Simulationstechnik V

Vorlesung/Praktikum an der RWTH Aachen

Numerische Simulation von Strömungsvorgängen

B. Binninger

Institut für Technische Verbrennung

Templergraben 64

2. Teil

1) Welche Garantie kann gegeben werden, dass die Lösung des algebraischen Gleichungssystems nahe an der Lösung der Differentialgleichung liegt?

Vermutungen:

verfeinertes Gitter → bessere Approximation

höhere Diskretisierungsgenauigkeit → bessere Approximation

2) Unter welchen Bedingungen fällt die numerische Lösung mit der exakten zusammen?

Oberflächliche Antwort:

Numerische Lösung und exakte Lösung konvergieren, falls die Schrittweiten zum Beispiel Δx, Δt gegen Null gehen.

Diese Forderung wird als Konsistenz bezeichnet.

Bemerkung: Für Konvergenz des num. Lösungsverfahrens reicht diese Bedingung aber nicht aus!

Konsistenz

Die diskrete Gleichung soll bei verschwindenden Schrittweiten in die Differentialgleichung übergehen.

Nachweis:

Beispielsweise durch Umkehr des Diskretisierungsprozess

Dazu entwickelt man die Terme der Differenzengleichung in Taylorreihen und vollzieht den Grenzübergang zu verschwindenden Schrittweiten.

Beispiel für Konsistenzuntersuchungen: Diskretisierte Laplace-Gleichung

Die mit zentralen Differenzen diskretisierte Laplace-Gleichung lautet:

$$\Delta\phi = 0 \qquad \leftrightarrow \qquad \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0$$

Taylorentwicklung:

$$\phi_{i\pm1,j} = \phi_{i,j} \pm \frac{\partial\phi}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\Delta x^2 \pm \frac{1}{3!}\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\Delta x^3 + \frac{1}{4!}\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\Delta x^4 \pm \ldots$$

$$\phi_{i,j\pm1} = \phi_{i,j} \pm \frac{\partial\phi}{\partial y}\Delta y + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\Delta y^2 \pm \frac{1}{3!}\frac{\partial^3\phi}{\partial y^3}\Delta y^3 + \frac{1}{4!}\frac{\partial^4\phi}{\partial y^4}\Delta y^4 \pm \ldots$$

Einsetzen in die Differenzenformulierung liefert:

$$\frac{1}{\Delta x^2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\,\Delta x^2 + \frac{1}{12}\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\,\Delta x^4 + \frac{1}{48}\frac{\partial^6\phi}{\partial x^6}\,\Delta x^6 + \ldots\right) +$$

$$\frac{1}{\Delta y^2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\,\Delta y^2 + \frac{1}{12}\frac{\partial^4\phi}{\partial y^4}\,\Delta y^4 + \frac{1}{48}\frac{\partial^6\phi}{\partial y^6}\,\Delta y^6 + \cdots\right) = 0$$

Grenzübergang:

$$\lim_{\Delta x, \Delta y \to 0} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \Delta x^2 + \frac{1}{48} \frac{\partial^6 \phi}{\partial x^6} \Delta x^4 + \ldots + + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} \Delta y^2 + \frac{1}{48} \frac{\partial^6 \phi}{\partial y^6} \Delta y^4 + \cdots \right) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}}_{\Delta \phi} = - \lim_{\Delta x, \Delta y \to 0} \left(\frac{1}{12} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \Delta x^2 + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} \Delta y^2 + \frac{1}{48} \frac{\partial^6 \phi}{\partial x^6} \Delta x^4 + \frac{1}{48} \frac{\partial^6 \phi}{\partial y^6} \Delta y^4 + \cdots \right) \overset{!}{\approx} 0$$

Die Differenzenlösung gibt also die Lösung der Potentialgleichung $\Delta\phi = 0$ mit messbarer Genauigkeit wieder, falls die höheren Ableitungen endlich bleiben.

Übung:

Untersuchen Sie die Konsistenz der Diskretisierungen der Laplace-Gleichung und der verschiedenen Lösungsalgorithmen, indem der Iterationszähler als zeitliche Entwicklung gedeutet werden.

Bemerkung:

Die Differenzengleichung (endliches Δx, Δy) entspricht einer Differentialgleichung:

$$\underbrace{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}}_{\Delta \phi} + \frac{1}{12}\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\Delta x^2 + \frac{1}{12}\frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4}\Delta y^2 + \cdots = 0$$

Für endliche Schrittweiten zeigt der Diskretisierungsfehler an, welche zusätzlichen Terme die diskrete Gleichung gegenüber der Differentialgleichung „mitschleppt“.
Aus dem Charakter dieser Terme kann auf Eigenschaften der Näherungslösung geschlossen werden.
So bedeuten Abbruchterme mit ungeraden Ableitungen, dass Dispersionsfehler auftreten, das heißt, dass Fehlerkomponenten verschiedener Wellenlänge sich mit unterschiedlicher Geschwindigkeit im Gitter ausbreiten. Abbruchterme mit geraden Ableitungen implizieren zusätzliche Diffusion.

Die verbleibenden 4. Ableitungen im obigen Beispiel können physikalisch als zusätzliche Diffusion interpretiert werden.

Konvergenz

Definition: Die numerische Lösung $\phi_{i,j}^{\nu}$ konvergiert zur exakten Lösung $\phi(x_i, y_j, t_\nu)$ der Differentialgleichung falls gilt:

$$\phi_{i,j}^{\nu} \quad \rightarrow \quad \phi(x_i, y_j, t_\nu) \quad \text{falls} \quad \Delta x, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0$$

Bemerkung:

Die diskrete Funktion $\phi_{i,j}^{\nu}$ soll die exakte Lösung des algebraischen Systems darstellen.
Numerische Fehler jeder Art, zum Beispiel Rundungsfehler, soll $\phi_{i,j}^{\nu}$ nicht enthalten.

Für endliches Δx, Δy und Δt ist der Fehler definiert durch:

$$\epsilon_{i,j}^{\nu} = \phi(x_i, y_j, t_\nu) - \phi_{i,j}^{\nu}$$

Der Fehler hängt von den Schrittweiten Δx, Δy und Δt , der Konsitenzordnung und von der Größe der höheren Ableitungen ab. Der Nachweis der Konvergenz ist schwierig.

Stabilität

Der Nachweis der Konsistenz reicht nicht aus, um zu zeigen, dass die Lösung für verschwindende Schrittweiten auch der Lösung der Differentialgleichung entspricht.

Der Lösungsalgorithmus muss zusätzlich Stabilität besitzen, damit die Näherungslösung eine sinnvolle Approximation der exakten Lösung ist.

Laxsches Äquivalenzkriterium

Konsistenz + Stabilität <=> Konvergenz

Der Beweis dieser Behauptung kann nur für lineare Anfangswertprobleme geführt werden.

Für ein richtig gestelltes lineares Anfangswertproblem und eine Differentialapproximation, die die Konsistenzbedingung erfüllt, ist die Stabilität des Lösungsalgorithmus eine notwendige und hinreichende Bedingung für Konvergenz.

Alle Störungen, die im System der algebraischen Gleichung während der Anwendung des Lösungsalgorithmus auftreten

(zum Beispiel schlechte Anfangsbelegung, schlechte Konditionierung, Rundungsfehler …)

sollen stets gedämpft werden.

$$\zeta_{i,j}^{\nu} = \widetilde{\phi}_{i,j}^{\nu} - \phi_{i,j}^{\nu}$$

exakte numerische Lösung

im Computer dargestellter Näherungswert der exakten Lösung

Von-Neumann-Methode zur Untersuchung der Stabilität

Die von-Neumann-Methode liefert eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Stabilität bei linearen Anfangswertproblemen mit konstanten Koeffizienten.

Bei ihrer "lokalen" Anwendung (eingefrorene Nichtlinearitäten) stellt sie nur eine notwendige Bedingung dar.

Hintergrund der Methode:

Die Fehler werden in einer endlichen Fourierreihe dargestellt. Es wird nachgewiesen, ob jede Fourierkomponente, jeder Mode, getrennt bei Anwendung des Lösungsalgorithmus gedämpft oder angeregt wird.

Dabei weist gedämpftes Verhalten der Fehlerkomponente auf Stabilität hin.

Anfangsfehler:

$$\zeta_{i,j}^{\nu} = V_k^{\nu}\, e^{\sqrt{-1}(k_x x_i + k_y y_j)} = V_k^{\nu}\, e^{\sqrt{-1}(k_x i \Delta x + k_y j \Delta y)}$$

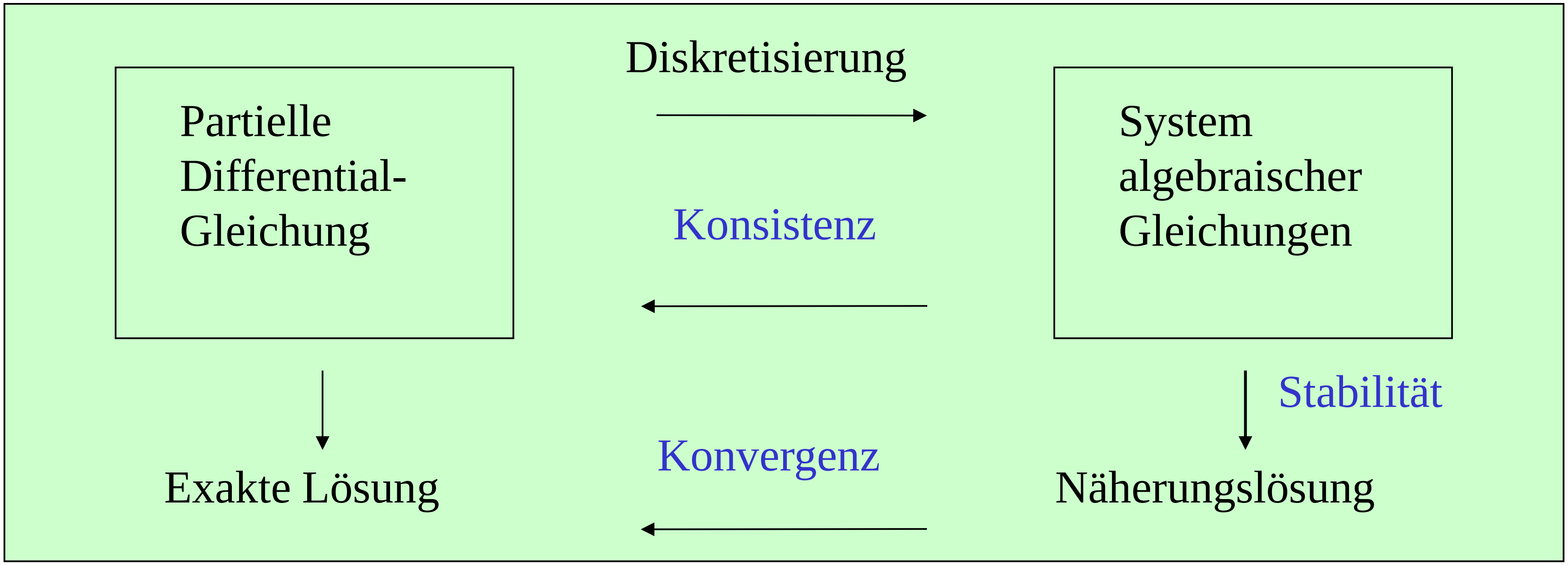
Darin sind die k_x, k_y die Wellenzahlen der Fouriermoden in x- bzw. y-Richtung.

Der Verstärkungsfaktor einer Fouriermode ist definiert als

$$\zeta_{i,j}^{\nu+1} / \zeta_{i,j}^{\nu} = G^{\nu}$$

Forderung für Stabilität: $$|G^{\nu}| \leq 1$$

Zusammenfassung der Zusammenhänge



Beispiel: Konsistenz + Stabilität => Konvergenz

Instationäre Diffusionsgleichung:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

Diskretisierung und expliziter Lösungsalgorithmus:

1) Diskretisierung der Zeit mit einseitigen Differenzen (Genauigkeit 1. Ordnung):

$$\frac{\phi_i^{\nu+1} - \phi_i^{\nu}}{\Delta t} = \alpha \frac{\phi_{i+1}^{\nu} - 2\phi_i^{\nu} + \phi_{i-1}^{\nu}}{\Delta x^2} \quad \Rightarrow \quad \phi_i^{\nu+1} = \phi_i^{\nu} + \underbrace{\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}}_{s} \left(\phi_{i+1}^{\nu} - 2\phi_i^{\nu} + \phi_{i-1}^{\nu}\right)$$

2) Diskretisierung der Zeit mit zentralen Differenzen (Genauigkeit 2. Ordnung):

$$\frac{\phi_i^{\nu+1} - \phi_i^{\nu-1}}{2\,\Delta t} = \alpha \frac{\phi_{i+1}^{\nu} - 2\phi_i^{\nu} + \phi_{i-1}^{\nu}}{\Delta x^2} \quad \Rightarrow \quad \phi_i^{\nu+1} = \phi_i^{\nu-1} + \underbrace{\frac{\alpha\, 2\, \Delta t}{\Delta x^2}}_{2s} \left(\phi_{i+1}^{\nu} - 2\phi_i^{\nu} + \phi_{i-1}^{\nu}\right)$$

3. Implizite Formulierung

$$-s\,\phi_{i+1}^{\nu+1} + (2s+1)\phi_i^{\nu+1} - s\,\phi_{i-1}^{\nu+1} = \phi_i^{\nu} \qquad \Rightarrow \qquad \phi_i^{\nu+1} = \phi_i^{\nu} + \underbrace{\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}}_{s}\left(\phi_{i+1}^{\nu+1} - 2\phi_i^{\nu+1} + \phi_{i-1}^{\nu+1}\right)$$

Übung: Nachweis der Konsistenz für die verschiedenen Formulierungen!

Nachweis der Stabilität

Fourieransatz: $\phi_i^\nu = V_k^\nu \, e^{\sqrt{-1}\,k\,x}$

Diskretisierung 1:

$$V_k^{\nu+1}\, e^{\sqrt{-1}ki\Delta x} = V_k^\nu\, e^{\sqrt{-1}ki\Delta x} + s\,(V_k^\nu\, e^{\sqrt{-1}k(i+1)\Delta x} - 2V_k^\nu\, e^{\sqrt{-1}ki\Delta x} + V_k^\nu\, e^{\sqrt{-1}k(i-1)\Delta x})$$

$$\Rightarrow \quad \frac{V_k^{\nu+1}}{V_k^\nu} = 1 + s(e^{\sqrt{-1}k\Delta x} - 2 + e^{\sqrt{-1}k(-\Delta x)})$$

Mit $e^{\sqrt{-1}k\Delta x} + e^{-\sqrt{-1}k\Delta x} = 2\cos(kx)$ folgt:

$$\frac{V_k^{\nu+1}}{V_k^\nu} = 1 + 2s(\cos kx - 1) = 1 - 4s\sin^2(k\frac{x}{2})$$

Stabilitätsbedingung:

$$|\frac{V_k^{\nu+1}}{V_k^\nu}| \leq 1 \qquad \Leftrightarrow \qquad |1 - 4s\sin^2(k\frac{x}{2})| \leq 1$$

Die Forderung liefert Bedingungen für den Parameter *s*:

$$|1 - 4s\sin^2(k\frac{x}{2})| \leq 1 \qquad \Rightarrow \qquad -1 \leq 1 - 4s\sin^2(k\frac{x}{2}) \leq 1 \quad \forall\, x$$

1.1) $$-2 \leq -4s\sin^2(k\frac{x}{2}) \qquad \Rightarrow \qquad s \leq \frac{1}{2}$$

1.2) $$-4s\sin^2(k\frac{x}{2}) \leq 0 \qquad \Rightarrow \qquad s \geq 0$$

Zusammengefasst ergibt sich: $0 \leq s \leq \frac{1}{2}$

oder für den Zusammenhang zwischen Zeit- und Ortsschrittweite: $0 \leq \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$

Das Verfahren ist stabil, falls:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$$

Diskretisierung 2:

$$V_k^{\nu+1} = V_k^{\nu-1} + s\,V_k^\nu\,(e^{\sqrt{-1}kx} + e^{-\sqrt{-1}kx} - 2) = V_k^{\nu-1} + 4sV_k^\nu\,(\cos kx - 1)$$

$$= V_k^{\nu-1} + 8s\,V_k^\nu\,\sin^2 k\tfrac{x}{2}$$

Amplitudenverhältnis: $$\frac{V_k^{\nu+1}}{V_k^\nu} = \frac{V_k^{\nu-1}}{V_k^\nu} + 8s\sin^2 k\frac{x}{2}$$

$$G = \frac{1}{G} + 8s\sin^2 k\frac{x}{2}\,, \quad G^2 - G\,8s\sin^2 k\frac{x}{2} - 1 = 0$$

$$\Rightarrow \quad G_{1,2} = 4s\sin^2 k\frac{x}{2} \pm \sqrt{16s^2\sin^4 k\frac{x}{2} + 1}$$

Die Stabilitätsbedingung $|G_{12}| \leq 1$ ist nicht erfüllbar für alle $s \geq 0$! .

Das Verfahren ist also instabil!

Diskretisierung 3:

$$-s\,V_k^{\nu+1}e^{\sqrt{-1}ki\Delta x} + (2s+1)V_k^{\nu+1} - s\,V_k^{\nu+1}e^{\sqrt{-1}ki\Delta x} = V_k^{\nu}$$

Verstärkungsfaktor: $$G = \frac{V_k^{\nu+1}}{V_k} = \frac{1}{-s\left(e^{\sqrt{-1}kx} + e^{-\sqrt{-1}kx}\right) + 2s + 1}$$

Mit $e^{\sqrt{-1}kx} + e^{-\sqrt{-1}kx} = 2\cos kx$

ergibt sich:

$$G = \frac{1}{2s(\cos kx - 1) + 1} = \frac{1}{4s\sin^2 k\frac{x}{2} + 1}$$

Die Stabilitätsbedingung $|G| \leq 1$ liefert $-1 \leq \frac{1}{1+4s\sin^2 k\frac{x}{2}} \leq 1$.

$$\sin^2 k\tfrac{x}{2} = 0 \quad \Rightarrow \quad G = 1 \quad \forall\, s$$

$$\sin^2 k\tfrac{x}{2} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad s \geq 0$$

$$\sin^2 k\frac{x}{2} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad s \geq 0$$

Stabil ohne Einschränkungen für alle $s \geq 0$.

Das implizite Verfahren ist also uneingeschränkt stabil.

Die höhere Stabilität ist eine grundsätzlicher Vorteil impliziter gegenüber expliziter Verfahren.