_max)
    unew(2:N) = u(2:N) - (a*dt/dx)*(u(2:N)-u(1:N-1));
    unew(1) = u(1) - (a*dt/dx)*(u(1)-u(N));

    u = unew;
    t = t + dt;
end
```

Lax-Friedrichs Verfahren:

```
function u = laxfriedrichs(u_alt, t_max, dt, dx, a)
t = 0;
n = length(u_alt);
u = u_alt;
while (t < t_max)
    u(2:n-1) = 0.5*(u_alt(1:n-2)+u_alt(3:n)) -
        dt/(2*dx)*a*(u_alt(3:n)-u_alt(1:n-2));
    u(1) = 0.5*(u_alt(n)+u_alt(2)) - dt/(2*dx)*a*(u_alt(2)-u_alt(n));
    u(n) = 0.5*(u_alt(n-1)+u_alt(1)) - dt/(2*dx)*a*(u_alt(1)-u_alt(n-1));

    u_alt = u;
    t = t + dt;
end
```

Lax-Wendroff Verfahren:

```
function unew = laxwendroff(u, t_max, dt, dx, a)
t = 0;
N = length(u);
unew = u;
while (t < t_max)
    unew(2:N-1) = u(2:N-1) - (a*dt/(2*dx))*(u(3:N)-u(1:N-2)) +
        (a*dt/dx)^2/2*(u(3:N)-2*u(2:N-1)+u(1:N-2));
    unew(1) = u(1) - (a*dt/(2*dx))*(u(2)-u(N)) +
        (a*dt/dx)^2/2*(u(2)-2*u(1)+u(N));
    unew(N) = u(N) - (a*dt/(2*dx))*(u(1)-u(N-1)) +
        (a*dt/dx)^2/2*(u(1)-2*u(N)+u(N-1));

    u = unew;
    t = t + dt;
end
```

C.2. Matlab Code zur Burger's Gleichung

Upwind Verfahren:

```
function unew = upwind_burgers(u, t_max, dt, dx)
t = 0;
N = length(u);
unew = u;
while (t < t_max)
    unew(2:N) = u(2:N) - (u(2:N)*dt/dx).*(u(2:N)-u(1:N-1));
    unew(1) = 1;

    u = unew;
    t = t + dt;
end
```

Lax-Friedrichs Verfahren:

```
function u = laxfriedrichs_burgers(u_alt, t_max, dt, dx)
t = 0;
n = length(u_alt);
u = u_alt;
while (t < t_max)
    u(2:n-1) = 0.5*(u_alt(1:n-2)+u_alt(3:n)) -
        dt/(2*dx)*u_alt(1:n-2).*(u_alt(3:n)-u_alt(1:n-2));
    u(1) = 1;
    u(n) = 0;

    u_alt = u;
    t = t + dt;
end
```

Lax-Wendroff Verfahren:

```
function unew = laxwendroff_burgers(u, t_max, dt, dx)
t = 0;
N = length(u);
unew = u;
while (t < t_max)
    unew(2:N-1) = u(2:N-1) - (u(2:N-1)*dt/(2*dx)) .* (u(3:N)-u(1:N-2)) +
        (u(2:N-1)*dt/dx).^2 .* (u(3:N)-2*u(2:N-1)+u(1:N-2))/2;
    unew(1) = 1;
    unew(N) = 0;

    u = unew;
    t = t + dt;
end
```

C.3. Matlab Code des erhaltenden Upwind Verfahrens für die Burger's Gleichung

```
function unew = upwind_burgers_conserv(u, t_max, dt, dx)
t = 0;
N = length(u);
unew = u;
while (t < t_max)
    unew(2:N) = u(2:N) - (dt/dx)*(u(2:N).^2-u(1:N-1).^2)/2;
    unew(1) = u(1) - (dt/dx)*(u(1)^2-1);

    u = unew;
    t = t + dt;
end
```

Literaturverzeichnis

- [1] Randall J. LeVeque *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser Verlag, Basel, 1990

- [2] Peter D. Lax *Hyperbolic Partial Differential Equations*, AMS/CIMS, 2006

- [3] Kersti Ekeland *Essentially Non-Oscillatory Schemes for Conservation Laws in One Space Dimension*, NTNU, 1997

- [4] O. A. Oleinik *Discontinuous solutions of nonlinear differential equations*, Amer. Math. Soc. Transl. (2), 26 (1963), pp.95–172

- [5] K. W. Morton, D. F. Mayers *Numerical Solution of Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, 1994