

MODELLBILDUNG

Modellierung und Simulation von Strömen

Prof. Dr. Hans Babovsky

Technische Universität Ilmenau, SS 2008

1 Konzept

Wir wollen für ein Teilchensystem (Gasteilchen in der Luft, Rußteilchen im Motor, Ladungsträger im Computerchip, etc.) den Weg von den Bewegungsgleichungen für die einzelnen Teilchen über die Erstellung partieller Differentialgleichungen bis zur Diskretisierung und Implementierung im Computer verfolgen.

N-Teilchensystem, Newton-Gleichungen, random walk



partielle Differentialgleichungen



Diskretisierung



Implementierung

2 Simulation von Flüssen

Betrachte $N \gg 1$ Punkte im Raum, welche sich zufällig oder deterministisch nach gewissen Gesetzmäßigkeiten bewegen.

Da N als sehr groß angenommen werden soll (Autos im Straßennetz, Moleküle in der Luft, Ladungen in Halbleitern, etc.), müssen Wege gefunden werden, diese Ensembles geeignet zu Modellieren und auf dem Rechner zu berechnen. Wir betrachten hier lediglich zwei einfache Modellprobleme:

- **Gleichförmige Bewegung** und die **lineare Advektionsgleichung**
- **Random walk** und die **Wärmeleitgleichung**

2.1 Newtons Gleichungen, gleichförmige Bewegung

Die berühmte Newton-Gleichung der Mechanik lautet

$$F = m \cdot a$$

Kraft = Masse x Beschleunigung

Das bedeutet Folgendes.

Nehmen wir an, ein Teilchen bewegt sich auf einer Bahn $x(t)$ im Raum (z.B. in \mathbb{R}^3). Seine Geschwindigkeit v ist gegeben als erste Ableitung von x , und die Beschleunigung a als zweite:

$$\begin{aligned}v &= x' \\ a &= x''\end{aligned}$$

Damit lassen sich die Newton-Gleichungen als folgendes lineare Differentialgleichungssystem formulieren: Bezeichnen wir $z = (z_1, z_2)^T := (x, x')^T$, so ist

$$z' = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{=:A} \cdot z + \begin{pmatrix} 0 \\ F/m \end{pmatrix}$$

Die Lösung lautet für $F/m = \text{const}$

$$\begin{aligned} z(t) &= \exp(At)z_0 + \frac{F}{m} \cdot \int_0^t \exp(A(t-s)) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} ds \\ &= \begin{pmatrix} x_0 + tv_0 + \frac{F}{2m}t^2 \\ v_0 + \frac{F}{m}t \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Besonders einfach wird dieses System, wenn $F \equiv 0$. In diesem Fall besteht die Wirkung des Newton-Gesetzes in der Translation der Ortskoordinate:

$$x_0 \rightarrow x(t) = x_0 + t \cdot v_0$$

Entsprechend verhält sich ein System von N Teilchen, welche sich ohne Wechselwirkung und ohne äußere Krafteinwirkung bewegen:

$$\left(x_0^{(i)}\right)_{i=1}^N \rightarrow \left(x^{(i)}(t)\right)_{i=1}^N = \left(x_0^{(i)} + tv_0\right)_{i=1}^N$$

Ist N sehr groß, so geht man besser von der Beschreibung einzelner Teilchen zu **Teilchendichten** über:

$$f(t, x) \cdot \Delta x$$

beschreibt die Anzahl der Teilchen, welche sich zur Zeit t im (kleinen) Intervall $[x, x + \Delta x]$ befinden.

Nachdem sich ein Teilchen, welches sich zur Zeit t im Ort x befindet, zur Zeit 0 im Ort $x - tv_0$ befunden hat, muss gelten

$$f(t, x) = f(0, x - tv_0)$$

oder umgekehrt

$$f(t, x + tv_0) = f(0, x)$$

Damit hängt der Ausdruck $f(t, x + tv_0)$ nicht von t ab und wir erhalten durch Anwendung der Kettenregel

$$\frac{d}{dt} f(t, x + tv_0) = \partial_t f(t, x + tv_0) + v_0 \cdot \partial_x f(t, x + tv_0)$$

die

partielle Differentialgleichung (**lineare Advektionsgleichung**) $\partial_t f(t, x) + v_0 \cdot \partial_x f(t, x) = 0.$

Sind x und v (2- oder 3-dimensionale) Vektoren, so gilt entsprechend $\partial_t f(t, x) + v_0 \cdot \nabla_x f(t, x) = 0.$

2.2 Random walk

Betrachten wir ein Teilchen, welches sich zufällig nach folgenden Regeln auf $\sigma\mathbf{Z}$ bewegt. Es bezeichne $Z(n\Delta\tau) =: \sigma z_n$ ($\sigma > 0$) den Ort des Teilchens zur Zeit $n\Delta\tau$. Dann gelte

- $z_0 = 0$
- Die Bahn $\tau \rightarrow Z(\tau)$ ist konstant in $[n\Delta\tau, (n+1)\Delta\tau)$
- Zur Zeit $(n+1)\Delta t$ springt das Teilchen zufällig auf einen der Nachbarplätze:

$$z_{n+1} = \begin{cases} z_n - 1 & \text{mit Wk } 1/2 \\ z_n + 1 & \text{mit Wk } 1/2 \end{cases}$$

Bezeichnet $\Delta\xi_n$ den Zuwachs $\sigma(z_n - z_{n-1})$, so ist $(\Delta\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge von unabhängigen gleichverteilten ZVa auf $\{-\sigma, \sigma\}$ mit Erwartungswert $\mathcal{E}(\Delta\xi) = 0$ und Varianz $Var(\Delta\xi) = \mathcal{E}(|\Delta\xi|^2) = \sigma^2$. Außerdem ist $z_n = z_0 + \sum_{k=1}^n \Delta\xi_k$.

In der Stochastik lernt man, Summen unabhängiger gleichverteilter ZVa für große n zu berechnen (*Gesetze der großen Zahl, zentraler Grenzwertsatz*). Der **zentrale Grenzwertsatz** lautet:

Für $n \rightarrow \infty$ konvergiert die Verteilung von

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \Delta \xi_k$$

gegen die Normalverteilung $N = N(0, \sigma^2)$, welche gegeben ist durch die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \cdot \exp(-\xi^2/(2\sigma^2))$$

Reskalierung:

Das Konzept des random walks benutzt man z.B. um die Bewegung von Schwebeteilchen in Luft oder Wasser zu modellieren. Die Bewegung solcher Schwebeteilchen wird hervorgerufen durch eine Vielzahl von Stößen mit Luft- oder Wassermolekülen. Hierbei müssen wir unterscheiden zwischen mikro- und makroskopischen Zeit- und Raumskalen. Wir betrachten $\Delta\tau = 1$ und $\Delta\xi$ als mikroskopische Zuwächse und definieren als makroskopische Gegenstücke für kleine ϵ

$$\Delta t := \epsilon^2 \Delta\tau, \quad \Delta x := \epsilon \Delta\xi.$$

Wo befindet sich nun das Teilchen zur (makroskopischen) Zeit $t = \epsilon^2 \tau > 0$? Offenbar haben bis dahin $n(t) = \lfloor t/\epsilon^2 \rfloor$ Sprünge stattgefunden ($\lfloor \cdot \rfloor$ ist die Gaußklammer), und der Ort ist

$$X(t) = \sum_{k=1}^{n(t)} \Delta x_k = \epsilon \cdot \sum_{k=1}^{n(t)} \Delta\xi.$$

Wegen $n \leq t/\epsilon^2 < n + 1$ ist $\epsilon^2 = (1 + \delta)^2 \cdot t/n$ mit $\delta \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. Nach dem zentralen Grenzwertsatz konvergiert die makroskopische Aufenthaltswahrscheinlichkeit für

$$X(t) = (1 + \delta) \cdot \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \sqrt{t} \Delta \xi$$

gegen die Normalverteilung $N(0, t\sigma^2)$, gegeben durch die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t\sigma}} \cdot \exp(-x^2/(2\sigma^2 t)).$$

Man rechnet leicht nach, dass für $t > 0$ diese Dichte Lösung der folgenden **Wärmeleitungsgleichung** (oder **Diffusionsgleichung**) ist.

$$\partial_t f(t, x) = \sigma^2 \partial_{xx} f(t, x).$$

In zwei oder drei Raumdimensionen ist x ein Vektor und die Wärmeleitungsgleichung lautet

$$\partial_t f(t, x) = \sigma^2 \Delta f(t, x)$$

mit dem Laplaceoperator $\Delta u = \partial_{x_1 x_1} u + \partial_{x_2 x_2} u (+ \partial_{x_3 x_3} u)$.

3 Semidiskretisierungen

Wir wollen nun untersuchen, wie man die beiden partiellen Differentialgleichungen

$$\partial_t f(t, x) + a \cdot \partial_x f(t, x) = 0$$

und

$$\partial_t f(t, x) = \sigma^2 \partial_{xx} f(t, x).$$

auf dem Intervall $x \in [0, 1]$ numerisch gelöst werden können.

Um diese Probleme zu vervollständigen, müssen sie noch ergänzt werden um **Anfangsbedingungen**

$$f(0, x) = \phi_0(x)$$

mit einer vorgegebenen Funktion ϕ_0 und **Randbedingungen**, auf welche wir später eingehen werden.

Zu diesem Zweck definieren wir eine Schrittweite $h := 1/N$ und definieren die $N + 1$ Gitterpunkte auf $[0, 1]$, $x_j = j \cdot h$, $j = 0, \dots, N$. Des Weiteren schreiben wir für die gesuchte Lösung $f(t, x)$ kurz $f_j(t)$ anstelle $f(t, jh)$.

Nun müssen wir die Ableitungen $\partial_x f(t, x)$ und $\partial_{xx} f(t, x)$ in den Punkten x_j durch die Werte $f_k(t)$, $k, 0, \dots, N$, approximieren. Hierbei helfen uns Taylorreihenapproximationen.

Approximationen der ersten und zweiten Ableitungen

Der Satz von Taylor besagt, dass für hinreichend glatte Funktionen f

$$f(x \pm h) = f(x) \pm h\partial_x f(x) + \frac{h^2}{2!}\partial_{xx}f(x) \pm \frac{h^3}{3!}f_{xxx}(x) + \mathcal{O}(h^4).$$

Hieraus finden wir leicht Approximationen für $\partial_x f(x_j)$ in der Form

$$\begin{aligned} \text{einseitige Differenzen: } \partial_x f(x_j) &= \frac{f_{j+1} - f_j}{h} + \mathcal{O}(h) = \frac{f_j - f_{j-1}}{h} + \mathcal{O}(h) \\ \text{zentrale Differenz: } \partial_x f(x_j) &= \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

Obwohl von niedrigerer Ordnung als zentrale Differenzen, bieten sich als einseitige Differenzen die *Upwind-Varianten* an:

$$\text{approximiere } a\partial_x f(x_j) \quad \text{durch} \quad \begin{cases} a \cdot \frac{f_{j+1} - f_j}{h} & \text{falls } a > 0 \\ a \cdot \frac{f_j - f_{j-1}}{h} & \text{falls } a < 0 \end{cases}$$

Als Approximation der zweiten Ableitung verwenden wir im Folgenden die *zentrale Differenz*

$$\partial_{xx}f(x_j) = \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$

Die semidiskrete Advektionsgleichung ($a > 0$)

Einsetzen der Upwind-Approximation führt auf die Differentialgleichungen für f_1, \dots, f_{N-1}

$$\begin{aligned}\partial_t f_1 &= \frac{a}{h}(f_1 - f_0) \\ \partial_t f_2 &= \frac{a}{h}(f_2 - f_1) \\ &\vdots \\ \partial_t f_{N-1} &= \frac{a}{h}(f_{N-1} - f_{N-1})\end{aligned}$$

Formulieren wir nun noch z.B. die Randbedingungen $f(t, 0) = f(t, 1) = 0$ für alle $t > 0$, so lassen sich diese Gleichungen zu folgendem linearen System gewöhnlicher Differentialgleichungen für $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_{N-1})^T$ zusammenfassen.

$$\partial_t \mathbf{f} = \frac{a}{h} \cdot \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{f}$$

Es ist nicht allzu schwierig nachzuweisen, dass das System die folgende *analytische* Lösung hat

$$\mathbf{f}(t) = e^{-at/h} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ at/h & 1 \\ (at/h)^2/2! & at/h & 1 \\ (at/h)^3/3! & (at/h)^2/2! & at/h & 1 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & (at/h)^3/3! & (at/h)^2/2! & at/h & 1 \end{pmatrix} \mathbf{f}(0)$$

Zur *numerischen* Lösung können wir beispielsweise das klassische Runge-Kutta-Verfahren verwenden.

Zur Analyse des *Diskretisierungsfehlers* beachten wir, dass für die Upwind-Diskretisierung gilt

$$\frac{f(x) - f(x - h)}{h} = \partial_x f(x) - \frac{h}{2} \partial_{xx} f(x) + \mathcal{O}(h^2)$$

Damit erhalten wir als Modellgleichung für das diskrete System die *Advektions-Diffusionsgleichung*

$$\partial_t f(t, x) + a \partial_x f(t, x) = \frac{ah}{2} \partial_{xx} f(t, x) \quad (+\mathcal{O}(h^2))$$

welche einen Diffusionsterm der Ordnung $\mathcal{O}(h)$ als Fehler enthält.

(Weiteres hierzu in meiner Vorlesung *Numerik von Erhaltungsgleichungen*.)

Die semidiskrete Wärmeleitungsgleichung

In ähnlicher Weise erhalten wir zu den Randbedingungen $f(t, 0) = f(t, 1) = 0$ als semidiskrete Version der Wärmeleitungsgleichung des System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\partial_t \mathbf{f} = \frac{1}{h^2} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix}}_{=:A} \mathbf{f}$$

(Eine ausführliche Analyse der Matrix A und die Behandlung verwandter Fragestellungen erfolgen in meiner Vorlesung *Numerik partieller Differentialgleichungen*.)

4 Einige ausgewählte Fragestellungen

4.1 Charakteristikenverfahren

Wie im eindimensionalen ist bei mehreren Dimensionen die Lösung f der Advektionsgleichung gegeben durch die Anfangs- und Randbedingungen und die Forderung, dass die Lösung konstant ist entlang “Charakteristiken”. Die *Charakteristiken* sind bei vorgegebenem Geschwindigkeitsvektor v und gegebenen (t_0, x) als Bahnen

$$\phi(t|t_0, x) := x + (t - t_0)v.$$

Demnach ist die Funktion

$$t \rightarrow f(t, \phi(t|t_0, x)) = \text{const}$$

Um eine semidiskretisierte Version der Advektionsgleichung auf einem Gitter herzuleiten, leiten wir uns aus der Taylorformel folgende Approximation von ersten Richtungsableitungen $v \cdot \nabla g$ von Funktionen $g = g(x)$ her. Hierzu ist eine Differenzenapproximation von g entlang der zugehörigen Charakteristik zu berechnen.

$$v \cdot \nabla g(x) = \frac{1}{s}(g(x) - g(x - sv)) + \mathcal{O}(s^2)$$

Im Folgenden beschränken wir uns auf zwei Raumdimensionen und auf einen Geschwindigkeitsvektor $v = (a, b)^T$ mit $0 < a < b$. Den Raum \mathbb{R}^2 überziehen wir mit einem äquidistanten Gitter

$$\mathcal{G} = h \cdot \mathbf{Z} \times \mathbf{Z} \quad (h > 0 \text{ klein})$$

Der Einfachheit halber schreiben wir abkürzend $x_{j,k} := h(j, k)$ und $f_{j,k}(t) := f(t, x_{j,k})$.

Ist $x_{j,k} \in \mathcal{G}$, so gibt es $\xi \in (0, 1)$ und $s > 0$ derart, dass $h(j - \xi, k - 1) = x_{j,k} - sv$, und aus der Taylorformel folgt

$$v \cdot \nabla f(t, x_{j,k}) = \frac{1}{s}(f(t, x_{j,k}) - f(t, x_{j,k} - sv)) + \mathcal{O}(s^2) = \frac{1}{s}(f_{j,k}(t) - f(t, h(j - \xi, k - 1))) + \mathcal{O}(s^2)$$

Außerdem rechnet man leicht nach, dass $s = h/b$ und $\xi = a/b$.

Wegen $h(j - \xi, k - 1) \notin \mathcal{G}$ muss der Funktionswert $f(t, h(j - \xi, k - 1))$ durch lineare Approximation aus den Werten an Nachbarpunkten berechnet werden. Dies geschieht durch den Strahlensatz

$$\frac{f(t, h(j, k - 1)) - f(t, h(j - \xi, k - 1))}{\xi} = \frac{f(t, h(j, k - 1)) - f(t, h(j - 1, k - 1))}{1},$$

also durch die Konvexkombination

$$f(t, h(j - \xi, k - 1)) = (1 - \xi) \cdot f_{j,k-1} + \xi f_{j-1,k-1}.$$

Ist nun $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein (konvexes) beschränktes Gebiet, so definieren wir $\mathcal{G}_\Omega := \mathcal{G} \cap \overline{\Omega}$ und die endliche Indexmenge $\mathbf{Z}_\Omega := \{(j, k) \in \mathbf{Z} \times \mathbf{Z} \mid h(j, k) \in \mathcal{G}_\Omega\}$. Wir schreiben $\mathbf{f}(t) := (f_{j,k})_{j,k \in \mathbf{Z}_\Omega}$. Durch Festlegung geeigneter Randbedingungen lässt sich für \mathbf{f} aus den vorherigen Überlegungen ein System linearer Differentialgleichungen der Form

$$\mathbf{f}'(t) = A\mathbf{f}(t)$$

herleiten.

Komponentenweise lautet dieses System

$$f'_{j,k} = \frac{1}{h} \cdot ((b - a)f_{j,k-1} + af_{j-1,k-1} - bf_{j,k}).$$

4.2 Kinetische Gleichungen

Kinetische Gleichungen sind ein wichtiges Hilfsmittel zur Modellierung von Strömungen und stellen (Integro-) Differentialgleichungen für Funktionen $f = f(t, x, v)$ dar. Hierbei sind t der Zeitparameter, $x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ der Orts- und $v \in V \subseteq \mathbb{R}^d$ der Geschwindigkeitsparameter. Sie sind von der Form

$$\partial_t f(t, x, v) + v \nabla f(t, x, v) = J[f(t, x, \cdot)](v)$$

Numerisch gelöst werden sie häufig unter Anwendung eines *operator splitting*-Verfahrens. Das bedeutet, dass alternierend in kleinen Zeitintervallen der Länge Δt die beiden folgenden Probleme gelöst werden.

(i) Löse $\partial_t f(t, x, v) + v \nabla f(t, x, v) = 0$,

(ii) Für alle $x \in \Omega$ löse $\partial_t f(t, v) = J[f(t, \cdot)](v)$.

Den ersten Schritt haben wir oben ausführlich besprochen. Zur Lösung des zweiten Problems kann u.a. das klassische Runge-Kutta-Verfahren herangezogen werden.