Raum-Zeit-Probleme

Partielle Differenzialgleichungen

Im folgenden werden numerische Lösungsverfahren für partielle Differenzialgleichungen betrachtet, bei denen neben den Anfangswerten außerdem Randbedingungen gegeben sind.

Die Systemgrößen hängen von Raumkoordinaten x, y, z und von der Zeit t ab, d.h. $u(t, \vec{x}) = u(t, x, y, z)$.

Daher kann es bei den systembeschreibenden Gleichungen Ableitungen (sog. partielle Ableitungen) nach den einzelnen (abhängigen) Variablen geben, d.h.:

$$\frac{\partial u(t,x,y,z)}{\partial t}, \frac{\partial u(t,x,y,z)}{\partial x}, \frac{\partial u(t,x,y,z)}{\partial y} \text{ und } \frac{\partial u(t,x,y,z)}{\partial z}.$$

Wärmeleitungsgleichung

Die Wärmeleitungsgleichung ist das einfachste Beispiel einer partiellen Diffenzialgleichung im 3D Raum und in der Zeit.

Sie beschreibt die zeitliche Entwicklung der Temperatur oder auch der Stoffdiffusion $u(t, \vec{x})$ im Raum.

$$\frac{\partial u(t, \vec{x})}{\partial t} = D \triangle u(t, \vec{x})$$

im Gebiet $a \leq x \leq b$, $a \leq y \leq b$, $a \leq z \leq b$ und für Zeiten $t \geq 0$.

Auf der rechten Seite der Gleichung stehen in der Notation des Laplace-Operators zweite partielle Ableitung in die Raumrichtungen:

$$\triangle u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

Wärmeleitungsgleichung in 1D

Zur Vereinfachung wird das System auf eine Raumkoordinate reduziert und $D = 1$ gesetzt. Dann lautet die Wärmeleitungsgleichung:

$$\frac{\partial u(t,\vec{x})}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(t,\vec{x})}{\partial x^2} \quad \text{mit} \quad a \leq x \leq b,\ t \geq 0$$

Eine andere Schreibweise ist: $u_t = u_{xx}$.

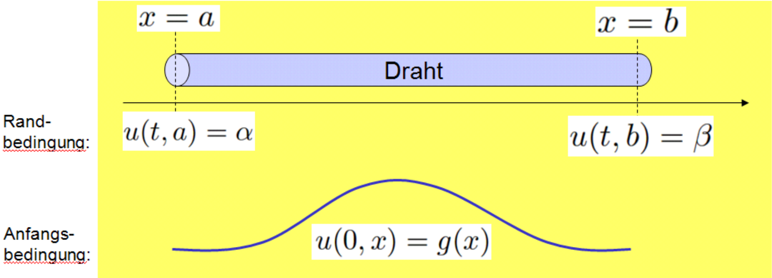
Zu dem Raum-Zeit-Problem gehören außerdem:
Anfangsbedingungen:

$$u(0,x) = g(x) \quad a \leq x \leq b$$

$g(x)$ ist eine gegebene Funktion und
Randbedingungen:

$$u(t,a) = \alpha, \quad u(t,b) = \beta \quad \text{für alle} \quad t \geq 0.$$

Wärmeleitungsgleichung in 1D



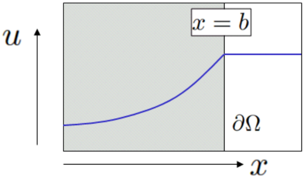
Die Lösung $u(t, x)$ der Gleichung $u_t = u_{xx}$ gibt die Temperatur im Punkt x zur Zeit t.

Randbedingungen

Dirichlet:

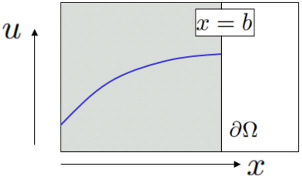
$$u(t,a) = \alpha$$

$$u(t,b) = \beta$$

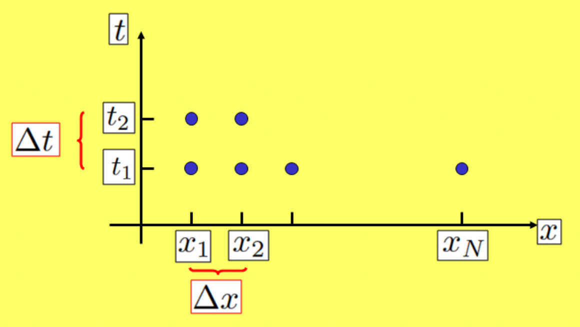


Neumann:

$$\left.\frac{\partial u(t,x)}{\partial x}\right|_{x=a,b} = 0$$



Zur numerischen Lösung wird die Wärmeleitungsgleichung in finite Differenzenformulierung gebracht.
Hierzu wird die $(t, \vec{x})$-Ebene mit einem Gitter aus diskreten Gitterabständen Δx und Δt überzogen.



u_i^n bezeichnet die Näherungslösung im Punkt $x_i = i \cdot \Delta x$ und zur Zeit $t_n = n \cdot \Delta t$ mit $i = 0, \ldots, N$, $n = 0, \ldots, K$. (Die Skizze ist nicht vollständig.)

Mit den Vorüberlegungen folgt die Differenzenform der Wärmeleitungsgleichung $u_t = u_{xx}$:

$$\underbrace{\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t}}_{\text{rechtsseitige Zeitableitung}} = \underbrace{\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}}_{\text{zentrale Raumableitung}}$$

Daraus folgt:

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

Anfangsbedingung zur Zeit $t = 0$

$$u_i^0 = g(x_i), i = 1, \dots, N$$

Randbedingungen (hier Dirichlet):

$$u_0^n = \alpha, \quad u_{N+1}^n = \beta, \quad n = 0, \dots, K$$

Bemerkung:

Das finite Differenzenverfahren heißt explizit in der Zeit, da das nächste Zeitupdate $(n+1)$ durch eine explizite Formel aus den vorangehenden Zeitschritten (n) bestimmt wird.

Diskretisierungsfehler

Im folgenden wird die Genauigkeit der Näherungslösung des expliziten finite Differenzenverfahrens bestimmt.

Sei $u(t, \vec{x})$ die exakte Lösung von $u_t = u_{xx}$. Einsetzen in die Differenzengleichung gibt ein Maß für den Fehler e an:

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

Die Größe von e läßt sich durch Δt und Δx ausdrücken. Eine Taylorreihenentwicklung von $u(t, x)$ als Funktion von t für festes x ergibt (d.h. setze $x_0 = t$ und $x = t + \Delta t$ in die Taylorformel ein):

$$f(t+\Delta t) = f(t) + f'(t)(t+\Delta t - t) + \dots$$

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

In ähnlicher Weise ergibt eine Taylorreihenentwicklung von $u(t,x)$ in x bei festem t:

$$
\begin{aligned}
& u(t,x+\Delta x) - 2u(t,x) + u(t,x-\Delta x) \\
= \quad & u(t,x) + u_x(t,x)\Delta x + \frac{u_{xx}(t,x)}{2!}((\Delta x)^2) + \\
& \frac{u_{xxx}(t,x)}{3!}((\Delta x)^3) + \frac{u_{xxxx}(t,x)}{4!}((\Delta x)^4) - 2u(t,x) \\
& + u(t,x) - u_x(t,x)\Delta x + \frac{u_{xx}(t,x)}{2!}((\Delta x)^2) - \\
& \frac{u_{xxx}(t,x)}{3!}((\Delta x)^3) + \frac{u_{xxxx}(t,x)}{4!}((\Delta x)^4) \\
= \quad & u_{xx}(t,x)((\Delta x)^2) + \frac{2 \cdot u_{xxxx}(t,x)}{4!}((\Delta x)^4)
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

$$
\frac{u_{xx}(t,x)((\Delta x)^2) + 12 u_{xxxx}(t,x)((\Delta x)^4)}{(\Delta x)^2} = u_{xx}(t,x) + O((\Delta x)^2)
$$

Aus den beiden Taylorreihenentwicklungen in der Zeit und im Ort folgt mit der Gleichung $u_t = u_{xx}$ für den Fehler

$$e = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$$

d.h. das Diskretisierungsverfahren ist von erster Ordnung in der Zeit und von zweiter Ordnung im Raum.

Stabilität

Damit das Verfahren $u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right)$ stabil ist, müssen (Δt) und (Δx) folgende Stabilitätsbedingung erfüllen:

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} (\Delta x)^2$$

d.h. für feiner Ortsschrittweiten Δx muss Δt quadratisch kleiner werden.

Dies schränkt die Wahl von Δx ein.

Beispiel zur Wahl der maximal möglichen Zeitschrittweite

Δx	Δt
0.1	$0.5 \cdot 10^{-2}$
0.01	$0.5 \cdot 10^{-4}$
0.001	$0.5 \cdot 10^{-6}$

Bemerkungen:

- falls das Stabilitätskriterium $\Delta t \leq \frac{1}{2}(\Delta x)^2$ verletzt wird, treten unmittelbar Instabilitäten auf. Dies hat nichts mit Rundungsfehlern zu tun, sondern tritt auch bei exakter Arithmetik auf
- die Stabilitätsbedingung kann viel kleinere Zeitschrittweiten erfordern als für die eigentliche Zeitauflösung der Anwendung nötig ist. Dies ist ein Nachteil des expliziten Verfahrens, da kleine Zeitschrittweiten einen hohen Rechenaufwand bedeuten.

Implizites Differenzenverfahren

Im Gegensatz zum expliziten Differenzenverfahren wird beim impliziten Verfahren die diskrete Raumableitung zum Zeitpunkt $(n+1)$ an den Stellen x_i ausgewertet:

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

In dieser Formulierung sind alle Terme der rechten Seite unbekannt, da die einzelnen Werte im räumlichen Gitter zum Zeitpunkt $(n+1)$ vorliegen muss.

Die Aufgabe führt folglich auf ein lineares Gleichungssystem, durch das die Werte u_i^{n+1} implizit festgelegt sind.

Umstellung der Differenzenformulierung ergibt:

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

In Matrix-Vektor-Form:

$$\left(I + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} A\right) \vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \vec{b}, \quad n = 0, 1, \ldots$$

wobei

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & & \ldots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & & \ldots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & \ldots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

eine $(2, -1)$ Tridiagonalmatrix ist.

Bemerkungen:

- $\vec{u}^{n+1}$ und $\vec{u}^n$ sind Vektoren mit den Komponenten u_i^{n+1}, u_i^n, $i = 1, \ldots, N$.
- Die Randbedingungen ergeben sich mit $u_0^k = \alpha$, $u_{N+1}^k = \beta$, $k = 0, 1, \ldots$ und sind in $\vec{b}$ enthalten. $\vec{b}$ ist Null außer $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\alpha$, $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\beta$ in der ersten und letzten Komponente.
- Beim impliziten Verfahren muss in jedem Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem gelöst werden.
- Für tridiagonale Matrizen (wie A) gibt es hierzu effiziente Löser, dennoch ist das Verfahren rechenaufwendiger.
- Aber das Stabilitätsverhalten ist günstiger und erlaubt größere Schrittweiten.

Für das implizite Verfahren gilt folgende Stabilitätsbedingung

$$0 < \frac{1}{1 + 2\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}(1 + \cos(k\pi\Delta x))} < 1$$

Da $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ und $1 + \cos(k\pi\Delta x) > 0$, ist die Stabilitätsbedingung immer erfüllt, d.h. sie gilt für jedes Verhältnis der Schrittweiten Δt und Δx.

Bemerkungen:

- Das Verfahren heißt unbedingt stabil , unabhängig von Δt und Δx.
- Aber: Δt und Δx können wegen des Diskretisierungsfehlers nicht beliebig gewählt werden, sondern müssen klein sein.

Für den Diskretisierungsfehler gilt ähnlich wie beim expliziten Verfahren:

$$e = O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$$

d.h. die Stabilität fordert keine Einschränkung an Δt und Δx, wohl aber die Genauigkeit des Verfahrens.

Eine bzgl. der Genauigkeit bessere Methode ist das Crank-Nicolson-Verfahren, eine Mittelung aus explizitem und implizitem Verfahren.

$$\begin{aligned}\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2(\Delta x)^2}\left\{(u_{i+1}^{n+1}-2u_i^{n+1}+u_{i-1}^{n+1})\right.\\ &\qquad \left.+(u_{i+1}^n-2u_i^n+u_{i-1}^n)\right\}\end{aligned}$$

in Matrix-Vektor-Form:

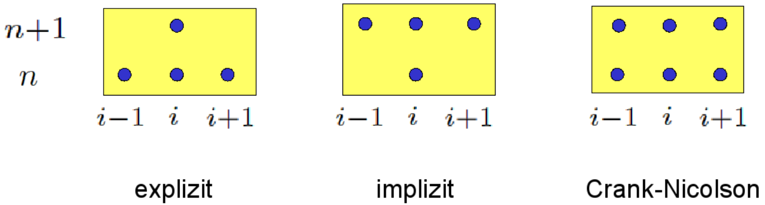
$$\left(I+\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}A\right)\vec{u}^{n+1}=\left(I-\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}A\right)\vec{u}^n+\vec{b},$$

wobei $n=0,1,\ldots K$ und A die $(2,-1)$-Tridiagonalmatrix ist, d.h. es muss wieder ein lineares Gleichungssystem gelöst werden.

Bemerkungen:

- der Vorteil des Crank-Nicolson-Verfahrens ist, dass das Verfahren unbedingt stabil und von 2. Ordnung in der zeit und im Ort ist, d.h. $e = O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^2)$.
- es wird sehr oft verwendet für die numerische Lösung von parabolischen partiellen Differenzialgleichungen.

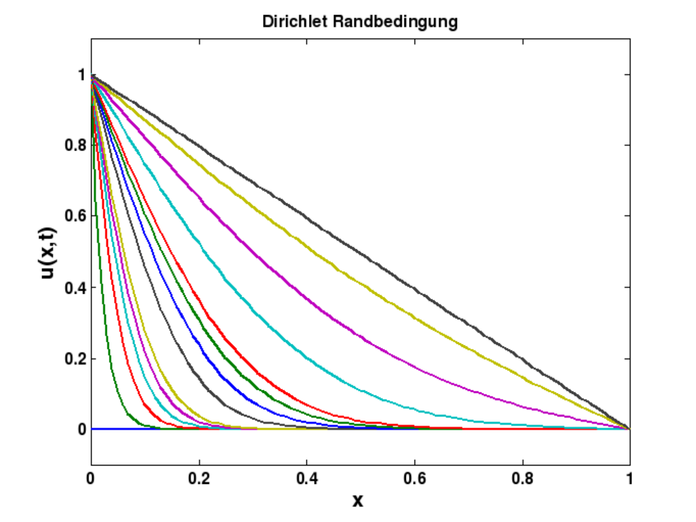
Differenzensterne für die Diskretisierungsverfahren im Vergleich



Darstellung der Gitterpunkte, die in das jeweilige Differenzenverfahren eingehen

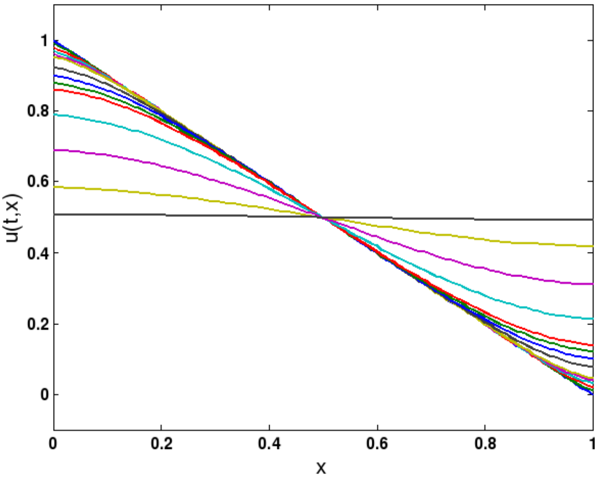
Beispiel

Temperaturfeldentwicklung bei festen Randwerten: Dirichlet Randbedingungen



Beispiel

Temperaturfeldentwicklung bei Neumann Randbedingungen



Beispiel

Temperaturfeldentwicklung beim Aufheizen: Dirichlet und Neumann Randbedingungen