



Institut für Numerische Simulation der Universität Bonn
Prof. Dr. Mario Bebendorf

Praktikum im Sommersemester 2012

Programmierpraktikum numerische Algorithmen (P2E1)
(Numerische Lösung der Wärmeleitungsgleichung)
Betreuer: Christian Kuske¹

Blatt 1

1 Einführung

In diesem Programmierpraktikum soll eine numerische Lösung $u: \Omega \subset \mathbb{R}^d \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ der Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{aligned} -\Delta u + c \frac{\partial u}{\partial t} &= 0 \quad \text{in } \Omega, \\ u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{1}$$

gefunden werden. Hierbei ist $\mathbb{R} \ni c \neq 0$ die Temperaturleitfähigkeit, $g \in \partial\Omega$ eine Funktion die Anfangs- und Randwerte vorgibt, $\frac{\partial u}{\partial t}$ die partielle Ableitung von u nach der Zeit t und Δ bezeichne den d -dimensionalen LAPLACE-Operator.

Bei der Wärmeleitungsgleichung handelt es sich um eine parabolische partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Ein Überblick über die verschiedenen Typen von Differentialgleichungen wird im folgenden Abschnitt gegeben.

Einschränkung

Der Einfachheit halber wird die Gleichung (1) für $d = 2$ betrachtet. Die Übertragung der später vorgestellten Verfahren auf mehr als zwei Dimensionen lässt sich ohne große Änderungen in Programmcode bewerkstelligen.

Zusätzlich wird das Gebiet auf den zweidimensionalen Einheitswürfel beschränkt.

Insgesamt ergibt sich:

$$\begin{aligned} u: [0, 1]^2 \times [0, T] &\rightarrow \mathbb{R}, \\ (x, y) \times t &\mapsto u(x, y, t). \end{aligned}$$

Zur Bestimmung der numerischen Lösung der Gleichung (1) wird diese zunächst für den stationären (zeitunabhängigen, $t = t_0$) Fall ermittelt. Das heißt, es wird $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ gesetzt.

¹We6 4.002; Tel.: 0228/73-60454; Email: kuske@ins.uni-bonn.de

Damit lässt sich Gleichung (1) zu

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 0 & \text{in } \Omega := [0, 1]^2, \\ u &= g & \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2}$$

umschreiben. Diese Gleichung ist eine elliptische partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Zu beachten ist, dass bei der Lösung der Gleichung (2) c keine Rolle spielt, da ein stationäres Problem gelöst wird und c lediglich die Ausbreitung der Temperatur beschreibt.

Diskretisierung

Da die Gleichung (2) kontinuierlich ist und sich somit nicht im Computer darstellen lässt, muss sie diskretisiert werden. Genauer findet sich in Abschnitt 3.

Durch diese Diskretisierung ergibt sich folgendes Gleichungssystem

$$L_h u_h = f_h \quad \text{in } \Omega_h, \tag{3}$$

wobei Ω_h das gesamte (inklusive Rand) diskretisierte Gebiet mit der Gitterweite h darstellt. Die dadurch entstehende Matrix $L_h \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$ und rechte Seite $f_h \in \mathbb{R}^{n^2}$ lassen sich dann numerisch berechnen. Die diskrete Lösung u_h stellt damit eine Näherung an u aus Gleichung (2) dar.

Da die Matrix L_h wenige Einträge ungleich Null besitzt, bietet sich ein iteratives Verfahren zum Lösen der Gleichung (3) an.

2 Differentialgleichungen

Eine Differentialgleichung ist eine Gleichung einer unbekanntem Funktion, die sich auf sich selbst und ihren Ableitungen bezieht und von einer oder mehreren Variablen abhängt. Solche Gleichungen treten besonders in der Physik auf, finden aber auch Anwendung in anderen Bereichen.

Beispiel 2.1. *Bei der Berechnung von Zinsen hängt der Zuwachs proportional von der momentanen Geldmenge ab, das heißt*

$$\frac{dK(t)}{dt} = rK(t).$$

Hierbei ist r die Zinsrate und $K(t)$ das Kapital zum Zeitpunkt t . Es handelt sich um eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung. Damit die Lösung eindeutig ist, müssen Anfangswerte $K(t_0) = k_0$ festgelegt werden.

Gewöhnliche Differentialgleichungen

Wie im obigen Beispiel zu sehen ist, hängen gewöhnliche Differentialgleichungen von lediglich einer Variablen ab, wobei die Ordnung den höchsten Grad der Ableitung angibt.

Partielle Differentialgleichungen

Bei dieser Art von Differentialgleichungen ist eine Abhängigkeit in mehreren Variablen gegeben (mind. zwei), wobei zusätzlich partielle Ableitungen in mindestens zwei Variablen auftauchen. Auch in diesem Fall bezeichnet die Ordnung den höchsten Grad der Ableitung.

In diesem Praktikum wird sich vorwiegend mit partiellen Differentialgleichung zweiter Ordnung befasst. Eine allgemeine Darstellung in d Variablen sieht wie folgt aus:

$$-\sum_{i,j=1}^d a_{ij}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^d b_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} + c(x)u = f(x). \quad (4)$$

Im Unterschied zu den gewöhnlichen Differentialgleichungen gibt es drei wesentliche Typen von partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Mit $(A(x))_{ij} := a_{ij}(x)$ ergibt sich:

- Die Gleichung (4) heißt elliptisch, falls $A(x)$ positiv definit für alle x ist.
- Die Gleichung (4) heißt hyperbolisch, falls $A(x)$ einen negativen und $d - 1$ positive Eigenwerte für alle x hat.
- Die Gleichung (4) heißt parabolisch, falls $A(x)$ positiv semidefinit aber nicht definit ist und der Rang von $(A(x), b(x))$ gleich d für alle x ist.

Der d -dimensionale LAPLACE-Operator besteht aus der Summe aller partiellen Ableitungen zweiten Grades in einer Dimension, das heißt

$$\Delta := \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (5)$$

Aus den Gleichungen (1) und (2) werden mit Hilfe von (4) und (5) folgende Matrizen für $d = 3$ beziehungsweise $d = 2$ erzeugt:

$$A_p(x) = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b_p(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad A_e(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix $A_p(x)$ und der Vektor $b_p(x)$ erfüllen die dritte Bedingung der Gleichung (4) und damit ist Gleichung (1) eine parabolische partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in drei Variablen. Die Gleichung (2) ist elliptisch.

Diese Strukturen werden für ein beliebiges d beibehalten.

3 Diskretisierung

Eine Diskretisierung ist der Übergang von einem kontinuierlichen Modell (1), (2) zu einem diskreten Modell (3), das durch endlich viele Daten beschrieben werden kann. Dabei entsteht ein sogenannter Diskretisierungsfehler $e_h := u - u_h$, der die Abweichung des kontinuierlichen Problems zum diskretisierten angibt. Dieser Fehler sollte bei einer Verringerung der Gitterweite $h = \frac{1}{n-1}$ gegen Null streben, wobei n die Anzahl der Diskretisierungspunkte darstellt.

Finite Differenzen

Da die Gleichungen (1) und (2) Ableitungen enthalten, stellt sich die Frage, wie sich diese mit Hilfe von diskreten Datenpunkten berechnen beziehungsweise annähern lässt. Dazu dient die Methode der Finiten Differenzen.

Diese Methode ist durch den folgenden Zusammenhang zwischen Differenzenquotient und Ableitung

$$\frac{du}{dx} := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

motiviert.

Für die erste Ableitung im Eindimensionalen gibt es drei verschiedene Typen von Finiten Differenzen:

- $(\partial^+ u)(x) := \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$ Vorwärtsdifferenz
- $(\partial^- u)(x) := \frac{u(x) - u(x-h)}{h}$ Rückwärtsdifferenz
- $(\partial^0 u)(x) := \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}$ zentrale Differenz

Für die zweite Ableitung in einer Dimension lassen sich die Finiten Differenzen wie folgt definieren:

- $(\partial^+(\partial^- u))(x) = (\partial^-(\partial^+ u))(x) := \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}$
- $(\partial^0(\partial^0 u))(x) := \frac{u(x+2h) - 2u(x) + u(x-2h)}{4h^2}$

Alle anderen Kombinationen von ∂^+ , ∂^- und ∂^0 sind ebenfalls möglich, führen allerdings auf Verfahren mit einer schlechteren Konsistenzordnung. In der Praxis wird für die zweite Ableitung meist $(\partial^+(\partial^- u))(x)$ verwendet, wobei diese dann mit dem sogenannten Differenzenstern

$$h^{-2} \begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix}$$

abgekürzt wird.

Konsistenz

Ist ein numerisches Verfahren konsistent, so approximiert dieses Verfahren das gegebene Problem. Wie schnell dies geschieht, lässt sich durch die Konsistenzordnung beschreiben.

Eine Diskretisierung $-L_h u_h = f_h$ von $-\Delta u = f$ heißt konsistent von Ordnung k , falls für $h \rightarrow 0$

$$\|\tilde{R}_h \Delta u - L_h R_h u\|_\infty \leq ch^k \|u\|_{C^{k+2}(\bar{\Omega})}$$

für alle $u \in C^{k+2}(\bar{\Omega})$ gilt. Hierbei sind \tilde{R}_h, R_h geeignete Restriktionen auf einem Gitter Ω_h und c eine von h, u unabhängige Konstante.

$$\begin{array}{ccc} u & \xrightarrow{\Delta} & f \\ R_h \downarrow & & \downarrow \tilde{R}_h \\ u_h & \xrightarrow{L_h} & f_h \end{array}$$

Stabilität

Ist ein numerisches Verfahren stabil, so ist es unempfindlich gegenüber kleinen Störungen der Daten. Das bedeutet, dass die Störungen das Verfahren nicht beeinflussen und auftretende Rundungsfehler die Lösung nicht verfälschen.

Eine Diskretisierung L_h heißt stabil, falls

$$\sup_{h>0} \|L_h^{-1}\|_\infty < \infty$$

gilt.

Bemerkung 3.1 (Konvergenz). *Es lässt sich zeigen, dass aus der Konsistenz und der Stabilität die Konvergenz des Verfahrens folgt. Dabei entspricht die Konvergenzordnung die der Konsistenzordnung.*

