

Computational Physics

Florian Bruckner

Christian Doppler Laboratory of Advanced Magnetic Sensing and Materials, Institute of Solid State Physics, Vienna University of Technology, Austria

2015-02-25

1 Partielle Differentialgleichungen (PDEs)

- Bei **partiellen** Differentialgleichungen (Partial Differential Equations, PDE), treten mehr als eine unabhängige Variablen auf.
- Mögliche Differentialoperatoren: div , rot , Δ , ∂_t , ...
- Partikuläre Lösung durch Faltung mit Greensfunktion
- Problem mit Randbedingungen, Inhomogenitäten, Nichtlinearitäten: in den seltensten Fällen sind analytische Lösungen bekannt.
- Lösungen sind Felder (Temperature, Magnetfeld, Druck, ...)

Lineare partielle Differentialgleichung 2. Ordnung

$$\sum_{i,j=1}^n \underbrace{a_{ij}(x) u_{x_i, x_j}}_{\text{Hauptteil}} + F(x, u, u_{x_i}, \dots, u_{x_j}) = 0$$

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij} u_{x_i, x_j} + \sum_{i=1}^n b_i u_{x_i} + c u = f$$

linear

- Koeffizienten nur von den unabhängigen Variablen x_i abhängig
- Superpositionsprinzip
- z.B:

$$\sin(x)u_{xx} + \cos(y)u_{yy} = \exp(-x^2 - y^2)$$

nicht-linear

- Koeffizienten auch von der Unbekannten u bzw. deren Ableitungen abhängig
- Oft keine eindeutige Lösung
- z.B: Burgers-Gleichung

$$u_t + u u_x = c u_{xx}$$

konstante Koeffizienten

- $a_{ij} = \text{constant}$

$$u_{xx} + 3 u_{xy} + u_y + u_x - u = e^{x-y}$$

variable Koeffizienten

- $a_{ij} = f(x, y)$

$$\sin(xy) u_{xx} + u_{xy} + y u_x - u = e^{x-y}$$

- Für PDEs 2. Ordnung:

$$\sum_{i,j=1}^n \underbrace{a_{ij}(x)}_{\text{Hauptteil}} u_{x_i, x_j} + F(x, u, u_{x_1}, \dots, u_{x_j}) = 0$$

- Koeffizienten des Hauptteils bestimmen die Klasse der Differentialgleichung
- Klasseneinteilung je nach Definitheit der Koeffizienten-Matrix
- Je nach Klasse sind verschiedene Problemstellungen sinnvoll
- Klasse ändert sich nicht durch Ähnlichkeitstransformationen
- Beispiel für Gleichung mit 2 Unbekannten x und y :

$$A = \begin{pmatrix} a_{xx} & a_{xy} \\ a_{yx} = a_{xy} & a_{yy} \end{pmatrix}$$

$$D = \det A = a_{xx} a_{yy} - a_{xy}^2 = \begin{cases} > 0 & \text{definit (elliptisch)} \\ = 0 & \text{semi-definit (parabolisch)} \\ < 0 & \text{indefinit (hyperbolisch)} \end{cases}$$

Elliptisch

- Koeffizientenmatrix $a_{ij}(x)$ ist positiv definit oder negativ definit
- Randwert-Probleme
 - Neumann-Randbedingungen
 - Dirichlet-Randbedingungen
 - Robin-Randbedingungen
- z.B: Poisson-Gleichung $u_{xx} + u_{yy} = 0$

Hyperbolisch

- Koeffizientenmatrix $a_{ij}(x)$ ist indefinit
- Anfangs-Randwert-Probleme, Anfangswert-Probleme (Cauchy-Probleme)
- z.B: Wellengleichung $u_{tt} = c u_{xx}$

Parabolisch

- Koeffizientenmatrix $a_{ij}(x)$ ist positiv semi-definit oder negativ semi-definit
- Anfangs-Randwert-Probleme, Anfangswert-Probleme
- z.B: Wärmeleitungsgleichung $u_t = c u_{xx}$

Gemischt

- Definitheit abhängig vom Punkt x
- z.B: Euler-Tricomi equation $u_{xx} = x u_{yy}$

■ Gleichung:

$$u_{xx} + u_{yy} = \Delta u(x, y) = f(x, y)$$

■ Eigenschaften:

- linear
- elliptisch
- beschreibt Gleichgewichtszustände (Potential, Temperatur, ...)
- *Quellterm* f beschreibt die Entstehung bzw. das Verschwinden der Größe u
- *Diffusionsterm* Δu beschreibt die Ausbreitung der Größe u durch Diffusion
- Lösung glatter als Randwerte

■ Beispiele:

- gespannte Membran
- stationäre Wärmeleitungsgleichung
- stationäre Maxwell-Gleichungen

■ Gleichung:

$$u_t - a u_{xx} - b u_x = f(x, t)$$

■ Eigenschaften:

- linear
- parabolisch
- beschreibt zeitliche Entwicklung von Potential, Temperatur, ...
- *Diffusionsterm* u_{xx} beschreibt die Ausbreitung der Größe u durch Diffusion
- *Konvektions-Term* $c u_x$ beschreibt die Ausbreitung der Größe u durch Konvektion (Strömung)
- *Quellterm* f beschreibt die Entstehung bzw. das Verschwinden der Größe u
- Lösung glatter als Randwerte

■ Beispiele:

- instationäre Wärmeleitung
- Schrödinger-Gleichung (Dynamik von quantenmechanischen Zuständen)
- Black-Scholes-Gleichung (Finanzmathematik)

■ Gleichung:

$$u_{tt} - u_{xx} = 0$$

■ Eigenschaften:

- linear
- hyperbolisch
- beschreibt zeitliche Entwicklung von Potential, Magnetfeld, ...
- beschreibt Wellenphänomene (Beugung, Reflektion, ...)
- Lösungen nicht oder schwach gedämpft → lange Reichweite

■ Beispiele:

- dynamische Maxwell Gleichungen
- Akustik, Schallwellen
- Klein-Gordon-Gleichung (relativistische Feldgleichung für Spin-0-Teilchen)

■ Vergleich Wellen-Glg – Wärmeleitungs-Glg

Finite Differenzen Methode (FDM)

- einfache Implementierung
- sehr schnell durch Verwendung von FFT
- erfordert reguläres Gitter
- Geometrie oft nur schlecht abgebildet
- dünn besetzte Matrizen

Finite Elemente Methode (FEM)

- Tetraeder-, Würfel-, Hexaeder-Elemente
- Gitter-Erzeugung oft schwierig
- Schwache Formulierung
- Aufstellen der Elementmatrizen (FEniCS)
- dünn besetzte Matrizen

Randelemente Methode (BEM)

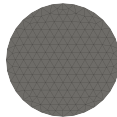
- Problem nur am Rand definiert (2D)
- dicht besetzte Matrizen
- oft zeitaufwendig bei Inhomogenitäten / Nichtlinearitäten

Finite Volumen Methode (FVM)

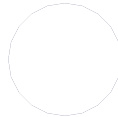
- Erhaltungssätze auch im Diskreten
- z.B: Navier-Stokes-Gleichungen (OpenFOAM)
- Ähnlich zu unstetigen FEM Formulierungen



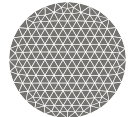
FDM



FEM



BEM



FVM

Linien-Methode (MOL)

- Zuerst räumliche Dimensionen diskretisieren (meist elliptisch)
- PDE zerfällt in System von ODEs
- Zeit-Diskretisierung anschließend mit Methoden für ODEs (Einschritt-, Mehrschritt-Verfahren, ...)

Rothe-Methode

- Zuerst zeitliche Dimension diskretisieren
- Stationäre PDE pro Zeitschritt
- Raum-Diskretisierung anschließend mit Methoden für elliptische PDEs (FDM, FEM, ...)

Raum-Zeit Diskretisierung

- Räumliche und zeitliche Dimensionen werden gleichzeitig Diskretisiert
- Spezielle finite Elemente notwendig (DG-FEM)

- Annahme eines regulären Gitters (für Raum und Zeit)
- Approximation der Differentialoperatoren durch finite Differenzen
- Herleitung mittels Taylor-Reihe (wie bei ODEs):

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \Delta t + O(\Delta t^2)$$

$$u(x + \Delta x, t) = u(x, t) + \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + O(\Delta x^3)$$

$$u(x - \Delta x, t) = u(x, t) - \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 - O(\Delta x^3)$$

- Näherungen für Differentialoperatoren:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

■ Laplace-Gleichung

$$\Delta u = f$$

■ Verwendung des 3-Point-Stencil für die Ortsdiskretisierung

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

■ Assemblieren des Gesamtsystems $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & . & . & . & . \\ 1 & -2 & 1 & . & . & . \\ . & 1 & -2 & 1 & . & . \\ . & . & 1 & -2 & 1 & . \\ . & . & . & . & 1 & -2 \\ . & . & . & . & . & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ \dots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ \dots \\ f_n \end{pmatrix}$$

■ Lösung des linearen, dünnbesetzten Gleichungssystems

Wärmeleitungsgleichung 1D

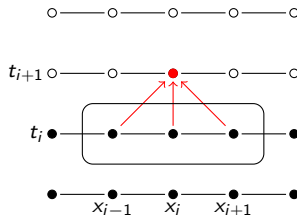
$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \alpha \Delta u + f(x, t)$$

- Verwendung des expliziten Euler-Verfahrens für die Zeitdiskretisierung

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &\approx \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} = \\ &= (u_i^{t+1} - u_i^t) / \Delta t \end{aligned}$$

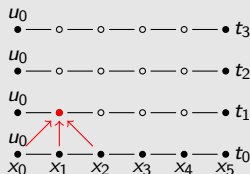
- Verwendung des 3-Point-Stencil für die Ortsdiskretisierung

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} &\approx \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} = \\ &= (u_{i+1}^t - 2u_i^t + u_{i-1}^t) / \Delta x^2 \end{aligned}$$



Dirichlet Randbedingungen

- Potential am Rand gegeben $u(x_0, t) = u_0$



- z.B: Laplacegleichung $\Delta u = f$, $u_0 = a$, $u_5 = b$

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & -2 & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & -2 & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a/\Delta x^2 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ b/\Delta x^2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & -2 & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 - a/\Delta x^2 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 - b/\Delta x^2 \end{pmatrix}$$

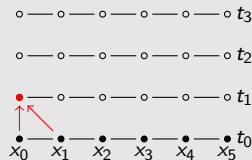
Neumann Randbedingungen

- Normalableitung am Rand gegeben $\frac{\partial u}{\partial n}(x_0, t) = \phi$
- Diskretisierung der Randbedingung ($n = -1$)

$$\frac{\partial}{\partial x} u_0^t = (u_1^t - u_{-1}^t) / 2 \Delta x = -\phi$$

- Einsetzen in Stencil bei x_0

$$\Delta u_0^t = (u_1^t - u_0^t) / \Delta x^2 + \phi / \Delta x$$



- z.B: Laplacegleichung $\Delta u = f, u_n(0) = \phi, u_n(5) = \psi$

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & . & . & . & . \\ 1 & -2 & 1 & . & . & . \\ . & 1 & -2 & 1 & . & . \\ . & . & 1 & -2 & 1 & . \\ . & . & . & 1 & -2 & 1 \\ . & . & . & . & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 - 2\phi / \Delta x \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 - 2\psi / \Delta x \end{pmatrix}$$

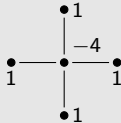
Laplace-Gleichung 2D $\Delta u = 0$

■ 3-Point-Stencil für x und y

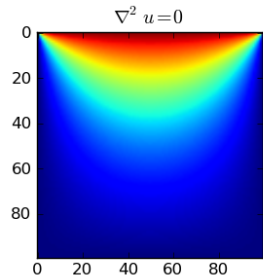
$$u_{xx} = (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) / \Delta x^2$$

$$u_{yy} = (u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) / \Delta y^2$$

■ Stencil für Laplace-Operator



- Einfachste Lösung mittels Fixpunkt-Iteration
- Besser: Methoden für lineare Gleichungssysteme (CG, GMRES, ...)
- **Beispiel: Laplace-Glg mit Excel (LibreOffice Calc)**



■ lokale Fehler

- Diskretisierungsfehler
- Rundungsfehler
- Verfahrensfehler

■ von-Neumann Stabilitätsanalyse

- Fehler in der Anfangsbedingung werden gedämpft
- Gesamtfehler bleibt beschränkt
- Alternativen benötigen Eigenwerte bzw. Matrix-Normen
- Basiert auf Fourier-Darstellung der Fehler

Exakte Lösung u

$$u_t(x, t) = \alpha \Delta u(x, t) + f(x, t)$$

$$u(t_0, x) = u_0(x)$$

$$u(t, x_0) = a$$

$$u(t, x_1) = b$$

Gestörte Lösung \tilde{u}

$$\tilde{u}_t(x, t) = \alpha \Delta \tilde{u}(x, t) + f(x, t)$$

$$\tilde{u}(t_0, x) = \tilde{u}_0(x) + \epsilon_0(x)$$

$$\tilde{u}(t, x_0) = a$$

$$\tilde{u}(t, x_1) = b$$

Fehlergleichung $\epsilon = \tilde{u} - u$

$$\epsilon_t(x, t) = \alpha \Delta \epsilon(x, t)$$

$$\epsilon(t_0, x) = \epsilon_0(x)$$

$$\epsilon(t, x_0) = 0$$

$$\epsilon(t, x_1) = 0$$

von-Neumann Stabilitätsanalyse

- Ansatz des Fehlers als Fourier-Reihe

$$\epsilon(t, x) = \sum_m e^{a_m t} e^{i k_m x} \quad k_m = \pi m / L$$

- Verstärkungsfaktor

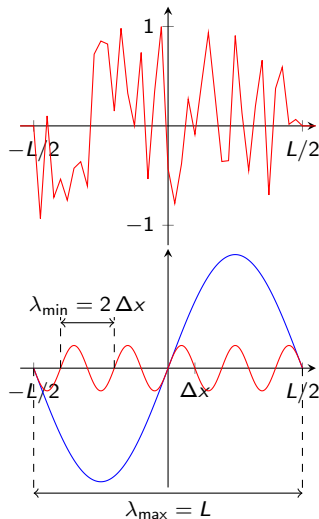
$$G = \frac{\epsilon_i^{t+1}}{\epsilon_i^t} = e^{a \Delta t}$$

- Numerisch stabil wenn $|G| < 1$
- z.B: Wärmeleitungsgleichung mit explizitem Eulerverfahren

$$\left| \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k_m \Delta x}{2} \right) \right| < 1$$

- für alle k_m erfüllt, wenn

$$\frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} < 1$$



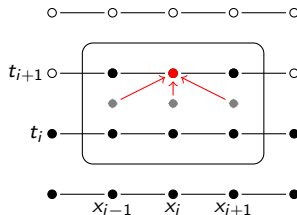
Allgemein

- Basiert auf der Trapezregel (siehe ODEs)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(t, x, u, u_x, u_{xx})$$

$$u_i^{t+1} - u_i^t = \frac{\Delta t}{2} [f_i^{t+1} + f_i^t]$$

- semi-implizit
- meist bedingungslos stabil
- in jedem Zeit-Schritt muss ein Gleichungssystem gelöst werden
- lokaler Fehler $O(\Delta x^3, \Delta t^3) \rightarrow$ Ordnung 2



■ Zentrale-Finite-Differenzen:

Derivative	Accuracy	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
1	2				-1/2	0	1/2			
	4			1/12	-2/3	0	2/3	-1/12		
	6		-1/60	3/20	-3/4	0	3/4	-3/20	1/60	
	8	1/280	-4/105	1/5	-4/5	0	4/5	-1/5	4/105	-1/280
2	2				1	-2	1			
	4			-1/12	4/3	-5/2	4/3	-1/12		
	6		1/90	-3/20	3/2	-49/18	3/2	-3/20	1/90	
	8	-1/560	8/315	-1/5	8/5	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560
3	2			-1/2	1	0	-1	1/2		
	4		1/8	-1	13/8	0	-13/8	1	-1/8	
	6	-7/240	3/10	-169/120	61/30	0	-61/30	169/120	-3/10	7/240
4	2			1	-4	6	-4	1		
	4		-1/6	2	-13/2	28/3	-13/2	2	-1/6	
	6	7/240	-2/5	169/60	-122/15	91/8	-122/15	169/60	-2/5	7/240
5	2		-1/2	2	-5/2	0	5/2	-2	1/2	

■ Vorwärts-Finite-Differenzen:

Derivative	Accuracy	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	-1	1							
	2	-3/2	2	-1/2						
	3	-11/6	3	-3/2	1/3					
	4	-25/12	4	-3	4/3	-1/4				
	5	-137/60	5	-5	10/3	-5/4	1/5			
	6	-49/20	6	-15/2	20/3	-15/4	6/5	-1/6		
2	1	1	-2	1						
	2	2	-5	4	-1					
	3	35/12	-26/3	19/2	-14/3	11/12				
	4	15/4	-77/6	107/6	-13	61/12	-5/6			
	5	203/45	-87/5	117/4	-254/9	33/2	-27/5	137/180		
	6	469/90	-223/10	879/20	-949/18	41	-201/10	1019/180	-7/10	
3	1	-1	3	-3	1					
	2	-5/2	9	-12	7	-3/2				
	3	-17/4	71/4	-59/2	49/2	-41/4	7/4			
	4	-49/8	29	-461/8	62	-307/8	13	-15/8		
	5	-967/120	638/15	-3929/40	389/3	-2545/24	268/5	-1849/120	29/15	
	6	-801/80	349/6	-18353/120	2391/10	-1457/6	4891/30	-561/8	527/30	-469/240
4	1	1	-4	6	-4	1				
	2	3	-14	26	-24	11	-2			
	3	35/6	-31	137/2	-242/3	107/2	-19	17/6		
	4	28/3	-111/2	142	-1219/6	176	-185/2	82/3	-7/2	
	5	1069/80	-1316/15	15289/60	-2144/5	10993/24	-4772/15	2803/20	-536/15	967/240

- Für Rückwärts-Finite-Differenzen ändern sich die Vorzeichen aller Koeffizienten für ungerade Ableitungen

1 Advektions-Gleichung: $u_t = -v u_x$

- beschreibt die Strömung einer inkompressiblen Flüssigkeit
- Verwende die FTCS-Methode (Forward-Time Central-Space):
 - Zentrale-Differenzen für die Ortsableitung: $u_x = u_{i+1}^t - u_{i-1}^t$
 - Explizite Eulermethode für die Zeitableitung: $u_t = u_i^{t+1} - u_i^t$
- Diskretisiere die Gleichung (welche Anfangs-/Randbedingungen sind erforderlich)
- Welche Ordnung ergibt sich für Zeit und Ort?
- Untersuche die Stabilität der Methode

2 Löse die 1D-Wärmeleitungsgleichung:

$$u_t = u_{xx}$$

$$u(0, x) = \sin(\pi x)$$

$$u(t, 0) = 0$$

$$u(t, 1) = 0$$

- Gibt es eine analytische Lösung?
- Vergleiche explizites Euler-Verfahren, implizite Euler-Verfahren, Crank-Nicolson-Verfahren
- Plote $u(x, t)$ für $x \in (0, 1)$, $t \in (0, 1)$ bzw. einzelne $u(x, t_i)$
- Experimentiere mit verschiedenen Zeit-, Orts-Schrittweiten