Numerische Strömungsmechanik Sommersemester 2016

Hausaufgabe

Name: Roland Zimmermann

Matrikelnummer: 21426901

Mail Adresse: roland.zimmermann@stud.uni-goettingen.de

Abgabetermin: 05.08.2016

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	3
2.	Fragestellung	3
3.	Theorie 3.1. Die Diffusions-Advektion-Gleichung	3 3 4 5
4.	4.2. Aufgabe 2: FTCS-Lösung	8 9 9 10 12 13
	Auswertung der Ergebnisse 5.1. Numerische Korrektheit der FTCS-Lösung	15 15
	teratur Quellcode	15 15

1. Einleitung

2. Fragestellung

In dieser Hausaufgabe wird ein zweidimensionales quadratisches System betrachtet. In diesem soll die Wärmeausbreitung (siehe 3.1) beschrieben werden, welche durch ein extern erzeugtes Geschwindigkeitsfeld (durch einen Ventilator) hervorgerufen wird. Dieses Vektorfeld soll nicht zeitabhängig sein, und lässt sich in dimensionsloser Form durch

$$\vec{v} = (\pi \sin(2\pi x)\cos(\pi y), -2\pi \cos(2\pi x)\sin(\pi y))^t$$

beschreiben. Hierbei gibt es für jeden der vier Ränder je eine Randbedingung. So soll die Temperatur auf dem oberen Rand T=1 betragen, auf dem unteren dagegen T=0. An dem linken und rechten Rand soll dagegen bloß die jeweilige Normalenableitung verschwinden. Dies wird durch eine wärmeisoliernde Wand in dem System bedingt. Zu Beginn soll eine Temperaturverteilung der Form $T_{start}=y$ vorliegen.

Zur Untersuchung des System fallen mehrere Aufgaben an. So wird zuerst das Geschwindigkeitsfeld selber untersucht (siehe 4.1). Anschließend wird eine erste numerische Lösung des Problems (im FTCS-Schema) durchgeführt (siehe 4.2). Daraufhin wird nun die numerische Korrektheit dieser Lösung untersucht (siehe 4.3). Schließlich werden für verschiedene Parameter Simulationen durchgeführt, um unter anderem die Stabilität zu beurteilen (siehe 4.4, 4.5). Schließlich wird das Problem noch einmal gelöst, diesmal aber im BTCS-Schema (siehe 4.6).

3. Theorie

3.1. Die Diffusions-Advektion-Gleichung

Die Ausbreitung von Flüssigkeiten, Gasen beziehungsweise von Energie kann zum einen durch die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}T = D\nabla^2 T \tag{1}$$

und zum anderen durch die Advektionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}T = -\nabla \cdot (\vec{v} \cdot T) \tag{2}$$

beschrieben werden. Hierbei stehen T für die Verteilung der Energie (Temperatur), t für die Zeit und D für die Diffusionskonstante. Während die Diffusionsgleichung die zeitliche Ausbreitung der Partikel beziehungsweise der Energie, bedingt durch zufällige

Bewegungen, beschreibt, beschreibt die Advektionsgleichung den Partikelfluss der durch ein Geschwindigkeitsfeld herbeigeführt wird.

Fasst man diese beiden Effekte zusammen, so erhält man die Diffusions-Advektion-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}T = D\nabla^2 T - \nabla \cdot (\vec{v} \cdot T) \tag{3}$$

Hierbei kann nun, wenn ein gegebenen externes, divergenzfreies Geschwindigkeitsfeld gegeben ist, dieses aus der Divergenz herausgelöst werden, sodass sich

$$\frac{\partial}{\partial t}T + \vec{v} \cdot \nabla T = D\nabla^2 T \tag{4}$$

ergibt.

Durch das Einführen der Péclet-Zahl

$$Pe = \frac{Lv\rho c_p}{\lambda}$$

ist eine Entdimensionalisierung der Gleichung (4) möglich. Hierbei stehen L für eine charakteristische Länge, v für eine Geschwindigkeit, rho für die Dichte, c_p für die spezifische Wärmekapazität und λ für die Wärmeleitfähigkeit des jeweiligen Mediums. Somit ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t}T + Pe \cdot \vec{v} \cdot \nabla T = \nabla^2 T \tag{5}$$

3.2. Das FTCS-Schema

Eine mögliche Methode zur Lösung einer solchen partiellen Differenzialgleichung ist durch die Verfahrensgruppe der finiten Differenzen gegeben. Eine hierfür geeignete Diskretiserung des Problems ist in Form eines FTCS-Schemas (Forward in Time, Centered in Space) gegeben. Hierbei wird der Raum in der x-Richtung in $(N_x + 1)$ - und in der y-Richtung in $(N_y + 1)$ Stützstellen unterteilt, sodass sich ein räumliches Gitter ergibt. Zwischen diesen Punkten herrscht ein jeweiliger Abstand von $\Delta x = X/N_x$ und $\Delta y = Y/N_y$, wobei X und Y für die Ausmaße des zu beschreibenden Problems in der x- und y-Richtung sind.

Die Temperatur T(x, y), die hiermit beschrieben werden soll, geht somit in die Form $T_{i,j}$ über, wobei i der Index des Punktes in der x- und j der in der y-Richtung ist. Diese Indizes laufen von 0 bis N_x beziehungsweise N_y .

Um nun noch die Zeit zu erfassen, wird auch diese in Punkte diskretisiert, die einen Abstand Δ_t haben. Sodass sich insgesamt ein dreidimensionaler Würfel ergibt, dessen verschiedenen Ebenen für die verschiedenen Zeitpunkte stehen. Erneut geht die Temperatur $T(x,y) = T_{i,j}$ über in $T_{i,j}^N$, wobei N für den zeitlichen Index steht. Auch hier wird

von 0 an indiziert.

Diese Aufteilung erlaubt es nun, die in den Gleichung (5) vorkommenden Ableitungen zu beschreiben. Hierbei wird in dem *FTCS*-Schema die zeitliche Ableitung in der ersten und die räumlichen in der zweiten Ordnung beschrieben. Es ergibt sich für die Ableitungen

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,y) = \frac{T_{i,j}^{N+1} - T_{i,j}^{N}}{\Delta t},\tag{6}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}T(x,y) = \frac{T_{i+1,j}^N - T_{i-1,j}^N}{2\Delta x},\tag{7}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x, y) = \frac{T_{i+1,j}^N - 2T_{i,j}^N + T_{i-1,j}^N}{\Delta x^2}.$$
 (8)

Durch Einsetzen in die Gleichung (5) und Umstellen nach $T_{i,j}^{N+1}$ erhält man schließlich in der zweiten räumlichen Ordnung

$$T_{i,j}^{N+1} = T_{i,j}^{N} + \Delta t \left(-Pe \left(v_{i,j}^{x} \frac{T_{i+1,j}^{N} - T_{i-1,j}^{N}}{2\Delta x} + v_{i,j}^{y} \frac{T_{i,j+1}^{N} - T_{i,j-1}^{N}}{2\Delta x} \right) + \frac{T_{i+1,j}^{N} - 2T_{i,j}^{N} + T_{i-1,j}^{N}}{\Delta x^{2}} + \frac{T_{i,j+1}^{N} - 2T_{i,j}^{N} + T_{i,j-1}^{N}}{\Delta y^{2}} \right)$$
(9)

womit die Integration durchgeführt werden kann. Die Ausdrücke v^x und v^y stehen für die jeweilige x- und y-Komponente des zeitlich konstanten Geschwindigkeitsfeldes an dem jeweiligen Ort.

Des Weiteren sind allerdings noch die Randbedingungen zu beachten. Bei *Dirichlet*-Rändern muss an dem Schema nichts geändert werden. Bei *Neumann*-Rändern dagegen schon. Exemplarisch wird hierfür als Beispiels der linke Rand betrachtet, auf dem die erste Ableitung in x-Richtung verschwinden soll. Durch eine Taylor-Entwicklung und einen Koeffizientenvergleich erhält man die diskretisierte Randbedingung zweiter Ordnung

$$T_{i,j}^{N+1} - \frac{4}{3}T_{i+1,j}^{N+1} + \frac{1}{3}T_{i+2,j}^{N+1} = 0.$$

3.3. Das BTCS-Schema

Ein alternativer Ansatz zur Lösung ist das BTCS-Schema (Backward in Time, Centered in Space), bei der räumlich erneut eine Diskretisierung zweiter Ordnung durchgeführt wird, diese allerdings zum Zeitpunkt (N+1) ausgewertet wird. Zeitlich wird auch wieder ein Verfahren erster Ordnung verwendet. Somit ergibt sich der Ausdruck

$$T_{i,j}^{N} = T_{i,j}^{N+1} \alpha + \beta_{i-1,j}^{-} T_{i-1,j}^{N+1} + \beta_{i+1,j}^{+} T_{i+1,j}^{N+1} + \gamma_{i,j-1}^{-} T_{i,j-1}^{N+1} + \gamma_{i,j+1}^{+} T_{i,j+1}^{N+1}.$$
 (10)

Dabei wurden die folgenden Abkürzungen eingeführt und benutzt

$$\alpha = \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta t} \right), \tag{11}$$

$$\beta_{i,j}^{\pm} = \Delta t \left(-\frac{1}{\Delta x^2} \pm \frac{Pev_{i,j}^x}{2\Delta x} \right), \tag{12}$$

$$\gamma_{i,j}^{\pm} = \Delta t \left(-\frac{1}{\Delta y^2} \pm \frac{Pev_{i,j}^y}{2\Delta y} \right). \tag{13}$$

Um das Problem nun besser beschreiben zu können, wird das zweidimensionale Feld in einen eindimensionalen Spaltenvektor zusammengefasst. Hierfür ist es notwendig, die Indizes umzubenennen. Hierbei wird ab jetzt die folgende Konvention benutzt: durchlaufe erst alle x-Werte zu einem festen y-Wert, und erhöhe das y. Dies bewirkt, dass die Zeilen des Feldes hintereinander geschrieben werden:

$$T_{i,j}^N = T_{i+N_u j}^N.$$

Nun kann die Gleichung (10) als eine Matrixoperation der Form

$$\vec{T}^N = M \cdot \vec{T}^{N+1}.$$

mit der Matrix M ausgedrückt werden. Diese hat die fünf Diagonalen, die ungleich null sind in ihrem Hauptteil, und zwei weitere Submatrizen, die fast nur eine Hauptdiagonale haben, die ungleich null ist. Somit schreibe M nun als Blockmatrix

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix},$$

mit der Matrix A

welche die Randbedingungen am oberen, linken und rechten Rand umsetzt; und der Matrix ${\cal C}$

$$m{C} = egin{pmatrix} 1 & 0 & . & . & 0 \ 0 & 1 & 0 & . & . \ . & . & . & . \ . & 0 & 1 & 0 \ 0 & . & . & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

welche die Randbedingungen am unteren Rand umsetzt. Die Matrix B

setzt die implizite Gleichung (10) um. Um nun einen Zeitschritt vorzugehen, muss also nur noch die Matrix M invertiert werden, beziehungsweise das Gleichungssystem $M\vec{x} = \vec{b}$ gelöst werden.

Hierfür hat sich das SOR-Verfahren, welches eine Modifikation des $Gau\beta$ -Seidel-Verfahrens ist, als besonders geeignet herausgestellt. Dies sind beides iterative Lösungsverfahren. Um diese zu benutzen, wird die Matrix zuerst in drei Teilmatrizen $\mathbf{M} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$ zerlegt, wobei D eine Diagonal-, L eine untere Dreiecks- und U eine obere Dreiecksmatrix ist. Zudem wird der Residuen-Vektor $\vec{r_n} = \mathbf{M}\vec{x_n} - \vec{b}$ eingeführt, wobei der Index den jeweiligen Iterationsschritt angibt. Dieser Vektor beschreibt die Differenz zwischen der korrekten und der iterativen Lösung der Gleichung Mx = b.

Durch diese Zerlegung ist es möglich eine rekursive Bestimmungsformel [2, S. 25ff]

$$\vec{x}^n = \vec{x}^{n-1} - \alpha (\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \vec{r}^{n-1}$$

aufzustellen. Hierbei ist α der so genannte Relaxationsparameter. Bei dem Gauss-Seidel-Verfahren ist er gleich null.

Diese Matrizen-Gleichung kann in Summenschreibweise durch Eigenschaften triagonaler Matrizen aus der linearen Algebra auch als

$$x_i^{n+1} = (1 - \alpha)x_i^n + \frac{\alpha}{m_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} m_{i,j} x_j^{n+1} - \sum_{j=i}^{N} m_{i,j} x_j^n \right)$$
(14)

aufgefasst werden [2, S.30], wobei N die Dimensionen des Problems angibt.

4. Durchführung der Aufgaben

4.1. Aufgabe 1: Untersuchung von \vec{v}

Für die numerische Betrachtung des Problems spielt der Einfluss von \vec{v} eine entscheidende Rolle. Ist dieses Geschwindigkeitsfeld nämlich divergenzfrei, so ergibt sich eine mögliche, vereinfachende Betrachtung in diskretisierter Form (siehe). Für das externe Feld

$$\vec{v} = (\pi \sin(2\pi x)\cos(\pi y), -2\pi \cos(2\pi x)\sin(\pi y))^t$$

gilt

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial}{\partial x} (\pi \sin(2\pi x) \cos(\pi y) + \frac{\partial}{\partial y} (-2\pi \cos(2\pi x) \sin(\pi y)) = 0;$$

es ist somit divergenzfrei. Dies kann man auch grafisch nachvollziehen.

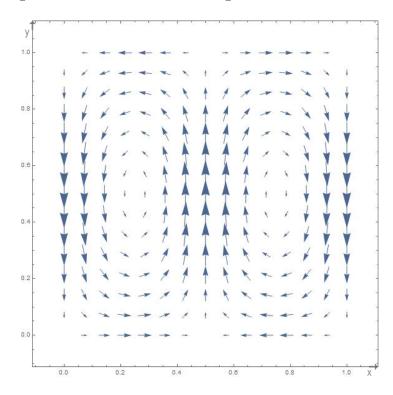


Abbildung 1: Grafische Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes \vec{v} in Abhängigkeit von x und y.

4.2. Aufgabe 2: FTCS-Lösung

4.3. Aufgabe 3: Numerische Korrektheit der FTCS-Lösung

Zur Beurteilung der Korrektheit der numerischen Lösung wird normalerweise erstmal versucht, das Ergebnis mit der analytischen Lösung zu vergleichen. Da dieses Problem allerdings nicht analytisch lösbar ist, muss hier anders verfahren werden. Als Ansatz hierbei wird eine mögliche stationäre Lösung geraten, und die Differenzialgleichung um einen Quellterm so ergänzt, dass dies die exakte Lösung des Problems ist.

Für diese konstruierte stationäre Lösung wird der Ansatz

$$T^* = \cos(\pi x)\sin(\pi y) + y$$

gewählt, da dies sowohl die Startverteilung umsetzt, als auch die vier Randbedingungen erfüllt. Um den Quellterm Q zu korrigieren, wird T^* in die stationäre Gleichung

$$Pe \cdot \vec{v} \nabla T^* = \nabla^2 T^* + Q$$

eingesetzt, welche auch Quellen berücksichtigt. Es ergibt sich somit

$$Q = Pe \cdot \vec{v} \nabla T^* - \nabla^2 T^*,$$

was sich nach Einsetzen des Ansatzes und des gegebenen Geschwindigkeitsfeldes zu

$$Q = \pi^2 \left(2\cos(\pi x)\sin(\pi y) - Pe \cdot \cos(\pi x)^3 \sin(2\pi y) \right) - 2Pe \cdot \pi \cos(2\pi x)\sin(\pi y)$$

ergibt.

Berücksichtigt man diesen Quellterm in dem FTCS-Schema, folgt:

$$\begin{split} T_{i,j}^{N+1} = & T_{i,j}^{N} + \Delta t \left(-Pe\left(v_{i,j}^{x} \frac{T_{i+1,j}^{N} - T_{i-1,j}^{N}}{2\Delta x} + v_{i,j}^{y} \frac{T_{i,j+1}^{N} - T_{i,j-1}^{N}}{2\Delta x} \right) \right. \\ & \left. + \frac{T_{i+1,j}^{N} - 2T_{i,j}^{N} + T_{i-1,j}^{N}}{\Delta x^{2}} + \frac{T_{i,j+1}^{N} - 2T_{i,j}^{N} + T_{i,j-1}^{N}}{\Delta y^{2}} + Q_{i,j} \right) \end{split}$$

Dies führt zu Änderungen des Quellcodes im Vergleich zur vorherige Aufgabe in der Methode ... in den Zeilen ...-............ Nun kann zu jedem Zeitpunkt die Differenz zwischen der stationären Lösung $T_{i,j}^*$ und der numerischen Lösung $T_{i,j}^N$ berechnet werden als

$$\sigma^N = \sqrt{(\Sigma_{i,j}(T_{i,j}^N - T_{i,j}^*)^2)}.$$

Diese Abweichung wird nun alle 100 Zeitschritte ausgegeben. Dies führt zu Veränderungen in der Methode ... in Zeile ... bis

Setzt man nun noch $N_x = N_y$, und variiert diese Werte für ein festes Δt , so können

Aussagen getroffen werden, über die Abweichungen der stationären numerischen T und der tatsächlichen stationären Lösung T^* in Abhängigkeit von der Gittergröße.

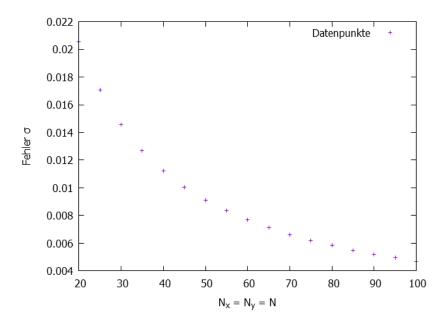


Abbildung 2: Grafische Auftragung der numerischen Abweichung σ in Abhängigkeit von der Gittergröße N.

In Abbildung (2) ist der Verlauf des Fehlers σ in Abhängigkeit von $N_x = N_y$ für Pe = 2 für einen Zeitschritt von $\Delta t = 2 \cdot 10^{-5}$ aufgetragen. Zudem wurde eine Regression durchgeführt, welche eine Abhängigkeit der Form $\sigma = N^{-1.2}$ ergeben hat. Dazu ist noch anzumerken, dass für größere N-Werte (größer als 115) der Fehler nicht mehr weiter sinkt, sondern sogar stark anwächst, da die numerische Lösung divergent wird.

4.4. Aufgabe 4: Auswertung verschiedener FTCS-Lösungen

Im weiteren Verlauf wird der zuvor eingeführte Quellterm Q=0 gesetzt. Nun kann das Temperaturfeld T für zwei verschiedene $P\'{e}clet$ -Zahlen Pe=2 und Pe=10 simuliert, und zu den drei Zeitpunkten t=0.005, t=0.05 und t=0.5 visualisiert werden. Hierfür wird $\Delta t=2\cdot 10^-4$ und $N=N_x=N_y=30$ angenommen. Die Darstellungen sind in den Abbildungen (3) und (4) zu finden.

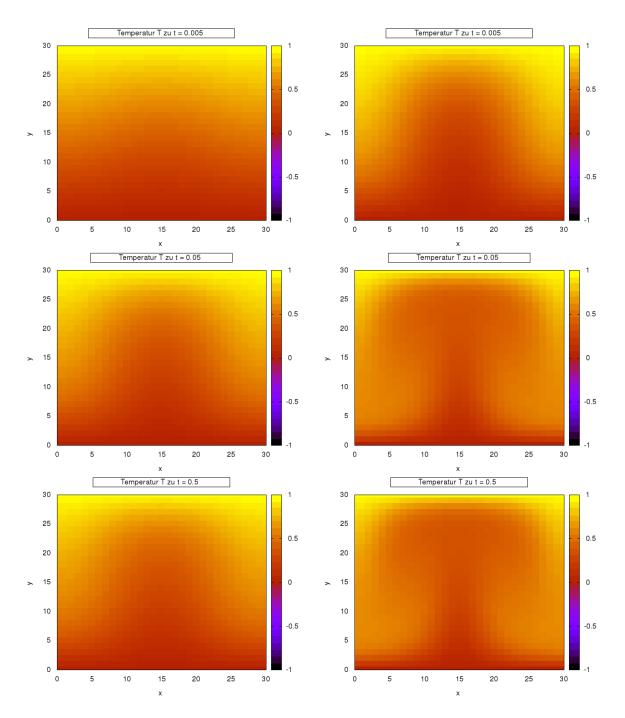


Abbildung 3: Temperatur für Pe=2. **Abbildung 4:** Temperatur für Pe=10.

4.5. Aufgabe 5: Beurteilung der Stabilität der FTCS-Lösung

Um weitere Aussagen über die numerische Lösung treffen zu können, wird nun noch die Stabilität betrachtet. Hierfür wird zuerst für $N=N_x=N_y=30$ die maximale Zeitschrittgröße Δt_{max}^{Pe} für die $P\acute{e}clet\text{-}Zahlen$ $Pe\in\{0.1,1.0,10\}$ bestimmt. Diese ergeben sich zu

$$\Delta t_{max}^{0.1} = 2.785 \cdot 10^{-4} 2.788,$$

$$\Delta t_{max}^{1.0} = 2.787 \cdot 10^{-4} 2.789,$$

$$\Delta t_{max}^{10} = 2.795 \cdot 10^{-4}.$$

Dies liefert einen ersten Eindruck: Die Stabilitätsgrenze hängt von Pe ab, und nimmt für steigende Pe in gewissen, geringen Maßen zu.

Für eine genauere Aussage wird nun eine *von-Neumann-Stabilitätsanalyse* durchgeführt. Hierfür wird für die Lösung ein Ansatz der generellen Form

$$T_{i,j}^{N} = \xi^{N} e^{i(k_x \Delta x \cdot i + k_y \Delta y \cdot j)}$$

gewählt. Durch Einsetzen in Gleichung (9) und Kürzen ergibt sich der Ausdruck

$$\xi = 1 - \frac{\Delta t P e v^x}{2\Delta x} \left(e^{ik_x \Delta x} - e^{-ik_x \Delta x} \right) - \frac{\Delta t P e v^y}{2\Delta y} \left(e^{ik_y \Delta y} - e^{-ik_y \Delta y} \right) - \frac{2\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{2\Delta t}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left(e^{ik_x \Delta x} + e^{-ik_x \Delta x} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \left(e^{ik_y \Delta y} + e^{-ik_y \Delta y} \right),$$

welcher durch trigonometrische Identitäten in

$$\xi = 1 - i\Delta t Pe\left(\frac{v^x}{\Delta x}\sin(k_x \Delta x) + \frac{v^y}{\Delta y}\sin(k_y \Delta y)\right) + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\cos(k_x \Delta x) + \frac{2\Delta t}{\Delta y^2}\cos(k_y \Delta y) - \frac{2\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{2\Delta t}{\Delta y^2}$$

übergeht. Damit das Verfahren konvergiert, muss ξ kleiner 1 ein. Nähert man hier den Sinus und den Cosinus mit den Maximalwerten, und schätzt die Komponenten v^x und v^y nach oben durch π und 2π ab, so ergibt sich

$$\lambda^2 \left(64 + \frac{Pe2\pi^2}{\Delta x^2} \right) - 16\lambda < 0, \tag{15}$$

mit der CFL-Zahl $\lambda = \Delta t/\Delta x^2$. Eine Lösung dieser Ungleichung ergibt folgenden Bereich, sodass das FTCS-Schema konvergiert:

$$0 < \lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{8\left(\frac{Pe}{\Delta x}\right)^2}{32\left(\frac{Pe}{\Delta x}\right)^2 + \pi^2}.$$
 (16)

Dies ist durch die Abschätzungen nach oben bedingt, eine obere Schranke. Liegt λ außerhalb des Bereiches, aber nahe an der Grenze, so ist ein Konvergieren nicht sicher ausgeschlossen. Liegt λ allerdings in dem Bereich, so konvergiert das Verfahren sicher. Dieses Verhalten konnte an den zuvor empirisch ermittelten Grenzen für Δt verifiziert werden.

4.6. Aufgabe 6: BTCS-Lösung

Nachdem zuvor die explizite Diskretisierung untersucht wurde, wird das Problem nun implizit im BTCS-Schema betrachtet (siehe 3.3). Hierfür wird zuerst die zuvor beschriebene Matrix \mathbf{M} implementiert. Dies wird in (...) durchgeführt. Nun muss nur noch in jedem Integrationsschritt diese Matrix invertiert werden. Dafür wurde das SOR-Verfahren in (...) nach Gleichung (14) implementiert. Dabei werden in jedem einzelnen Interationsschritt die Residuen $\vec{r} = \mathbf{M}\vec{x} - \vec{b}$ für die Lösung von $\mathbf{M}\vec{x} = \vec{b}$ berechnet, und gefordert, dass der Betrag dieser kleiner als $|\vec{r}| < 10^{-4}$ ist. Dies wird als Abbruchbedingung im dem SOR-Verfahren genutzt. Um die Vorteile des SOR wirklich nutzen zu können, muss zuerst ein geeigneter Relaxationsparameter α ermittelt werden. Hierzu wird Pe = 10, $N_x = N_y = 30$ und $\Delta t = 100$ gesetzt. Nun wird α mit einer Schrittweite von 0.05 ab 1.0 variiert und die benötigten Iterationen ermittelt.

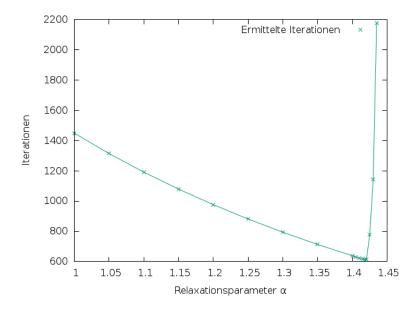


Abbildung 5: Grafische Darstellung der benötigten Iterationen zur Konvergenz in Abhängigkeit vom Relaxationsparameter α .

Die grafische Auftragung der so ermittelten Ergebnisse ist in Abbildung (5) zu finden. Es ist gut erkennbar, dass das bei $\alpha=1.41$ die geringste Anzahl an Iterationen benötigt wurde. Somit wird im weiteren Verlauf dieser Parameter genutzt.

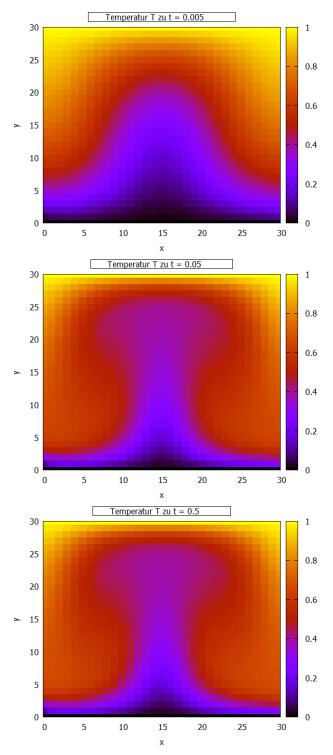


Abbildung 6: Temperatur nach dem *BTCS-Schema* für Pe=10 und $\Delta t=2\cdot 10^{-4}$.

Schließlich wird das zuvor implementierte und getestete Verfahren noch einmal für die Parameterwahl aus Aufgabenpunkt (4.4) angewendet, um die Ergebnisse miteinander zu vergleichen. Hierfür wurde also erneut Pe=10, $\Delta t=2\cdot 10^{-4}$ und $t\in\{0.005,0.05,0.5\}$ gewählt. Die hierdurch erhaltenen Temperaturverteilungen sind erneut als Heatmap in Abbildung (6) dargestellt.

5. Auswertung der Ergebnisse

5.1. Numerische Korrektheit der FTCS-Lösung

Durch den Vergleich in Abschnitt (4.3) ist erkennbar, dass der numerische Fehler für größere Gitter deutlich geringer wird. Dieser Abfall hat allerdings auch eine bestimmte Grenze. Überschreitet $N=N_x=N_y$ diesen Wert, so kann die numerische Lösung nicht mehr konvergieren. Den Grund für dieses Verhalten (Abweichung der CFL-Zahl) ist in Abschnitt (4.5) beschrieben und erklärt. Anzumerken ist noch, dass der Fehler noch rapider gefallen wäre, wenn man den Gesamtfehler durch die Anzahl der zu berechnenden Gitterpunkte zwecks einer Normalisierung geteilt hätte.

Literatur

- [1] Andres Honecker, Thomas Pruschke, Salvatore R. Manmana, Scriptum zur Vorlesung: Computergestütztes wissenschaftliches Rechnen. Göttingen, Sommersemester 2016
- [2] W. Auzinger, Lecture Notes Iterative Solution of Large Linear Systems. Wien, 2011

A. Quellcode

```
1 #include <iostream>
2 #include <fstream>
3 #include <vector>
4 #include <cstdlib>
5 #include <iomanip>
6 #include <cmath>
s using namespace std;
10 //custom type which discribes a 2d grid. use this instead of arrays
     for access violation safety
11 typedef vector<vector<double >> grid_t;
14 //integrates the ODE with the FTCS scheme. expects the parameters:
15 // values: a grid_t object which contains current distribution of
     the temperature T
16 // v0x, v0y: a grid_t object which contains the x/y component of
     the velocity v0
    delta_t, delta_x, delta_y, pe: the time-step-size, the step
     size in x/y direction and the Péclet number
18 void ftcs_time_step(grid_t& values, grid_t v0x, grid_t v0y, const
     double delta_t, const double delta_x, const double delta_y,
     const double pe)
19 {
    //get the dimensions of the grid
20
    size_t dimension_x = values.size();
21
    size_t dimension_y = values.at(0).size();
22
23
    //create copy of the grid with the same dimensions
24
    //this will be used for the calculation of the derivatives
    grid_t old_values;
    for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
27
28
      //add a new row
      old_values.push_back(vector<double>());
      for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
      {
32
        //copy value
33
        old_values.at(x).push_back(values.at(x).at(y));
    }
```

```
37
    //loop over the entire inner grid (ignore the 4 outer sides of
38
        the rectangle) and calculate the new value using the
        FTCS-scheme
    for (size_t x=1; x<dimension_x-1; x++)
39
40
       for (size_t y=1; y<dimension_y-1; y++)
41
      {
42
         values.at(x).at(y) += delta_t*
43
44
                       1.0/\text{pow}(\text{delta}_{-x}, 2) * (\text{old}_{-v}\text{alues}.\text{at}(x+1).\text{at}(y) -
45
                           2.0* old_values.at(x).at(y) +
                          old_values.at(x-1).at(y))
                    + 1.0/pow(delta_y, 2)*(old_values.at(x).at(y+1) -
46
                        2.0* old_values.at(x).at(y) +
                        old_values.at(x).at(y-1))
                       -pe*
                         (
                           v0x. at(x). at(y)/(2.0*delta_x)*(old_values.at(x+1).at(y)-old_values)
49
50
                             v0y. at(x). at(y)/(2.0*delta_y)*(old_values.at(x).at(y+1)-ellowers)
                    );
      }
53
    //now take care of the four boundary conditions
56
57
    //left/right boundaries (Neumann boundaries)
    for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
59
60
       values at (0) at (y) = 1.0/3.0*(4.0*values at (0+1) at (y) -
61
          values . at (0+2) . at (y);
       values. at (dimension_x - 1). at (y) =
          -2.0/3.0*(-2.0*values.at(dimension_x-2).at(y) +
          1.0/2.0* values . at (dimension_x -3). at (y));
    }
63
64
    //bottom/top boundaries (Dirichlet boundaries)
65
    for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
66
       values.at(x).at(0) = 0.0;
68
       values . at (x) . at (dimension_y -1) = 1.0;
69
70
```

```
71
72 }
74 int main(int argc, char* argv[])
75 {
    //print information for the usage
    cout << "Use this program to calculate the temperature with the
77
        FTCS-scheme in the rectangle." << endl;
    cout << "Expects the follwing set of parameters:" << endl;
78
79
    cout << " \setminus toutput file : \setminus tThe path to the file in which the
        results will be stored." << endl;
    cout << "\tN_x:\t\tThe amount of grid points in the x-direction."
81
       \ll endl;
    cout \ll "\tN_y\t\t amount of grid points in the y-direction."
82
       \ll endl;
    cout << "\tPe:\t\tThe Péclet-Number" << endl;
    cout \ll \text{``} tMax t t tThe maximum time until the system will be
        simulated." << endl;
    cout << "\tDelta t\t\tThe time step size for the integration." <<
85
        endl;
    //read entered parameters
87
88
    //create output stream
89
     ofstream outputFile;
90
     outputFile.open(argv[1]);
91
     outputFile << fixed << setprecision(5);
    //the amount of grid points in the x direction
94
    const size_t dimension_x = (atoi)(argv[2])+1;
95
    //the distance between to grid points
96
     const double delta_x = 1.0/(dimension_x - 1);
97
    //the amount of grid points in the x direction
    const size_t dimension_y = (atoi)(argv[3]) + 1;
100
    //the distance between to grid points
101
    const double delta_y = 1.0/(dimension_y - 1);
102
    //Péclet –number
    const double pe = atof(argv[4]);
    //maximum time until which the system will be simulated
106
    const double \max_{t} = atof(argv[5]);
    //the time step size
```

```
const double delta_t = atof(argv[6]);
109
    cout << "Entered parameters:" << endl;</pre>
111
     cout << "\tNx:" << dimension_x << "\tNy:" << dimension_y <<
112
        "\tPe:" << pe << "\tMax t" << max_t << "\tDelta t:" << delta_t
       << endl;
113
    //to store the x component of the velocity v0
114
     grid_t v0x;
115
    //to store the y component of the velocity v0
     grid_t v0y;
117
    //to store the current temperature
     grid_t values;
119
120
    //create the new grids
    for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
       //add a new row
124
       v0x.push_back(vector < double > ());
125
       v0y.push_back(vector<double>());
126
       values.push_back(vector<double>());
127
       for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
       {
130
         //add the v0 values
         v0x.at(x).push_back(M_PI*sin(2*M_PI*x*delta_x)*cos(M_PI*y*delta_y));
         v0y.at(x).push_back(-2.0*M_PI*cos(2*M_PI*x*delta_x)*sin(M_PI*y*delta_y));
         //add the start temperature of the rectangle
         values.at(x).push_back(y*delta_y);
136
       }
    }
138
139
    //loop over the time, until we have reached the maximum time
    for (double t=0.0; t<\max_{t}; t+=delta_{t})
141
142
       ftcs_time_step(values, v0x, v0y, delta_t, delta_x, delta_y, pe);
143
144
145
    //print the final grid's values in the givven output file in a
        matrix form
    for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
147
148
       for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
149
```

```
150
         outputFile << values.at(x).at(y) << "\t";
      outputFile << "\n";
    return 1;
156
157
                              source/task02.cpp
 1 #include <iostream>
 2 #include <fstream>
 3 #include <vector>
 4 #include <cstdlib>
 5 #include <iomanip>
 6 #include <cmath>
 s using namespace std;
10 //custom type which discribes a 2d grid. use this instead of arrays
     for access violation safety
11 typedef vector<vector<double >> grid_t;
14 //integrates the ODE with the FTCS scheme and returns the error,
     compared with the stationary solution. expects the parameters:
      values: a grid_t object which contains current distribution of
     the temperature T
     v0x, v0y: a grid_t object which contains the x/y component of
     the velocity v0
      source: a grid_t object which contains the source values
18 // delta_t, delta_x, delta_y, pe: the time-step-size, the step
     size in x/y direction and the Péclet number
19 double ftcs_time_step(grid_t& values, grid_t v0x, grid_t v0y,
     grid_t source, const double delta_t, const double delta_x, const
     double delta_y, const double pe)
20 {
    //get the dimensions of the grid
    size_t dimension_x = values.size();
22
    size_t dimension_y = values.at(0).size();
23
    //create copy of the grid with the same dimensions
    //this will be used for the calculation of the derivatives
26
    grid_t old_values;
27
```

```
28
    for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
29
30
      //add a new row
31
      old_values.push_back(vector<double>());
32
      for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
        //copy value
35
        old_values.at(x).push_back(values.at(x).at(y));
36
37
    }
38
39
    //loop over the entire inner grid (ignore the 4 outer sides of
40
       the rectangle) and calculate the new value using the
       FTCS-scheme
    for (size_t x=1; x<dimension_x-1; x++)
41
      for (size_t y=1; y<dimension_y-1; y++)
43
        values.at(x).at(y) += delta_t*
45
46
                     1.0/\text{pow}(\text{delta_x}, 2) * (\text{old_values.at}(x+1).\text{at}(y) -
47
                        2.0* old_values.at(x).at(y) +
                        old_values.at(x-1).at(y)
                  + 1.0/pow(delta_y, 2)*(old_values.at(x).at(y+1) -
48
                      2.0* old_values.at(x).at(y) +
                      old_values.at(x).at(y-1)
                     -pe*
49
                       (
                         v0x. at(x). at(y)/(2.0*delta_x)*(old_values.at(x+1).at(y)-old_values)
51
                          53
                       + source.at(x).at(y)
                   );
      }
56
57
58
    //now take care of the four boundary conditions
59
    //left/right boundaries (Neumann boundaries)
61
    for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
62
63
```

```
values . at (0) . at (y) = 1.0/3.0*(4.0*values . at (0+1) . at (y) -
         values . at (0+2) . at (y);
      values. at (dimension_x - 1). at (y) =
65
          -2.0/3.0*(-2.0*values.at(dimension_x-2).at(y) +
          1.0/2.0* values . at (dimension_x -3). at (y));
    }
66
67
    //bottom/top boundaries (Dirichlet boundaries)
68
    for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
69
70
      values.at(x).at(0) = 0.0;
71
      values.at(x).at(dimension_y-1) = 1.0;
72
73
74
    //now calculate the error, compared to the stationary solution
75
    //loop over all elements and compare them
    double error = 0.0;
    for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
78
79
      for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
80
      {
81
        error += pow(
82
                     values. at(x). at(y) -
                         (\cos(M_PI*delta_x*x)*\sin(M_PI*delta_y*y)+y*delta_y)
                    ,2);
      }
85
86
    return sqrt(error);
89
90
91 int main(int argc, char* argv[])
92 {
    //print information for the usage
93
    cout << "Use this program to calculate the temperature with the
       FTCS-scheme in the rectangle with a source, and to compare the
       stationary solution with the numerical." << endl;
    cout << "Expects the follwing set of parameters:" << endl;
95
96
    cout << "\toutput file:\tThe path to the file in which the
       results will be stored." << endl;
    cout << "\tN_x:\t\tThe amount of grid points in the x-direction."
98
       \ll endl;
```

```
cout << "\tN_y\t\tThe amount of grid points in the y-direction."
aa
       \ll endl;
    cout << "\tPe:\t\tThe Péclet-Number" << endl;
100
    cout << "\tMax t\t\tThe maximum time until the system will be
        simulated." << endl;
    cout << "\tDelta t\t\tThe time step size for the integration." <<
102
        endl;
103
    //read entered parameters
104
    //create output stream
    ofstream outputFile;
     outputFile.open(argv[1]);
108
     outputFile << fixed << setprecision(5);
109
110
    //the amount of grid points in the x direction
111
    const size_t dimension_x = (atoi)(argv[2]) + 1;
    //the distance between to grid points
113
    const double delta_x = 1.0/(dimension_x - 1);
114
115
    //the amount of grid points in the x direction
116
    const size_t dimension_y = (atoi)(argv[3]) + 1;
    //the distance between to grid points
    const double delta_y = 1.0/(dimension_y - 1);
119
120
    //Péclet –number
    const double pe = atof(argv[4]);
    //maximum time until which the system will be simulated
    const double max_t = atof(argv[5]);
    //the time step size
     const double delta_t = atof(argv[6]);
126
127
    cout << "Entered parameters:" << endl;</pre>
128
    cout << "\tNx: " << dimension_x << "\tNy: " << dimension_y <<
        "\tPe: " << pe << "\tMax t: " << max_t << "\tDelta t: " <<
        delta_t << endl;
130
    //to store the x component of the velocity v0
131
     grid_t v0x;
    //to store the y component of the velocity v0
    grid_t v0y;
    //to store the current temperature
135
    grid_t values;
136
    //to store the source of the temperature
```

```
grid_t sources;
138
     //create the new grids
140
     for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
141
       //add a new row
143
       v0x.push_back(vector < double > ());
144
       v0y.push_back(vector<double>());
145
       values.push_back(vector<double>());
146
       sources.push_back(vector<double>());
148
       for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
150
         //add the v0 values
         v0x.at(x).push_back(M_PI*sin(2*M_PI*x*delta_x)*cos(M_PI*y*delta_y));
         v0y. at(x). push_back(-2.0*M_PI*cos(2*M_PI*x*delta_x)*sin(M_PI*y*delta_y));
153
         //add the start temperature of the rectangle
          values.at(x).push_back(y*delta_y);
156
157
         //add the source of the temperature of the rectangle
158
         sources.at(x).push_back(
           pow(M_PI, 2) *(cos(M_PI*delta_x*x)*sin(M_PI*delta_y*y)*2
           - \text{ pe*pow}(\cos(x*\text{delta}_x*\text{M}_PI), 3)*\sin(2*\text{M}_PI*\text{delta}_y*y))
161
           -\text{pe}*2*M_PI*\cos(2*M_PI*\text{delta}_x*x)*\sin(M_PI*y*\text{delta}_y)
162
         );
163
       }
164
     }
166
     //to print just every 100th error comparison
167
     size_t iteration = 0;
168
     //loop over the time, until we have reached the maximum time
169
     for (double t=0.0; t<\max_{t}; t+=delta_{t})
170
       double err = ftcs_time_step(values, v0x, v0y, sources, delta_t,
172
           delta_x , delta_y , pe);
173
       //print error value
174
       if (iteration ++ % 100 == 0)
       {
            cout << "time:\t" << t << "\terror:\t" << err << "\n" <<
               flush:
            iteration = 0;
178
179
```

```
}
180
181
    //print the final grid's values in the givven output file in a
182
        matrix form
     for (size_t y=0; y<dimension_y; y++)
       for (size_t x=0; x<dimension_x; x++)
186
         outputFile \ll values.at(x).at(y) \ll " t";
187
       outputFile << "\n";
190
191
    return 1;
192
193
                               source/task03.cpp
 1 #include <iostream>
 2 #include <fstream>
 3 #include <vector>
 4 #include <cstdlib>
 5 #include <iomanip>
 6 #include <cmath>
 7 #include "../../lib/linear_system.h"
 8 #include "../../lib/square_matrix.h"
10 using namespace std;
11 using namespace numerical;
  //custom type which discribes a 2d grid. use this instead of arrays
      for access violation safety
14 typedef vector<vector<double >> grid_t;
16 /*calculates the variable beta. expects the parameters:
     plus: indicates whether beta plus or beta minus will be calculated
    delta_{-}t , delta_{-}x , delta_{-}y , pe: the time-step-size , the step size
        in x/y direction and the Péclet number
    x,y: the x/y coordinate of the point on which beta is desired
21 double beta (bool plus, double delta_t, double delta_x, double
      delta_y, double pe, double x, double y)
    if (plus)
    {
24
```

```
return delta_t*(-1.0 / pow(delta_x, 2) + (pe*(M_PI*sin(2 *
25
         M_PI*x*delta_x)*cos(M_PI*y*delta_y))) / (2.0*delta_x));
    }
26
    else
27
28
      return delta_t*(-1.0 / pow(delta_x, 2) - (pe*(M_PI*sin(2 *
29
         M_PI*x*delta_x)*cos(M_PI*y*delta_y))) / (2.0*delta_x));
    }
30
31 }
  /*calculates the variable ganna. expects the parameters:
    plus: indicates whether gamma plus or gamma minus will be
       calculated
    delta_t, delta_x, delta_y, pe: the time-step-size, the step size
       in x/y direction and the Péclet number
    x,y: the x/y coordinate of the point on which gamma is desired
38 double gamma(bool plus, double delta_t, double delta_x, double
     delta_y, double pe, double x, double y)
39 {
    if (plus)
40
41
      return delta_t*(-1.0 / pow(delta_y, 2) + (pe*(-2.0*M_PI*cos(2 * ...)))
         M_PI*x*delta_x)*sin(M_PI*y*delta_y))) / (2.0*delta_y));
43
    else
44
45
      return delta_t*(-1.0 / pow(delta_y, 2) - (pe*(-2.0*M_PI*cos(2 * 
46
          M_{-}PI*x*delta_{-}x\;)*sin\left(M_{-}PI*y*delta_{-}y\;\right))\;)\;\;/\;\;\left(2.0*delta_{-}y\;\right))\;;
47
  }
48
49
50 int main(int argc, char* argv[])
51
    //print information for the usage
    cout << "Use this program to calculate the temperature with the
       BTCS-scheme in the rectangle." << endl;
    cout << "Expects the follwing set of parameters:" << endl;
54
    cout << "\toutput file:\tThe path to the file in which the
       results will be stored." << endl;
    cout \ll "\tN_x:\t\t. The amount of grid points in the
57
       x-direction." << endl;
```

```
cout \ll "\tN_y\t\t amount of grid points in the y-direction."
58
       \ll endl;
    cout << "\tPe:\t\tThe Péclet-Number" << endl;
59
    cout \ll \text{``} tMax t t tThe maximum time until the system will be
       simulated." << endl;
    cout << "\tDelta t\t\tThe time step size for the integration." <<
       endl;
62
    //read entered parameters
63
    //create output stream
    ofstream outputFile;
    outputFile.open(argv[1]);
67
    outputFile << fixed << setprecision(5);
68
69
    //the amount of grid points in the x direction
    const size_t dimension_x = (atoi)(argv[2])+1;
    //the distance between to grid points
72
    const double delta_x = 1.0/(dimension_x - 1);
73
74
    //the amount of grid points in the x direction
75
    const size_t dimension_y = (atoi)(argv[3]) + 1;
76
    //the distance between to grid points
77
    const double delta_y = 1.0/(dimension_y - 1);
78
79
    //Péclet –number
80
    const double pe = atof(argv[4]);
81
    //maximum time until which the system will be simulated
82
    const double max_t = atof(argv[5]);
    //the time step size
84
    const double delta_t = atof(argv[6]);
85
86
    cout << "Entered parameters:" << endl;</pre>
87
    cout << "\tNx: " << dimension_x << "\tNy: " << dimension_y <<
       "\tPe: " << pe << "\tMax t: " << max_t << "\tDelta t: " <<
       delta_t << endl;
89
    //the length of the value vector
90
    size_t n = dimension_x * dimension_y;
91
    //create a new square matrix (nXn) to store the matrix M
    square_matrix coeff_matrix(n, 0);
94
95
    //create const value for the variable alpha
```

```
const double alpha = delta_t * (2.0 / pow(delta_x, 2) + 2.0 /
97
       pow(delta_y, 2) + 1.0;
98
    //now set the values of the three matrices
99
    //Matrix A
    //main diagonal for the neuman boundaries
    for (size_t i = 0; i < dimension_x; i++)
103
104
       coeff_matrix.set_value(i, i, 1.0);
106
107
    //first row (for the dirichlet boundaries)
108
    coeff_matrix.set_value(0, 0, 2.0);
    coeff_matrix.set_value(0, 1, -4.0 / 3.0);
110
    coeff_matrix.set_value(0, 2, 1.0 / 3.0);
111
    for (size_t i = dimension_x; i < n; i += dimension_x)
113
114
       coeff_matrix.set_value(0, i - 2, 1.0 / 3.0);
115
       coeff_matrix.set_value(0, i - 1, -4.0 / 3.0);
116
       coeff_matrix.set_value(0, i, 2.0);
       coeff_matrix.set_value(0, i + 1, -4.0 / 3.0);
       coeff_matrix.set_value(0, i + 2, 1.0 / 3.0);
119
120
    coeff_matrix.set_value(0, dimension_x - 1, -4.0 / 3.0);
    coeff_{matrix.set_value}(0, dimension_{x} - 2, 1.0 / 3.0);
123
124
    //Matrix B
    //contains the biggest part of the BTCS-scheme
126
    for (size_t i = dimension_x; i < n - dimension_x; i++)
127
128
       coeff_matrix.set_value(i, i - dimension_x, gamma(false,
          delta_t, delta_x, delta_y, pe, i % dimension_x,
          i/dimension_x));
       coeff_matrix.set_value(i, i - 1, beta(false, delta_t, delta_x,
130
          delta_y, pe, i % dimension_x, i/dimension_x));
       coeff_matrix.set_value(i, i, alpha);
       coeff_matrix.set_value(i, i + 1, beta(true, delta_t, delta_x,
          delta_y, pe, i % dimension_x, i/dimension_x));
       coeff_matrix.set_value(i, i + dimension_x, gamma(true, delta_t,
133
          delta_x, delta_y, pe, i % dimension_x, i/dimension_x));
    }
```

```
135
    //Matrix C
136
     //main diagonal for the neuman boundaries
137
     for (size_t i = n - dimension_x; i < n; i++)
138
       coeff_matrix.set_value(i, i, 1.0);
140
141
142
     //create two vectors to store the temperature and to calculate
143
        the new one
     vector < double > values;
     vector<double> old_values;
145
146
     // fill them with the starting temperature
147
     for (size_t y = 0; y < dimension_y; y++)
148
149
       for (size_t x = 0; x < dimension_x; x++)
151
         old_values.push_back(y*delta_y);
         values.push_back(y*delta_y);
153
154
    }
155
156
     //loop over the time, until we have reached the maximum time
157
     for (double t = 0.0; t < max_t; t += delta_t)
158
159
       //invert the matrix M/solve the linear system to get the new
160
          temperature (value)
       linear_system_solve_sor(coeff_matrix, values, old_values, 1.44,
161
          1e-4);
162
       //copy the new values into the old_values vector for the next
163
          iteration
       for (size_t i = 0; i < n; i++)
         old_values.at(i) = values.at(i);
166
167
168
169
     //print the final grid's values in the givven output file in a
        matrix form
     for (size_t i = 0; i < n; i++)
171
172
       outputFile << values.at(i) << "\t";
173
```

source/task06.cpp