2. Klassifikation numerischer Probleme

2.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen

Zu den einfachsten Mitgliedern der Klasse der Anfangswertprobleme gehören die *gewöhnlichen Differentialgleichungen*. Diese befassen sich mit *skalaren* zeitabhängigen Grössen $a(t)$ oder *vektoriellen* Grössen $\mathbf{a}(t) = \left(a_1(t), a_2(t), \ldots\right)$. Eines der einfachsten Beispiele ist das Steinwurfproblem, welches durch die Differentialgleichung

$$\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{g} \tag{2.1}$$

beschrieben wird, wobei $\mathbf{x} = (x, y, z)$ den Ortsvektor und $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$ die Schwerebeschleunigung bezeichnet. Da auf der linken Seite die zweite Ableitung auftritt, wird (2.1) als eine *gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung* bezeichnet.

Die allgemeine Form eines *Systems erster Ordnung* lautet

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \mathbf{L}(\mathbf{a}, t) \ . \tag{2.2}$$

Die Grösse $\mathbf{L}$ stellt eine beliebige Funktion dar. Da hier mehrere Gleichungen miteinander wechselwirken, wird auch von einem *gekoppelten* System gesprochen.

Differentialgleichungen höherer Ordnung wie (2.1) können immer in ein System erster Ordnung überführt werden. Bezeichnet man die Geschwindigkeitskomponenten des Steinwurfproblems mit $d\mathbf{x} / dt = (u, v, w)$, so lautet das zu (2.1) dazugehörige Problem erster Ordnung

$$\frac{d}{dt}(x, y, z, u, v, w) = (u, v, w, 0, 0, -g) \ . \tag{2.3}$$

Bei dieser Umformung vermehrt sich die Anzahl der zu betrachtenden Variablen.

Gewöhliche Differentialgleichungen in der Zeit (mit zeitlichen Ableitungen) beschreiben meistens ein *Anfangswertproblem*. Die zeitliche Entwicklung solcher Systeme ist bestimmt durch eine Gleichung der Form (2.2) und einen Anfangswert $\mathbf{a}(t=0) = \mathbf{a}_o$. Im Falle des Steinwurfproblems (2.3) umfasst die Anfangsbedingung die Position und die Geschwindigkeit des Körpers zur Zeit t=0.

2.2 Partielle Differentialgleichungen

Partielle Differentialgleichungen treten in Problemen mit *Feldvariablen* $a = a(\mathbf{x}, t)$ auf. Die rechte Seite der zu (2.2) analogen Gleichung enthält dann im Allgemeinen auch *partielle Ableitungen* $\partial / \partial x_i$. Die Funktion L auf der rechten Seite wird in diesem Fall Operator genannt, worunter eine beliebige Funktion verstanden werden kann. Ein einfaches Beispiel ist die Wärmeleitungsgleichung. In seiner einfachsten Form (bei konstanter Wärmeleitfähigkeit K_h und Wärmekapazität C_h) lautet sie

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T \qquad \text{mit} \qquad \lambda = \frac{K_h}{C_h} , \tag{2.4}$$

wobei λ die Temperaturleitzahl bezeichnet. Zur Integration dieser Gleichung in die Zukunft sind Anfangswerte und Randwerte notwendig. Im Fall des Wärmeflusses durch eine eindimensionale Wand der Dicke L gilt

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \qquad \text{für} \qquad 0 \le x \le L, \tag{2.6a}$$

mit den Randwerten

$$T(x=0,t) = T_0(t) \qquad \text{und} \qquad T(x=L,t) = T_L(t) , \tag{2.6b}$$

und der Anfangsbedingung

$$T(x,t=0) = T_A(x) \tag{2.6c}$$

mit vorgegebenen Funktionen $T_0(t)$, $T_L(t)$ und $T_A(x)$. In vielen Fällen kann dabei in erster Näherung angenommen werden, dass die Randwerte konstant sind (im Falle einer Hauswand bestimmt durch die Innen- und die Aussentemperatur). Das System (2.6) gehört dann zur Klasse der kombinierten Anfangs- und Randwertprobleme.

Partielle Differentialgleichungen können durch räumliche *Diskretisierung* immer in gewöhnliche Differentialgleichungen überführt werden. Beschränkt man sich auf die "Gitterpunkte"

$$x_i = i\,\Delta x, \quad T_i = T(x_i) ,$$

und approximiert man die zweite Ableitung gemäss

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} , \tag{2.7}$$

so ergibt sich für die räumlich diskretisierte Form von (2.6a)

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \lambda \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} \tag{2.8}$$

Dies stellt ein gekoppeltes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen dar. Im Prinzip kann somit ein Standard-Algorithmus für gewöhnliche Differentialgleichungen, in Kombination mit einer räumlicher Diskretisierung à la (2.7), zur Lösung partieller Differentialgleichungen verwendet werden.

2.3 Randwertprobleme

Bei einem Randwertproblem geht es darum, eine Feldvariable ψ in einem Gebiet G so zu bestimmen, dass

$$L(\psi) = f \quad \text{in} \quad G \tag{2.10a}$$

und

$$B(\psi) = g \quad \text{auf dem Rand von } G \tag{2.10b}$$

erfüllt ist, wobei L und B Operatoren sind. Die Funktionen f und g beschreiben (bekannte) Inhomogenitäten und Randbedingungen.

Als erstes Beispiel betrachten wir wiederum die Wärmeleitungsgleichung (2.6). Bei festgehaltenen Randbedingungen (Temperatur an den Enden der Wand) geht jeder Anfangszustand $T(x,t=0)$ für $t \to \infty$ über in einen stationären Zustand T^*, welcher gemäss (2.6) die Gleichung

$$0 = \lambda \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^2} \qquad \text{für} \qquad 0 \le x \le L, \tag{2.11a}$$

erfüllt. Zusammen mit den Randbedingungen

$$T(x=0) = T_0 \qquad \text{und} \qquad T(x=L) = T_L, \tag{2.11b}$$

ergibt sich ein *Randwertproblem* für $T^* = T(t=\infty)$. Der Vergleich mit (2.10) zeigt, dass hier die Feldvariable ψ der Temperatur entspricht und der Operator $L(\psi)$ durch die zweite Ableitung gegeben ist. Das Intervall zwischen 0 und L bildet das Gebiet G. Die Funktion (der Operator) B ist die Identität, da auf dem Rand direkt die Temperatur selbst vorgegeben ist. Die Randwerte g sind durch das Paar (T_0, T_L) gegeben. In unserem Fall (λ ist konstant) impliziert (2.11a) dass die Lösung T^* im Intervall $[0,L]$ einen konstanten Gradienten besitzt.

Ein klassisches Beispiel aus der Strömungslehre ist die Berechnung der Stromfunktion einer inkompressiblen zweidimensionalen Strömung aus der Verteilung der Vorticity. Eine inkompressible Strömung $\mathbf{v}=(u,v)$ im zweidimensionalen Raum (x,y) ist per Definition divergenzfrei, d.h.

$$\mathrm{div}(\mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{2.12}$$

und kann somit durch eine Stromfunktion ψ beschrieben werden. Diese ist definiert durch

$$(u,v) = \left(-\frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \tag{2.13}$$

und stellt automatisch sicher dass (2.12) erfüllt ist. Kennt man die Vorticity

$$\zeta = \mathbf{k} \cdot (\nabla \times \mathbf{v}) = -\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \nabla^2 \psi \quad \text{mit} \quad \mathbf{k} = (0,0,1) \tag{2.14}$$

der Strömung, so lässt sich die Stromfunktion (und damit der Windvektor) in einem durch vertikale Wände begrenzten Gebiet G berechnen durch die Lösung des Randwertproblems

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi &= \zeta \qquad \text{in } G \\ \psi &= 0 \qquad \text{auf dem Rand von } G \end{aligned} \tag{2.15}$$

Die Randbedingung stellt sicher, dass der Windvektor parallel zu den Wänden des Gebietes verläuft. Ist die Strömung zudem rotationsfrei ($\zeta = 0$) so vereinfacht sich das

Randwertproblem noch zusätzlich. Letztere Approximation wird häufig in der Aerodynamik verwendet, zum Beispiel zum Abschätzen des Auftriebes eines Flügelprofils.

2.4 Linearität und Nichtlinearität

Gleichungen der Form

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi) \qquad \text{mit} \qquad \phi = \phi(x,t) \tag{2.20}$$

bezeichnet man genau dann als *linear*, wenn mit den Lösungen $\phi_1(x, t)$ und $\phi_2(x, t)$ auch deren Linearkombination

$$a\,\phi_1(x,t) + b\,\phi_2(x,t) \qquad (a, b=\text{const}) \tag{2.21}$$

eine Lösung darstellt. Den entsprechenden Operator F bezeichnet man dann ebenfalls als linear. Beispiele linearer und nichtlinearer Operatoren sind die erste Ableitung $F(\phi) = \partial\phi / \partial x$ und der quadratische Operator $F(\phi) = \phi\, \partial\phi / \partial x$.

Die Linearität beziehungsweise Nichtlinearität bestimmt oft die Schwierigkeit der numerischen Integration. Lineare Systeme lassen ein breites Spektrum semi-analytischer Methoden zu, welche für nichtlineare Systeme nicht anwendbar sind. Ein Beispiel: Wird eine Anfangsbedingung $\phi(x, t=0)$ als eine Fourierreihe der Form

$$\phi(x,t=0) = a_1 e^{i k_1 x} + a_2 e^{i k_2 x} + \ldots. \tag{2.22}$$

dargestellt, so folgt mit der Linearität automatisch, dass jede Wellenkomponente einzeln und unabhängig von den anderen integriert werden kann, und dass die verschiedenen Komponenten zu einer späteren Zeit $t>0$ zur Lösung $\phi(x, t>0)$ rekombiniert werden können.

2.4.1 Lagrange'sche versus Euler'sche Form der Transportgleichung

Als Beispiel betrachten wir die *Transportgleichung* (oder *Advektionsgleichung*) einer gasförmigen Mischung (z.B. Luft mit Luftschadstoffen). Durch eine laminare Strömung $\mathbf{v}(\mathbf{x},t)=(u,v,w)$ werde zwischen $t=t_1$ und t_2 ein Luftpacket auf beliebig komplexe Weise

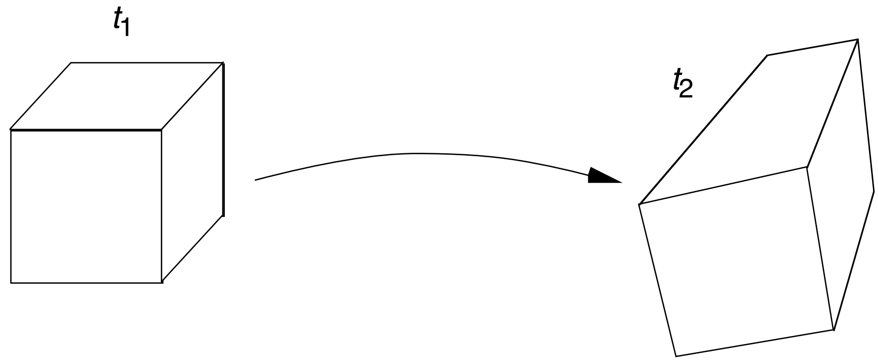

Fig.2.1: Veränderung eines Luftpackets durch eine laminare Strömung

verschoben, verdreht und verformt (siehe Fig.2.1). Für das Mischungsverhältnis

$$m = \frac{n_S}{n_L} = \frac{\text{Anzahl Schadstoffmoleküle im Volumen}}{\text{Anzahl Luftmoleküle im Volumen}} \tag{2.23}$$

gilt eine einfache Beziehung, sofern man inerte chemische Substanzen betrachtet: Da die Anzahl der Moleküle im betrachteten Volumen durch die laminare Strömung nicht verändert werden kann, ist

$$m(t_1) = m(t_2), \tag{2.24}$$

das heisst das Mischungsverhältnis ist entlang einer Strömungstrajektorie erhalten. Als Differentialgleichung ausgedrückt lautet dies

$$\frac{d\ m}{dt} = 0\ , \tag{2.25a}$$

wobei m=$m(t)$ das Mischungsverhältnis eines ausgewählten, sich bewegenden Luftpackets beschreibt. Gleichung (2.25a) ist eine *Lagrange'sche Gleichung*, welche Eigenschaften des Luftpackets *entlang der Strömungstrajektorie* beschreibt. Will man darin das Mischungsverhältnis als Feldvariable $m(\mathbf{x},t)$ verwenden, so muss dies gemäss

$$\frac{d\ m\big(\mathbf{x}(t),t\big)}{dt} = 0 \tag{2.25b}$$

erfolgen, wobei $\mathbf{x}(t)$ den Ort des betrachteten Luftpackets zur Zeit t bezeichnet.

Die Lagrange'sche Differentialgleichung (2.25b) kann mit Hilfe des totalen Differentials (erweiterte Kettenregel) in die *Eulersche Form* verwandelt werden

$$\frac{d\ m(x,y,z,t)}{dt} = \frac{\partial m}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial m}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial m}{\partial z}\frac{dz}{dt} + \frac{\partial m}{\partial t}\ .$$

Mit der Definition der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = d\mathbf{x}/dt$ folgt somit

$$\frac{d\ m}{dt} = 0 \qquad \text{mit} \qquad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u\frac{\partial}{\partial x} + v\frac{\partial}{\partial v} + w\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\ . \tag{2.26}$$

In diese Euler'sche Gleichung kann für die Feldvariable m direkt $m(\mathbf{x},t)$ eingesetzt werden. Den Operator d/dt bezeichnet man dabei als *Advektions- oder Transportoperator*. Zur besseren Unterscheidung von der partiellen Ableitung wird letzterer oft mit D/Dt anstelle d/dt bezeichnet (Konvention).

2.4.2 Lineare versus nichtlineare Transportgleichung

Im eindimensionalen Falle und bei konstanter Geschwindigkeit u lässt sich die Transportgleichung schreiben als

$$\frac{d\ \phi(x,t)}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + u\frac{\partial\phi}{\partial x} = 0 \qquad (u\text{=const}) \tag{2.27}$$

Zur Integration dieser Gleichung wird eine Anfangsbedingung der Form

$$\phi(x,t_o) = \phi_o(x) \tag{2.28}$$

benötigt. Im Falle konstanter Geschwindigkeit hat dieses Problem die analytische Lösung

$$\phi(x,t) = \phi_o(x - tu) \ , \qquad (2.29)$$

welche die Verschiebung der Anfangsbedingung mit der Geschwindigkeit u beschreibt. Mit konstanter Geschwindigkeit u ist das Transportproblem (2.27) *linear*. Dies kann anhand der oben diskutierten Definition einfach überprüft werden, denn die Summe von

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + u\frac{\partial \phi_1}{\partial x} = 0 \qquad \Big| \quad \times \ a$$

und

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial t} + u\frac{\partial \phi_2}{\partial x} = 0 \qquad \Big| \quad \times \ b$$

lässt sich schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(a\phi_1 + b\phi_2\right) + u\frac{\partial}{\partial x}\left(a\phi_1 + b\phi_2\right) = 0 \ ,$$

womit die Linearitätsbedingung (2.21) erfüllt ist.

In den meisten strömungsdynamischen Problemen tritt die Transportgleichung jedoch in *nichtlinearer* Form auf. Eine Nichtlinearität entsteht wenn die Transportgeschwindigkeit selbst von der transportierten Grösse abhängig ist, d.h. falls $u = u(\phi)$. Im einfachsten Fall ergibt sich mit $u = u(\phi) = \phi$ die sogenannte Burgers-Gleichung. Das resultierende Problem lässt sich schreiben als

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad (2.30)$$

und man spricht treffend von *Selbstadvektion*. Man kann sich leicht davon überzeugen dass diese Gleichung die obige Definition der Linearität nicht mehr erfüllt. Das durch (2.30) beschriebene Problem ist um Grössenordnungen komplexer als die lineare Gleichung.

Jedes nichtlineare Problem kann durch *Linearisierung* approximiert werden. Dazu spaltet man alle Variablen auf gemäss

$$u = \overline{u} + u' \qquad (2.31)$$

in einen Grundzustand $\overline{u}$ und eine Störung u'. Der Grundzustand muss dabei eine Lösung des nichtlinearen Problems darstellen, in unserem Falle z.B. $\overline{u} = \text{const}$. Einsetzen von (2.31) in (2.30) ergibt

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + \left(\overline{u} + u'\right)\frac{\partial u'}{\partial x} = 0$$

wobei $\partial\overline{u}/\partial t = \partial\overline{u}/\partial x = 0$ verwendet wurde. Diese Gleichung ist mit (2.30) äquivalent. Die eigentliche Lineariserung erfolgt mit der Vernachlässigung aller nichtlinearer Terme, in unserem Fall $u'\left(\partial u'/\partial x\right)$. Dies ergibt

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + \overline{u}\frac{\partial u'}{\partial x} = 0 \qquad (2.32)$$

Für kleine Störungen um den Grundzustand $\overline{u}$ herum, das heisst wenn $u \approx \overline{u}$, liefert dies eine gut brauchbare Approximation.