Diplomprüfung Computational Physics

Hanno Rein

8. September 2006

Inhaltsverzeichnis

1 Eulergleichungen

1.1 Massenerhaltung

Die Masse m in einem Volumen W ist

$$m = \int_{W_0} \rho \, dV.$$

Damit gilt für die Massenänderung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} m = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_W \rho \, dV = -\oint_{\partial W} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} \, df \overset{\text{Gauß}}{=} -\int_W \nabla \rho \vec{u} \, dV.$$

Da dies für ein beliebiges Volumen W gilt, folgt die bekannte Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0.$$

1.2 Reynoldsches Transporttheorem

Im Folgenden wird ein Volumen $W(t)$ betrachtet, das zeitlich veränderlich ist. Sei eine Größe Φ definiert durch

$$\Phi = \int_{W(t)} A \, dV.$$

Die Jacobi Determinate J ist definiert als

$$J = \left| \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(a_x, a_y, a_z)} \right|.$$

Sie beschreibt die Änderung des Volumenelements dV bei einer Koordinatentransformation. Somit ist die zeiliche Änderung der Größe Φ im mitbewegten Koordinatensystem

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \Phi &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{W(t)} A \, dV = \int_{W_0} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} [A(x(a,t),t) \cdot J] \, dV_0 \\ &= \int_{W_0} \left[A \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} J + J \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} A + (\vec{u} \cdot \nabla) \cdot A \right) \right] dV_0 \end{aligned}$$

Die Ableitung der Jacobi-Determinanten ergibt sich nach längerer Rechnung, bei der hauptsächlich die Antisymmetrie des ϵ-Tensors verwendet wird, zu

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} J = (\nabla \cdot u) J$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Phi &= \int_{W_0} \left[\frac{\partial}{\partial t} A + (\vec{u} \cdot \nabla) A + A(\nabla \cdot \vec{u}) \right] J \, dV_0 \\ &= \int_{W(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} A + \nabla \cdot (A\vec{u}) \right] dV \end{aligned}$$

Diese Gleichung nennt man das Reynoldsche Transporttheorem. Setzt man $A = \rho$, so ist Φ die Masse im Volumen $W(t)$. Da sich das Volumen mit der Strömung mitbewegt, darf sich die Masse nicht ändern. Man erhällt daraus die Kontinuitätsgleichung. Diese Betrachtungsweise wird im Gegensatz zur Eulerschen, Lagrangesche Beschreibung genannt. Es handelt sich aber in beiden Fällen um die gleiche Physik.

1.3 Impulserhaltung

Die Druckkraft auf eine Oberfläche ∂W ist gegeben durch

$$K_{\partial W} = -\oint_{\partial W} p \, \vec{n} \, df \overset{\text{Gauß}}{=} \int_W \nabla p \, dV$$

Mit der spezifischen äußeren Kraft k und Newton ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{W(t)} \rho \vec{u} \, dV = \int_{W(t)} \left[-\nabla p + \rho \vec{k} \right] dV$$

Setzt man in das Reynoldsche Transporttheorem für A die Größe $\rho\vec{u}$ ein, so gilt

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{W(t)} \rho \vec{u} \, dV &= \int_{W(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \underbrace{\vec{u} \otimes \vec{u}}_{\text{Matrix } u_i u_j}) \right] dV \\ ? =? & \int_{W(t)} \left[\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \right) \vec{u} \right] dV. \end{aligned}$$

Die differenzielle Form der Impulserhaltungsgleichung ist somit

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \right) \vec{u} = -\nabla p + \rho \vec{k},$$

bzw in Erhaltungsform

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \rho \vec{k}.$$

Den Tensor zweiter Stufe $\Pi = \rho \cdot \vec{u} \otimes \vec{u} + p \cdot 1$ nennt man die Impulsstromdichte. Damit lässt sich die Gleichung schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) = -\frac{\partial}{\partial x_k}\Pi_{ik}.$$

1.4 Energieerhaltung

Geht man von einem adiabatischen System (also $dQ = TdS = 0$) aus, so ergibt sich die thermische Energiegleichung zu

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon) + \nabla \cdot (\rho\epsilon\vec{u}) = -p\nabla \cdot \vec{u}.$$

Hierbei ist ϵ die spezifische innere Energie.

1.5 Zusammenfassung Eulergleichungen

Die Eulergleichungen für ein eindimensionales ideales Gas lauten somit

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial\rho uu}{\partial x} &= -\frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial\rho\epsilon}{\partial t} + \frac{\partial\rho\epsilon u}{\partial x} &= -p\frac{\partial u}{\partial x}.\end{aligned}$$

Die Gleichungen werden durch die Zustandsgleichung des idealen Gases vervollständigt:

$$p = (\gamma - 1)\rho\epsilon.$$

1.6 Navier Stokes Gleichungen

Die Navier Stokes Gleichung ist eine Erweiterung der Impulsgleichung. Hierbei wird die Viskosität (Zähigkeit) mitberücksichtigt. Ohne Viskosität ist die Oberflächenkraft pro Fläche $-p(\vec{x}, t)\,\vec{n}$. Nun wird dazu noch ein Term $\sigma(\vec{x}, t) \cdot n$ hinzuaddiert. Dabei ist σ der Reibungs-, bzw Spannungstensor. An diesen Tensor zweiter Stufe lassen sich einige Einschränkungen stellen:

1. Reibung tritt nur auf, wenn eine Relativbewegung statt findet. Somit muss der Tensor von der Ableitung der Geschwindigkeit abhängen. Wir nehmen an, dass er nur linear von der ersten Ableitung abhängt.

2. Der Spannungstensor σ muss invariant unter starrer Rotation und Translation sein.

3. Der Spannungstensor muss symmetrisch sein.

Dadurch erhällt man die allgemeine Form

$$\sigma_{ij} = \eta \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{u})\delta_{ij} \right] + \zeta(\nabla \cdot \vec{u})\delta_{ij}$$

Man nennt η dynamischer Viskositätskoeffizient (Scherviskosität) und ζ Volumenviskositätskoeffizient. Der Faktor hinter η ist spurfrei. Der Term verschindet somit bei gleichmäßiger Volumenkontraktion. Bei inkompressiblen Flüssigkeiten verschwindet der ζ-Term. Mit diesem Tensor wird die Impulsgleichung erweitert zu

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \rho\vec{k} + \nabla\sigma.$$

Dabei ist die Divergenz von σ folgendermaßen zu verstehen

$$(\nabla \cdot \sigma)_i = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}.$$

2 Klassifikation partieller Differentialgleichungen

Siehe [4].

3 Diskretisierung

3.1 Lösungsmethoden

Es gibt gibt verschiedene Möglichkeiten die hydrodynamischen partiellen Differentialgleichungen numerisch zu lösen.

- **Finite Differenzen:** Hierbei wird das zu untersuchende Gebiet mittels eines Gitters in endlich viele Elemente aufgeteilt. Die auftretenden Ableitung in der Differentialgleichung werden durch finite Differenzen angenähert. Aus den partiellen Differentialgleichungen werden somit Differenzengleichungen.

- **Finite Elemente:** Auch hier wird das zu untersuchende Gebiet in endlich viele Elemente aufgeteilt. Auf diesen Elementen setzt man nun eine Linearkombination von n Basisfunktionen an. Nun werden die Differentialgleichungen mit Testfunktionen multipliziert und integriert. Man erhällt ein Gleichungssystem, dass man lösen muss.

- **Spektralmethoden:** Hierbei werden globale Ansatzfunktionen verwendet. Diese Methode überführt die partiellen Differentialgleichungen in gewöhnliche.

- **Teilchenmethoden:** Smoothed Particle Hydrodynamics ist eine Lagrage-Methode. Sie benutzt die Koordinaten der Teilchen im mitbewegten System. Jede Größe im System wird durch Mittelung über alle Teilchen gewonnen. Die Methode ist recht einfach zu implementieren und sehr robust (oft zu robust). Die DGLs werden in gewöhnliche Differentialgleichungen überführt.

3.2 Geometrische Interpretation

Man kann die finiten Differenzen mit Hilfe des RSA-Algorithmus (Reconstruct, Solve, Average) geometrisch interpretieren.

1. Für gegebene diskrete Anfangswerte u^n wird ein Interpolationspolynom $u_I(x)$ konstruiert. Dies kann zum Beispiel im Falle des Upwind Algorithmus eine stückweise konstante Funktion sein. Oder wie beim Fromm, Beam-Warming und Lax-Wendroff Verfahren eine stückweise lineare Funktion.

2. Für das berechnete Interpolationspolynom $u_I(x)$ wird nun die Advektionsgleichung exakt gelöst. Dieser Schritt ist sehr einfach und exakt:

$$u_I^{n+1}(x) = u_I(x - a\Delta t).$$

3. Nun muss wieder in eine diskrete Form zurückgerechnet werden. Dies geschieht durch eine Mittelung über die Funktion u_I^{n+1}. Auch dieser Schritt ist exakt.

Nur im ersten Schritt findet eine Näherung statt, alle anderen Schritte sind exakt. Somit muss man nur den ersten Schritt verbessern, um ein Verfahren höherer Ordnung zu bekommen.

4 Lax Äquivalenztheorem

4.1 Konsistenz

Sei u_e^n die exakte Lösung zum Zeitpunkt n. Dann ist der lokale Diskretisierungsfehler (LTE) definiert als

$$LTE = \frac{1}{\Delta t}(u_e^{n+1} - Lu_e^n).$$

Ein numerisches Verfahren heißt konsistent, wenn für $\Delta t, \Delta x \to 0$ der lokale Diskretisierungsfehler verschwindet $||LTE(x,t)|| \to 0$.

4.2 Konvergenz

Ein numerisches Verfahren heißt konvergent, wenn gilt

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \to 0} ||u_e(x_j, t^n) - u_j^n|| = 0.$$

4.3 Stabilität

Für die Stabilitätsuntersuchung betrachtet man zwei benachbarte diskrete Lösungen u und u_e zum Zeitpunkt t^n. Beim nächsten Zeitschritt t^{n+1} gilt

$$\begin{aligned} ||u_{e^{n+1}} - u^{n+1}|| &= ||u_e^{n+1} - Lu_e^n + Lu_e^n - u^{n+1}|| \\ &\leq ||u_e^{n+1} - Lu_e^n|| + ||Lu_e^n - Lu^n|| \\ &\leq ||LTE\Delta t|| + ||L(u_e^n - u^n)|| \end{aligned}$$

Ein numerisches Differenzenverfahren heißt stabil, wenn für den zweiten Term in der letzten Zeile gilt

$$||L(u_e^n - u^n)|| \leq K||u_e^n - u^n||.$$

Hierbei ist K eine von der Lösung u unabhängige Konstante. Für den Fehler $\epsilon_j^n = u_{e,j}^n - u_j^n$ muss gelten

$$\lim_{n \to \infty} ||\epsilon_j^n|| < K',$$

für ein festes Δt. Lässt sich das Differenzen Schema als Matrixgleichung $u^{n+1} = Au^n$ schreiben, so dürfen die Fehler, für die ebenfalls $\epsilon^{n+1} = A\epsilon^n$ gilt, nicht anwachsend. Die Eigenwerte von A müssen also kleiner als 1 sein.

4.4 Lax Äquivalenztheorem

Das Laxsche Äquivalenztheorem besagt, dass für ein konsistentes Differenzenverfahren die Stabilität eine hinreichende und notwendige Bedingung für Konvergenz ist.

4.5 Satz von Courant Friedrich Levy

Es existiert kein explizites, konsistentes und stabiles finite Differenzenschema, das bedingungslos stabil ist (also für alle Δt).

5 Stabilitätsanalyse

5.1 Von Neumannsche Stabilitätsanalyse

Bei der Von Neumannschen Stabilitätsanalyse geht man von der Fourier Darstellung einer Funktion aus

$$u_j^n = \sum_{k=-N/2}^{N/2} C_k^n e^{\frac{2\pi kij}{N}}.$$

Man setzt nun diese Reihe in das Differenzenschema ein und schaut sich das Verhältnis

$$V_k = \frac{C_k^{n+1}}{C_k^n}$$

an. V_k entspricht dem Verstärkungsfaktor der Mode mit Wellenzahl k. Da dieser Faktor unabhängig von n ist, muss er kleiner als eins sein, um nicht ständig anzuwachsen, was zur Instabilität führen würde. Ist V für alle Frequenzen kleiner als eins, so ist das Verfahren stabil.

5.2 Modifizierte Gleichung / Hirt-Methode

Man kann aus den finiten Differenzengleichungen (FDG) wieder eine partielle Differentialgleichung gewinnen, indem man die auftretenden Differenzen durch Ableitungen ersetzt. Dies sieht auf den ersten Moment aus wie ein Zirkelschluss, allerdings kann es sein, dass die FDG eine andere PDG besser approximiert (in einer höheren Ordnung), als diejenige, von der sie abgeleitet wurde. Dies lässt Rückschlüsse auf das Verhalten der FDG zu. Im Falle der Upwind Methode sieht die modifizierte Gleichung folgendermaßen aus:

$$\frac{\partial u_M}{\partial t} + a\frac{\partial u_M}{\partial x} = \frac{1}{2}a\Delta x(1-\sigma)\frac{\partial^2 u_M}{\partial x^2}.$$

Der zusätzliche Term auf der rechten Seite ist für $\sigma < 1$ ein Diffusionsterm, der die intrinsische numersiche Diffusion des Verfahrens beschreibt. Ist $\sigma > 1$, so ist es kein Diffusionsterm mehr. Das Verfahren wird instabil (Stabilitätsanalyse nach der Methode von Hirt).

Beim Lax-Wendroff Verfahren ist der zusätzliche Term eine Ableitung dritter Ordnung. Dies beschriebt eine Dispersion, welche sich mit dem Ansatz $e^{i(kx-\omega t)}$ explizit ausrechnen lässt. Damit kann man die Oszillationen an Diskontinuitäten bei diesem Verfahren erklären.

6 Diskontinuitäten

Bei Diskontinuitäten tritt bei verschiedenen Differenzenverfahren ein unterschiedliches Verhalten auf. Beispielsweise erzeugt das Fromm-Verfahren bei einem Rechteckimpuls sowohl am linken, als auch am rechten Rand der Diskontinuität einen Over-, bzw Undershoot. Der Grund hierfür liegt in der linearen Interpolationsfunktion u_I. Hierdurch ist der Fluss in die Zelle einmal zu klein, bzw einmal zu groß. Das bedeutet es werden neue Extremstellen (Minima und Maxima) erzeugt. Dieses Verhalten ist unphysikalisch. Bei dem Upwind-Verfahren (1. Ordnung) tritt dieses Verhalten nicht auf.

Man kann die Forderung nach der Erhaltung des Wertebereichs einer Funktion in die folgenden Bedingungen packen:

1. Erhaltung der Positivität

$$u_j^n \geq 0 \rightarrow u_j^{n+1} \geq 0$$

2. Erhaltung der Monotonizität

$$u_j^n \geq u_{j+1}^n \rightarrow u_j^{n+1} \geq u_{j+1}^{n+1}$$

3. Beschränktheit

$$||Lu||_\infty \leq ||u||_\infty$$

Diese Bedingungen sind für lineare Gleichungen äquivalent.

6.1 Theorem von Godunov

Sei

$$(Lu)_j = \sum_k c_k u_{j+k}$$

ein lineares Schema, das konsistent und beschränkt ist, dann ist das Verfahren höchstens von Ordnung 1 ($O(\Delta x)$).

Man braucht also ein nicht lineares Verfahren für eine höhere Ordnung. Eine andere Möglichkeit ist es, das Verfahren an der nähe von Diskontinuitäten durch eines erster Ordnung zu ersetzen. Das geht zum Beispiel mit Slope-Limitern.

6.2 Slope-Limiter

Das Ziel des Einsatzes von Slope-Limitern ist zum einen das Erreichen einer hohen Ordnung in glatten Bereichen (wenig Diffusion), zum anderen sollen Oszillationen bei Diskontinuitäten begrenzt werden. Im Reconstruction-Schritt des RSA-Algorithmus wird eine lineare Funktion angenähert:

$$u_I(x) = u_j + \frac{x - x_j}{\Delta x} \Delta u_j.$$

Dabei hängt die Steigung vom verwendeten Verfahren ab.

minmod Diese Methode wählt das Minimum von Lax-Wendroff und Beam-Warming aus:

$$\Delta u_j = minmod(u_j^n - u_{j-1}^n, u_{j+1}^n - u_j^n),$$

wobei *minmod* folgendermaßen definiert ist

$$minmod(a,b) = \begin{cases} a & \text{für} \quad |a| < |b| \quad ab > 0 \\ b & \text{für} \quad |a| > |b| \quad ab > 0 \\ 0 & \text{für} \qquad\qquad\quad\; ab < 0 \end{cases}$$

Geometric Mean Bei dieser Methode werden bei gleichem Vorzeichen der Gradienten, die inversen Steigungen arithmetisch gemittelt.

$$\Delta u_j = \begin{cases} 2\frac{(u_{j+1}^n - u_j^n)(u_j^n - u_{j-1}^n)}{(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)} & \text{für} \qquad (u_{j+1}^n - u_j^n)(u_j^n - u_{j-1}^n) > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Monotonized Centered (MC-Limiter)

$$\Delta u_j = minmod\left(\frac{1}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n), 2(u_j^n - u_{j-1}^n), 2(u_{j+1}^n - u_j^n)\right)$$

Der erste Term ist die Fromm Steigung, die beiden anderen die doppelten Linearen. Dieses Verfahren erzeugt steilere Gradienten als die anderen beiden.

Im den nächsten beiden Schritten Solve und Average des RSA-Algoritmus wird nun ein Riemannproblem an jedem Zellrand gelöst und danach auf das Gitter zurückgemittelt.

6.3 Riemann Problem

Siehe [1], [2].

7 Verschiedene Verfahren

7.1 Upwind

Forward Time Backward Space

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

Stabil für $\sigma < 1$, TVD (total variation diminishing), erfüllt nicht Entropiebedingung.

7.2 Downwind

Forward Time Forward Space

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

Unconditional unstable.

7.3 Centered

Forward Time Centered Space

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

Instabil. Kann aber als Ausgangspunk für andere (stabile) Verfahren benutzt werden.

7.4 Leapfrog

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

7.5 Lax-Wendroff

Herleitung: Betrachte Tayler-Entwicklung und benutzte Advektionsgleichung

$$\begin{aligned} u(x, t + \Delta t) &= u(x,t) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t) + \dots \\ &= u(x,t) - \Delta t a \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) + \frac{\Delta t^2}{2} a^2 \frac{\partial u^2}{\partial x^2}(x,t) + \dots \end{aligned}$$

Werden die Ableitungen durch Forward Time und Centered Space angenähert, so gilt

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

Für eine andere Herleitung betrachtet man einen zusätzlichen Zeitschritt zum Zeitpunkt $n + \frac{1}{2}$.

7.6 Crank-Nicolson

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\sigma}{4}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n + u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1})$$

Das Verfahren ist unbedingt stabil. Es entstehen allerdings Oszillationen, da das Verfahren zweiter Ordnung ist.

Literatur

[1] W. Kley: *Skript zur Vorlesung Numerische Hydrodynamik*, `http://www.tat.physik.uni-tuebingen.de/~kley/lehre/numhydro/`

[2] L. D. Landau & E. M. Lifschitz: *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band 6: Hydrodynamik*, Akademie Verlag, 1986

[3] C. Laney: *Computational Gas Dynamics*, Cambridge University Press, 1998

[4] D. Zwillinger: *Handbook of Differential Equations, Second Edition*, Academic Press, 1992

[5] R. LeVeque: *Finite Difference Methods for Differential Equations*, `http://www.amath.washington.edu/~rjl/`

[6] R. LeVeque: *Nonlinear Conservation Laws an Finite Volume Methods for Astrophysical Fluid Flow*, `http://www.amath.washington.edu/~rjl/`