Kapitel 5

Zeitintegrationsverfahren

5.1 Implizite und explizite Verfahren erster Ordnung

Bei der Herleitung der Finite-Volumen-Formulierung für die lineare Konvektionsgleichung im Abschnitt 1.3 mußten wir 2 Integrale über das Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ numerisch auswerten (s. (1.49)). Für diese Auswertung standen uns die Werte der unbekannten Funktion aus den Zeitebenen $t = t_n$ und $t = t_{n+1}$ zu Verfügung. Damit ergeben sich 3 Möglichkeiten zur Auswertung der Zeitintegrale im Rahmen der Finite-Volumen-Formulierung.

Die erste Möglichkeit besteht darin, daß man ausschließlich die Werte der „alten" Zeitebene $t = t_n$ verwendet. Das führt zu einem *expliziten* Diskretisierungsverfahren. Wird der Konvektionsterm mit Hilfe des UPWIND-Verfahrens diskretisiert, so erhält man bei expliziter Zeitintegration folgende Diskretisierung der linearen Konvektionsgleichung:

$$\frac{U_i - \overline{U}_i}{\Delta t} + a\frac{\overline{U}_i - \overline{U}_{i-1}}{\Delta x} = 0. \tag{5.1}$$

Zur Erinnerung: wir bezeichnen mit U immer die Werte der „neuen" Zeitebene $t = t_{n+1}$ und mit $\overline{U}$ – die Werte der „alten" Zeitebene $t = t_n$.

Eine *implizite* Zeitintegration erhält man, wenn zur Auswertung der Zeitintegrale nur die Werte aus der Zeitebene $t = t_{n+1}$ eingesetzt werden. Die Eigenschaften des impliziten UPWIND-Verfahrens für die lineare Konvektionsgleichung wurden im Abschnitt 1.4 ausführlich diskutiert, die entsprechende Diskretisierungsformel lautet:

$$\frac{U_i - \overline{U}_i}{\Delta t} + a\frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} = 0. \tag{5.2}$$

Die dritte Möglichkeit besteht darin, daß man bei der Auswertung der Zeitintegrale den Beitrag der Funktionswerte aus beiden Zeitebenen $t = t_n$ und $t = t_{n+1}$ je zu Hälfte berücksichtigt. Das führt zum sogenannten *Crank-Nicolson*-Verfahren. Für die UPWIND-Diskretisierung der Konvektionsterme sieht die Crank-Nicolson-Zeitintegration folgendermaßen aus:

$$\frac{U_i - \overline{U}_i}{\Delta t} + \frac{a}{2}\frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} + \frac{a}{2}\frac{\overline{U}_i - \overline{U}_{i-1}}{\Delta x} = 0. \tag{5.3}$$

Bei der Herleitung von TVD-Verfahren haben wir uns ausschließlich auf die implizite Zeitintegration beschränkt. Man kann aber genauso gut Diskretisierungsverfahren mit der TVD-Eigenschaft auf anderen Zeitintegrationverfahren aufbauen. Die Vor- und Nachteile von unterschiedlichen Zeitintegrationverfahren sind das Thema dieses Abschnittes.

Der größte Vorteil von expliziten Verfahren ist ihre einfache und kostengünstige numerische Behandlung, da die resultierenden Gleichungssysteme nach den Funktionswerten der neuen Zeitebene explizit aufgelöst werden können. So kann die explizite UPWIND-Diskretisierung (5.1) folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$U_i = \overline{U}_i - \frac{a\Delta t}{\Delta x}(\overline{U}_i - \overline{U}_{i-1}). \tag{5.4}$$

Dies ermöglicht eine direkte Berechnung des „unbekannten“ Wertes U_i aus den bekannten Werten $\overline{U}_i$ und $\overline{U}_{i-1}$.

Die implizite UPWIND-Diskretisierung (5.2) führt dagegen zu einem Gleichungssystem

$$\left(1 + \frac{a\Delta t}{\Delta x}\right) U_i - \frac{a\Delta t}{\Delta x} U_{i-1} = \overline{U}_i, \tag{5.5}$$

aus welchem die Werte der neuen Zeitebene nur mittels einer rechenzeitintensiveren algebraischen Lösung ermittelt werden können.

Der Vorteil von expliziten Verfahren wird noch deutlicher bei nichtlinearen TVD-Verfahren bzw. bei der Diskretisierung nichtlinearer Gleichungen, da bei impliziten Verfahren das resultierende System infolge der Nichtlinearität iterativ gelöst werden muß.

Allerdings sind die expliziten Verfahren mit einer starken Einschränkung verbunden. Sie betrifft die maximal zulässige Zeitschrittweite. Während alle in vorigen Kapiteln betrachteten impliziten Verfahren (abgesehen von der unphysikalischen Downwind-Diskretisierung) absolut (d.h. unabhängig von der Zeitschrittweite) stabil sind, sind alle expliziten Verfahren entweder bedingt stabil oder sogar absolut instabil. Bedingte Stabilität bedeutet, daß das Diskretisierungsverfahren nur dann stabil ist, wenn die Zeitschrittweite Δt nicht größer als ein maximal zulässiger Wert Δt_0 ist. Für das explizite UPWIND-Verfahren (5.1) bedeutet das z.B., daß die Zeitschrittweite Δt folgende Stabilitätsbedingung

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{a} \tag{5.6}$$

erfüllen muß. Das implizite UPWIND-Verfahren (5.2) kann dagegen für beliebige Werte von Δt eingesetzt werden.

Es ist interessant, daß gerade im Falle einer linearen Konvektionsgleichung mit konstanter Geschwindigkeit die absolute Stabilität von impliziten Verfahren keinerlei Vorteile bringen kann. Wir erinnern uns an die Methode der modifizierten Differentialgleichung, die im Kapitel 1 mehrmals angewandt wurde. So lautete die modifizierte Differentialgleichung für das implizite UPWIND-Verfahren (vgl. 1.87):

$$u_t + au_x = \frac{a\Delta x}{2} u_{xx}. \tag{5.7}$$

Bei der Herleitung dieser Gleichung haben wir allerdings den Zeitfehleranteil aus dem lokalen Abbruchfehler der UPWIND-Diskretisierung durch einen Grenzübergang $\Delta t \to 0$ bereits eliminiert. Für einen *endlichen* Wert von Δt lautet die modifizierte Differentialgleichung für das implizite UPWIND-Verfahren dagegen

$$u_t + au_x = \frac{a\Delta x}{2} u_{xx} + \frac{\Delta t}{2} u_{tt}. \tag{5.8}$$

Die implizite Formulierung kann also als *UPWIND-Diskretisierung der Zeitableitung* aufgefaßt werden und führt genauso zu einer numerischen Diffusion wie die UPWIND-Diskretisierung der Ortsableitung. Der negative Einfluß dieser „zeitintegrationsbedingten“ numerischen Diffusion ist um so stärker, je intensiver sich die Lösung der Differentialgleichung mit der Zeit ändert. Bei der linearen Konvektionsgleichung findet eine örtliche Änderung der Lösung immer parallel mit der zeitlichen Änderung der Lösung statt, da für die Lösung der linearen Konvektionsgleichung gilt:

$$u_t = -au_x. \tag{5.9}$$

Daraus folgt

$$u_{tt} = a^2 u_{xx}. \tag{5.10}$$

Eingesetzt in (5.8) führt das zu folgender Form der modifizierten Differentialgleichung für das implizite UPWIND-Verfahren

$$u_t + au_x = \left(\frac{a\Delta x}{2} + \frac{a^2 \Delta t}{2} \right) u_{xx}. \tag{5.11}$$

Man sieht, daß bei einer Zeitschrittweite von $\Delta t > \Delta x / a$ der „zeitintegrationsbedingte“ Koeffizient der numerischen Diffusion größer ist als der numerische Diffusionkoeffizient, der durch die UPWIND-Diskretisierung der Ortsableitung hervorgerufen wird. Würde man durch eine TVD-Diskretisierung den örtlichen Fehler weitgehend reduzieren, so würde noch der Zeitfehleranteil bleiben, der in derselben Größenordnung liegt. Um diesen zu reduzieren, müßte man mit Zeitschrittweiten arbeiten, die wesentlich kleiner als $\Delta x/a$ sind, und in diesem Bereich kann man wiederum die effektivere explizite Formulierung verwenden.

Die Tatsache, daß der Einsatz der impliziten Zeitintegration im Falle der linearen Konvektionsgleichung im Vergleich zur expliziten Zeitintegration wenig Sinn macht , kann allerdings nicht verallgemeinert werden. Insbesondere im 2- und 3-dimensionalen Fall aber genauso bei anderen 1-D Gleichungen sind Situationen denkbar, bei denen die Lösung starke örtlichen Gradienten hat, sich zeitlich aber gar nicht bzw. nur ganz langsam ändert. Der Testfall No.11 am Ende des vorigen Kapitels ist ein gutes Beispiel dafür. Wird eine solche stationäre bzw. quasistationäre Lösung eines Problems gesucht, so kommt man mit impliziten Verfahren viel schneller ans Ziel, da die Möglichkeit, mit wesentlich größeren Zeitschrittweiten zu arbeiten, die Verluste infolge einer aufwendigeren Lösung des algebraischen Gleichungssystem mehr als ausgleicht.

Ist man dagegen an einer genauen zeitlichen Auflösung interessiert und muß man dabei mit Zeitschrittweiten arbeiten, die unterhalb der Stabilitätsgrenze von expliziten Verfahren liegen, so ist die explizite Zeitintegration eindeutig vorzuziehen. Wir werden den Aufbau eines expliziten TVD-Verfahren daher kurz skizzieren. Wie im impliziten Fall wird ein expliziter TVD-Konvektionsstrom als ein gewichtetes Mittel aus dem (expliziten) UPWIND-Strom

$$aU_{i-1/2} = F^{up}(\overline{U}; i-1/2) = a\overline{U}_{i-1}. \tag{5.12}$$

und dem expliziten CDS-Strom

$$aU_{i-1/2} = F^{cds}(\overline{U}; i-1/2) = a\frac{\overline{U}_{i-1} + \overline{U}_i}{2}. \tag{5.13}$$

gebildet. Der resultierende Ausdruck für den TVD-Strom $F^{tvd}(\overline{U}; l)$ sowie die TVD-Diskretisierungsformel stimmen mit (1.152,1.153) überein, wenn man anstatt von den Werten U der neuen Zeitebene die Werte der alten Zeitebene $\overline{U}$ einsetzt. Analog zu (1.168) kann die explizite TVD-Diskretisierung in der Form

$$U_i = \overline{U}_i - \overline{C}_{i-1}(\overline{U}_i - \overline{U}_{i-1}) + \overline{D}_i(\overline{U}_{i+1} - \overline{U}_i), \tag{5.14}$$

dargestellt werden, wobei die Größen $\overline{C}_{i-1}$ und $\overline{D}_i$ folgendermaßen definiert sind:

$$\overline{C}_{i-1} = \frac{a\Delta t}{2\Delta x}\left(2 - \phi(\overline{\theta}_l) + \phi(\overline{\theta}_r)\frac{\overline{U}_{i+1} - \overline{U}_i}{\overline{U}_i - \overline{U}_{i-1}}\right)$$

$$= \frac{a\Delta t}{2\Delta x}\left(2-\phi(\overline{\theta}_l)+\frac{\phi(\overline{\theta}_r)}{\overline{\theta}_r}\right) \tag{5.15}$$

$$\overline{D}_i = 0. \tag{5.16}$$

Analog zum Theorem 4 kann gezeigt werden, daß ein Finite-Volumen-Verfahren, das in der Form (5.14) dargestellt werden kann, die TVD-Eigenschaft besitzt, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind [40, 41]:

$$\overline{C}_i \geq 0, \quad \forall i \tag{5.17}$$

$$\overline{D}_i \geq 0, \quad \forall i \tag{5.18}$$

$$\overline{C}_i + \overline{D}_i \leq 1, \quad \forall i \tag{5.19}$$

Unter den Voraussetzungen des Theorems 5 sind die Bedingungen (5.17, 5.18) offensichtlich erfüllt. Analog zu (1.175) kann man zeigen, daß

$$2-\phi(\overline{\theta}_l)+\frac{\phi(\overline{\theta}_r)}{\overline{\theta}_r} \leq 4 \tag{5.20}$$

gilt, woraus folgt

$$\overline{C}_i + \overline{D}_i \leq \frac{a\Delta t}{2\Delta x}\cdot 4 + 0 = \frac{2a\Delta t}{\Delta x}. \tag{5.21}$$

Die Bedingung (5.19) ist erfüllt, wenn $\Delta t \leq 0.5\Delta x/a$ ist. Man sieht, daß sich die maximal zulässige Zeitschrittweite beim expliziten TVD-Verfahren im Vergleich zum expliziten UPWIND-Verfahren halbiert hat (vgl. (5.6)). Das darf aber nicht überraschen, da der TVD-Strom als ein gewichtetes Mittel aus UPWIND-Strom und CDS-Strom gebildet wird. Während das dem UPWIND-Strom entsprechende explizite Verfahren bedingt stabil ist, ist das explizite CDS-Verfahren *absolut instabil*. Die „Beimischung“ von numerischer Diffusion in Form von UPWIND-Strom stabilisiert somit das CDS-Verfahren und verleiht dem resultierenden Verfahren die TVD-Eigenschaft.

5.2 Das Crank-Nicolson-TVD-Verfahren

Sowohl die vollimplizite als auch die vollexplizite Zeitintegration, die wir im vorigen Abschnitt untersucht haben, führen zu Diskretisierungsverfahren, die bzgl. der Zeitkoordinate lediglich erster Ordnung genau sind. Da die vollimpliziten Verfahren überwiegend in Situationen mit zeitlich wenig veränderlichen Lösungen eingesetzt werden, spielt die niedrige Ordnung des Verfahrens keine große Rolle. Die vollexpliziten Verfahren werden dagegen dann eingesetzt, wenn die genaue zeitliche Auflösung des Problems von Interesse ist und deshalb so kleine Zeitschritte erfordert, daß sie in den Stabilitätsbereich von expliziten TVD-Verfahren fallen.

In diesen Situationen ist es sinnvoll, anstatt von expliziten TVD-Verfahren Crank-Nicolson-TVD-Verfahren einzusetzten. Dadurch wird nicht nur die Ordnung des Verfahrens bzgl. der Zeitkoordinate von 1 auf 2 erhöht, sondern auch der Stabilitätsbereich des Verfahrens im Vergleich zur expliziten Variante um Faktor 2 ausgeweitet.

Beim Crank-Nicolson-TVD-Verfahren wird der TVD-Konvektionsstrom als ein arithmetisches Mittel aus dem impliziten und dem expliziten TVD-Strom gebildet. Die resultierende Diskretisierungsformel kann in der Form

$$\begin{aligned} U_i = \overline{U}_i \quad &- \quad C_{i-1}^{cn}(U_i - U_{i-1}) + D_i^{cn}(U_{i+1} - U_i) \\ &- \quad \overline{C}_{i-1}^{cn}(\overline{U}_i - \overline{U}_{i-1}) + \overline{D}_i^{cn}(\overline{U}_{i+1} - \overline{U}_i), \end{aligned} \tag{5.22}$$

dargestellt werden, wobei

$$\begin{aligned} C_{i-1}^{cn} &= 0.5C_{i-1} \\ \overline{C}_{i-1}^{cn} &= 0.5\overline{C}_{i-1} \\ D_i^{cn} &= 0.5D_i \\ \overline{D}_i^{cn} &= 0.5\overline{D}_i \end{aligned}$$

und die Koeffizienten C_{i-1}, D_i, $\overline{C}_{i-1}$, $\overline{D}_i$ wie in (1.169, 1.170, 5.15, 5.16) definiert werden.

Analog zum Theorem 4 kann gezeigt werden, daß ein Finite-Volumen-Verfahren, das in der Form (5.22) dargestellt werden kann, die TVD-Eigenschaft besitzt, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind [40, 41]:

$$\begin{aligned} 0 \leq \quad C_i^{cn} \quad &\leq C < \infty, \quad \forall i \\ 0 \leq \quad D_i^{cn} \quad &\leq D < \infty, \quad \forall i \\ \overline{C}_i^{cn} \quad &\geq \quad 0, \quad \forall i \\ \overline{D}_i^{cn} \quad &\geq \quad 0, \quad \forall i \\ \overline{C}_i^{cn} + \overline{D}_i^{cn} \quad &\leq \quad 1, \quad \forall i \end{aligned}$$

Unter Voraussetzungen des Theorems 5 sind alle diese Bedingungen erfüllt, wenn zusätzlich $\Delta t \leq \Delta x/a$ gilt. Durch Beimischung des impliziten TVD-Stroms kann somit im Vergleich zum expliziten TVD-Verfahren die maximal zulässige Zeitschrittweite tatsächlich von $0.5\Delta x/a$ auf $\Delta x/a$ um Faktor 2 erhöht werden.

Das Crank-Nicolson-TVD-Verfahren führt zu einem nichtlinearen Gleichungssystem, das zunächst linearisiert und anschließend mehrmals mittels eines direkten oder iterativen algebraischen Solvers gelöst werden muß. Die Berechnung von Koeffizienten des resultierenden Gleichungssystems ist aufwendiger als beim vollimpliziten Verfahren, da sowohl der implizite als auch der explizite TVD-Strom ermittelt werden muß. Zur Lösung von zeitinsensitiven Problemen sollte daher lieber das implizite TVD-Verfahren erster Ordnung eingesetzt werden. Bei zeitempfindlichen Problemen ist das Crank-Nicolson-TVD-Verfahren dem expliziten TVD-Verfahren vorzuziehen, da infolge der höheren Ordnung des Crank-Nicolson-Verfahrens eine vergleichbare Genauigkeit mit wesentlich größeren Zeitschrittweiten erreicht werden kann, als beim Einsatz des expliziten Verfahrens. So kann man der Tabelle 1.1 entnehmen (Abschnitt 1.4), daß sich im Testfall No.1 beim Einsatz des impliziten UPWIND-Verfahrens erster Ordnung die vier signifikanten Stellen des Gesamtfehlers erst ab einer Zeitschrittweite $\Delta t = 0.00005$ nicht mehr ändern. Diese Zeitschrittweite liegt weit unterhalb der Stabilitätsgrenze für das explizite UPWIND-Verfahren, deren Einsatz die erforderliche Rechenzeit um Faktor 2 verkürzt. Der Unterschied fällt nicht so stark aus, da im Falle der UPWIND-Diskretisierung keine Linearisierung notwendig ist. Außerdem ermöglicht die tridiagonale Form des Gleichungssystems den Einsatz eines direkten algebraischen Lösers. Beim Einsatz des Crank-Nicolson-UPWIND-Verfahrens wird die erforderliche Genauigkeit bereits bei einer Zeitschrittweite von $\Delta t = 0.005$ erreicht, so daß die Anzahl der notwendigen Zeitschritte um Faktor 100 kleiner ist, was in einer 38(!)-fachen Reduktion der Rechenzeit im Vergleich zum expliziten UPWIND-Verfahren resultiert.

In allen Testfällen, die in vorigen Kapiteln untersucht wurden, wurde zunächst der Zeitfehleranteil aus dem Gesamtfehler eliminiert, und erst anschließend die verbleibenden Ortsfehleranteile von verschiedenen Ortsdiskretisierungen miteinander verglichen. Obwohl wir dabei nur vollimplizite Verfahren miteinander verglichen haben, wurde die Zeitfehlerelimination mittels des Crank-Nicolson-Verfahrens durchgeführt, da die impliziten Verfahren (insbesondere in 2-D Fällen) bis zu 1000-fach längere Rechenzeit in Anspruch genommen hätten. Auf die Gültigkeit der getroffenen Aussagen hat das allerdings keinen Einfluß, da *im Grenzwert* $\Delta t \to 0$ (beim fixierten Wert von Δx) die implizite und die Crank-Nicolson-Zeitintegration bei einem stabilen Verfahren dieselben Lösungsprofile liefern.

.