

## Teil II: Numerische Methoden

### 7. Numerische Methoden für lineare Gleichungen

Lineares Cauchyproblem:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x &= 0, & -\infty < x < \infty, t > 0, \\ \mathbf{u}(x, 0) &= \mathbf{u}_0(x). \end{aligned} \quad (7.1)$$

Ortgitter mit **Gitterweite**  $h$ . Zeitgitter mit **Zeitschritt**  $k$ . Gitterpunkte  $(x_j, t_n) = (jh, nk)$ . Auch  $x_{j+1/2} = x_j + h/2 = (j + 1/2)h$ . Annahme: Gitterverhältnis  $k/h$  konstant bei  $k, h \rightarrow 0$ . Näherung  $\mathbf{U}_j^n$  für  $\mathbf{u}_j^n = \mathbf{u}(x_j, t_n)$  bzw. für den Mittelwert

$$\bar{\mathbf{u}}_j^n = \frac{1}{h} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{u}(x, t_n) dx.$$

Diskrete Anfangsdaten:  $\mathbf{U}_j^0 = \mathbf{u}_j^0$  oder  $\mathbf{U}_j^0 = \bar{\mathbf{u}}_j^0$ . Stückweise konstante Fortsetzung von  $\mathbf{U}_j^n$ :

$$\mathbf{U}_k(x, t) = \mathbf{U}_j^n, \quad \text{für } (x, t) \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times [t_n, t_{n+1}) \quad (7.2)$$

Forwärtsschreiten in der Zeit: Hier fast ausschließlich Einschrittverfahren, in denen  $\mathbf{U}^n$  aus  $\mathbf{U}^{n-1}$  berechnet wird.

**Finite Differenzenverfahren:** Zumeist werden Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzt. Beispiele: **Explizite** Diskretisierung:

$$\frac{\mathbf{U}_j^{n+1} - \mathbf{U}_j^n}{k} + \mathbf{A} \left( \frac{\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_{j-1}^n}{2h} \right) = 0 \quad (7.3)$$

Das gibt

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{k}{2h} \mathbf{A} (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_{j-1}^n).$$

**Implizite** Diskretisierung (Implizites Eulerverfahren):

$$\frac{\mathbf{U}_j^{n+1} - \mathbf{U}_j^n}{k} + \mathbf{A} \left( \frac{\mathbf{U}_{j+1}^{n+1} - \mathbf{U}_{j-1}^{n+1}}{2h} \right) = 0 \quad (7.4)$$

Hier muß bei jedem Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Obwohl (7.3) wegen Stabilitätsproblemen unbrauchbar ist, gibt es funktionierende explizite Methoden, die im allgemeinen effizienter als implizite Methoden sind. Wir werden uns ausschließlich mit expliziten Methoden beschäftigen. Im Folgenden eine Liste von expliziten Verfahren:

**Linksseitige Differenzen:**

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{k}{h} \mathbf{A} (\mathbf{U}_j^n - \mathbf{U}_{j-1}^n) \quad (7.5)$$

**Rechtsseitige Differenzen:**

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{k}{h} \mathbf{A} (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_j^n) \quad (7.6)$$

**Lax-Friedrichs:**

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \frac{1}{2} (\mathbf{U}_{j-1}^n + \mathbf{U}_{j+1}^n) - \frac{k}{2h} \mathbf{A} (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_{j-1}^n) \quad (7.7)$$

**Leapfrog:**

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^{n-1} - \frac{k}{h} \mathbf{A} (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_{j-1}^n) \quad (7.8)$$

**Lax-Wendroff:**

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{k}{2h} \mathbf{A} (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_{j-1}^n) + \frac{k^2}{2h^2} \mathbf{A}^2 (\mathbf{U}_{j+1}^n - 2\mathbf{U}_j^n + \mathbf{U}_{j-1}^n) \quad (7.9)$$

## Beam-Warming:

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{k}{2h} \mathbf{A}(3\mathbf{U}_j^n - 4\mathbf{U}_{j-1}^n + \mathbf{U}_{j-2}^n) + \frac{k^2}{2h^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{U}_j^n - 2\mathbf{U}_{j-1}^n + \mathbf{U}_{j-2}^n) \quad (7.10)$$

Bis auf das Leapfrog-Verfahren sind das alles Einschrittverfahren. (7.5)–(7.8) entstehen durch Ersetzen von Ableitungen durch Differenzenquotienten. Herleitung des Lax-Wendroff- und des Beam-Warming-Verfahrens: Taylorentwicklung

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x, t+k) &= \mathbf{u}(x, t) + k\mathbf{u}_t(x, t) + \frac{k^2}{2}\mathbf{u}_{tt}(x, t) + O(k^3) \\ &= \mathbf{u}(x, t) - k\mathbf{A}\mathbf{u}_x(x, t) + \frac{k^2}{2}\mathbf{A}^2\mathbf{u}_{xx}(x, t) + O(k^3). \end{aligned}$$

Nun werden Ortsableitungen durch Differenzenapproximationen zweiter Ordnung ersetzt (Lax-Wendroff: Zentrale Differenzen, Beam-Warming: Linksseitige Differenzen).

Schreibweise für Einschrittverfahren:

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathcal{H}_k(\mathbf{U}^n) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{U}_j^{n+1} = \mathcal{H}_k(\mathbf{U}^n; j)$$

Der Definitionsbereich von  $\mathcal{H}_k$  kann auf Funktionen von  $x$  erweitert werden: In  $\mathcal{H}_k(v; x)$  wird an Stelle von  $v_j, v_{j+1}$  usw.  $v(x), v(x+h)$  usw. verwendet.

**Lineare Methoden:**  $\mathcal{H}_k$  ist ein linearer Operator.

### 7.1. Fehler

Fehlerfunktion:

$$\mathbf{E}_k(x, t) = \mathbf{U}_k(x, t) - \mathbf{u}(x, t)$$

Sei  $\|\cdot\|$  eine Norm für Funktionen von  $x$ .

**Definition.** Eine Methode heißt **konvergent** bezüglich der Norm  $\|\cdot\|$ , wenn

$$\lim_{k \rightarrow 0} \|\mathbf{E}_k(\cdot, t)\| = 0$$

für alle  $t \geq 0$  und alle Anfangsdaten  $\mathbf{u}_0$  aus einem bestimmten Funktionenraum.

Beispiel für die Norm:  $L^1(\mathbb{R})$ -Norm

$$\|v\|_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |v(x)| dx$$

Für Gitterfunktionen:

$$\|\mathbf{U}_k(\cdot, t_n)\|_1 = \|\mathbf{U}^n\|_1 := h \sum_j |\mathbf{U}_j^n|$$

Von nun an bedeutet  $\|\cdot\|$  immer die  $L^1(\mathbb{R})$ -Norm.

Für ein beliebiges Einschrittverfahren erwarten wir, daß die Gleichung

$$\frac{1}{k}(\mathbf{U}_j^{n+1} - \mathcal{H}_k(\mathbf{U}^n; j)) = 0$$

für  $k \rightarrow 0$  formal gegen die Differentialgleichung (7.1) konvergiert. Das Konzept des lokalen Diskretisierungsfehlers beinhaltet eine Umkehrung dieser Betrachtungsweise.

**Definition.** a) Für ein Einschrittverfahren ist der **lokale Diskretisierungsfehler** gegeben durch

$$\mathbf{L}_k(x, t) = \frac{1}{k} (\mathbf{u}(x, t+k) - \mathcal{H}_k(\mathbf{u}(\cdot, t); x)).$$

b) Die Methode heißt **konsistent**, wenn

$$\lim_{k \rightarrow 0} \|\mathbf{L}_k(\cdot, t)\| = 0.$$

c) Die Methode ist **p-ter Ordnung**, wenn es für alle hinreichend glatten Anfangsdaten mit kompaktem Träger eine Konstante  $C_L$  gibt, sodaß

$$\|\mathbf{L}_k(\cdot, t)\| \leq C_L k^p, \quad \forall k \leq k_0, t \leq T.$$

**Beispiel :** Lax-Friedrichs-Verfahren:

$$\mathbf{L}_k(x, t) = \mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x + \frac{1}{2} \left( k\mathbf{u}_{tt} - \frac{h^2}{k}\mathbf{u}_{xx} \right) + O(k^2) = O(k) \quad (7.11)$$

für Lösungen von (7.1). Verfahren erster Ordnung.

## 7.2. Stabilität

Es gilt

$$\mathbf{u}(x, t+k) = \mathcal{H}_k(\mathbf{u}(\cdot, t); x) + k\mathbf{L}_k(x, t)$$

und damit für lineare Methoden

$$\mathbf{E}_k(\cdot, t+k) = \mathcal{H}_k\mathbf{E}_k(\cdot, t) - k\mathbf{L}_k(\cdot, t).$$

mit einer Matrix  $\mathcal{H}_k$ . Das hat die Lösung

$$\mathbf{E}_k(\cdot, t_n) = \mathcal{H}_k^n \mathbf{E}_k(\cdot, 0) - k \sum_{i=1}^n \mathcal{H}_k^{n-i} \mathbf{L}_k(\cdot, t_{i-1}).$$

**Definition.** Eine Methode heißt **stabil**, wenn für jede Zeit  $T$  Konstante  $C_S$  und  $k_0 > 0$  existieren, sodaß

$$\|\mathcal{H}_k^n\| \leq C_S, \quad \forall nk \leq T, k \leq k_0.$$

**Der Lax'sche Äquivalenzsatz.** Für eine konsistente lineare Methode ist Stabilität notwendig und hinreichend für Konvergenz.

**Beispiel 1:** Das Lax-Friedrichs-Verfahren ist stabil für

$$\nu = \max_{p=1, \dots, m} \left| \frac{\lambda_p k}{h} \right| \leq 1. \quad (7.12)$$

**Beispiel 2:** Die Methode (7.5) mit linksseitigen Differenzen ist stabil, wenn für alle Eigenwerte

$$0 \leq \frac{\lambda_p k}{h} \leq 1$$

gilt. Insbesondere müssen alle Eigenwerte positiv sein.

**Definition.** Der **Abhängigkeitsbereich**  $\mathcal{D}(\bar{x}, \bar{t})$  ist die Menge aller Punkte  $(x, t)$  mit der folgenden Eigenschaft: Eine Störung der Lösung von (7.1) an der Stelle  $(x, t)$  hat einen Einfluß auf die Lösung an der Stelle  $(\bar{x}, \bar{t})$ . Analog wird der **numerische Abhängigkeitsbereich**  $\mathcal{D}_k(\bar{x}, \bar{t})$  für Differenzenverfahren definiert.

**Die CFL(Courant-Friedrichs-Levy)-Bedingung.** Es ist notwendig für die Stabilität einer numerischen Methode, daß asymptotisch für  $k \rightarrow 0$  der numerische Abhängigkeitsbereich  $\mathcal{D}_k(\bar{x}, \bar{t})$  den Abhängigkeitsbereich  $\mathcal{D}(\bar{x}, \bar{t})$  enthält.

Für beliebige Verfahren, für die  $\mathcal{H}_k(\mathbf{U}^n; j)$  nur von  $\mathbf{U}_{j-1}^n$ ,  $\mathbf{U}_j^n$  und  $\mathbf{U}_{j+1}^n$  abhängt, nimmt die CFL-Bedingung die Form (7.12) an. Die Zahl  $\nu$  wird **Courantzahl** genannt.

**Achtung:** Die CFL-Bedingung ist nicht hinreichend für Stabilität (siehe Beispiel 2).

Abbildung 8.1

### 7.3. Upwind-Methoden

Für die skalare Gleichung

$$u_t + au_x = 0, \quad a > 0,$$

ist die Methode (7.5) mit linksseitigen Differenzen unter der Bedingung  $ak/h \leq 1$  stabil. Physikalisch gesehen, wird die Information für den nächsten Zeitpunkt aus der Richtung geholt, aus der der Wind bzw. die Strömung kommt (upwind direction, upstream direction). Für die obige Gleichung ist (7.5) die Upwind-Methode erster Ordnung.

Die Upwind-Methode für ein System mit positiven und negativen Eigenwerten: Sei

$$\begin{aligned} \lambda_p^+ &= \max(\lambda_p, 0), & \mathbf{A}^+ &= \text{diag}(\lambda_1^+, \dots, \lambda_m^+), \\ \lambda_p^- &= \min(\lambda_p, 0), & \mathbf{A}^- &= \text{diag}(\lambda_1^-, \dots, \lambda_m^-). \end{aligned}$$

Upwind-Methode:

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{k}{h} \mathbf{A}^+ (\mathbf{U}_j^n - \mathbf{U}_{j-1}^n) - \frac{k}{h} \mathbf{A}^- (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_j^n) \quad (7.13)$$

mit

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{R} \mathbf{\Lambda}^+ \mathbf{R}^{-1}, \quad \mathbf{A}^- = \mathbf{R} \mathbf{\Lambda}^- \mathbf{R}^{-1}.$$

### 8. Die Berechnung unstetiger Lösungen

Die Abbildung 8.1 zeigt numerische Lösungen und die exakte Lösung des Riemann-Problems

$$\begin{aligned} u_t + u_x &= 0, \\ u(x, 0) &= \begin{cases} 1 & x < 0, \\ 0 & x > 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (8.1)$$

zum Zeitpunkt  $t = 0.5$ . Gitter:  $h = 0.01$ ,  $k/h = 0.5$ .

Konvergenzüberlegungen aus dem vorigen Kapitel sind hier nicht anwendbar. Bezüglich der sup-Norm ist keine Konvergenz zu erwarten. Welche Konvergenzrate bezüglich der  $L^1(\mathbb{R})$ -Norm?

Wegen (7.11) ist das Lax-Friedrichs-Verfahren ein Verfahren zweiter Ordnung für die Differentialgleichung

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x + \frac{1}{2} \left( k\mathbf{u}_{tt} - \frac{h^2}{k}\mathbf{u}_{xx} \right) = 0.$$

Eine solche Gleichung heißt **modifizierte Gleichung** für das Lax-Friedrichs-Verfahren. Die modifizierte Gleichung ist nicht eindeutig. Eine andere, brauchbarere Wahl ist

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = \frac{h^2}{2k} \left( \mathbf{I} - \frac{k^2}{h^2}\mathbf{A}^2 \right) \mathbf{u}_{xx}. \quad (8.2)$$

Dieses System wird auf die übliche Art durch die Transformation  $\mathbf{u} = \mathbf{R}\mathbf{v}$  entkoppelt:

$$v_{pt} + \lambda_p v_{px} = \frac{h^2}{2k} \left( 1 - \left( \frac{\lambda_p k}{h} \right)^2 \right) v_{pxx}, \quad p = 1, \dots, m$$

Ist die CFL-Bedingung (7.12) erfüllt, dann ist die rechte Seite ein Diffusionsterm, dessen Effekt ein Ausschmieren von Unstetigkeiten ist. Das ist typisch für Methoden erster Ordnung (siehe Abb. 8.1). Interpretation in der Gasdynamik: Reibungseffekt. Daher der Begriff **künstliche Viskosität**.

Modifizierte Gleichung für das Lax-Wendroff-Verfahren:

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = \frac{h^2}{6} \mathbf{A} \left( \frac{k^2}{h^2} \mathbf{A}^2 - \mathbf{I} \right) \mathbf{u}_{xxx}$$

Beam-Warming-Verfahren:

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = \frac{h^2}{6} \mathbf{A} \left( 2\mathbf{I} - \frac{3k}{h} \mathbf{A} + \frac{k^2}{h^2} \mathbf{A}^2 \right) \mathbf{u}_{xxx}$$

Im skalaren Fall:

$$u_t + au_x = \mu u_{xxx} \quad (8.3)$$

Das ist eine **dispersive** Gleichung. Dispersive modifizierte Gleichungen sind typisch für Verfahren zweiter Ordnung. Anfangswertprobleme für (8.3) können mit Hilfe der Fouriertransformation gelöst werden:

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}_0(\xi) \exp [i\xi(x - (a + \mu\xi^2)t)] d\xi$$

mit der Fouriertransformierten  $\hat{u}_0(\xi)$  der Anfangsdaten  $u(x, 0)$ . Die Gleichung  $c(\xi) = a\xi + \mu\xi^3$ , die die **Frequenz** in Abhängigkeit von der **Wellenzahl**  $\xi$  angibt, heißt **Dispersionsrelation**. Offensichtlich wird der Lösungsanteil mit der Wellenzahl  $\xi$  mit der Geschwindigkeit  $a + \mu\xi^2$  verschoben. Den Effekt, daß die Anteile mit verschiedener Wellenzahl mit der Zeit auseinandergezogen werden, bezeichnet man als **Dispersion**.

Eine Sprungfunktion hat ein breites Fourierpektrum. Für das Riemann-Problem klingt die Funktion  $\hat{u}_0(\xi)$  für  $|\xi| \rightarrow \infty$  nur langsam (wie  $1/\xi$ ) ab.

Der Dispersionseffekt erklärt das oszillierende Verhalten der Lösung bei Verwendung des Lax-Wendroff- bzw. des Beam-Warming-Verfahrens. Im skalaren Fall mit positivem  $a$  erhält man unter der Bedingung  $\nu = ak/h < 1$  für das Lax-Wendroff-Verfahren

$$\mu = \frac{1}{6} h^2 a (\nu^2 - 1) < 0,$$

und für das Beam-Warming-Verfahren

$$\mu = \frac{1}{6} h^2 a (2 - 3\nu + \nu^2) > 0.$$

Daher treten die Oszillationen beim Lax-Wendroff-Verfahren hinter der Unstetigkeit und beim Beam-Warming-Verfahren vor der Unstetigkeit auf (siehe Abb. 8.1).

Mit Hilfe der modifizierten Gleichung

$$u_t + u_x = Du_{xx} \tag{8.4}$$

für ein Verfahren erster Ordnung im skalaren Fall versuchen wir nun, den Fehler bei der numerischen Lösung des Riemannproblems (8.1) zu schätzen.

Die Lösung des Riemann-Problems für (8.4) ist

$$u^D(x, t) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x-t}{\sqrt{4Dt}} \right) \right]$$

mit der Fehlerfunktion

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz.$$

Für die Differenz zwischen  $u^D(x, t)$  und der exakten Lösung  $u(x, t) = u_0(x-t)$  gilt

$$\|u(., t) - u^D(., t)\| = \sqrt{Dt} \left( \int_{-\infty}^0 (1 + \operatorname{erf}z) dz + \int_0^{\infty} (1 - \operatorname{erf}z) dz \right) = C_1 \sqrt{Dt}.$$

Die Diffusionskonstante ist  $O(k)$ , d.h. die Verfahren "erster Ordnung" konvergieren mit der Ordnung  $k^{1/2}$ .