

Essentially Non-Oscillatory Verfahren zur numerischen Lösung der Diffusionsgleichung

Diplomarbeit
aus Mathematik

zur Erlangung des Akademischen Grades
„Magister der Naturwissenschaften“
an der Fakultät für Naturwissenschaften und Mathematik der
Universität Wien

Eingereicht von
Christof Obertscheider
Leidesdorfgasse 11-13/1/10
1190 Wien

bei Univ.Prof. Dr. Herbert J. Muthsam

Wien, im November 2002

Zusammenfassung

Essentially Non-Oscillatory (ENO) Verfahren wurden zur numerischen Lösung von hyperbolischen Erhaltungsgesetzen entwickelt. Die Diffusionsgleichung ist eine parabolische partielle Differentialgleichung. In dieser Diplomarbeit werden ENO Verfahren zur numerischen Lösung der Diffusionsgleichung verwendet. Weiters soll überprüft werden, ob die verwendeten Algorithmen für Courantzahlen $\frac{k}{h^2} > \frac{1}{2}$ stabil sind.

Vorwort

Nach elf Semestern schlieÙe ich mein Lehramtstudium für Mathematik und Physik mit der Diplomarbeit *Essentially Non-Oscillatory Verfahren zur numerischen Lösung der Diffusionsgleichung* ab. Bei Univ.Prof. Dr. Herbert J. Muthsam bedanke ich mich für die Betreuung der Diplomarbeit. Während dieser Zeit habe ich sehr viel über die Arbeitsweise der numerischen Mathematik gelernt. Bei Mag. Bernhard Löw-Baselli bedanke ich mich für die Unterstützung in mathematischen und EDV-Problemen.

Bei meinen Eltern Josef und Martha bedanke ich mich dafür, dass sie mir mein Studium sowie Aktivitäten neben meinem Studium ermöglicht und mich dabei immer unterstützt haben.

Drei Jahre meines Studiums wurden durch die Mitarbeit in der AktionsGemeinschaft bereichert. Diese Zeit hat sehr zu meiner persönlichen Weiterentwicklung beigetragen. Insbesondere bedanke ich mich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der AktionsGemeinschaft.

Schließlich bedanke ich mich bei allen meinen Freundinnen und Freunden, Verwandten und Bekannten, welche mich während meines Studiums unterstützt haben.

Wien, im November 2002

Christof Obertscheider

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	1
1 Einleitung	3
2 Analysis der Diffusionsgleichung	4
2.1 Physikalische Interpretation	4
2.2 Fundamentallösung	4
2.3 Anfangswertproblem	5
2.4 Inhomogene Diffusionsgleichung	6
2.5 Mittelwertformel	8
2.6 Eigenschaften von Lösungen	11
2.7 Regularität	13
2.8 Explizite Lösung im Eindimensionalen	15
3 Numerik der Diffusionsgleichung	16
3.1 Zwei Beispiele	16
3.2 Differenzenverfahren	17
3.3 Stabilitätsanalyse (nach von Neumann)	19
4 ENO Verfahren	22
4.1 Rekonstruktion und Approximation in 1D	22
4.2 ENO Approximation in 1D	25
4.3 Weighted ENO Approximation in 1D	27
4.4 ENO und WENO Verfahren für 1D Erhaltungsgesetze	30
5 Runge Kutta Verfahren	33
6 Numerische Ergebnisse	35
6.1 Aufbereiten des ENO und WENO Algorithmus für die Diffusionsgleichung	35
6.2 Ergebnisse	36
6.2.1 Stetige Anfangsbedingung	36
6.2.2 Unstetige Anfangsbedingung	43
A Laxscher Äquivalenzsatz	47
B Source Code	52
Lebenslauf	59
Sacherschließung	60

Kapitel 1

Einleitung

Die Diffusionsgleichung $u_t - \Delta u = 0$ - auch bekannt als Wärmeleitungsgleichung - ist eine lineare parabolische partielle Differentialgleichung. In Kapitel 2 wird die Diffusionsgleichung analytisch untersucht (Anfangswertproblem, Mittelwerteigenschaft, Maximumsprinzip, Regularität, explizite Lösung von $u_t - u_{xx} = 0$).

In den Kapiteln über numerische Verfahren zur Lösung der Diffusionsgleichung betrachten wir nur den räumlich eindimensionalen Fall, also $u_t - u_{xx} = 0$.

Kapitel 3 handelt von Differenzenverfahren zur Lösung von Partiellen Differentialgleichungen (PDE). Es werden die Konzepte konsistent, konvergent und stabil eingeführt. Wie diese drei Konzepte bei linearen PDE zusammenhängen beschreibt der Laxsche Äquivalenzsatz. Weiters wird gezeigt, wie man Differenzenverfahren für lineare PDE mit periodischen Randbedingungen auf Stabilität untersucht (von Neumannsche Stabilitätsanalyse). Am Anfang des Kapitels werden zwei typische Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der Diffusionsgleichung vorgestellt. Damit werden auch die eingeführten Begriffe veranschaulicht.

Essentially Non-Oscillatory Verfahren sind stark nichtlineare, hochauflösende Verfahren, die entwickelt wurden um hyperbolische Erhaltungsgesetze zu lösen. Kapitel 4 gibt einen Überblick über ENO und weighted ENO (WENO) Verfahren.

Zur Zeitdiskretisierung verwenden wir in Kapitel 2 das Euler (Vorwärts) Verfahren $u_t(x_i) \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k}$. Kapitel 5 gibt eine kurze Einführung in Runge Kutta Verfahren. Runge Kutta Verfahren sind Einschrittverfahren. Zur Berechnung der Funktionswerte zum nächsten Zeitpunkt werden Zwischenschritte eingeführt.

In Kapitel 6 werden ENO und WENO Verfahren aufbereitet um die Diffusionsgleichung numerisch zu lösen. Weiters das Anfangswertproblem mit stetigen und unstetigen Anfangsbedingungen mit den entwickelten Verfahren gelöst.

In Anhang A wird der Laxsche Äquivalenzsatz für lineare PDE bewiesen. Anhang B beinhaltet den Source Code des Fortran 90 Programms, welches für die numerischen Berechnungen in Kapitel 6 verwendet wurde.

Kapitel 2

Analysis der Diffusionsgleichung

In diesem Kapitel untersuchen wir die Diffusionsgleichung

$$u_t - \Delta u = 0 \tag{2.1}$$

unter vorgegebenen Anfangs- und Randbedingungen. Sei $t > 0$ und $x \in U$, wobei $U \subset \mathbb{R}^n$ offen ist. Die unbekannte Funktion ist $u : \bar{U} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, $u = u(x, t)$. Der Laplaceoperator bezieht sich auf die räumlichen Variablen $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) : \Delta u = \sum_{i=1}^n u_{x_i x_i}$.

2.1 Physikalische Interpretation

Die Diffusionsgleichung - auch bekannt als Wärmeleitungsgleichung - beschreibt in typischen Anwendungen die Zeitentwicklung einer Dichte u . Die Dichte beschreibt zum Beispiel die Wärme oder eine chemische Konzentration. Sei $V \subset U$ beliebig und ∂V glatt. Die Änderung der Gesamtmenge in V ist gleich dem negativen Fluss durch ∂V :

$$\frac{d}{dt} \int_V u \, dx = - \int_{\partial V} F \cdot n \, d\sigma$$

F ist die Flussdichte, n ist der Normalvektor auf ∂V . Bei genügender Glattheit von u erhält man mit dem Satz von Gauß

$$u_t = -\operatorname{div} F \tag{2.2}$$

weil V beliebig war. In vielen Situationen ist F proportional zum Gradienten von u , zeigt aber in die entgegengesetzte Richtung, weil der Fluss von Regionen höherer zu niedriger Konzentration geht:

$$F = -a Du \quad (a > 0)$$

wobei $Du = (u_{x_1}, \dots, u_{x_n})$. Ersetzt man F in (2.2), so erhält man die Partielle Differentialgleichung (PDE)

$$u_t = a \cdot \operatorname{div}(Du) = a \cdot \Delta u$$

Für $a = 1$ erhält man die Diffusionsgleichung (2.1).

2.2 Fundamentallösung

Eine gute Strategie um partielle Differentialgleichungen zu untersuchen, ist das Betrachten von expliziten Lösungen. Wenn die PDE linear ist erhält man daraus kompliziertere Lösungen.

Definition. Die Funktion

$$\Phi(x, t) := \begin{cases} \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} & (x \in \mathbb{R}^n, t > 0) \\ \delta_0 & (x \in \mathbb{R}^n, t = 0) \\ 0 & (x \in \mathbb{R}^n, t < 0) \end{cases}$$

löst die Diffusionsgleichung [1] und heißt Fundamentallösung der Diffusionsgleichung. δ_0 ist die Deltadistribution auf \mathbb{R}^n mit Masse 1 im Ursprung.

Lemma (Integral der Fundamentallösung). Für jede Zeit $t > 0$ gilt

$$\int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x, t) dx = 1$$

Beweis. Wir berechnen

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x, t) dx &= \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} dx \\ &= \frac{1}{\pi^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-|z|^2} dz \\ &= \frac{1}{\pi^{n/2}} \prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z_i^2} dz_i = 1 \end{aligned}$$

□

2.3 Anfangswertproblem

Wir benützen die Fundamentallösung Φ um eine Lösung des Anfangswertproblems für die Diffusionsgleichung

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = 0 & \text{in } \mathbb{R}^n \times [0, \infty) \\ u = g & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (2.3)$$

zu erhalten.

Die Funktion $(x, t) \mapsto \Phi(x, t)$ löst die Diffusionsgleichung für $(x, t) \neq (0, 0)$. Folglich ist auch die Funktion $(x, t) \mapsto \Phi(x - y, t)$ für jedes feste $y \in \mathbb{R}^n$ eine Lösung. Daher müsste auch die Faltung

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t) g(y) dy \\ &= \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} g(y) dy \quad (x \in \mathbb{R}^n, t > 0) \end{aligned} \quad (2.4)$$

eine Lösung sein.

Satz 1.1 (Lösung des Anfangswertproblems). Sei $g \in C(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R})$ und $u(x, t)$ sei wie in (2.4). Dann gilt

- (i) $u \in C^\infty(\mathbb{R}^n \times (0, \infty))$,
- (ii) $u_t(x, t) - \Delta u(x, t) = 0 \quad (x \in \mathbb{R}^n, t > 0)$,
- (iii) $\lim_{\substack{(x, t) \rightarrow (x^0, 0) \\ x \in \mathbb{R}^n, t > 0}} u(x, t) = g(x^0)$ für jeden Punkt $x^0 \in \mathbb{R}^n$.

Beweis. 1. Da die Funktion $\frac{1}{t^{n/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}}$ unendlich oft differentierbar ist, mit gleichmäßig beschränkten Ableitungen für alle Ordnungen auf $\mathbb{R}^n \times [\delta, \infty)$ für alle $\delta > 0$, sehen wir dass $u \in C^\infty(\mathbb{R}^n \times (0, \infty))$. Weiters ist

$$\begin{aligned} u_t(x, t) - \Delta u(x, t) &= \int_{\mathbb{R}^n} [(\Phi_t - \Delta_x \Phi)(x - y, t)] g(y) dy \\ &= 0 \quad (x \in \mathbb{R}^n, t > 0), \end{aligned}$$

weil Φ die Diffusionsgleichung löst.

2. Sei $x^0 \in \mathbb{R}^n$ fest und $\epsilon > 0$. Wähle $\delta > 0$ so, dass

$$|g(y) - g(x^0)| < \epsilon \quad \text{wenn } |y - x^0| < \delta, \quad y \in \mathbb{R}^n \quad (2.5)$$

Wenn $|x - x^0| < \frac{\delta}{2}$ ist, erhalten wir mit Hilfe des Lemmas

$$\begin{aligned} |u(x, t) - g(x^0)| &= \left| \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t) [g(y) - g(x^0)] dy \right| \\ &\leq \int_{B(x^0, \delta)} \Phi(x - y, t) |g(y) - g(x^0)| dy \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^n - B(x^0, \delta)} \Phi(x - y, t) |g(y) - g(x^0)| dy \\ &=: I + J \end{aligned}$$

Wegen (2.5) und dem Lemma gilt

$$I \leq \epsilon \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t) dy = \epsilon$$

Weiters, wenn $|x - x^0| \leq \frac{\delta}{2}$ und $|y - x^0| \geq \delta$ gilt

$$|y - x^0| \leq |y - x| + \frac{\delta}{2} \leq |y - x| + \frac{1}{2} |y - x^0|$$

Also ist $|y - x| \geq \frac{1}{2} |y - x^0|$ Daraus folgt

$$\begin{aligned} J &\leq 2\|g\|_{L^\infty} \int_{\mathbb{R}^n - B(x^0, \delta)} \Phi(x - y, t) dy \\ &\leq \frac{C}{t^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n - B(x^0, \delta)} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} dy \\ &\leq \frac{C}{t^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n - B(x^0, \delta)} e^{-\frac{|y-x^0|^2}{16t}} dy \\ &= \frac{C}{t^{n/2}} \int_{\delta}^{\infty} e^{-\frac{r^2}{16t}} r^{n-1} dr \rightarrow 0 \quad \text{wenn } t \rightarrow 0^+ \end{aligned}$$

Wenn also $|x - x^0| < \frac{\delta}{2}$ und $t > 0$ genügend klein ist, dann gilt $|u(x, t) - g(x^0)| < 2\epsilon$. □

Bemerkung. g sei beschränkt und stetig, $g \geq 0$, $g \not\equiv 0$, dann ist

$$u(x, t) = \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} g(y) dy$$

tatsächlich positiv für alle Punkte $x \in \mathbb{R}^n$ und Zeiten $t > 0$. Deshalb sagt man, die Diffusionsgleichung hat unendliche Ausbreitungsgeschwindigkeit für Störungen.

2.4 Inhomogene Diffusionsgleichung

Wir betrachten nun das inhomogene Anfangswertproblem

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = f & \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, \infty) \\ u = 0 & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (2.6)$$

Die Abbildung $(x, t) \rightarrow \Phi(x - y, t - s)$ ist auch eine Lösung der Diffusionsgleichung (für vorgegebene $y \in \mathbb{R}^n$, $0 < s < t$). Für ein festes s löst die Funktion

$$u = u(x, t; s) = \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t - s) f(y, s) dy$$

das Anfangswertproblem

$$\begin{cases} u_t(\cdot; s) - \Delta u(\cdot; s) = 0 & \text{in } \mathbb{R}^n \times (s, \infty) \\ u(\cdot; s) = f(\cdot; s) & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = s\} \end{cases} \quad (2.7)$$

Das ist ein Anfangswertproblem der Form (2.3), mit dem Anfangszeitpunkt $t = s$ anstatt $t = 0$, und die Funktion g wurde durch die Funktion $f(\cdot; s)$ ersetzt. Die Funktion $u(\cdot; s)$ ist daher keine Lösung von (2.6).

Nach dem Duhamelschen Prinzip erhält man eine Lösung von (2.6) aus der Lösung des Anfangswertproblems (2.7) durch Integration nach s . Wir betrachten

$$u(x, t) = \int_0^t u(x, t; s) ds \quad (x \in \mathbb{R}^n, t \geq 0)$$

Einsetzen von $u(x, t; s)$ liefert

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t - s) f(y, s) dy ds \\ &= \int_0^t \frac{1}{(4\pi(t - s))^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4(t-s)}} f(y, s) dy ds \end{aligned} \quad (2.8)$$

für $x \in \mathbb{R}^n, t > 0$.

Im Folgenden bezeichne $C_1^2(U)$ die Menge aller zweimal stetig differenzierbaren Funktionen auf der Menge U mit kompakten Träger.

Um zu zeigen dass (2.8) eine Lösung des Anfangswertproblems (2.6) ist, nehmen wir zur Vereinfachung an, dass $f \in C_1^2(\mathbb{R}^n \times [0, \infty))$ und dass f einen kompakten Träger hat.

Satz 1.2 (Lösung des inhomogenen Problems). Sei u wie in Gleichung (2.8). Dann gilt

- (i) $u \in C_1^2(\mathbb{R}^n \times (0, \infty))$,
- (ii) $u_t(x, t) - \Delta u(x, t) = f(x, t) \quad (x \in \mathbb{R}^n, t > 0)$,
- (iii) $\lim_{\substack{(x,t) \rightarrow (x^0,0) \\ x \in \mathbb{R}^n, t > 0}} u(x, t) = 0$ für jeden Punkt $x^0 \in \mathbb{R}^n$.

Beweis. 1. Da Φ im Punkt $(x, t) = (0, 0)$ singularär ist, können wir die Aussage nicht durch direktes Differenzieren unter dem Integral zeigen. Wir gehen ähnlich vor wie im Satz über die Lösung des homogenen Anfangswertproblems.

Als erstes wechseln wir die Variablen und schreiben

$$u(x, t) = \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) f(x - y, t - s) dy ds$$

Da $f \in C_1^2(\mathbb{R}^n \times [0, \infty))$ einen kompakten Träger hat und $\Phi = \Phi(y, s)$ in der Nähe von $s = t > 0$ glatt ist, berechnen wir

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) f_t(x - y, t - s) dy ds \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, t) f(x - y, 0) dy \end{aligned}$$

und

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(x, t) = \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f(x - y, t - s) dy ds \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

Folglich sind $u_t, D_x^2 u$ und ebenso $u, D_x u$ Elemente von $C(\mathbb{R}^n \times (0, \infty))$.

2. Wir berechnen dann

$$\begin{aligned}
u_t(x, t) - \Delta u(x, t) &= \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} - \Delta_x \right) f(x - y, t - s) \right] dy ds \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, t) f(x - y, 0) dy \\
&= \int_\epsilon^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) \left[\left(-\frac{\partial}{\partial s} - \Delta_y \right) (f(x - y, t - s)) \right] dy ds \\
&\quad + \int_0^\epsilon \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) \left[\left(-\frac{\partial}{\partial s} - \Delta_y \right) (f(x - y, t - s)) \right] dy ds \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, t) f(x - y, 0) dy \\
&=: I_\epsilon + J_\epsilon + K
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Jetzt ist

$$|J_\epsilon| \leq (\|f_t\|_{L^\infty} + \|D^2 f\|_{L^\infty}) \int_0^\epsilon \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, s) dy ds \leq \epsilon C \tag{2.10}$$

nach dem Lemma. Durch partielle Integration erhalten wir

$$\begin{aligned}
I_\epsilon &= \int_\epsilon^t \int_{\mathbb{R}^n} \left[\left(\frac{\partial}{\partial s} - \Delta_y \right) \Phi(y, s) \right] f(x - y, t - s) dy ds \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, \epsilon) f(x - y, t - \epsilon) dy \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, t) f(x - y, 0) dy \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, \epsilon) f(x - y, t - \epsilon) dy - K
\end{aligned} \tag{2.11}$$

weil Φ die Diffusionsgleichung löst. Aus (2.9)-(2.11) erhalten wir

$$\begin{aligned}
u_t(x, t) - \Delta u(x, t) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(y, \epsilon) f(x - y, t - \epsilon) dy \\
&= f(x, t) \quad (x \in \mathbb{R}^n, t > 0)
\end{aligned}$$

Der Grenzwert für $\epsilon \rightarrow 0$ wird wie im Satz über die Lösung des homogenen Anfangswertproblems berechnet. Schließlich beachte man, dass $\|u(\cdot, t)\|_{L^\infty} \leq t \|f\|_{L^\infty} \rightarrow 0$. □

Bemerkung. Kombiniert man die beiden Sätze über die Lösung des Anfangswertproblems für die homogene und inhomogene Diffusionsgleichung, so erhält man

$$u(x, t) = \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t) g(y) dy + \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t - s) f(y, s) dy ds$$

als Lösung von

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = f & \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, \infty) \\ u = g & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \tag{2.12}$$

2.5 Mittelwertformel

Sei $U \subset \mathbb{R}^\infty$ offen und beschränkt, $T > 0$ fest. Der parabolische Zylinder ist definiert durch $U_T := U \times (0, T]$. Der parabolische Rand von U_T ist $\Gamma_T := \bar{U}_T - U_T$.

Definition. Für feste $x \in \mathbb{R}$, $t \in \mathbb{R}$, $r > 0$ definieren wir

$$E(x, t; r) := \left\{ (y, s) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid s \leq t, \Phi(x - y, t - s) \geq \frac{1}{r^n} \right\}$$

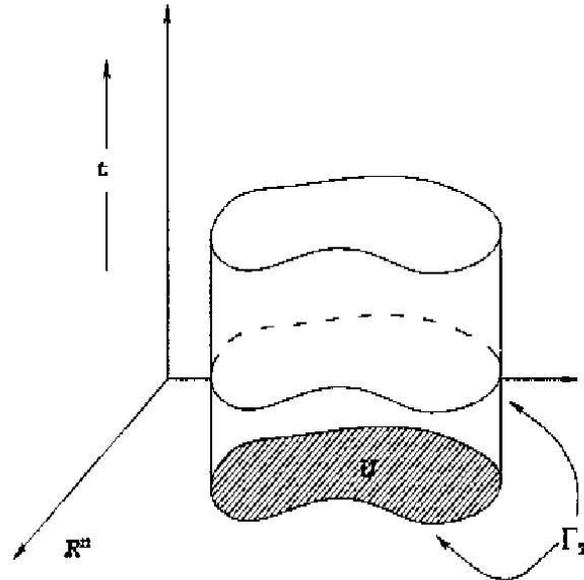


Abbildung 2.1: Der Bereich U_T

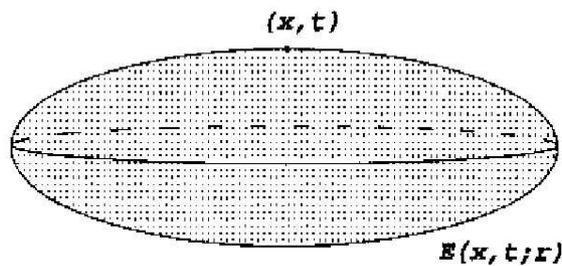


Abbildung 2.2: Der Bereich $E(x, t; r)$

Der Rand dieses Bereichs in der Raum-Zeit ist eine Niveaulinie (Level Set) von $\Phi(x - y, t - s)$. Der Punkt (x, t) ist in der Mitte der oberen Fläche.

Satz 1.3 (Eine Mittelwerteigenschaft für die Diffusionsgleichung). Sei $u \in C_1^2(U_T)$ eine Lösung der Diffusionsgleichung. Dann gilt

$$u(x, t) = \frac{1}{4r^n} \int \int_{E(x, t; r)} u(y, s) \frac{|x - y|^2}{(t - s)^2} dy ds \quad (2.13)$$

Die rechte Seite von (2.13) beinhaltet $u(y, x)$ nur für Zeiten $s \leq t$. Das ist vernünftig, weil der Wert von $u(x, t)$ soll nicht von zukünftigen Zeiten abhängen.

Beweis. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir annehmen, dass $x = 0$ und $t = 0$. Wir schreiben $E(r) = E(0, 0; r)$ und setzen

$$\begin{aligned} \phi(r) &:= \frac{1}{r^n} \int \int_{E(r)} u(y, s) \frac{|y|^2}{s^2} dy ds \\ &= \int \int_{E(1)} u(ry, r^2s) \frac{|y|^2}{s^2} dy ds \end{aligned} \quad (2.14)$$

Wir berechnen

$$\begin{aligned}
\phi'(r) &= \int \int_{E(1)} \sum_{i=1}^n u_{y_i} y_i \frac{|y|^2}{s^2} + 2r u_s \frac{|y|^2}{s} dy ds \\
&= \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} \sum_{i=1}^n u_{y_i} y_i \frac{|y|^2}{s^2} + 2u_s \frac{|y|^2}{s} dy ds \\
&=: A + B
\end{aligned}$$

Weiters führen wir die nützliche Funktion

$$\psi := -\frac{n}{2} \log(-4\pi s) + \frac{|y|^2}{4s} + n \log r \quad (2.15)$$

ein und sehen, dass $\psi = 0$ auf $\partial E(r)$, weil $\Phi(y, -s) = r^{-n}$ auf $\partial E(r)$ und $\psi = \log \Phi$. Wir benützen (2.15) und schreiben

$$\begin{aligned}
B &= \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} 4u_s \sum_{i=1}^n y_i \psi_{y_i} dy ds \\
&= -\frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} 4n u_s \psi + 4 \sum_{i=1}^n u_{s y_i} y_i \psi dy ds
\end{aligned}$$

Bei der partiellen Integration verschwindet der Randterm weil $\psi = 0$ auf $\partial E(r)$. Partielle Integration nach s liefert

$$\begin{aligned}
B &= \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} -4n u_s \psi + 4 \sum_{i=1}^n u_{y_i} y_i \psi_s dy ds \\
&= \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} -4n u_s \psi + 4 \sum_{i=1}^n u_{y_i} y_i \left(-\frac{n}{2s} - \frac{|y|^2}{4s^2} \right) dy ds \\
&= \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} -4n u_s \psi + \frac{2n}{s} \sum_{i=1}^n u_{y_i} y_i dy ds - A
\end{aligned}$$

Folglich, da u die Diffusionsgleichung löst, ist

$$\begin{aligned}
\phi'(r) &= A + B \\
&= \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} -4n \Delta u \psi - \frac{2n}{s} \sum_{i=1}^n u_{y_i} y_i dy ds \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{1}{r^{n+1}} \int \int_{E(r)} 4n u_{y_i} \psi_{y_i} - \frac{2n}{s} u_{y_i} y_i dy ds \\
&= 0, \quad \text{gemäß (2.15)}.
\end{aligned}$$

Da ϕ konstant ist, gilt

$$\phi(r) = \lim_{t \rightarrow 0} \phi(t) = u(0, 0) \left(\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t^n} \int \int_{E(t)} \frac{|y|^2}{s^2} dy ds \right) = 4u(0, 0)$$

weil

$$\frac{1}{t^n} \int \int_{E(t)} \frac{|y|^2}{s^2} dy ds = \int \int_{E(1)} \frac{|y|^2}{s^2} dy ds = 4$$

□

2.6 Eigenschaften von Lösungen

Mit Hilfe der Mittelwerteigenschaft zeigt man das starke Maximumsprinzip für die Diffusionsgleichung.

Satz 1.4 (Starkes Maximumsprinzip). Sei $u \in C_1^2(U_T) \cap C(\bar{U}_T)$ eine Lösung der Diffusionsgleichung in U_T .

- (i) Dann gilt $\max_{\bar{U}_T} u = \max_{\Gamma_T} u$
(Maximumsprinzip)
- (ii) Sei U zusammenhängend und $(x_0, t_0) \in U_T$ mit $u(x_0, t_0) = \max_{\bar{U}_T} u$.
Dann ist u konstant in \bar{U}_{t_0} .
(Starkes Maximumsprinzip)

Analoge Aussagen gelten für min statt max.

Beweis. 1. Angenommen es existiert ein Punkt $(x_0, t_0) \in U_T$ mit $u(x_0, t_0) = M := \max_{\bar{U}_T} u$. Dann gilt für alle genügend kleinen $r > 0$, $E(x_0, t_0; r) \subset U_T$. Wir verwenden die Mittelwerteigenschaft und erhalten

$$M = u(x_0, t_0) = \frac{1}{4r^n} \int \int_{E(x_0, t_0; r)} u(y, s) \frac{|x_0 - y|^2}{(t_0 - s)^2} dy ds \leq M$$

weil

$$1 = \frac{1}{4r^n} \int \int_{E(x_0, t_0; r)} \frac{|x_0 - y|^2}{(t_0 - s)^2} dy ds$$

Gleichheit herrscht nur, wenn u identisch gleich M in $E(x_0, t_0; r)$ ist. Folglich gilt

$$u(y, s) = M \quad \text{für alle } (y, s) \in E(x_0, t_0; r)$$

Zeichne eine Strecke L in U_T , welche (x_0, t_0) mit einem anderen Punkt $(y_0, s_0) \in U_T$ verbindet, wobei $s_0 < t_0$ ist. Betrachte

$$r_0 := \min\{s \geq s_0 \mid u(x, t) = M \text{ für alle Punkte } (x, t) \in L, s \leq t \leq t_0\}$$

Weil u stetig ist, wird das Minimum angenommen. Wir nehmen an, dass $r_0 > s_0$. Dann gilt $u(z_0, r_0) = M$ für einen Punkt (z_0, r_0) auf $L \cap U_T$ und folglich ist $u \equiv M$ auf $E(z_0, r_0; r)$ für alle genügend kleinen $r > 0$. Für genügend kleine $\sigma > 0$ ist $L \cap \{r_0 - \sigma \leq t \leq r_0\}$ in $E(z_0, r_0; r)$ enthalten. Dies ist ein Widerspruch. Also ist $r_0 = s_0$ und folglich $u \equiv M$ auf L .

2. Sei $x \in U$ ein fester Punkt und $0 \leq t < t_0$. Es existieren Punkte $\{x_0, x_1, \dots, x_m = x\}$ so dass die Strecken im \mathbb{R}^n , welche die Punkte x_{i-1} und x_i verbinden, in U liegen für $i = 1, \dots, m$. Wähle Zeiten $t_0 > t_1 > \dots > t_m = t$. Dann liegt die Strecke des \mathbb{R}^n , welche die Punkte (x_{i-1}, t_{i-1}) und (x_i, t_i) ($i = 1, \dots, m$) in U_T . Gemäß Schritt 1 gilt $u \equiv M$ entlang jeder solchen Strecke und folglich gilt $u(x, t) = M$.

□

Bemerkung. Wenn u sein Maximum (oder Minimum) an einem inneren Punkt annimmt, dann ist u konstant zu allen früheren Zeiten. Die stimmt mit der intuitiven Vorstellung überein, dass die Lösung im Zeitintervall $[0, t_0]$ konstant ist, wenn die Anfangs- und Randbedingungen konstant sind. Für $t > t_0$ kann sich die Lösung verändern, wenn sich die Randbedingungen nach t_0 verändern.

Bemerkung. Eine Folgerung des starken Maximumsprinzips ist: Wenn U zusammenhängend ist und $u \in C_1^2(U_T) \cap C(\bar{U}_T)$ erfülle

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = 0 & \text{in } U_T \\ u = 0 & \text{auf } \partial U \times [0, T] \\ u = g & \text{auf } U \times \{t = 0\} \end{cases}$$

mit $g \geq 0$. Dann ist u überall in U_T positiv, wenn g irgendwo in U positiv ist. Dies ist eine weitere Illustration der unendlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit für Störungen.

Eine wichtige Anwendung des Maximumsprinzips ist die folgende Eindeutigkeitsaussage.

Satz 1.5 (Eindeutigkeit für beschränkte Bereiche). Sei $g \in C(\Gamma_T)$. Dann existiert höchstens eine Lösung $u \in C_1^2(U_T) \cap C(\bar{U}_T)$ des Anfangs-/Randwertproblems

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = 0 & \text{in } U_t \\ u = g & \text{auf } \Gamma_T \end{cases} \quad (2.16)$$

Beweis. Seien u und \tilde{u} zwei Lösungen von (2.16). Wende Satz 1.4 auf die Funktion $w := \pm(u - \tilde{u})$ an. □

Wir erweitern die Eindeutigkeitsaussage auf das Cauchyproblem, das Anfangswertproblem für $U = \mathbb{R}^n$. Da der Bereich unbeschränkt ist, müssen wir eine Kontrolle für das Verhalten der Lösungen für große $|x|$ einführen.

Satz 1.6 (Maximumsprinzip für das Cauchyproblem). Sei $u \in C_1^2(\mathbb{R}^n \times (0, T)) \cap C(\mathbb{R}^n \times [0, T])$ eine Lösung von

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = 0 & \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, T) \\ u = g & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (2.17)$$

und erfülle die Abschätzung

$$u(x, t) \leq Ae^{a|x|^2} \quad (x \in \mathbb{R}^n, 0 \leq t \leq T)$$

für Konstanten $A, a > 0$. Dann gilt

$$\sup_{\mathbb{R}^n \times [0, T]} u = \sup_{\mathbb{R}^n} g$$

Beweis. 1. Als erstes nehmen wir an, dass

$$4aT < 1 \quad (2.18)$$

Dann existiert ein $\epsilon > 0$ so dass

$$4a(T + \epsilon) < 1 \quad (2.19)$$

Seien $y \in \mathbb{R}^n$ und $\mu > 0$ fest. Wir definieren

$$v(x, t) := u(x, t) - \frac{\mu}{(T + \epsilon - t)^{n/2}} e^{\frac{|x-y|^2}{4(T+\epsilon-t)}} \quad (x \in \mathbb{R}^n, t > 0)$$

Nachrechnen zeigt, dass

$$v_t - \Delta v = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, T]$$

Sei $r > 0$ fest und $U := B^0(y, r)$ die offene Kugel mit Mittelpunkt y und Radius r . $U_T = B^0(y, r) \times (0, T]$. Gemäß Satz 1.4 gilt

$$\max_{\bar{U}_T} v = \max_{\Gamma_T} v \quad (2.20)$$

2. Sei $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} v(x, 0) &= u(x, 0) - \frac{\mu}{(T + \epsilon)^{n/2}} e^{\frac{|x-y|^2}{4(T+\epsilon)}} \\ &\leq u(x, 0) = g(x) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Seien $|x - y| = r$ und $0 \leq t \leq T$, dann gilt

$$\begin{aligned} v(x, t) &= u(x, t) - \frac{\mu}{(T + \epsilon - t)^{n/2}} e^{\frac{r^2}{4(T+\epsilon-t)}} \\ &\leq Ae^{a|x|^2} - \frac{\mu}{(T + \epsilon - t)^{n/2}} e^{\frac{r^2}{4(T+\epsilon-t)}} \\ &\leq Ae^{a(|y|+r)^2} - \frac{\mu}{(T + \epsilon)^{n/2}} e^{\frac{r^2}{4(T+\epsilon)}} \end{aligned}$$

Gemäß (2.19) existiert ein $\gamma > 0$ so, dass $\frac{1}{4(T+\epsilon)} = a + \gamma$. Wir setzen die obige Berechnung fort und erhalten

$$v(x, t) \leq Ae^{a(|y|+r)^2} - \mu(4(a + \gamma))^{n/2} e^{(a+\gamma)r^2} \leq \sup_{\mathbb{R}^n} g \quad (2.22)$$

für ein genügend großes r . Aus (2.20)-(2.22) folgt

$$v(y, t) \leq \sup_{\mathbb{R}^n} g$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$, $0 \leq t \leq T$, vorausgesetzt (2.18) hält. Geht $\mu \rightarrow 0$ erhält man die Aussage des Satzes.

3. Im allgemeinen Fall ist (2.18) nicht erfüllt. Dann wenden wir das obige Resultat wiederholt auf die Zeitintervalle $[0, T_1]$, $[T_1, 2T_1]$, etc. an, mit $T_1 = \frac{1}{8a}$. □

Satz 1.7 (Eindeutigkeit des Cauchyproblems). Sei $g \in C(\mathbb{R}^n)$. Dann existiert höchstens eine Lösung $u \in C_1^2(\mathbb{R}^n \times (0, T]) \cap C(\mathbb{R}^n \times [0, T])$ des Anfangswertproblems

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = 0 & \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, T) \\ u = g & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (2.23)$$

welche die Abschätzung

$$u(x, t) \leq Ae^{a|x|^2} \quad (x \in \mathbb{R}^n, 0 \leq t \leq T) \quad (2.24)$$

für Konstanten $A, a > 0$ erfüllt.

Beweis. Wenn u und \tilde{u} (2.23) und (2.24) erfüllen, wenden wir Satz 1.6 auf $w := \pm(u - \tilde{u})$ an. □

2.7 Regularität

Der folgende Satz zeigt, dass Lösungen der Diffusionsgleichung automatisch glatt sind.

Satz 1.8 (Glattheit). Sei $u \in C_1^2(U_T)$ eine Lösung der Diffusionsgleichung in U_T . Dann ist $u \in C^\infty(U_T)$. Diese Regularitätseigenschaft gilt auch, wenn u nicht glatte Randwerte auf Γ_T hat.

Beweis. 1. Sei

$$C(x, t; r) = \{(y, s) \mid |x - y| \leq r, t - r^2 \leq s \leq t\}$$

Der geschlossene kreisförmige Zylinder mit Radius r , Höhe r^2 , wobei der Mittelpunkt der Deckenfläche (x, t) ist.

Sei $(x_0, t_0) \in U_T$ fest und wähle $r > 0$ so klein, dass $C := C(x_0, t_0; r) \subset U_t$. Definiere weiters kleinere Zylinder $C' := C(x_0, t_0; \frac{3}{4}r)$, $C'' := C(x_0, t_0; \frac{1}{2}r)$.

Wähle eine glatte Funktion $\zeta = \zeta(x, t)$ so, dass

$$\begin{cases} 0 \leq \zeta \leq 1, \zeta \equiv 1 \text{ auf } C' \\ \zeta \equiv 0 \text{ nahe der parabolischen Grenze von } C \end{cases} \quad (2.25)$$

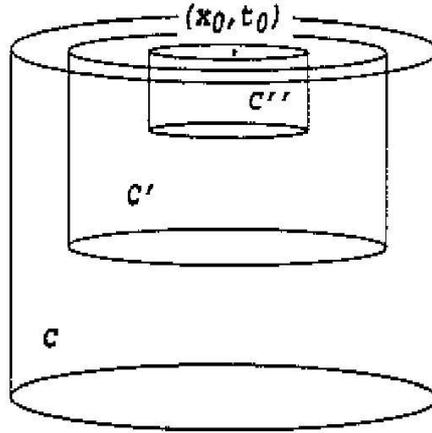
Erweitere $\zeta \equiv 0$ auf $(\mathbb{R}^n \times [0, t_0]) - C$.

2. Wir nehmen vorläufig an, dass $u \in C^\infty(U_T)$ und setzen

$$v(x, t) := \zeta(x, t)u(x, t) \quad (x \in \mathbb{R}^n, 0 \leq t \leq t_0)$$

Dann ist

$$v_t = \zeta u_t + \zeta_t u, \quad \Delta v = \zeta \Delta u + 2D\zeta \cdot Du + u \Delta \zeta$$



Folglich ist

$$v = 0 \quad \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \quad (2.26)$$

und

$$v_t - \Delta v = \zeta_t u - 2D\zeta \cdot Du - u \Delta \zeta =: \tilde{f} \quad (2.27)$$

in $\mathbb{R}^n \times (0, t_0)$. Setze nun

$$\tilde{v}(x, t) := \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t - s) \tilde{f}(y, s) dy ds$$

Gemäß Satz 1.2 gilt

$$\begin{cases} \tilde{v} - \Delta \tilde{v} = \tilde{f} & \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, t_0) \\ \tilde{v} = 0 & \text{auf } \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (2.28)$$

Da $|v|, |\tilde{v}| \leq A$ für eine Konstante A , folgt aus Satz 1.7 dass $v \equiv \tilde{v}$. Also

$$v(x, t) = \int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi(x - y, t - s) \tilde{f}(y, s) dy ds \quad (2.29)$$

Angenommen $(x, t) \in C''$. Da $\zeta \equiv 0$ außerhalb des Zylinders C ist, folgt aus (2.27) und (2.29) dass

$$u(x, t) = \int \int_C \Phi(x - y, t - s) [(\zeta_s(y, s) - \Delta \zeta(y, s))u(y, s) - 2D\zeta(y, s) \cdot Du(y, s)] dy ds$$

Der Ausdruck in den eckigen Klammern verschwindet in einem Bereich in der Nähe der Singularität von Φ . Wenn man den letzten Term partiell integriert, erhält man

$$u(x, t) = \int \int_C [\Phi(x - y, t - s)(\zeta_s(y, s) - \Delta \zeta(y, s)) + 2D_y \Phi(x - y, t - s) \cdot D\zeta(y, s)] u(y, s) dy ds \quad (2.30)$$

Wir haben diese Formel bewiesen unter der Annahme $u \in C^\infty$. Genügt u nur der Voraussetzung im Satz, erhalten wir (2.30) mit $u^\epsilon = \eta_\epsilon \star u$ statt u , wobei η_ϵ die Standarddämpfung in den Variablen x und t ist, und $\epsilon \rightarrow 0$ geht.

3. Formel (2.30) hat die Gestalt

$$u(x, t) = \int \int_C K(x, t, y, s) u(y, s) dy ds \quad ((x, t) \in C'') \quad (2.31)$$

wobei

$$K(x, t, y, s) = 0 \quad \text{für alle Punkte } (y, s) \in C'$$

weil $\zeta \equiv 1$ auf C' . Beachte dass K auf $C - C'$ glatt ist. Wenn wir den Ausdruck (2.31) betrachten, sehen wir, dass u in $C'' = C(x_0, t_0; \frac{1}{2}r)$ C^∞ ist. □

2.8 Explizite Lösung im Eindimensionalen

Wir betrachten die räumlich eindimensionale Diffusionsgleichung $u_t = u_{xx}$ $x \in [0, 2\pi], t \in \mathbb{R}_0^+$ mit der Anfangsbedingung $u(x, 0) = g(x)$ und periodischen Randbedingungen $u(x + 2\pi, t) = u(x, t)$. Gesucht ist $u(x, t)$ für $0 \leq x \leq 2\pi$ und $t > 0$.

Um eine Lösung dieses Problems zu ermitteln verwenden wir den Separationsansatz

$$u(x, t) = X(x) \cdot T(t)$$

Daraus folgt, dass

$$\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}$$

Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten $\lambda \in \mathbb{R}$ sein.

$$\frac{dT}{dt} = \lambda T \quad \text{und} \quad \frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda X$$

Jede Lösung der rechten Gleichung, die die Randbedingung erfüllt, besitzt eine Fourierentwicklung

$$X(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} c_n e^{inx}, \quad c_n \in \mathbb{C}$$

Gliedweises Differenzieren liefert

$$-n^2 c_n = \lambda c_n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

Hier sind entweder alle $c_n = 0$, was zu $(x, t) = 0$ führt, oder es gilt $\lambda + n^2 = 0$. Damit hat $X(x)$ die Gestalt

$$X_n(x) = c_n e^{inx}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

Die Differentialgleichung für $T(t)$ liefert

$$T_n(t) = A e^{-n^2 t}, \quad n \in \mathbb{Z}, A \in \mathbb{C}$$

Daher sind die Lösungen der Diffusionsgleichung

$$u_n(x, t) = A e^{-n^2 t} c_n e^{inx}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

Und somit sind auch die Linearkombinationen Lösungen

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{-n^2 t} e^{inx}$$

Bestimmen der a_n .

$$u(x, 0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{inx} \quad \Big| \quad \int_{-\pi}^{\pi} \dots e^{-imx} dx$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} u(x, 0) e^{-imx} dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \int_{-\pi}^{\pi} e^{inx} e^{-imx} dx$$

Für $m \neq n$ ist das Integral auf der linken Seite gleich Null. Für $n = m$ nimmt es den Wert 2π an. wir erhalten also

$$a_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u(x, 0) e^{-inx} dx$$

Beispiele.

$$u(x, 0) = e^{ikx} \rightarrow u(x, t) = e^{-k^2 t} e^{ikx}$$

$$u(x, 0) = \cos(kx) \rightarrow u(x, t) = \cos(kx) e^{-k^2 t}$$

$$u(x, 0) = \sin(kx) \rightarrow u(x, t) = \sin(kx) e^{-k^2 t}$$

Kapitel 3

Numerik der Diffusionsgleichung

Bei der Untersuchung von Numerischen Methoden zur Lösung der Diffusionsgleichung beschränken wir uns auf den räumlich eindimensionalen Fall mit periodischen Randbedingungen.

Wir betrachten die Diffusionsgleichung

$$u_t = u_{xx} \quad (3.1)$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(x, 0) = g(x) \quad (3.2)$$

und periodischen Randbedingungen.

Gegeben sei ein äquidistantes Gitter $a = x_{1/2} < x_{3/2} < \dots < x_{N-1/2} < x_{N+1/2} = b$. Wir definieren

- Zellen $I_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$
- Zellmittelpunkte $x_i = \frac{1}{2}(x_{i-1/2} + x_{i+1/2})$
- die Maschenweite $\Delta x = \Delta x_i = x_{i-1/2} - x_{i+1/2}$ für $i = 1, 2, \dots, N$

Der betrachtete Bereich der $(x - t)$ Ebene ist also mit Gitterpunkten $(x_i^{(h)}, t_n^{(k)})$ versehen, für die gilt

$$x_i^{(h)} = ih, \quad t_n^{(k)} = nk \quad i = 0, \dots, N, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3)$$

wobei $h = \Delta x$ die räumliche Maschenweite entlang der x -Achse ist und $k = \Delta t$ der Zeitschritt ist. $u_i^n \approx u(x_i, t_n)$ sei eine Approximation für u an der Stelle (x_i, t_n) .

3.1 Zwei Beispiele

Die Diffusionsgleichung ist eine Zeitentwicklungsgleichung und wird deshalb vorwärts in der Zeit gelöst. Wir bestimmen unsere Differenzengleichung so, dass wir in der Zeit voranschreiten können indem wir die Werte u_i^{n+1} für alle i aus den Werten u_i^n zum vorigen Zeitpunkt bestimmen. Eine natürliche Diskretisierung von (3.1) wäre zum Beispiel

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k} = \frac{1}{h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) \quad (3.4)$$

Dabei verwenden wir einen räumlich zentrierten Differenzenquotienten und einen zeitlichen Vorwärtsdifferenzenquotienten. (3.4) ist ein explizites Verfahren, weil wir jedes u_i^{n+1} explizit durch Daten aus früheren Zeitpunkten berechnen können.

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{k}{h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) \quad (3.5)$$

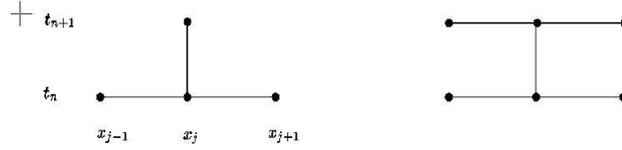


Abbildung 3.1: Stencils für das Verfahren (3.5) (links) und für das Verfahren (3.7) (rechts)

Ein anderes Einschrittverfahren, welches in der Praxis wesentlich nützlicher ist, ist das Crank-Nicolson Verfahren

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k} = \frac{1}{2h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) + \frac{1}{2h^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) \quad (3.6)$$

Daraus erhalten wir

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{k}{2h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n + u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) \quad (3.7)$$

Das Crank-Nicolson Verfahren ist ein implizites Verfahren und liefert ein Gleichungssystem der Form

$$\begin{pmatrix} \star & \star & & & & & \star \\ \star & \star & \star & & & & \\ & \star & \star & \star & & & \\ & & \star & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \ddots & \star \\ \star & & & & & \star & \star & \star \\ & & & & & \star & \star & \star \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \vdots \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \star \\ \star \\ \star \\ \vdots \\ \star \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Dieses Gleichungssystem von N Gleichungen lässt sich mit $O(n)$ Aufwand lösen. Wir zerlegen diese entartete Tridiagonalmatrix T in eine normalisierte Dreieckszerlegung $T = L \cdot R$, wobei L eine linke untere Dreiecksmatrix mit den Diagonalelementen $L_{ii} = 1$ für $i = 1, \dots, N$ ist, und R eine rechte obere Dreiecksmatrix ist. In den Matrizen L und R spiegelt sich die Struktur von T wieder.

$$L = \begin{pmatrix} \star & & & & & & \\ \star & \star & & & & & \\ & \star & \star & & & & \\ & & \star & \star & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ \star & & & & & \star & \star \end{pmatrix} \quad R = \begin{pmatrix} \star & \star & & & & & \star \\ & \star & \star & & & & \\ & & \star & \star & & & \\ & & & \star & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \star \\ \star & & & & & & \star \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Die in [10] angegebenen Algorithmen für die Dreieckszerlegung von Bandmatrizen und für die Lösung des Gleichungssystems $Tx = LRx = b$ müssen nur geringfügig abgeändert werden, wodurch der Aufwand $O(n)$ erhalten bleibt. Somit ist das Crank-Nicolson Verfahren nahezu gleich effizient wie ein explizites Verfahren. Wir werden in der Stabilitätsanalyse sehen, dass ein implizites Verfahren wesentlich größere Zeitschritte erlaubt als ein explizites Verfahren.

3.2 Differenzenverfahren

Wir betrachten die Diffusionsgleichung auf einem räumlich begrenzten Bereich $[a, b]$ der x -Achse mit periodischen Randbedingungen. Dies ist äquivalent zu einem Cauchy-Problem mit periodischer Anfangsbedingung.

Definition. Sei $u_j^{(h)}$ eine numerische Approximation für $u(x_j)$ und

$$U^h = \left\{ (u_1^{(h)}, u_2^{(h)}, \dots, u_N^{(h)}) : u_j^{(h)} \in \mathbb{R} \right\}$$

Auf der Menge U^h definieren wir ein Inneres Produkt

$$\langle u^{(h)}, v^{(h)} \rangle := h \sum_{j=1}^N u_j^{(h)} \cdot v_j^{(h)}$$

Daraus erhalten wir eine Norm auf U^h :

$$\|u^{(h)}\| = \langle u^{(h)}, v^{(h)} \rangle^{1/2}$$

Da wir Probleme mit periodische Randbedingungen betrachten ist u_i auch für $i < 1$ und $i > N$ bekannt.

Definition (Verschiebungsoperatoren). Die Abbildung

$$S_+ : U^h \rightarrow U^h \mid (S_+(u^{(h)}))_i = u_{i+1}^{(h)}$$

heißt Verschiebung des ursprünglichen Vektors nach links. Die Abbildung

$$S_- : U^h \rightarrow U^h \mid (S_-(u^{(h)}))_i = u_{i-1}^{(h)}$$

heißt Verschiebung des ursprünglichen Vektors nach rechts.

Bemerkung. S_+ und S_- lassen sich als Matrizen schreiben.

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ 1 & & & & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \begin{pmatrix} 0 & & & & 1 \\ 1 & 0 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & 1 & 0 & \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Bemerkung. $S_+S_- = I$, $S_+ = S_-^{-1}$, $S_{2+} = S_+S_+$

Definition (Differenzenoperatoren). Die Abbildung

$$D_+ = \frac{1}{h}(S_+ + I) : U^h \rightarrow U^h \mid (D_+u^{(h)})_i = \frac{u_{i+1}^{(h)} - u_i^{(h)}}{h}$$

heißt Vorwärtsoperator für $\frac{d}{dx}$. Die Abbildung

$$D_- = \frac{1}{h}(I - S_-) : U^h \rightarrow U^h \mid (D_-u^{(h)})_i = \frac{u_i^{(h)} - u_{i-1}^{(h)}}{h}$$

heißt Rückwärtsoperator für $\frac{d}{dx}$. Die Abbildung

$$D_0 = \frac{1}{2h}(S_+ - S_-) : U^h \rightarrow U^h \mid (D_0u^{(h)})_i = \frac{u_{i+1}^{(h)} - u_{i-1}^{(h)}}{h}$$

heißt Zentraldifferenzoperator für $\frac{d}{dx}$.

Bemerkung. Durch $\frac{u_{i+1}^{(h)} - 2u_i^{(h)} + u_{i-1}^{(h)}}{h^2}$ erhalten wir eine Differenzenapproximation für u_{xx} . Der dazugehörige Differenzenoperator hat die Gestalt $D_2 = \frac{1}{h^2}(S_+ - 2I + S_-)$. Dieser Differenzenoperator lässt sich auch als Polynom $Q(r, s) = \frac{1}{h^2}(r - 2 + s)$ mit zwei Variablen darstellen: $D_2 = Q(S_+, S_-)$.

Definition (Projektion). Die Abbildung

$$\pi^{(h)} : U \rightarrow U^h \mid u \mapsto (u(x_j))$$

projiziert die Werte einer Funktion u mit Funktionswerten aus U auf die Gitterpunkte x_j .

Formulierung der Differenzenapproximation. Die Diffusionsgleichung ist eine Zeitentwicklungsgleichung und wird daher vorwärts in der Zeit gelöst. Die allgemeine Form der Differenzenapproximation ist also

$$\begin{cases} u^{n+1} &= Q^{(h,k)}(S_+, S_-)u^n \\ u^0 &= \pi^h(g) \end{cases}$$

$Q^{(h,k)}$ ist eine $N \times N$ Matrix, welche aus den Matrizen S_+, I, S_- polynomial zusammengesetzt wird.

Der lokale Diskretisierungsfehler beschreibt wie gut das Diskretisierungsverfahren die Differentialgleichung beschreibt. Sei $\bar{u}(t, \cdot)$ die exakte Lösung der PDE zum Zeitpunkt t und $\bar{u}(t+k, \cdot)$ die exakte Lösung der PDE zum Zeitpunkt $t+k$. Nach einem Zeitschritt liefert das Verfahren die Werte $Q^{(h,k)}(S_+, S_-)(\pi^h(\bar{u}(t, \cdot)))$.

Definition. Sei $\epsilon^{(h,k)} = \frac{1}{k}(\pi^h(\bar{u}(t+k, \cdot))) - Q^{(h,k)}(S_+, S_-)(\pi^h(\bar{u}(t, \cdot)))$. $\epsilon^{(h,k)} \in U^h$ heißt lokaler Diskretisierungsfehler. Analog kann man den lokalen Diskretisierungsfehler beim n -ten Zeitschritt $\epsilon^{(n)}$ definieren.

Definition. Ein Verfahren heißt konsistent, wenn $\|\epsilon^{(h,k)}\| \rightarrow 0$ für $k \rightarrow 0$.

Definition. Ein Differenzenverfahren $u^{n+1} = Q^{(h,k)}u^n$ heißt konvergent, wenn $\|\pi^{(h,k)}(\bar{u}) - u^{(h,k)}\| \rightarrow 0$ für $(h, k) \rightarrow (0, 0)$ und heißt konvergent von der zeitlichen Ordnung $p \geq 1$ und der räumlichen Ordnung $q \geq 1$, wenn $\|\pi^{(h,k)}(\bar{u}) - u^{(h,k)}\| = O(k^p + h^q)$ für $(h, k) \rightarrow (0, 0)$.

Definition. Sei $u^{(n,h,k)} = Qu^{(n-1,h,k)} = Q^n u^0$. Ein Differenzenverfahren $Q^{(h,k)}$ heißt unbedingst stabil, wenn $\exists K > 0$ mit $\|u^{(n,h,k)}\|_{U^h} \leq K \|u^0\|_{U^h} \quad \forall h, k, t = nk$, das heißt $\|Q\| \leq 1$. Manchmal lässt man auch eine geringe Zunahme zu und sagt, Stabilität liegt vor, wenn $\exists K > 0, \beta \in \mathbb{R}$ mit $\|u^{(n,h,k)}\|_{U^h} \leq Ke^{\beta t} \|u^0\|_{U^h} \quad \forall h, k, t = nk$.

Das Verfahren heißt bedingt stabil, wenn die Bedingungen für $k \leq \varphi(h)$ gilt.

Mit Hilfe des Laxschen Äquivalenzsatzes für lineare PDE können wir die Überprüfung der Konvergenz in zwei Teile aufspalten.

Satz (Laxscher Äquivalenzsatz). Ein konsistentes Differenzenverfahren $u^{n+1} = Q^{(h,k)}u^n$ ist genau dann konvergent, wenn es stabil ist.

Beweis. Siehe Anhang A. □

Beispiel. Wir berechnen nun den lokalen Diskretisierungsfehler für das Verfahren $u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{k}{h^2}(u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n)$. Wenn u glatt ist, kann man $u(t_{n+1}, x_i)$ in eine Taylorreihe entwickeln:

$$u(t_{n+1}, x_i) = u(t_n, x_i) + ku_t(t_n, x_i) + \frac{k^2}{2}u_{tt}(t_n, x_i) + \dots$$

Ebenso entwickelt man $u(t_n, x_{i-1})$ und $u(t_n, x_{i+1})$ in eine Taylorreihe. Setzt man diese Entwicklungen in die Formel für den lokalen Diskretisierungsfehler ein, so erhält man $\epsilon^{(h,k)} = O(k + h^2)$.

Beispiel. Das Crank-Nicolson Verfahren (3.7) ist zentriert in Raum und Zeit. Der lokale Diskretisierungsfehler ist von zweiter Ordnung in Raum und Zeit, also $\epsilon^{(h,k)} = O(k^2 + h^2)$.

3.3 Stabilitätsanalyse (nach von Neumann)

Die Stabilitätsanalyse nach von Neumann basiert auf der Fouriertransformation und ist somit eingeschränkt auf lineare PDE. Normalerweise wird sie auf das Cauchy-Problem (keine Grenzen im

räumlichen Bereich, $-\infty < x < \infty$ im Eindimensionalen) angewandt. Die Stabilitätsanalyse nach von Neumann kann man auch verwenden um Probleme mit periodischen Randbedingungen zu untersuchen, weil diese äquivalent zu Cauchy-Problemen mit periodischen Anfangsbedingungen sind.

Wir betrachten das Intervall $[-\pi, \pi]$ und unterteilen es in N Teile, also $h = \frac{2\pi}{N}$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei N gerade. Sei $x_j^{(h)} = j \cdot h$, wobei $j = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, 0, \dots, \frac{N}{2} - 1$, wir schreiben $j \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle$. Wir betrachten die Funktion $\varphi_\nu(x) = e^{i\nu x}$ (ν kontinuierlich, $-\frac{N}{2} \leq \nu \leq \frac{N}{2}$) auf den Gitterpunkten $x_j^{(h)}$ und erhalten $\psi_\nu^{(h)}(x_j) = e^{i\nu x_j} = e^{2\pi i \frac{j\nu}{N}}$. $\psi_\nu^{(h)} = \left(\psi_\nu^{(h)}(x_j) \right)_{j \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle} \in \mathbb{C}^N$.

Lemma 3.1 $\psi_{\nu+N} = \psi_\nu$

Beweis. $\psi_{\nu+N} = e^{i \frac{2\pi j}{N} (\nu+N)} = e^{i \frac{2\pi j}{N} \nu} \cdot e^{i \frac{2\pi j}{N} N} = e^{i \frac{2\pi j}{N} \nu} = \psi_\nu$

□

Lemma 3.2 $\langle \psi_\nu, \psi_\mu \rangle = \delta_{\nu\mu}$ ($j \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle$), das heißt die ψ_ν bilden ein Orthonormalsystem. (Das Skalarprodukt in \mathbb{C}^N ist definiert durch $\langle u, v \rangle = \frac{1}{N} \sum_j u_j \bar{v}_j$.)

Beweis. $\langle \psi_\nu, \psi_\mu \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} e^{i \frac{2\pi j}{N} \nu} e^{-i \frac{2\pi j}{N} \mu} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi j}{N} (\nu-\mu)}$ (wegen Lemma 3.1)

Für $\nu = \mu$ erhalten wir: $\langle \psi_\nu, \psi_\mu \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^0 = 1$

Für $\nu \neq \mu$ erhalten wir: $\langle \psi_\nu, \psi_\mu \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} q^j = \frac{1}{N} \cdot \frac{1-q^N}{1-q}$ mit $q = e^{i \frac{2\pi}{N} (\nu-\mu)}$. Da $(\nu - \mu) \in \mathbb{Z}$, gilt $q^N = e^{i 2\pi (\nu-\mu)} = 1$. Daraus folgt $\langle \psi_\nu, \psi_\mu \rangle = 0$.

N linear unabhängige Elemente des \mathbb{C}^N bilden eine Basis des \mathbb{C}^N . Folglich ist $\{\psi_\nu\}_{j \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle}$ ein vollständiges Orthonormalsystem.

□

Definition. Gegeben sei eine Funktion u_j auf den Gitterpunkten $x_j = jh$, $j \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle$ mit $\|u\| < \infty$. Wir definieren die diskrete Fouriertransformation durch

$$\tilde{u}(\nu) = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} u_j e^{-i x_j \nu} = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} u_j \psi_\nu^{(h)}(x_j)$$

Da $S_- = S_+^{-1}$ ist, kann man das Differenzenverfahren $u^{n+1} = Q(S_+, S_-)u^n$ auch schreiben als $u^{n+1} = R(S_+)u^n$, wobei $R(z) = \sum_{-m}^m r_k z^k$ eine rationale Funktion ist.

Wir berechnen nun die j -te Komponente von $(S_+ \psi_\kappa)$:

$$(S_+ \psi_\kappa)_j = \psi_\kappa(x_{j+1}) = e^{2\pi i \frac{\kappa(j+1)}{N}} = e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}} e^{2\pi i \frac{\kappa j}{N}} = e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}} \psi_\kappa(x_j)$$

Folglich ist $(S_+ \psi_\kappa) = e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}} \psi_\kappa$.

\tilde{S}_+ ist die Matrix von S_+ in der Basis (ψ_ν) . Für $j \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle$ erhält man eine Diagonalmatrix $\tilde{S}_+ = \text{diag} \left(R \left(e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}} \right) \right)_{\kappa \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle}$.

Durch Ausrechnen von $\tilde{S}_+ u$ sieht man, dass \tilde{S}_+ auch die Fouriertransformierte von S_+ ist.

Die Fouriertransformierte des Differenzenoperators $Q = R(S_+)$ hat die Gestalt $\tilde{Q} = R(\tilde{S}_+) = \text{diag} \left(R \left(e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}} \right) \right)$.

Satz 3.3 Das Verfahren $u^{n+1} = Qu^n$ ist L^2 -stabil $\Leftrightarrow |R(e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}})| \leq 1 \forall \kappa \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle$.

Beweis. Das Verfahren $u^{n+1} = Qu^n$ ist stabil, wenn $\|Q^k\| \leq C$. Dabei ist $\|T\| = \sqrt{\rho(T+T^*)}$, wobei ρ der Spektralradius ist. Es gilt $\|Q\| = \|\tilde{Q}\|$. $\|\tilde{Q}^k\| = \max_{\kappa \in \langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \rangle} |R(e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}})|^k$. Also ist

$$\|\tilde{Q}^k\| \leq C \forall \kappa \Leftrightarrow |\operatorname{R}(e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}})| \leq 1. \quad \square$$

Bemerkung. Sei $\omega = e^{2\pi i \frac{1}{N}} = \omega_1$ und $\omega_\kappa = e^{2\pi i \frac{\kappa}{N}}$. Dann gilt $\omega_\kappa^\mu = \omega_\mu^\kappa = \omega_1^{\kappa\mu} = \omega_{\kappa\mu}$.

Beispiel. Wir lösen die Diffusionsgleichung mit dem Verfahren

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{k}{h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n)$$

$$\begin{aligned} Q &= I + \frac{k}{h^2} (S_+^{-1} - 2I + S_+) = \operatorname{R}(S_+) \\ \operatorname{R}(z) &= 1 + \frac{k}{h^2} (z^{-1} - 2 + z) = \lambda := \frac{k}{h^2}, \lambda > 0 \\ &= (1 - 2\lambda) + \lambda z^{-1} + \lambda z \\ \operatorname{R}(\omega_\kappa) &= (1 - 2\lambda) + 2\lambda \frac{\omega_\kappa + \omega_\kappa^{-1}}{2} \\ &= (1 - 2\lambda) + 2\lambda \cos\left(2\pi \frac{\kappa}{N}\right) \quad \kappa \in \left\langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \right\rangle \\ |\operatorname{R}(\omega_\kappa)| \leq 1 &\Leftrightarrow 1 - 2\lambda \geq 0, \quad \text{d.h. } k \leq \frac{h^2}{2} \end{aligned}$$

Dieses Verfahren ist bedingt stabil.

Beispiel. Wir lösen die Diffusionsgleichung mit dem Crank-Nicolson Verfahren (3.7).

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u_i^n + \frac{k}{2h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n + u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) \Leftrightarrow \\ u^{n+1} &= \left[I + \frac{k}{h^2} (S_+ - 2I + S_-) \right] u^n + \left[\frac{k}{h^2} (S_+ - 2I + S_-) \right] u^{n+1} \Leftrightarrow \\ u_j^{n+1} &= \left[I - \frac{k}{h^2} (S_+ - 2I + S_-) \right]^{-1} \left[I + \frac{k}{h^2} (S_+ - 2I + S_-) \right] u^n = Qu^n \\ \operatorname{R}(z) &= \left[1 - \frac{k}{h^2} (z - 2 + z^{-1}) \right]^{-1} \left[1 + \frac{k}{h^2} (z - 2 + z^{-1}) \right] \\ \operatorname{R}(\omega_\kappa) &= \frac{1}{1 + 2\lambda(1 - \cos \omega_\kappa)} \cdot [1 - 2\lambda(1 - \cos \omega_\kappa)] \\ &\quad \lambda := \frac{k}{h^2}, \lambda > 0, \kappa \in \left\langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1 - x}{1 + x} \quad (x \text{ positiv}) \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass $-1 \leq (\omega_\kappa) \leq 1$ für alle $\kappa \in \left\langle -\frac{N}{2}, \frac{N}{2} \right\rangle$. Das Crank-Nicolson Verfahren ist unbedingt stabil.

Das explizite Verfahren (3.5) ist bedingt stabil. Das Verhältnis $\frac{k}{h^2}$ muss kleiner oder gleich $\frac{1}{2}$ gewählt werden. Das implizite Crank-Nicolson Verfahren (3.7) ist unbedingt stabil.

Kapitel 4

ENO Verfahren

Essentially Non Oscillatory Verfahren (ENO Verfahren) sind stark nichtlineare Verfahren, die entwickelt wurden um hyperbolische Erhaltungsgesetze zu lösen.

4.1 Rekonstruktion und Approximation in 1D

Gegeben sind die Funktionswerte von $v_i \equiv v(x_i)$ an den Gitterpunkten x_i . Gesucht ist eine numerische Flussfunktion $\hat{v}_{i+1/2} \equiv \hat{v}(v_{i-r}, \dots, v_{i+s})$, sodass die Flussdifferenz die Ableitung $v'(x)$ von k -ter Ordnung approximiert:

$$\frac{1}{\Delta x_i}(\hat{v}_{i+1/2} - \hat{v}_{i-1/2}) = v'(x_i) + O(\Delta x^k) \quad (4.1)$$

Bei dieser Herleitung achten wir nicht auf die Randbedingungen und nehmen an, dass v_i für $i \leq 0$ und $i > N$ bekannt ist, falls benötigt.

Falls wir eine Funktion $h(x)$ finden, welche

$$v(x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} h(\xi) d\xi \quad (4.2)$$

erfüllt, dann gilt $v'(x) = \frac{1}{\Delta x} \left[h\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) - h\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right) \right]$. Um (4.1) zu erfüllen, suchen wir ein $\hat{v}_{i+1/2} = h(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^k)$. Eigentlich bräuchten wir einen $O(\Delta x^{k+1})$ Ausdruck um (4.1) zu erfüllen, da ein Δx im Nenner steht. In der Praxis ist der $O(\Delta x^k)$ gewöhnlich glatt und somit liefert die Differenz in (4.1) einen weiteres $O(\Delta x)$, welches sich mit dem im Nenner kürzt.

$h(x)$ ist in Beziehung (4.2) nur indirekt definiert. Die bekannte Funktion $v(x)$ ist der Zellmittelwert der gesuchten Funktion $h(x)$. Um $h(x)$ zu bestimmen benötigen wir den folgenden Algorithmus.

Rekonstruktion von Zellmittelwerten. Gegeben sind die Zellmittelwerte einer Funktion $v(x)$: $\bar{v}_i \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} v(\xi) d\xi$. Gesucht ist ein Polynom $p_i(x)$ vom Grad $\leq k-1$ für jede Zelle I_i , sodass $p_i(x)$ die Funktion $v(x)$ im Inneren der Zelle I_i von k -ter Ordnung approximiert:

$$p_i(x) = v(x) + O(\Delta x^k) \quad (4.3)$$

Im Speziellen erhalten wir Approximationen von k -ter Ordnung für $v(x)$ an den Zellgrenzen

$$\begin{aligned} v_{i+1/2}^- &= p_i(x_{i+1/2}) = v(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^k) \\ v_{i-1/2}^+ &= p_i(x_{i-1/2}) = v(x_{i-1/2}) + O(\Delta x^k) \end{aligned}$$

Wiederum nehmen wir an, dass \bar{v}_i für $i \leq 0$ und $i > N$ bekannt ist, falls benötigt.

Wir betrachten die Zelle I_i und wählen einen Stencil, bestehend aus r Zellen links, s Zellen rechts von I_i und der Zelle I_i selbst. ($r, s \geq 0$; $r + s + 1 = k$; $S(i) \equiv \{I_{i-r}, \dots, I_{i+s}\}$). Dann existiert ein eindeutiges Polynom $p(x)$ von Grad höchstens $k - 1 = r + s$ (Wir lassen den Index i weg, solange keine Verwechslungsgefahr besteht). Die Zellmittelwerte von $p(x)$ stimmen in jeder Zelle von $S(i)$ mit denen von $v(x)$ überein:

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} p(\xi) d\xi = \bar{v}_j \quad (4.4)$$

Wir wollen nun die Näherungen für $v(x)$ an den Zellgrenzen berechnen. Die Abbildungen von den gegebenen Zellmittelwerten \bar{v}_j im Stencil $S(i)$ auf die Werte $v_{i+1/2}^-$ und $v_{i-1/2}^+$ sind linear, es existieren also Konstanten $c_{r,j}$ und $\tilde{c}_{r,j}$, welche von linken Teil r des Stencils $S(i)$, von der Ordnung k , aber nicht von der Funktion v abhängen, sodass

$$v_{i+1/2}^- = \sum_{j=0}^{k-1} c_{r,j} \bar{v}_{i-r+j} \quad v_{i-1/2}^+ = \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{c}_{r,j} \bar{v}_{i-r+j}$$

Der mögliche Unterschied der Werte $v_{i+1/2}^+$ und $v_{i+1/2}^-$ erklärt sich aus der Möglichkeit von verschiedenen Stencils für die Zellen I_i und I_{i+1} . Man beachte auch, dass $\tilde{c}_{r,j} = c_{r-1,j}$.

Um die Genauigkeitsabschätzung (4.3) zu zeigen, betrachten wir die Stammfunktion von $v(x)$:

$$V(x) = \int_{-\infty}^x v(\xi) d\xi$$

wobei die untere Grenze $-\infty$ durch jede andere feste Zahl ersetzt werden kann. $V_{i+1/2}$ kann durch die Zellmittelwerte von $v(x)$ ausgedrückt werden:

$$V(x_{i+1/2}) = \sum_{j=-\infty}^i \int_{j-1/2}^{j+1/2} v(\xi) d\xi = \sum_{j=-\infty}^i \bar{v}_j \Delta x_j$$

Kennt man also die Zellmittelwerte $\{\bar{v}_j\}$, so kennt man auch die Stammfunktion $V(x)$ an den Zellgrenzen. $P(x)$ sei das eindeutig bestimmte Polynom von Grad $\leq k$, welches $V(x_{j+1/2})$ an den folgenden $k + 1$ Punkten

$$x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i+s+1/2}$$

interpoliert. $p(x)$ sei seine Ableitung:

$$p(x) \equiv P'(x)$$

Wir zeigen nun, dass (4.4) erfüllt ist:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} p(\xi) d\xi &= \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} P'(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{\Delta x_j} (P(x_{j+1/2}) - P(x_{j-1/2})) \\ &= \frac{1}{\Delta x_j} (V(x_{j+1/2}) - V(x_{j-1/2})) \\ &= \frac{1}{\Delta x_j} \left(\int_{-\infty}^{x_{j+1/2}} v(\xi) d\xi - \int_{-\infty}^{x_{j-1/2}} v(\xi) d\xi \right) \\ &= \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} v(\xi) d\xi = \bar{v}_j \quad j = i - r, \dots, i + s \end{aligned}$$

Das dritte Gleichheitszeichen gilt, weil $P(x)$ $V(x)$ an den Stellen $x_{j-1/2}$ und $x_{j+1/2}$ interpoliert für $j = i - r, \dots, i + s$. Aus der obigen Rechnung folgt, dass $p(x)$ das gesuchte Polynom ist. Aus der Standard Approximationstheorie [10] folgt

$$P'(x) = V'(x) + O(\Delta x^k) \quad x \in I_i$$

Das ist die Genauigkeitsabschätzung (4.3).

Die Herleitung der Werte für die Konstanten $\{c_{rj}\}$, die in Tabelle 4.1 angeführt sind findet man in [11].

Zusammenfassung. Gegeben sind die Werte $\{v_j\}$. Wir identifizieren sie mit Hilfe von (4.2) mit den Zellmittelwerten einer anderen Funktion $h(x)$, deren Stammfunktion $H(x) = \int_{-\infty}^x h(\xi)d\xi$ an den Zellgrenzen $x = x_{j+1/2}$ exakt bekannt ist, weil

$$H(x_{i+1/2}) = \sum_{j=-\infty}^i \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} h(\xi)d\xi = \Delta x \sum_{j=-\infty}^i v_j$$

Wir verwenden die oben beschriebene Rekonstruktion von Zellmittelwerten um eine Approximation von k -ter Ordnung für $h(x_{i+1/2})$ zu bekommen. Dies ist dann der numerische Fluss $\hat{v}_{i+1/2}$.

Wenn also der Stencil für den Fluss $\hat{v}_{i+1/2}$ aus den k Gitterpunkten x_{i-r}, \dots, x_{i+s} besteht, wobei $r + s = k - 1$, dann kann man den Fluss $\hat{v}_{i+1/2}$ schreiben als

$$\hat{v}_{i+1/2} = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj} v_{i-r+j}$$

wobei die Konstanten $\{c_{rj}\}$ in Tabelle 4.1 abgedruckt sind.

Fixed Stencil Approximation. Ein fester Stencil gibt an, dass der linke Teil r des Stencils für alle Stellen i gleich ist. Für überall glatte Funktionen $v(x)$ erhält man die beste Approximation entweder durch eine zentrierte Approximation $r = s - 1$ für gerades k (zentriert bezüglich der Stelle $x_{i+1/2}$), oder durch einseitige Upwind Approximation $r = s$ oder $r = s - 2$ für ungerades k .

Zum Beispiel erhält man eine Rekonstruktion vierter Ordnung für $v_{i+1/2}$ durch

$$v_{i+1/2} = -\frac{1}{12}\bar{v}_{i-1} + \frac{7}{12}\bar{v}_i + \frac{7}{12}\bar{v}_{i+1} - \frac{1}{12}\bar{v}_{i+2} + O(\Delta x^4)$$

und die zwei einseitigen Upwind Rekonstruktionen dritter Ordnung für $v_{i+1/2}$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} v_{i+1/2} &= -\frac{1}{6}\bar{v}_{i-1} + \frac{5}{6}\bar{v}_i + \frac{1}{3}\bar{v}_{i+1} + O(\Delta x^3) \\ \text{oder } v_{i+1/2} &= \frac{1}{3}\bar{v}_i + \frac{5}{6}\bar{v}_{i+1} - \frac{1}{6}\bar{v}_{i+2} + O(\Delta x^3) \end{aligned}$$

Analog erhält man einen zentrierten Fluss der Ordnung vier durch

$$\hat{v}_{i+1/2} = -\frac{1}{12}v_{i-1} + \frac{7}{12}v_i + \frac{7}{12}v_{i+1} - \frac{1}{12}v_{i+2}$$

und daraus

$$\frac{1}{\Delta x} (\hat{v}_{i+1/2} - \hat{v}_{i-1/2}) = v'(x_i) + O(\Delta x^4)$$

Die zwei einseitigen Upwind Flüsse der Ordnung drei sind

$$\begin{aligned} \hat{v}_{i+1/2} &= -\frac{1}{6}v_{i-1} + \frac{5}{6}v_i + \frac{1}{3}v_{i+1} \\ \text{oder } \hat{v}_{i+1/2} &= \frac{1}{3}v_i + \frac{5}{6}v_{i+1} - \frac{1}{6}v_{i+2} \end{aligned}$$

und daraus erhält man

$$\frac{1}{\Delta x} (\hat{v}_{i+1/2} - \hat{v}_{i-1/2}) = v'(x_i) + O(\Delta x^3)$$

4.2 ENO Approximation in 1D

Beim Lösen von Hyperbolischen Erhaltungsgesetzen interessieren wir uns für die Klasse von stückweise glatten Funktionen. In der Nähe von Unstetigkeitsstellen ist ein fester Stencil für die Approximation ungeeignet, weil in der Nähe solcher Unstetigkeiten Oszillationen entstehen können.

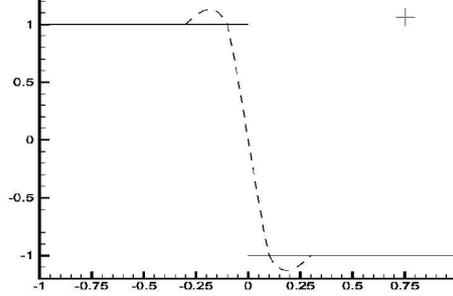


Abbildung 4.1: Oszillationen in der Nähe von Unstetigkeiten

Diese Oszillationen entstehen, weil der Stencil zur Berechnung von x_i die Zelle mit der Unstetigkeit enthält, wenn x_i nur nahe genug bei der Unstetigkeit liegt.

Ein genauer Blick auf Abbildung 4.2 legt die Verwendung von anpassungsfähigen Stencils nahe. Das heißt, der linke Teil r des Stencils wechselt mit x_i . Die Grundidee ist es, falls möglich zu verhindern, dass der Stencil für die Zelle I_i die Zelle mit der Unstetigkeit enthält. Um dies zu erreichen betrachten wir die Newtonsche Interpolationsformel.

Definition (Dividierte Differenzen). Sei $V(x) \equiv \int_{-\infty}^x v(\xi)d\xi$ eine Stammfunktion von $v(x)$ und seien $V[x_{i-1/2}] \equiv V(x_{i-1/2})$ die dividierten Differenzen der Ordnung 0. Die dividierten Differenzen der Ordnung j ($j \geq 1$) werden rekursiv definiert durch

$$V[x_{i-1/2}, \dots, x_{i+j-1/2}] \equiv \frac{V[x_{i+1/2}, \dots, x_{i+j-1/2}] - V[x_{i-1/2}, \dots, x_{i+j-3/2}]}{x_{i+j-1/2} - x_{i-1/2}}$$

Analog werden die dividierten Differenzen der Zellmittelwerte \bar{v} definiert:

$$\begin{aligned} \bar{v}[x_i] &\equiv \bar{v}_i \\ \bar{v}[x_i, \dots, x_{i+j}] &= \frac{\bar{v}[x_{i+1}, \dots, x_{i+j}] - \bar{v}[x_i, \dots, x_{i+j-1}]}{x_{i+j} - x_i} \end{aligned}$$

Die dividierten Differenzen der Ordnung 0 von \bar{v} sind die dividierten Differenzen der Ordnung 1 von $V(x)$.

$$V[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] = \frac{V(x_{i+1/2}) - V(x_{i-1/2})}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} = \bar{v}_i$$

Wir können also die dividierten Differenzen von $V(x)$ der Ordnung ≥ 1 durch die von \bar{v} der Ordnung ≥ 0 .

Das Newtonsche Interpolationspolynom $P(x)$ der Ordnung k , welches $V(x)$ an den $k+1$ Punkten interpoliert, hat die Gestalt

$$P(x) = \sum_{j=0}^k V[x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i-r+j-1/2}] \prod_{m=0}^{j-1} (x - x_{i-r+m-1/2})$$

Wir leiten $P(x)$ ab und erhalten $p(x)$

$$p(x) = \sum_{j=1}^k V[x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i-r+j-1/2}] \sum_{m=0}^{j-1} \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^{j-1} (x - x_{i-r+l-1/2})$$

Beachte, dass in der Formel für $p(x)$ nur dividierte Differenzen von $V(x)$ der Ordnung ≥ 1 vorkommen. Folglich können wir $p(x)$ ausschließlich durch dividierte Differenzen von \bar{v} ausdrücken.

Eine wichtige Eigenschaft [10] von dividierten Differenzen ist, dass

$$V[x_{i-1/2}, \dots, x_{i+j-1/2}] = \frac{V^{(j)}(\xi)}{j!}$$

für ein ξ im Inneren des Stencils, also $x_{i-1/2} < \xi < x_{i+j-1/2}$, so lange die Funktion $V(x)$ im Stencil glatt ist. Ist $V(x)$ unstetig an einer Stelle im Inneren des Stencils, dann ist

$$V[x_{i-1/2}, \dots, x_{i+j-1/2}] = O(1/\Delta x^j)$$

Daher sind dividierte Differenzen ein Maß für die Glattheit einer Funktion im Inneren eines Stencils.

Wir suchen nun $k + 1$ nebeneinanderliegende Punkte, die $x_{i-1/2}$ und $x_{i+1/2}$ enthalten müssen, für die $V(x)$ am glattesten ist, verglichen mit den anderen möglichen Stencils. Dies geschieht in Schritten. In jedem Schritt wird ein Punkt zum Stencil hinzugefügt. Wir starten mit dem Stencil $\tilde{S}_2(i) = \{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\}$, wobei wir \tilde{S} benützen um den Stencil für die Stammfunktion zu bezeichnen. Jeder Stencil \tilde{S} für V hat einen entsprechenden Stencil S für \bar{v} . $\tilde{S}_2(i)$ entspricht dem Stencil $S(i) = \{I_i\}$ für \bar{v} , bestehend aus nur einer Zelle.

Die lineare Interpolation im Stencil $\tilde{S}_2(i)$ läßt sich in der Newtonschen Form schreiben als

$$P^1(x) = V[x_{i-1/2}] + V[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}](x - x_{i-1/2})$$

Im nächsten Schritt, haben wir zwei Möglichkeiten unseren Stencil auszuweiten, indem wir einen Gitterpunkt hinzufügen: Wir können entweder den linken Nachbar $x_{i-3/2}$ hinzufügen, und erhalten somit das quadratische Interpolationspolynom

$$R(x) = P^1(x) + V[x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}](x - x_{i-1/2})(x - x_{i+1/2})$$

Oder wir fügen den rechten Nachbar $x_{i+3/2}$ hinzu, womit wir das folgende Interpolationspolynom erhalten

$$S(x) = P^1(x) + V[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}](x - x_{i-1/2})(x - x_{i+1/2})$$

Der Unterschied zwischen $P^1(x)$ und $R(x)$ bzw. $S(x)$ ist die Funktion $(x - x_{i-1/2})(x - x_{i+1/2})$ multipliziert mit zwei verschiedenen Konstanten. Diese beiden Konstanten sind die beiden dividierten Differenzen von $V(x)$ in zwei verschiedenen Stencils. Eine betragsmäßig kleinere dividierte Differenz sagt aus, dass die Funktion im dazugehörigen Stencil glatter ist. Um zu entscheiden welchen Gitterpunkt wir hinzufügen, vergleichen wir die beiden relevanten dividierten Differenzen und nehmen jene mit dem kleineren Absolutbetrag.

Also wenn $|V[x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]| < |V[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}]|$, dann nehmen wir den Dreipunkt-Stencil $\tilde{S}_3(i) = \{x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\}$, anderenfalls nehmen wir $\tilde{S}_3(i) = \{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}\}$. Diese Verfahren kann man weiter fortsetzen.

Im Falle eines äquidistanten Gitters empfiehlt es sich nichtdividierte Differenzen zu verwenden:

$$\begin{aligned} V \langle x_{i-1/2}, x_{i+1/2} \rangle &= V[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] = \bar{v}_i \\ V \langle x_{i-1/2}, \dots, x_{i+j+1/2} \rangle &= V \langle x_{i+1/2}, \dots, x_{i+j+1/2} \rangle - V \langle x_{i-1/2}, \dots, x_{i+j-1/2} \rangle \quad (j \geq 1) \end{aligned}$$

Dies reduziert die Rechenzeit und reduziert Round-Off Fehler.

Wenn der Stencil ermittelt wurde, kann man $v_{i+1/2}^-$ und $v_{i-1/2}^+$ mit den vorgeschichteten Werten c_{rj} berechnen. Daraus erhält man dann die Flüsse \hat{v} .

ENO Rekonstruktion. Gegeben sind die Zellmittelwerte $\{\bar{v}_i\}$ einer Funktion $v(x)$. Wir erhalten eine stückweise polynomiale Rekonstruktion von Grad höchstens $k - 1$, auf folgende Weise:

1. Berechne (nicht)dividierte Differenzen der Ordnung 1 bis k der Stammfunktion $V(x)$, mit Hilfe von \bar{v} .
2. In der Zelle I_i starte mit dem Zwei-Punkt-Stencil $\tilde{S}_2(i) = \{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\}$ für $V(x)$, welcher äquivalent zum Stencil $S_1(i) = \{I_i\}$ ist.
3. $\tilde{S}_l(i) = \{x_{j+1/2}, \dots, x_{j+l-1/2}\}$ ist bekannt für $l = 2, \dots, k$. Füge einen der benachbarten Punkte $x_{j-1/2}$ oder $x_{j+l+1/2}$ zum Stencil hinzu, entsprechend dem ENO Verfahren:
 - Wenn $|V[x_{j-1/2}, \dots, x_{j+l-1/2}]| < |V[x_{j+1/2}, \dots, x_{j+l+1/2}]|$, dann füge $x_{j-1/2}$ dem Stencil $\tilde{S}_l(i)$ hinzu und erhalte $\tilde{S}_{l+1}(i) = \{x_{j-1/2}, \dots, x_{j+l-1/2}\}$
 - Andernfalls, füge $x_{j+l+1/2}$ dem Stencil $\tilde{S}_l(i)$ hinzu und erhalte $\tilde{S}_{l+1}(i) = \{x_{j+1/2}, \dots, x_{j+l+1/2}\}$
4. Verwende die Lagrangesche oder die Newtonsche Form des Interpolationspolynoms um $p_i(x)$ zu berechnen. Dies ist ein Polynom vom Grad $\leq k - 1$ in I_i . Verwende $p_i(x)$ um Approximationen an den Zellgrenzen zu erhalten.

$$v_{i+1/2}^- = p_i(x_{i+1/2}), \quad v_{i-1/2}^+ = p_i(x_{i-1/2})$$

Diese Approximationen können auch unter Verwendung der vorgeschichteten Konstanten c_{rj} berechnet werden.

Eigenschaften der ENO Interpolation. Gegeben sei eine stückweise glatte Funktion $V(x)$. Wir starten mit einem Zwei Punkte Stencil $\tilde{S}_2(i) = \{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\}$ im Schritt 2 der ENO Rekonstruktion. Die ENO Interpolation hat folgende Eigenschaften [3]:

1. Die Fehlerabschätzung

$$P_i(x) = V(x) + O(\Delta x^{k+1}), \quad x \in I_i$$

gilt in jeder Zelle I_i , welche keine Unstetigkeit enthält.

2. $P_i(x)$ ist monoton in jeder Zelle I_i , welche die Unstetigkeitsstelle von $V(x)$ enthält.
3. Die Rekonstruktion ist TVB (total variation bounded). Das heißt, es existiert eine Funktion $z(x)$ mit

$$z(x) = P_i(x) + O(\Delta x^{k+1}), \quad x \in I_i$$

für alle Zellen I_i (inklusive der Zellen mit Unstetigkeitsstellen), sodass gilt

$$\text{TV}(z) \leq \text{TV}(v)$$

4.3 Weighted ENO Approximation in 1D

Im Folgenden beschreiben wir weighted ENO (WENO) Verfahren [9, 5]. WENO ist eine Weiterentwicklung von ENO. Statt nur einen der in Frage kommenden Stencils zur Rekonstruktion zu verwenden, verwendet man eine konvexe Kombination von allen.

Betrachten wir die k in Frage kommenden Stencils

$$S_r(i) = \{x_{i-r}, \dots, x_{i-r+k-1}\}, \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (4.5)$$

Daraus erhalten wir k verschiedene Rekonstruktionen für die Werte $v_{i+1/2}$

$$v_{i+1/2}^{(r)} = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj} \bar{v}_{i-r+j}, \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (4.6)$$

Die WENO Rekonstruktion nimmt nun eine konvexe Kombination von allen $v_{i+1/2}^{(r)}$ als neue Approximation für die Werte $v(x_{i+1/2})$ an den Zellgrenzen:

$$v_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+1/2}^{(r)} \quad (4.7)$$

Der Schlüssel zum Erfolg von WENO ist die Wahl der Gewichte ω_r . Für Stabilität und Konsistenz verlangen wir

$$\omega_r \geq 0, \quad \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r = 1 \quad (4.8)$$

Wenn die Funktion $v(x)$ in allen in Frage kommenden Stencils glatt ist, dann gibt es Konstanten d_r sodass

$$v_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r v_{i+1/2}^{(r)} = v(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^{2k-1}) \quad (4.9)$$

Die Konstanten d_r für $1 \leq k \leq 3$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} k=1: & \quad d_0 = 1 \\ k=2: & \quad d_0 = \frac{2}{3}, \quad d_1 = \frac{1}{3} \\ k=3: & \quad d_0 = \frac{3}{10}, \quad d_1 = \frac{3}{5}, \quad d_2 = \frac{1}{10} \end{aligned}$$

Alle d_r sind positiv und $\sum_{r=0}^{k-1} d_r = 1$. Im glatten Fall möchten wir

$$\omega_r = d_r + O(\Delta x^{k-1}), \quad r = 0, \dots, k-1$$

woraus wir eine Genauigkeit der Ordnung $2k-1$ erhalten würden:

$$v_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+1/2}^{(r)} = v(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^{2k-1}) \quad (4.10)$$

weil

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+1/2}^{(r)} - \sum_{r=0}^{k-1} d_r v_{i+1/2}^{(r)} &= \sum_{r=0}^{k-1} (\omega_r - d_r) \left(v_{i+1/2}^{(r)} - v(x_{i+1/2}) \right) \\ &= \sum_{r=0}^{k-1} O(\Delta x^{k-1}) O(\Delta^k) = O(\Delta^{2k-1}) \end{aligned}$$

Enthält die Funktion $v(x)$ in einem oder mehreren Stencils (4.5) eine Unstetigkeitsstelle, möchten wir dass die dazugehörigen Gewichte ω_r gleich 0 sind, um die erfolgreiche ENO Idee fortzusetzen. Wünschenswert wäre es, wenn die Gewichte glatte Funktionen der involvierten Zellmittelwerte sind. Weiters möchten wir, dass die Gewichte einfach mit dem Computer zu berechnen sind. Polynome und rationale Funktionen sind folglich Exponentialfunktionen vorzuziehen.

Diese Überlegungen führen auf Gewichte der Form

$$\omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s}, \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (4.11)$$

mit

$$\alpha_r = \frac{d_r}{(\epsilon + \beta_r)^2} \quad (4.12)$$

Dabei ist $\epsilon > 0$ die Maschinenkonstante und wird eingeführt, damit der Nenner nie 0 wird. Ein guter Wert für ϵ ist $\epsilon = 10^{-6}$. Die β_r heißen Glattheitsindikatoren der Stencils $S_r(i)$: Wenn die Funktion $v(x)$ im Stencil $S_r(i)$ glatt ist, verlangen wir

$$\beta_r = O(\Delta x^2)$$

und wenn $v(x)$ eine Unstetigkeitsstelle in Stencil $S_r(i)$ enthält, verlangen wir

$$\beta_r = O(1)$$

Für die Gewichte ω_r in (4.11) bedeutet das

$$\omega_r = O(1)$$

wenn die Funktion $v(x)$ im Stencil $S_r(i)$ glatt ist, und

$$\omega_r = O(\Delta x^4)$$

wenn $v(x)$ im Stencil $S_r(i)$ eine Unstetigkeitsstelle hat.

Wenn die konkrete Form der Glattheitsindikatoren β_r gegeben ist, muss man überprüfen, ob die Fehlerabschätzung (4.10) gilt. Für alle Glattheitsindikatoren β_r erfüllen die in (4.11) definierten Gewichte (4.8). Um (4.10) zu erfüllen reicht es, wenn gilt

$$\beta_r = D(1 + O(\Delta x^{k-1})), \quad r = 0, \dots, k-1 \quad (4.13)$$

wobei $D \neq 0$, unabhängig von r .

Die ENO Rekonstruktion sucht den glattesten Stencil durch den Vergleich von (nicht)dividierten Differenzen. In [5] werden Glattheitsindikatoren β_r konstruiert. Sei $p_r(x)$ das Rekonstruktionspolynom im Stencil $S_r(i)$. Wir definieren

$$\beta_r = \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{\partial^l p_r(x)}{\partial^l x} \right)^2 dx \quad (4.14)$$

Für $k = 2$ erhalten wir die Glattheitsindikatoren

$$\begin{aligned} \beta_0 &= (\bar{v}_{i+1} - \bar{v}_i)^2 \\ \beta_1 &= (\bar{v}_i - \bar{v}_{i-1})^2 \end{aligned} \quad (4.15)$$

Für $k = 3$ erhalten wir die Glattheitsindikatoren

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{13}{12}(\bar{v}_i - 2\bar{v}_{i+1} + \bar{v}_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3\bar{v}_i - 4\bar{v}_{i+1} + \bar{v}_{i+2})^2 \\ \beta_1 &= \frac{13}{12}(\bar{v}_{i-1} - 2\bar{v}_i + \bar{v}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\bar{v}_{i-1} - \bar{v}_{i+1})^2 \\ \beta_2 &= \frac{13}{12}(\bar{v}_{i-2} - 2\bar{v}_{i-1} + \bar{v}_i)^2 + \frac{1}{4}(\bar{v}_{i-2} - 4\bar{v}_{i-1} + 3\bar{v}_i)^2 \end{aligned} \quad (4.16)$$

(4.15) liefert ein WENO Verfahren dritter Ordnung, (4.16) liefert ein WENO Verfahren fünfter Ordnung.

Weighted ENO Rekonstruktion. Gegeben sind die Zellmittelwerte $\{\bar{v}_i\}$ einer Funktion $v(x)$. Für jede Zelle I_i erhalten wir eine Approximation der Ordnung $(2k-1)$ für $v(x)$ an den Zellgrenzen ($v_{i-1/2}^+$ und $v_{i+1/2}^-$) auf die folgende Weise

1. Berechne die k Approximationen $v_{i+1/2}^{(r)}$ der Ordnung k in (4.6), mit Hilfe der Stencils (4.5), für $r = 0, \dots, k-1$.
Berechne die k Approximationen $v_{i-1/2}^{(r)}$ der Ordnung k , mit Hilfe der Stencils (4.5), für $r = 0, \dots, k-1$.
2. Bestimme die Konstanten d_r und \tilde{d}_r , sodass

$$v_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r v_{i+1/2}^{(r)} = v(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^{2k-1}) \quad \text{und}$$

$$v_{i-1/2} = \sum_{r=0}^{k-1} \tilde{d}_r v_{i-1/2}^{(r)} = v(x_{i-1/2}) + O(\Delta x^{2k-1})$$

gilt. Aus Symmetriegründen gilt

$$\tilde{d}_r = d_{k-1-r}$$

3. Bestimme die Glattheitsindikatoren β_r in (4.14) für $r = 0, \dots, k-1$. Explizite Werte für $k = 2$ und $k = 3$ sind in (4.15) und (4.16) angegeben.
4. Bilde die Gewichte ω_r und $\tilde{\omega}_r$ mit Hilfe von (4.11)-(4.12) und

$$\tilde{\omega}_r = \frac{\tilde{\alpha}_r}{\sum_{s=0}^{k-1} \tilde{\alpha}_s}, \quad \tilde{\alpha}_r = \frac{\tilde{d}_r}{(\epsilon + \beta_r)^2}, \quad r = 0, \dots, k-1$$

5. Berechne die Rekonstruktionen der Ordnung $2k-1$

$$v_{i+1/2}^- = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+1/2}^{(r)}, \quad v_{i-1/2}^+ = \sum_{r=0}^{k-1} \tilde{\omega}_r v_{i-1/2}^{(r)} \quad (4.17)$$

4.4 ENO und WENO Verfahren für 1D Erhaltungsgesetze

Im Folgenden beschreiben wir ENO und WENO Verfahren für 1D Erhaltungsgesetze

$$u_t(x, t) + f_x(u(x, t)) = 0 \quad a \leq x \leq b \quad (4.18)$$

mit passenden Anfangs- und Randbedingungen. Wir konzentrieren uns auf räumliche Diskretisierung und lassen die Zeitvariable stetig (Method of Lines Ansatz).

Finite Differenzen Formulierung. Wir lösen (4.18) direkt mit folgendem Ansatz

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} (\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2})$$

wobei $u_i(t)$ die numerische Approximation des Punktwerts $u(x_i, t)$ ist und der numerische Fluss $\hat{f}_{i+1/2} = \hat{f}(u_{i-r}, \dots, x_{i+s})$ folgende Bedingungen erfüllt:

- \hat{f} ist eine Lipschitz stetige Funktion in allen Variablen
- \hat{f} ist konsistent mit dem physikalischen Fluss f , das heißt $\hat{f}(u, \dots, u) = f(u)$

Den numerische Fluss $\hat{f}_{i+1/2}$ erhält man durch die ENO oder WENO Rekonstruktion mit $\bar{v}(x) = f(u(x, t))$. Um Stabilität zu gewährleisten ist es wichtig, dass Upwindig verwendet wird, bei der Berechnung des Flusses. Der einfachste und am wenigsten aufwendigste Weg um Upwindig zu erreichen ist der Folgende: Berechne den Roe-Speed $\bar{a}_{i+1/2} = \frac{f(u_{i+1/2}) - f(u_{i-1/2})}{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}$ und

- wenn $\bar{a}_{i+1/2} \geq 0$, dann weht der Wind von links nach rechts. Wir nehmen also $v_{i+1/2}^-$ zur Berechnung des numerischen Flusses $\hat{f}_{i+1/2}$

- wenn $\bar{a}_{i+1/2} < 0$, dann weht der Wind von rechts nach links. Wir nehmen also $v_{i+1/2}^+$ zur Berechnung des numerischen Flusses $\hat{f}_{i+1/2}$

Ein Nachteil des ENO-Roe ist, dass man eventuell Lösungen erhält, welche die Entropiebedingung verletzen. Um dies zu vermeiden, verwendet man globales Flux Splitting:

$$f(u) = f^+(u) + f^-(u) \text{ wobei } \frac{df^+(u)}{du} \geq 0, \frac{df^-(u)}{du} \leq 0$$

Die einfachste Version ist Lax-Friedrich Flux Splitting:

$$f^\pm = \frac{1}{2}(f(u) \pm \alpha u)$$

wobei $\alpha = \max_u |f'(u)|$.

Tabelle 4.1: Konstanten c_{rj}

k	r	j=1	j=2	j=3	j=4	j=5
1	-1	1				
	0	1				
2	-1	3/2	-1/2			
	0	1/2	1/2			
	1	-1/2	3/2			
3	-1	11/6	-7/6	1/3		
	0	1/3	5/6	-1/6		
	1	-1/6	5/6	1/3		
	2	1/3	-7/6	11/6		
4	-1	25/12	-23/12	13/12	-1/4	
	0	1/4	13/12	-5/12	1/12	
	1	-1/12	7/12	7/12	-1/12	
	2	1/12	-5/12	13/12	1/4	
	3	-1/4	13/12	-23/12	25/12	
5	-1	137/60	-163/60	137/60	-21/20	1/5
	0	1/5	77/60	-43/60	17/60	-1/20
	1	-1/20	9/20	47/60	-13/60	1/30
	2	1/30	-13/60	47/60	9/20	-1/20
	3	-1/20	17/60	-43/60	77/60	1/5
	4	1/5	-21/20	137/60	-163/60	137/60

Kapitel 5

Runge Kutta Verfahren

Runge Kutta Verfahren werden verwendet um gewöhnliche Differentialgleichungen der Form

$$u_t = L(u)$$

mit passenden Anfangsbedingungen zu lösen. Mit Hilfe der Method of Lines Methode erhält man aus der Diffusionsgleichung $u_t = u_{xx}$ N solche gewöhnliche Differentialgleichungen

$$u_t(x_i) = L_i(u^n) \quad i = 1, \dots, N$$

Dabei wird u_{xx} an jeder Stelle x_i mit einer Differenzenapproximation angenähert und mit $L_i(u^n)$ bezeichnet.

In Kapitel 2 betrachteten wir als Zeitdiskretisierung nur das Euler (Vorwärts) Verfahren

$$u_t(x_i) \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k}$$

Runge Kutta Verfahren sind Einschrittverfahren. Zur Berechnung der Funktionswerte zum nächsten Zeitpunkt werden Zwischenschritte eingeführt.

Beispiel Ein explizites 2-Schritt Runge Kutta Verfahren ist gegeben durch

$$\begin{aligned} u_i^{(1)} &= u_i^n + \frac{1}{2}kL_i(u^n) \\ u_i^{n+1} &= u_i^n + kL_i(u^{(1)}) \end{aligned}$$

Im ersten Schritt werden mit dem Euler Verfahren Zwischenwerte berechnet, die $u_i(t_{n+1/2})$ approximieren. Im zweiten Schritt wird die räumliche Differenzenapproximation L_i am Mittelpunkt des Zeitintervalls berechnet.

Allgemeine Form des Runge Kutta Verfahrens. Die allgemeine Form des Runge Kutta Verfahrens [12] hat die Gestalt

$$\begin{aligned} u_i^{(j)} &= \sum_{k=0}^{j-1} \alpha_{jk} u_i^{(k)} + k\beta_{jk} L_i(u^{(k)}) \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, N \\ u_i^{(0)} &= u_i^n, \quad u_i^{(m)} = u_i^{n+1} \end{aligned} \tag{5.1}$$

Im Folgenden werden die Koeffizienten von Runge Kutta Verfahren der Ordnungen 2 und 3 [12] angeführt.

$$\begin{aligned} m = 2 : \quad \alpha_{11} &= 1, \beta_{11} = 1 \\ \alpha_{20} &= \frac{1}{2}, \alpha_{21} = \frac{1}{2}, \beta_{20} = 0, \beta_{21} = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m = 3 : \quad & \alpha_{11} = 1, \beta_{11} = 1 \\ & \alpha_{20} = \frac{3}{4}, \alpha_{21} = \frac{1}{4}, \beta_{20} = 0, \beta_{21} = \frac{1}{4} \\ & \alpha_{30} = \frac{1}{3}, \alpha_{31} = 0, \alpha_{32} = \frac{2}{3}, \beta_{30} = 0, \beta_{31} = 0, \beta_{32} = \frac{2}{3} \end{aligned}$$

Kapitel 6

Numerische Ergebnisse

Im Folgenden sollen ENO und WENO Verfahren auf die 1D Diffusionsgleichung (eine parabolische partielle Differentialgleichung) verallgemeinert werden. Weiters soll untersucht werden, ob die ENO und WENO Verfahren für $\frac{k}{h^2} \leq C$ mit $C > \frac{1}{2}$ stabil sind.

6.1 Aufbereiten des ENO und WENO Algorithmus für die Diffusionsgleichung

Hyperbolische Erhaltungsgesetze. ENO und WENO Verfahren wurden zur numerischen Lösung von hyperbolischen Erhaltungsgesetzen [7] entwickelt. 1D Erhaltungsgesetze haben die Gestalt

$$u_t(x, t) + f_x(u(x, t)) = 0 \quad a \leq x \leq b \quad (6.1)$$

wobei f eine nichtlineare Funktion in u ist.

Sei $a(u) = \frac{df}{du}$. Dann können wir (6.1) in der Form

$$u_t + a(u)u_x = 0 \quad (6.2)$$

schreiben. Folglich ist u konstant entlang Trajektorien $x(t)$, welche sich mit Geschwindigkeit

$$a = \frac{dx}{dt} \quad (6.3)$$

ausbreiten. Deshalb heißt a Signalgeschwindigkeit. Die Trajektorien, welche (6.3) erfüllen heißen Charakteristiken. Da u konstant entlang den Trajektorien und $a = \frac{dx}{dt}$ ist, sind die Charakteristiken Geraden in der $(x - t)$ Ebene.

Diffusionsgleichung. Die 1D Diffusionsgleichung hat die Gestalt

$$u_t = u_{xx} \quad (6.4)$$

Diese Gleichung lässt sich umschreiben zu

$$\begin{aligned} u_t - u_{xx} &= 0 \\ u_t + (-u_x)_x &= 0 \end{aligned} \quad (6.5)$$

Vergleicht man (6.1) und (6.5) so sieht man

$$f = -u_x \quad (6.6)$$

Der Method of Lines Ansatz für die Lösung von hyperbolischen Erhaltungsgesetzen mit Hilfe von ENO und WENO Verfahren liefert

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta t}(\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2}) \quad (6.7)$$

wobei $\hat{f}_{i+1/2}$ der numerische Fluss an der Zellgrenze $x_{i+1/2}$ ist, welcher mit ENO oder WENO Verfahren berechnet wird.

Programm. Um die Diffusionsgleichung mit ENO oder WENO Verfahren zu lösen, müssen folgende drei Schritte durchgeführt werden:

1. Berechne u_x , zum Beispiel mit Hilfe eines zentralen Differenzenquotienten
2. Berechne $f = -u_x$ an den Zellgrenzen mit Hilfe von ENO oder WENO Verfahren
3. Bilde das Schema (6.7) mit einer geeigneten Zeitdiskretisierung für $\frac{du_i(t)}{dt}$.

Angenommen die Anfangsbedingung $u(x, 0)$ sei beschränkt und stetig, $u(x, 0) \geq 0$ aber $u(x, 0) \not\equiv 0$. Dann ist $u(x, t)$ tatsächlich positiv für alle Punkte $x \in \mathbb{R}$ und Zeiten $t > 0$ (vergleiche Kapitel 2.3). Das heißt, Störungen breiten sich in alle Richtungen aus. Deshalb wird bei der Berechnung von $\hat{f}_{i+1/2}$ im Schritt 2 kein Upwinding verwendet.

Räumliche Diskretisierung. Berechnungen wurden mit folgenden Methoden durchgeführt:

- ENO Verfahren der Ordnungen 2,3,4,5
- WENO Verfahren der Ordnung 5
- Fixed Stencil Approximation der Ordnungen 2,4
- Zentraler Differenzenquotient

Zeitliche Diskretisierung. Berechnungen wurden mit folgenden Methoden durchgeführt:

- Euler (Vorwärts) Verfahren
- Runge Kutta Verfahren der Ordnung 2,3

6.2 Ergebnisse

Alle Berechnungen wurden mit $n = 128$ physikalischen Gitterpunkten durchgeführt. Zusätzlich wurden auf jeder Seite 5 Ghost Cells verwendet um die periodischen Randbedingungen zu realisieren.

6.2.1 Stetige Anfangsbedingung

Wir betrachten die 1D Diffusionsgleichung

$$u_t = u_{xx} \quad -\pi \leq x \leq +\pi$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(x, 0) = \cos x$$

und mit periodischen Randbedingungen.

Tabelle 6.1 zeigt bis zu welcher Courantzahl $c = \frac{k}{h^2}$ die verwendeten Algorithmen stabil sind.

In Tabelle 6.2 werden verschiedene numerische Algorithmen zur Lösung der Diffusionsgleichung verglichen. Die natürliche Diskretisierung (3.5) ist für Courantzahlen $c \leq 0.5$ stabil. Löst man die Diffusionsgleichung mit Hilfe eines ENO Algorithmus dritter Ordnung (ENO 3) und $c = 0.5$ so sieht man, dass der Rechenfehler halb so groß verglichen mit der natürlichen Diskretisierung ist, aber circa acht mal so viel Rechenzeit benötigt wird. Erhöht man die Courantzahl auf $c = 1.0$,

verliert man den Vorteil in der Rechengenauigkeit und die Rechenzeit ist noch immer deutlich höher.

Mit steigender Courantzahl sinkt zwar die benötigte Rechenzeit für die Verfahren ENO, WENO und Fixed Stencil, die Genauigkeit nimmt aber ab.

Tabelle 6.1: Stabilität der numerischen Verfahren

Numerisches Verfahren	Zeitdiskretisierung	Stabil bis Courantzahl $c = \frac{k}{h^2}$
ENO 2	Euler Vorwärts	1.6
ENO 3	Euler Vorwärts	1.4
ENO 4	Euler Vorwärts	1.3
ENO 5	Euler Vorwärts	1.2
ENO 2	Runge Kutta 3	2.0
ENO 3	Runge Kutta 3	1.7
ENO 4	Runge Kutta 3	1.6
ENO 5	Runge Kutta 3	1.6
WENO 5	Euler Vorwärts	1.4
WENO 5	Runge Kutta 3	1.6
Fixed Stencil 2	Euler Vorwärts	2.0
Fixed Stencil 2	Runge Kutta 3	2.5
Fixed Stencil 4	Euler Vorwärts	1.4
Fixed Stencil 4	Runge Kutta 3	1.8

Tabelle 6.2: Vergleich der numerischen Verfahren

Numerisches Verfahren	Courantzahl $c = \frac{k}{h^2}$	Fehler $\ \cdot \ _{\infty}$	Rechenzeit [s]
ENO 3	0.5	$1.0508 \cdot 10^{-7}$	2.443514
ENO 3	1.0	$4.3152 \cdot 10^{-7}$	1.161670
WENO 5	0.5	$1.0524 \cdot 10^{-7}$	6.829821
WENO 5	1.0	$4.3169 \cdot 10^{-7}$	3.354824
Fixed Stencil 4	0.5	$1.0506 \cdot 10^{-7}$	1.281843
Fixed Stencil 4	1.0	$4.3151 \cdot 10^{-7}$	0.6409216
Fixed Stencil 4	1.3	$5.8329 \cdot 10^{-7}$	0.5007200
Natürliche Diskretisierung	0.5	$1.9605 \cdot 10^{-7}$	0.3204608

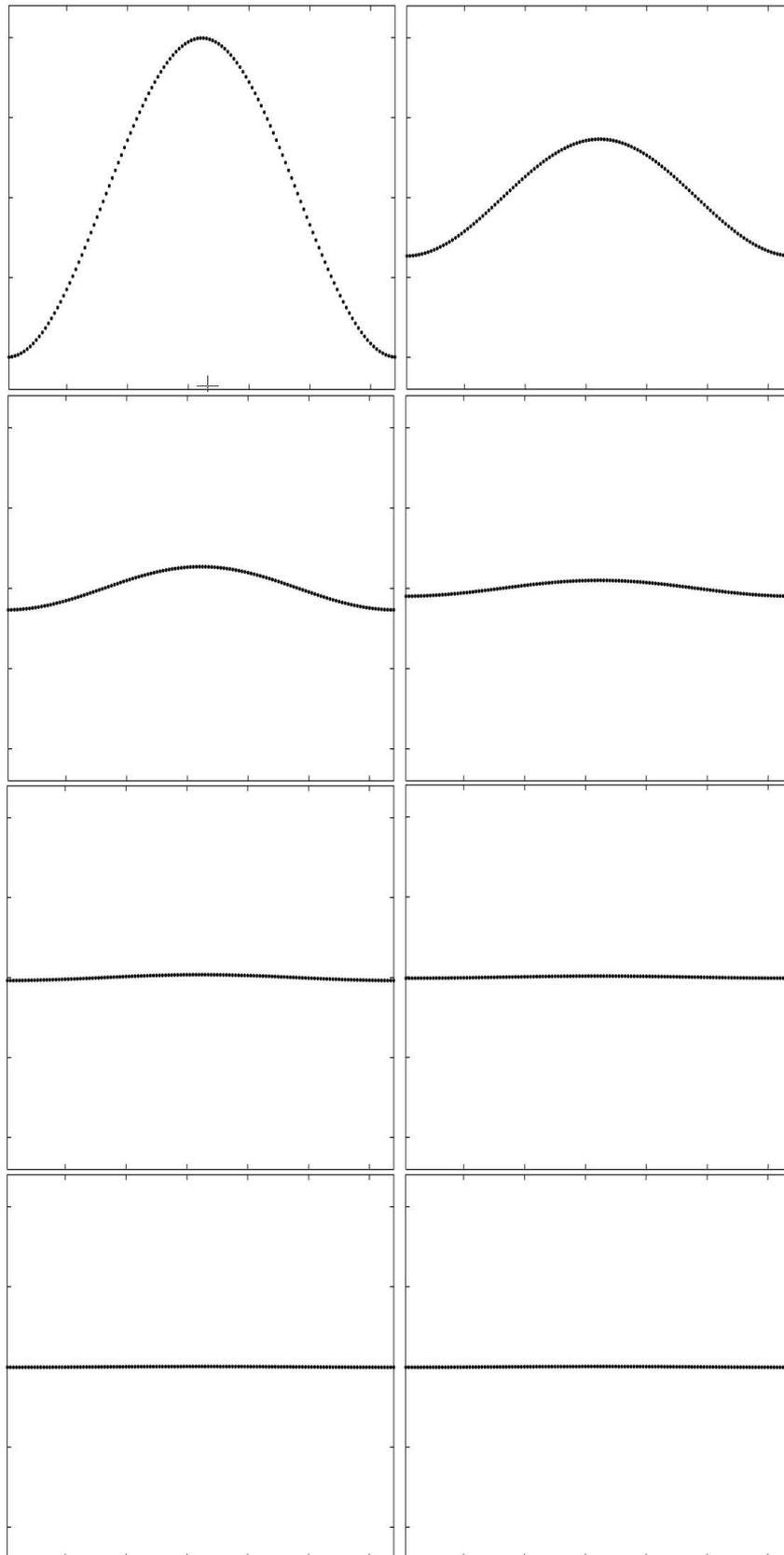


Abbildung 6.1: Numerische Lösung zu den Zeitpunkten $t = 0, 1, 2, \dots, 7$ berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$

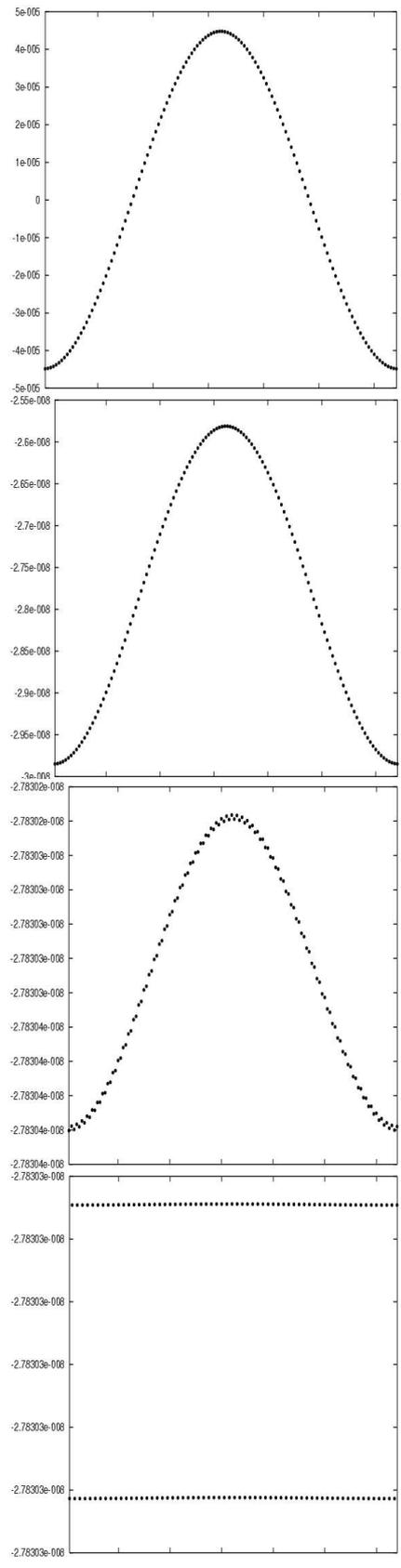


Abbildung 6.2: Numerische Lösung zu den Zeitpunkten $t = 10, 20, 30, 40$ berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$

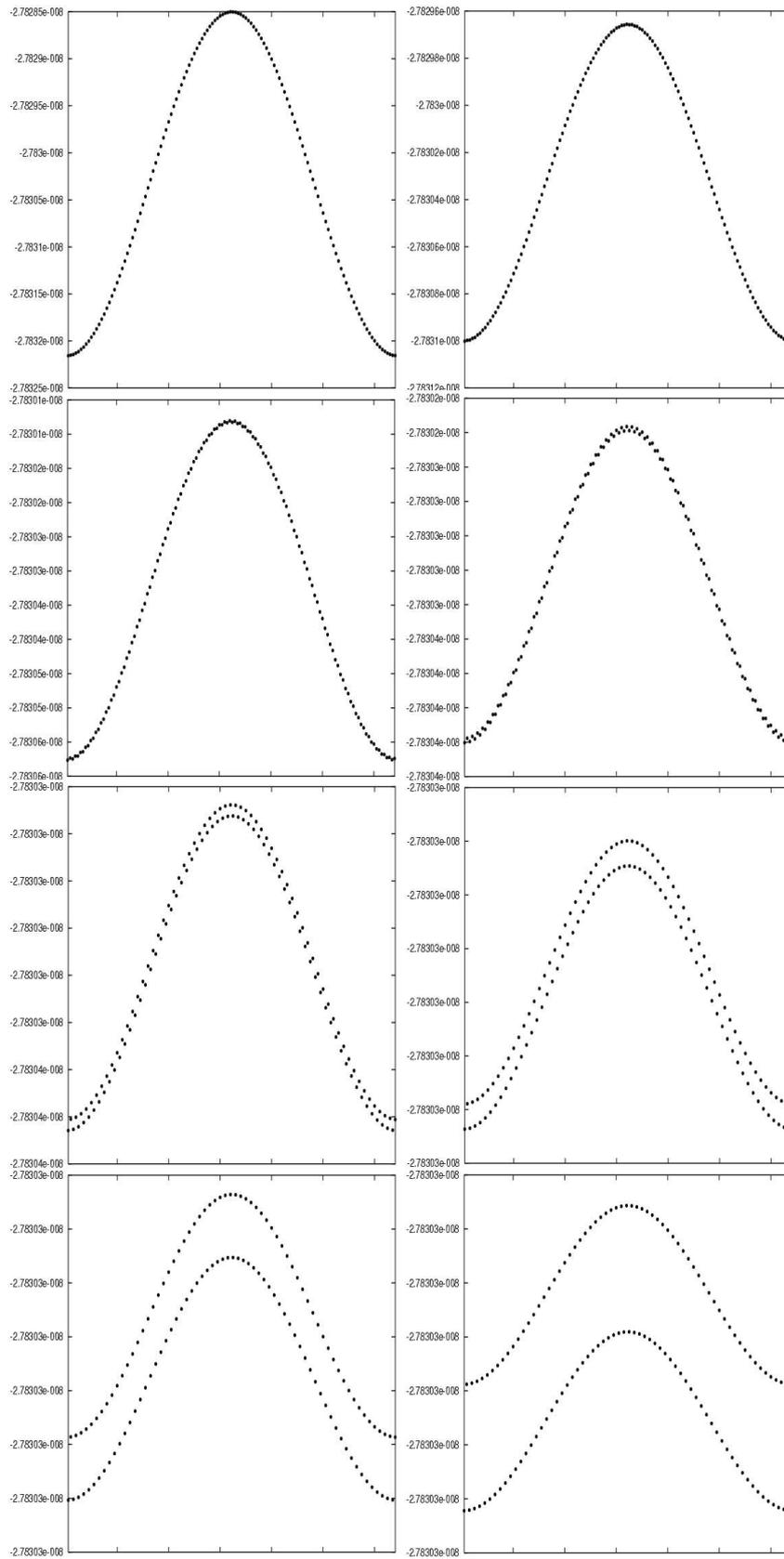


Abbildung 6.3: Entstehen von Oszillationen mit Periode 2. Numerische Lösung zu den Zeitpunkten $t = 27, 28, \dots, 34$, berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$

Die Abbildungen 6.1, 6.2 und 6.3 zeigen die Zeitentwicklung (berechnet mit einem ENO Verfahren dritter Ordnung) der Cosinusfunktion zu ausgewählten Zeiten.

Abbildung 6.2 zeigt, dass sich im Laufe der Zeit aus der Cosinusfunktion eine Flip Flop Funktion entwickelt. Dieses Phänomen zeigt sich auch bei der Verwendung von WENO Verfahren, Fixed Stencil Approximationen und auch bei der Berechnung mit Hilfe der natürlichen Diskretisierung (3.5).

Abbildung 6.3 zeigt die Entstehung dieser regelmäßigen Oszillationen mit Periode 2. Da in den verwendeten Algorithmen (ENO, WENO, Fixed Stencil) die Ableitung u_x mit einem zentralen Differenzenquotienten $\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2h}$ berechnet wird stellt sich ein stabiler Zustand ein. Die Ableitung u_x der Flip Flop Funktion hat an jeder Stelle den Wert 0.

Dieses Verhalten kann auch nicht verhindert werden, indem man den Fluss $f = u_x$ an den Zellmittelpunkten (statt an den Zellgrenzen) berechnet und nachher den Fluss an den Zellgrenzen durch Mittelung der zwei benachbarten Flüsse an den Zellmittelpunkten berechnet.

6.2.2 Unstetige Anfangsbedingung

Wir betrachten die 1D Diffusionsgleichung

$$u_t = u_{xx} \quad 0 \leq x \leq 1$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(x, 0) = \begin{cases} 0.4 & \text{wenn } 0 \leq x \leq \frac{1}{3} \\ 1.2 & \text{wenn } \frac{1}{3} < x < \frac{2}{3} \\ 0.4 & \text{wenn } \frac{2}{3} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

und mit periodischen Randbedingungen.

In Abschnitt 6.2.1 haben wir gesehen, bis zu welcher Courantzahl c die verwendeten Algorithmen Probleme mit stetigen Anfangsbedingungen stabil lösen können. Die Abbildungen 6.4 und 6.5 zeigen die numerischen Lösungen (berechnet mit einem ENO Verfahren dritter Ordnung) mit unstetiger Anfangsbedingung nach den ersten Zeitschritten k . Dabei sieht man, dass bei der Berechnung mit Courantzahl $c = 1.0$ immer wieder Ecken in der Lösung entstehen. Mit Courantzahl $c = 0.5$ erhält man eine glatte Lösung.

Auch bei diesen Problemen entstehen wieder Oszillationen mit Periode 2, die hier allerdings nicht regelmäßig sind (siehe Abbildung 6.8). Der Algorithmus bleibt aber stabil.

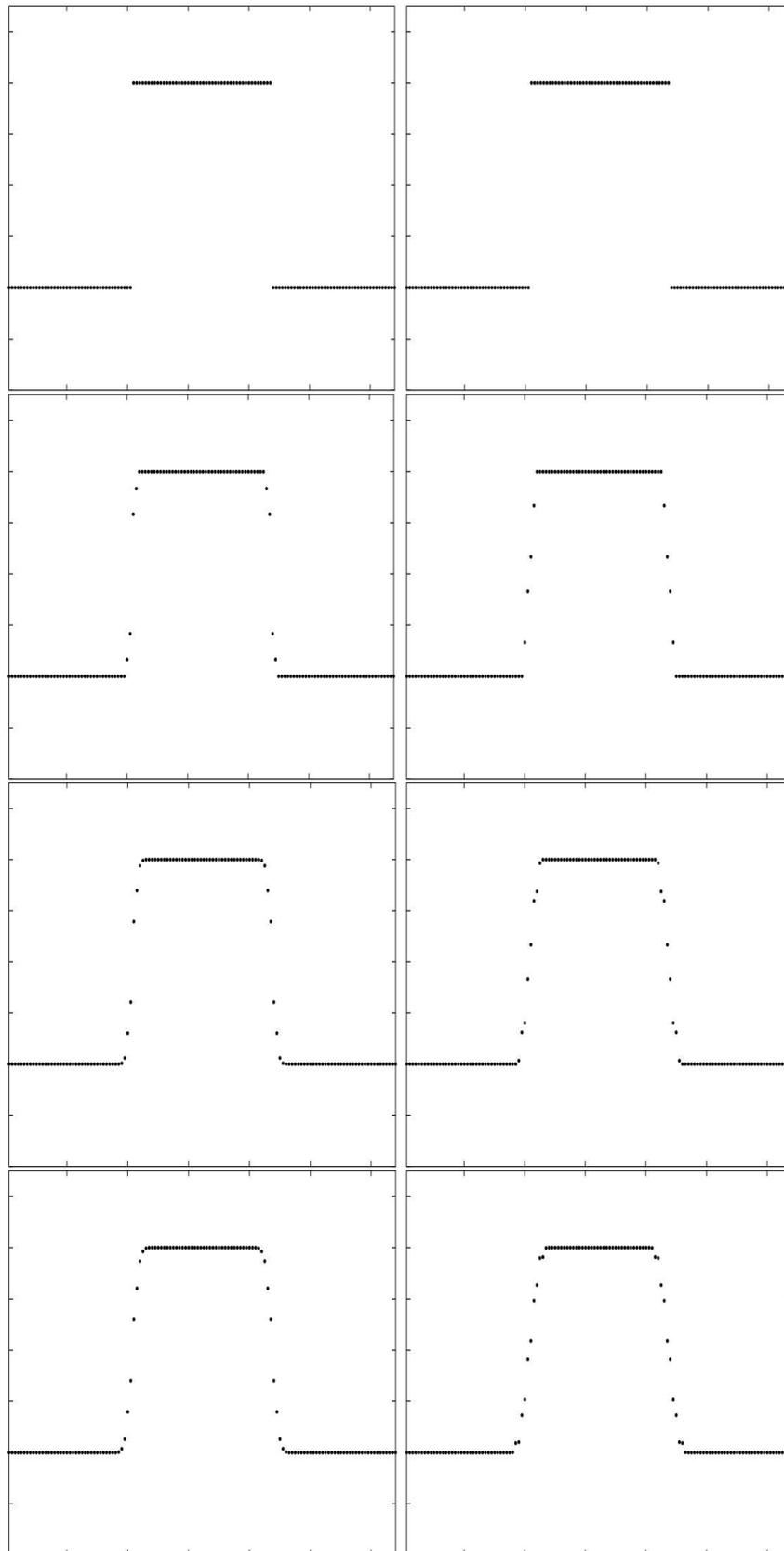


Abbildung 6.4: Numerische Lösung nach 0,1,2,3 Zeitschritten k , berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 0.5$ (links) und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$ (rechts)

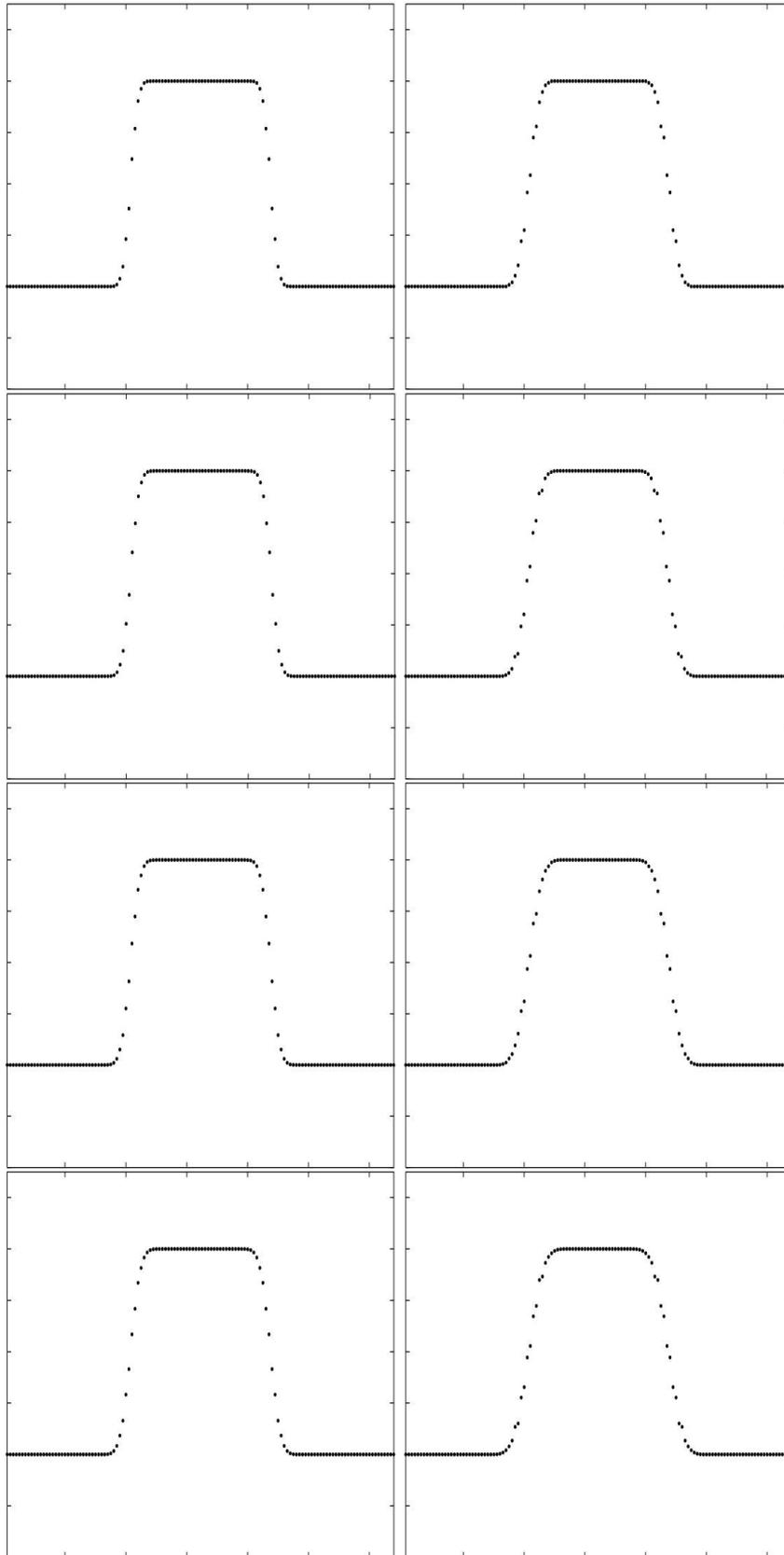


Abbildung 6.5: Numerische Lösung nach 4,5,6,7 Zeitschritten k , berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 0.5$ (links) und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$ (rechts)

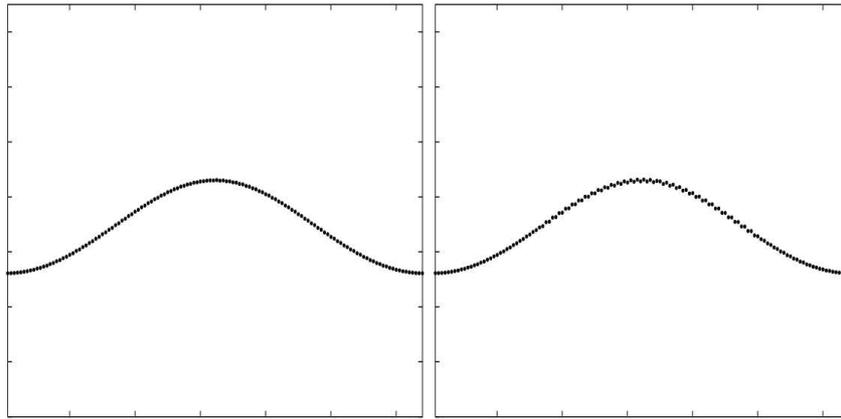


Abbildung 6.6: Numerische Lösung zum Zeitpunkt $t = 1$ berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 0.5$ (links) und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$ (rechts)

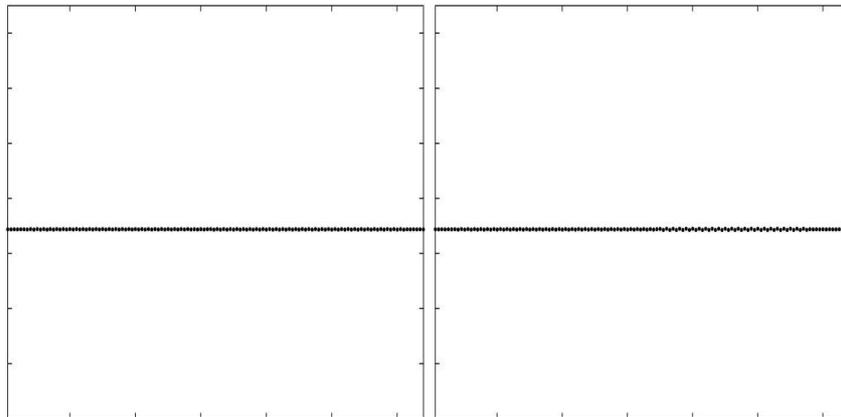


Abbildung 6.7: Numerische Lösung zum Zeitpunkt $t = 10$ berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 0.5$ (links) und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$ (rechts)

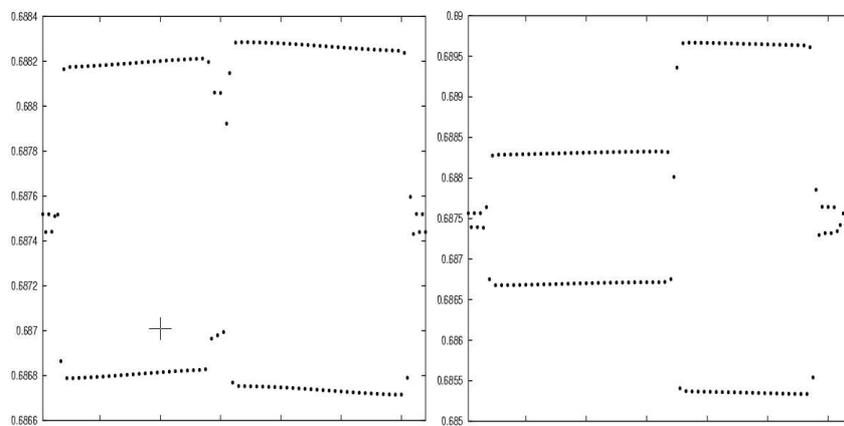


Abbildung 6.8: Numerische Lösung (Vergrößerung) zum Zeitpunkt $t = 10$ berechnet mit ENO 3 und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 0.5$ (links) und Courantzahl $c = \frac{k}{h^2} = 1.0$ (rechts)

Anhang A

Laxscher Äquivalenzsatz

Banachräume. Als erstes werden einige Grundlagen über Banachräume wiederholt. Die Beweise der Sätze findet man zum Beispiel in [6].

Sei X ein Vektorraum über einem skalaren Körper und sei $\|\cdot\| : X \rightarrow \mathbb{R}$ eine Norm auf X . Wir bezeichnen X mit $\|\cdot\|$ als normierten Raum.

Eine Folge $\{u_n\}$ in einem normierten Raum konvergiert gegen den Grenzwert $u \in X$ wenn $\lim_{n \rightarrow \infty} \|u_n - u\| = 0$. In diesem Fall schreiben wir $u_n \rightarrow u$. Eine Folge $\{u_n\}$ in einem normierten Raum heißt Cauchy Folge wenn $\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|u_m - u_n\| = 0$. Ein normierter Raum, indem alle Cauchy Folgen konvergieren heißt vollständiger normierter Raum oder Banachraum.

Satz A.1 Eine Teilmenge D eines Banachraums X ist vollständig (also auch ein Banachraum) dann und nur dann wenn D in X abgeschlossen ist.

Seien X und Y zwei Banachräume, und $D \subset X$. Sei T ein Operator der auf D definiert ist und dessen Bild in Y enthalten ist, $T : D \subset X \rightarrow Y$. T ist linear wenn D ein Teilraum von X ist und

$$\begin{aligned} T(u+v) &= Tu + Tv \\ T(\alpha u) &= \alpha Tu \end{aligned}$$

für alle $u, v \in D$ und Skalare α gilt. Ein linearer Operator heißt beschränkt, wenn es eine Konstante K gibt, sodass

$$\|Tu\| \leq K\|u\| \tag{A.1}$$

für alle $u \in D$. Beachte, dass die Normen auf X und Y verschieden sein können, dies wird aber nicht gekennzeichnet.

Sei $T : D \subset X \rightarrow Y$ ein beschränkter linearer Operator. Das Infimum der Menge aller oberen Schranken heißt die Norm von T und wird mit $\|T\|$ bezeichnet. Es gilt

$$\|T\| = \sup_{u \neq 0} \frac{\|Tu\|}{\|u\|} = \sup_{\|u\|=1} \|Tu\|$$

Eine Familie Γ von linearen Operatoren $T : X \rightarrow Y$ heißt gleichmäßig beschränkt wenn es eine Konstante K gibt, sodass (A.1) für alle $T \in \Gamma$ und $u \in X$ hält.

Satz A.2 (Banach-Steinhaus). Eine Familie Γ von beschränkten linearen Operatoren von einem Banachraum X in sich selbst ist gleichmäßig beschränkt wenn für jedes $u \in X$ die Menge der Normen

$$S = \{\|Tu\| \mid T \in \Gamma\}$$

beschränkt ist.

Banachraum Formulierung des Anfangswertproblems. Sei X ein Banachraum mit Norm $\|\cdot\|$, und sei $A : Y \subset X \rightarrow X$ ein linearer Operator. Eine echte Lösung $u(t)$ des abstrakten Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} &= Au(t), & 0 \leq t \leq T \\ u(0) &= u_0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

ist eine einparametrische Familie von Elementen $u(t) \in Y$, für die $u(0) = u_0$ und

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\| \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} - Au(t) \right\| = 0, \quad 0 \leq t \leq T \quad (\text{A.3})$$

Es empfiehlt sich $u(t)$ für jedes t als Element eines Funktionenraums der Variable x , und A als linearen Differentialoperator (unabhängig von t) vorzustellen.

Sei $D \subset Y$ ein Unterraum von Anfangsbedingungen u_0 sodass das Problem (A.2) eine eindeutige echte Lösung hat. Für jedes feste t , heißt $E_0(t) : D \rightarrow X$, $E_0(t)u_0 = u(t)$ echter Lösungsoperator. $E_0(t)$ ist ein linearer Operator.

Problem (A.2) heißt sachgemäß gestellt (auf X), wenn

1. es einen Unterraum D von Anfangsbedingungen gibt, der in X dicht ist, und
2. die dazugehörige Familie von echten Lösungsoperatoren $E_0(t)$, $0 \leq t \leq T$ gleichmäßig beschränkt ist.

Wenn $u(t)$ und $v(t)$ zwei echte Lösungen zu den Anfangsbedingungen u_0 und v_0 sind, und wenn das Problem sachgemäß gestellt ist, dann folgt aus 2 die Existenz einer Konstanten K sodass für alle $0 \leq t \leq T$

$$\|u(t) - v(t)\| = \|E_0(t)(u_0 - v_0)\| \leq K\|u_0 - v_0\|$$

gilt Die Lösung hängt also stetig von der Anfangsbedingung ab.

Satz A.3 Die echte Lösung $u(t) = E(t)u_0$, $u_0 \in X$ ist stetig auf dem Intervall $[0, T]$.

Beweis. Sei $t \in [0, T]$ fest und $\{u_{0n}\}$ eine Folge in D mit $u_{0n} \rightarrow u_0$. Wenn $s \in [0, T]$, dann gilt

$$\begin{aligned} \|u(s) - u(t)\| &= \|E(s) - E(t)u_0\| \\ &\leq \|E(s)(u_0 - u_{0n})\| + \|(E(s) - E(t))u_{0n}\| + \|E(t)(u_{0n} - u_0)\| \end{aligned}$$

Da (A.2) sachgemäß gestellt ist, erhalten wir

$$\|u(s) - u(t)\| \leq 2K\|u_0 - u_{0n}\| + \|u_n(s) - u_n(t)\|$$

wobei K eine Konstante ist und $u_n(t) = E(t)u_{0n}$ die echte Lösung zu u_{0n} ist. Gemäß (A.3) existiert ein $\eta_n \in X$ mit $\lim_{s \rightarrow t} \|\eta_n\| = 0$ und

$$\|u_n(s) - u_n(t)\| \leq |s - t| [\|Au_n(t)\| + \|\eta_n\|]$$

Fasst man die beiden letzten Gleichungen zusammen, erhält man

$$\|u(s) - u(t)\| \leq 2K\|u_0 - u_{0n}\| + |s - t| [\|Au_n(t)\| + \|\eta_n\|]$$

Sei $\epsilon > 0$ gegeben. Wir wählen n so groß, dass der erste Term auf der rechten Seite kleiner $\epsilon/2$ ist. Wir können dann δ so wählen, dass der zweite Term ebenfalls nicht größer als $\epsilon/2$ ist, wenn $|s - t| \leq \delta$.

□

Der folgende Satz zeigt die sogenannte Halbgruppeneigenschaft von $E(t)$.

Satz A.4 Für alle $s, t, s + t$ in $[0, T]$ gilt

$$E(s + t) = E(s)E(t) \quad (\text{A.4})$$

Beweis. Sei $u_0 \in X$. Dann existiert eine Folge $\{u_{0n}\}$ in D mit $u_{0n} \rightarrow u_0$. Sei t fest und $u_n(t) = E(t)u_{0n}$. Wir setzen $v_n(s) = u_n(s + t)$. Offensichtlich ist $v_n(s)$ die echte Lösung von (A.2) im Intervall $[0, T - t]$ mit der Anfangsbedingung $u_n(t)$. Folglich ist $v_n(s) = E(s)u_n(t)$. Also

$$E(s + t)u_{0n} = u_n(s + t) = v_n(s) = E(s)u_n(t) = E(s)E(t)u_{0n}$$

Daher gilt

$$\begin{aligned} \|E(s + t)u_0 - E(s)E(t)u_0\| &\leq \|E(s + t)(u_0 - u_{0n})\| + \|E(s + t)u_{0n} - E(s)E(t)u_{0n}\| \\ &\quad + \|E(s)E(t)(u_{0n} - u_0)\| \\ &\leq \|E(s + t)\| \|u_0 - u_{0n}\| + \|E(s)E(t)\| \|u_{0n} - u_0\| \\ &\leq (K + K^2) \|u_0 - u_{0n}\| \end{aligned}$$

Wenn $n \rightarrow \infty$, erhält man die gewünschte Aussage. □

Differenzenverfahren. Wir wollen das Anfangswertproblem mit Hilfe eines Differenzenverfahrens M_D numerisch lösen. Ein Differenzenverfahren ist eine einparametrische Familie von gleichmäßig beschränkten linearen Operatoren

$$C(\Delta t) : X \rightarrow X, \quad 0 < \Delta t \leq \Delta t_0$$

Die Näherungslösung von (A.2) bezeichnen wir mit $u(\cdot, t)$. Sie genügt der Differenzengleichung

$$u(\cdot, t + \Delta t) = C(\Delta t)u(\cdot, t)$$

Der Operator $C(\Delta t)$ soll den echten Lösungsoperator $E(\Delta t)$ approximieren. Ein Differenzenverfahren M_D ist konsistent (mit dem Anfangswertproblem (A.2)) wenn es einen dichten Teilraum D_C von X gibt, sodass für alle $u_0 \in D_C$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\| \frac{[C(\Delta t) - E(\Delta t)]E(t)u_0}{\Delta t} \right\| = 0, \quad 0 \leq t \leq T$$

gilt. Die Größe

$$\tau \equiv \frac{1}{\Delta t} [C(\Delta t) - E(\Delta t)]E(t)u_0, \quad u_0 \in D_C$$

heißt lokaler Diskretisierungsfehler. Das Verfahren M_D ist von der Ordnung p , wenn $\|\tau\| = O((\Delta t)^p)$ bei $\Delta t \rightarrow 0$ für ein $p \geq 0$.

Ein Differenzenverfahren M_D heißt konvergent bezüglich des Anfangswertproblems wenn für jedes feste $t \in [0, T]$ und $u_0 \in X$

$$\lim_{\Delta t_j \rightarrow 0} \|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| = 0$$

gilt, wobei $\{n_j\}$ eine Folge von ganzen Zahlen und $\{t_j\}$ eine Folge von Zeitschritten ist, sodass $\lim_{j \rightarrow \infty} n_j \Delta t_j = t$.

Ein Differenzenverfahren M_D heißt stabil, wenn die Familie von Operatoren

$$\Gamma = \{C^n(\Delta t) \mid 0 < \Delta t \leq \Delta t_0, 0 \leq n \Delta t \leq T\}$$

gleichmäßig beschränkt ist.

Konsistenz und Konvergenz hängen vom Anfangswertproblem ab, während Stabilität eine Eigenschaft des Differenzenverfahrens M_D ist.

Laxscher Äquivalenzsatz. Der Laxsche Äquivalenzsatz verbindet die drei Konzepte Konsistenz, Konvergenz und Stabilität.

Satz A.5 (Lax). Gegeben sei ein sachgemäß gestelltes Anfangswertproblem (A.2) und ein konsistentes Differenzenverfahren M_D . Dann ist Stabilität hinreichend und notwendig für Konvergenz.

Beweis. Angenommen M_D ist konvergent. Da alle $C^n(\Delta t) \in \Gamma$ beschränkt sind, folgt die Stabilität aus Satz A.2, wenn wir zeigen können, dass für jedes $u_0 \in X$ die Menge

$$S \equiv \{\|C^n(\Delta t)u_0\| \mid 0 \leq \Delta t \leq \Delta t_0, 0 \leq n \Delta t \leq T\}$$

beschränkt ist. Der Beweis ist indirekt. Wäre S nicht beschränkt, dann gibt es Folgen $\{n_j\}$ und $\{\Delta t_j\}$ sodass

$$0 \leq \Delta t_j \leq \Delta t_0, \quad 0 \leq n_j \Delta t_j \leq T \quad \text{und} \quad \|C^{n_j}(\Delta t_j)u_0\| \rightarrow \infty \quad \text{wenn} \quad j \rightarrow \infty$$

Durch die Wahl von passenden Teilfolgen (wenn nötig) erhält man ohne Beschränkung der Allgemeinheit

$$\Delta t_j \rightarrow a \quad \text{und} \quad n_j \Delta t_j \rightarrow t$$

wobei $0 \leq a \leq \Delta t_0$ und $0 \leq t \leq T$. Wenn $a \neq 0$, folgt $n_j \rightarrow t/a$ und die Folge $\{n_j\}$ ist beschränkt. Aber aus der Ungleichung

$$\|C^{n_j}(\Delta t_j)u_0\| \leq \|C(\Delta t_j)^{n_j}u_0\|$$

folgt, dass $\|C(\Delta t_j)\|^{n_j} \rightarrow \infty$. Daher $\|C(\Delta t)\| \rightarrow \infty$, was der Definition von M_D widerspricht. Wir schließen dass $\Delta t_j \rightarrow 0$. Nun wenden wir die Annahme dass M_D konvergent ist an, um die Existenz einer Konstanten K abzuleiten sodass

$$\|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| \leq K, \quad j = 1, 2, \dots$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \|C^{n_j}(\Delta t_j)u_0\| &\leq \|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| \\ &\leq K + \|E(t)u_0\| \end{aligned}$$

Dies widerspricht der Annahme dass $\|C^{n_j}(\Delta t_j)\| \rightarrow \infty$. Damit ist gezeigt dass S beschränkt ist, und daher M_D stabil ist.

Angenommen M_D ist stabil. Sei $u_0 \in D_C$. Wähle $\{\Delta t_j\}$, $\{n_j\}$ und $t \in [0, T]$ sodass $\Delta t_j \rightarrow 0$ und $n_j \Delta t_j \rightarrow t$ wenn $j \rightarrow \infty$. Betrachte die Größe

$$V_j \equiv [C^{n_j}(\Delta t_j) - E(n_j \Delta t_j)]u_0$$

Unter Verwendung der Halbgruppeneigenschaft von $E(t)$ kann man dies umschreiben zu

$$V_j \equiv [C^{n_j}(\Delta t_j) - E^{n_j}(\Delta t_j)]u_0$$

Verwendet man die Identität

$$\begin{aligned} C^{n_j} - E^{n_j} &= (C^{n_j} - C^{n_j-1}E) + (C^{n_j-1}E - C^{n_j-2}E^2) + \dots + (CE^{n_j-1} - E^{n_j}) \\ &= C^{n_j-1}(C - E) + C^{n_j-2}(C - E)E + \dots + (C - E)E^{n_j-1} \end{aligned}$$

erhält man

$$\begin{aligned} V_j &= \sum_{k=0}^{n_j-1} C^k(\Delta t_j)[C(\Delta t_j) - E(\Delta t_j)]E^{n_j-1-k}(\Delta t_j)u_0 \\ &= \sum_{k=0}^{n_j-1} C^k(\Delta t_j)[C(\Delta t_j) - E(\Delta t_j)]E((n_j - 1 - k) \Delta t_j)u_0 \end{aligned}$$

Da M_D stabil ist, existiert eine Konstante K sodass

$$\|V_j\| \leq \sum_{k=0}^{n_j-1} \left\| \frac{C(\Delta t_j) - E(\Delta t_j)}{\Delta t_j} E((n_j - 1 - k) \Delta t_j) u_0 \right\| \Delta t_j$$

Da M_D auch konsistent ist, existiert ein $\epsilon > 0$ sodass

$$\left\| \frac{C(\Delta t_j) - E(\Delta t_j)}{\Delta t_j} E((n_j - 1 - k) \Delta t_j) u_0 \right\| \leq \epsilon$$

für genügend große j . Für solche j gilt $\|V_j\| \leq K \epsilon n_j \Delta t_j \leq KT \epsilon$. Das heißt $\|V_j\| \rightarrow 0$ wenn $j \rightarrow \infty$. Wir sehen nun, dass

$$\begin{aligned} \|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| &\leq \|V_j\| + \|[E(n_j \Delta t_j) - E(t)]u_0\| \\ &= \|V_j\| + \|u(n_j \Delta t_j) - u(t)\| \end{aligned}$$

wobei $u(t) = E(t)u_0$. Da nach Satz A.3 $u(t)$ im Intervall $[0, T]$ stetig ist, folgt aus der obigen Ungleichung, dass M_D auf der Menge U_C stetig ist.

Um die Konvergenz auf ganz X auszuweiten, wählen wir für $u_0 \in X$ eine Folge $\{u_{0k}\}$ in D_C sodass $u_{0k} \rightarrow u_0$. Also ist

$$\begin{aligned} \|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| &\leq \|[C^{n_j}(\Delta t_j)(u_0 - u_{0k})]\| + \|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_{0k}\| \\ &\quad + \|[E(t)(u_{0k} - u_0)]\| \end{aligned}$$

Da M_D stabil ist und das Problem sachgemäß gestellt ist, sind $\|[C^{n_j}(\Delta t_j)]\|$ und $\|[E(t)]\|$ beschränkt durch eine Konstante K . Für $\epsilon > 0$ können wir ein genügend großes k wählen, sodass

$$\|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| \leq 2K\epsilon + \|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_{0k}\|$$

Für alle genügend kleinen Δt_j erhalten wir

$$\|[C^{n_j}(\Delta t_j) - E(t)]u_0\| \leq (2K + 1)\epsilon$$

□

Anhang B

Source Code

```
module globals
  implicit none
  double precision, allocatable :: u(:), x(:), u_old(:), u_x(:), u_aux(:), u_xx(:)
  double precision, allocatable :: f_hat(:), numerical_flux(:)
  double precision, parameter :: pi=3.1415927
  real :: a, b, n_intv, n_intv_1, len_intv
  integer :: n !number of gridpoints
  real :: courant_number, delta_t, delta_x, time, t_max
  real :: first_put_out, t_put_out, next_put_out
  integer :: margin
  integer :: output=81, input=80
  logical :: first_time=.true., l_put_out=.false.
  integer :: method, eno_order, rk_method, n_stages, stage, which_eno
  integer :: i, j, k, l, m !counter
  real :: time1, time2

  !ENO-reconstruction coefficients c_rj for the cell I_i with r cells to the left
  !and s cells to the right, such that r+s+1=eno_order
  real, dimension(-1:0,0:0) :: c1
  real, dimension(-1:1,0:1) :: c2
  real, dimension(-1:2,0:2) :: c3
  real, dimension(-1:3,0:3) :: c4
  real, dimension(-1:4,0:4) :: c5
end module globals

program diffusion_equation
  !This program computes numerical solutions to the diffusion equation
  !using ENO-Methods
  use globals

  call init ()

  call eno_init ()

  call init_data ()

  call calculation ()

  call final_put_out ()

  call exact_solution ()

end program diffusion_equation

subroutine init ()
  use globals
  implicit none

  open(unit=input, file='input.a')
  read(input, *) a
  read(input, *) b
  read(input, *) n
  read(input, *) margin
  read(input, *) courant_number
  read(input, *) t_max
  read(input, *) eno_order
  read(input, *) which_eno
  read(input, *) rk_method
  read(input, *) method
  read(input, *) first_put_out
  if (first_put_out .ge. 0.) read(input, *) t_put_out
  close(input)

  allocate(x(1:n))
  allocate(u(1:n))
  allocate(u_old(1:n))
  allocate(u_x(1:n))
  allocate(u_xx(1:n))
  allocate(f_hat(0:n))
  allocate(u_aux(1:n))

  !periodic boundary conditions
  !# of cells for the physical range: n-2*margin
  !length of interval: (b-a)/(n-2*margin)
  !# of cells: n, # of gridpoints: n
  !a=len_intv*margin; b=b+len_intv*margin
  !x(i)=a+(i-0.5)*len_intv

  len_intv=(b-a)/(n-2*margin)
  a=len_intv*margin
```

```

b=b*len_intv*margin
n_intv=n

do i=1,n
  x(i)=a+(i-0.5)*len_intv
enddo
delta_x=len_intv
if (margin .lt. eno_order) then
  write(*,*) 'margin lower than eno-order'
  write(*,*) 'stop'
  stop
endif

if (first_put_out .ge. 0.) then
  l_put_out=.true.
  next_put_out=first_put_out
endif

write(*,*) "Numerical solution of the DIFFUSION EQUATION"
write(*,*) "calculated with ENO methods"
write(*,*) ""

delta_t=courant_number*delta_x**2
write(*,*) "delta_x = ", delta_x
write(*,*) "delta_t = ", delta_t
write(*,*) "courant number (delta_t/delta_x^2) = ", courant_number

if (rk_method .eq. 1) then
  n_stages=1
elseif (rk_method .eq. 2) then
  n_stages=2
elseif (rk_method .eq. 3) then
  n_stages=3
else
  write(*,*) 'wrong input for rk_method: expected 1 or 2 or 3'
  write(*,*) 'stop'
  stop
endif

end subroutine init

subroutine init_data ()
use globals
implicit none

! do i=1,n/3
!   u(i)=0.4
! enddo
! do i=n/3+1,n-n/3
!   u(i)=1.2
! enddo
! do i=n-n/3+1,n
!   u(i)=0.4
! enddo

do i=1,n
  u(i)=cos(x(i))
enddo

end subroutine init_data

subroutine calculation ()
use globals
implicit none
double precision,dimension(1:n-1) :: du
double precision,dimension(1:n-2) :: ddu
double precision,dimension(1:n-3) :: dddu
double precision,dimension(1:n-4) :: ddddu
double precision,dimension(0:n) :: cb_value
real :: time_to_stop=1.,time_step=1.

call CPU_TIME(time1)

do time=0,t_max,delta_t

  u(1:margin)=u(n-margin-margin+1:n-margin) !periodic boundary conditions
  u(n-margin+1:n)=u(margin+1:margin+margin) ! - " -

  if (method .eq. 1) then

    u_old=u
    u_aux=u

!   if (time .ge. time_to_stop) then !for debugging purpose
!     time_to_stop=time_to_stop+time_step
!   endif

    do stage=1,n_stages

!calculate the derivative u_x
      u_x(1)=(u_aux(2)-u_aux(n-2*margin))/(2*delta_x)
      do i=2,n-1
        u_x(i)=(u_aux(i+1)-u_aux(i-1))/(2*delta_x)
      enddo
      u_x(n)=(u_aux(2*margin+1)-u_aux(n-1))/(2*delta_x)

!calculate -u_x at the cell boundaries
      call eno(-u_x)

      if (stage .eq. 1 .and. rk_method .eq. 1) then
        do j=1,n
          u(j)=u_old(j)-delta_t/delta_x*(f_hat(j)-f_hat(j-1))
        enddo
      endif
      if (stage .eq. 1 .and. rk_method .ne. 1) then
        do j=1,n
          u_aux(j)=u_old(j)-delta_t/delta_x*(f_hat(j)-f_hat(j-1))
        enddo
      endif
    enddo
  enddo
enddo

```

```

endif
if (stage .eq. 2 .and. rk_method .eq. 2) then
  do j=1,n
    u(j)=0.5*u_old(j)+0.5*u_aux(j)-0.5*delta_t/delta_x*(f_hat(j)-f_hat(j-1))
  enddo
endif
if (stage .eq. 2 .and. rk_method .eq. 3) then
  do j=1,n
    u_aux(j)=0.75*u_old(j)+0.25*u_aux(j)-0.25*delta_t/delta_x*(f_hat(j)-f_hat(j-1))
  enddo
endif
if (stage .eq. 3 .and. rk_method .eq. 3) then
  do j=1,n
    u(j)=1./3.*u_old(j)+2./3.*u_aux(j)-2./3.*delta_t/delta_x*(f_hat(j)-f_hat(j-1))
  enddo
endif
enddo

endif

endif

if (method .eq. 2) then
!natural discretisation
u_old=u
u(1)=u_old(1)+delta_t/(delta_x**2) *(u_old(1)-2*u_old(2)+u_old(3))
do i=2,n-1
  u(i)=u_old(i)+delta_t/(delta_x**2) *(u_old(i-1)-2*u_old(i)+u_old(i+1))
enddo
u(n)=u_old(n)+delta_t/(delta_x**2) *(u_old(n-2)-2*u_old(n-1)+u_old(n))
endif

if (l_put_out .and. time .ge. next_put_out) then
  call put_out ()
  next_put_out=next_put_out+t_put_out
endif

enddo !time

call CPU_TIME(time2)

end subroutine calculation

subroutine eno_init ()
use globals
implicit none

c1(-1,0)=1.
c1(0,0)=1.
c2(-1,0)=3./2.
c2(-1,1)=-1./2.
c2(0,0)=1./2.
c2(0,1)=1./2.
c2(1,0)=-1./2.
c2(1,1)=3./2.
c3(-1,0)=11./6.
c3(-1,1)=-7./6.
c3(-1,2)=1./3.
c3(0,0)=1./3.
c3(0,1)=5./6.
c3(0,2)=-1./6.
c3(1,0)=-1./6.
c3(1,1)=5./6.
c3(1,2)=1./3.
c3(2,0)=1./3.
c3(2,1)=-7./6.
c3(2,2)=11./6.
c4(-1,0)=25./12.
c4(-1,1)=-23./12.
c4(-1,2)=13./12.
c4(-1,3)=-1./4.
c4(0,0)=1./4.
c4(0,1)=13./12.
c4(0,2)=-5./12.
c4(0,3)=1./12.
c4(1,0)=-1./12.
c4(1,1)=7./12.
c4(1,2)=7./12.
c4(1,3)=-1./12.
c4(2,0)=1./12.
c4(2,1)=-5./12.
c4(2,2)=13./12.
c4(2,3)=1./4.
c4(3,0)=-1./4.
c4(3,1)=13./12.
c4(3,2)=-23./12.
c4(3,3)=25./12.
c5(-1,0)=137./60.
c5(-1,1)=-163./60.
c5(-1,2)=137./60.
c5(-1,3)=-21./20.
c5(-1,4)=1./5.
c5(0,0)=1./5.
c5(0,1)=77./60.
c5(0,2)=-43./60.
c5(0,3)=17./60.
c5(0,4)=-1./20.
c5(1,0)=-1./20.
c5(1,1)=9./20.
c5(1,2)=47./60.
c5(1,3)=-13./60.
c5(1,4)=1./30.
c5(2,0)=1./30.
c5(2,1)=-13./60.
c5(2,2)=47./60.
c5(2,3)=9./20.
c5(2,4)=-1./20.
c5(3,0)=-1./20.
c5(3,1)=17./60.
c5(3,2)=-43./60.
c5(3,3)=77./60.
c5(3,4)=1./5.

```

```

c5(4,0)=1./5.
c5(4,1)=-21./20.
c5(4,2)=137./60.
c5(4,3)=-163./60.
c5(4,4)=137./60.
end subroutine eno_init

subroutine eno (v) !v_i...cell-averages
use globals
implicit none
double precision,dimension(1:n) :: v,v_bd_minus,v_bd_plus,flux1,flux2,x_plus_half,x_minus_half,v_center
double precision,dimension(1:n,1:eno_order+1) :: w_bd_plus,w_bd_minus
double precision,dimension(1:eno_order+1) :: weight,beta,alpha
double precision,dimension(0:n) :: roe_speed
double precision,dimension(1:n,1:eno_order) :: div_diff !div_diff(i,m) m-th degree divided difference,
!with x_i as left most point/cell
integer,dimension(1:n) :: is,r !left-most point
double precision :: summe,this_x
integer :: leftmost,stencil_a,stencil_b

!Compute the divided difference table
div_diff=0.
!calculation of first order divided differences
do k=1,n
  div_diff(k,1)=v(k)
enddo
!calculation of the higher order divided differences
do j=2,eno_order
  do k=1,n-j+1
    div_diff(k,j)=(div_diff(k+1,j-1)-div_diff(k,j-1))/((j)*delta_x)
  enddo
enddo

if (which_eno .eq. 1) then
  !determining the stencil !is(j) is the left most cell in the stencil for cell j
  !r cells to the left, S(i)={I_i-r,...I_i,...I_i+s}
  if (eno_order .eq. 1) then
    do j=1,n-1
      is(j)=j
    enddo
  else
    do j=1,n-1
      is(j)=j
      do m=2,eno_order
        if (is(j) .eq. 1) then
          is(j)=1;exit
        endif
        if (abs(div_diff(is(j)-1,m)) .lt. abs(div_diff(is(j),m))) is(j)=is(j)-1
        if (is(j) .eq. n-m+1) then
          is(j)=n-eno_order+1;exit
        endif
      enddo
    enddo
  endif
  is(n)=n-eno_order+1

  do i=1,n
    x_plus_half(i)=x(i)+0.5*delta_x
    x_minus_half(i)=x(i)-0.5*delta_x
  enddo

  do i=1,n
    r(i)=i-is(i)
  enddo

  !calculation of the cell boundary value v_bd_minus(i) and v_bd_plus(i) in the i-th cell
  do i=1,n
    if (eno_order .eq. 1) then
      v_bd_minus(i)=c1(r(i),0)*v(i-r(i))
      v_bd_plus(i)=c1(r(i)-1,0)*v(i-r(i))
    endif
    if (eno_order .eq. 2) then
      v_bd_minus(i)=c2(r(i),0)*v(i-r(i))+c2(r(i),1)*v(i-r(i)+1)
      v_bd_plus(i)=c2(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c2(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)
    endif
    if (eno_order .eq. 3) then
      v_bd_minus(i)=c3(r(i),0)*v(i-r(i))+c3(r(i),1)*v(i-r(i)+1)+c3(r(i),2)*v(i-r(i)+2)
      v_bd_plus(i)=c3(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c3(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)+c3(r(i)-1,2)*v(i-r(i)+2)
    endif
    !
    ! this_x=x(i)
    ! v_center(i)=div_diff(is(i),1)+ &
    ! & div_diff(is(i),2)*((this_x-x_plus_half(is(i)))+(this_x-x_minus_half(is(i))))+ &
    ! & div_diff(is(i),3)*((this_x-x_plus_half(is(i)))+(this_x-x_plus_half(is(i)+1)))+ &
    ! & (this_x-x_minus_half(is(i)))+(this_x-x_plus_half(is(i)+1)))+ &
    ! & (this_x-x_minus_half(is(i)))+(this_x-x_plus_half(is(i)))
    !
    endif
    if (eno_order .eq. 4) then
      v_bd_minus(i)=c4(r(i),0)*v(i-r(i))+c4(r(i),1)*v(i-r(i)+1)+c4(r(i),2)*v(i-r(i)+2)+c4(r(i),3)*v(i-r(i)+3)
      v_bd_plus(i)=c4(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c4(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)+c4(r(i)-1,2)*v(i-r(i)+2)+c4(r(i)-1,3)*v(i-r(i)+3)
    endif
    if (eno_order .eq. 5) then
      v_bd_minus(i)=c5(r(i),0)*v(i-r(i))+c5(r(i),1)*v(i-r(i)+1)+c5(r(i),2)*v(i-r(i)+2)+c5(r(i),3)*v(i-r(i)+3)+c5(r(i),4)*v(i-r(i)+4)
      v_bd_plus(i)=c5(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c5(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)+c5(r(i)-1,2)*v(i-r(i)+2)+c5(r(i)-1,3)*v(i-r(i)+3)+c5(r(i)-1,4)*v(i-r(i)+4)
    endif
  enddo

  !calculation from reconstruction at cell boundaries
  !finite difference formulation
  f_hat(0)=v_bd_plus(1)
  f_hat(n)=v_bd_minus(n)
  do i=1,n-1
    f_hat(i)=0.5*(v_bd_plus(i+1)+v_bd_minus(i))
  enddo

  !
  ! calculation from reconstruction at cell centers
  ! f_hat(0)=v_center(1)
  ! do i=1,n-1
  !   f_hat(i)=0.5*(v_center(i+1)+v_center(i))
  ! enddo
  ! f_hat(n)=v_center(n)

```

```

endif

if (which_eno .eq. 2) then
do i=1,n
if (i .lt. n/2) then
stencil_a=0
stencil_b=min(i-1,eno_order-1)
elseif (i .ge. n/2) then
stencil_a=max(eno_order-1-n+i,0)
stencil_b=eno_order-1
endif

do j=stencil_a,stencil_b
r(i)=j

!calculation of the cell boundary values w_bd_plus(i,j+2)
if (eno_order .eq. 1) then
w_bd_minus(i,j+1)=c1(r(i),0)*v(i-r(i))
w_bd_plus(i,j+1)=c1(r(i)-1,0)*v(i-r(i))
endif
if (eno_order .eq. 2) then
w_bd_minus(i,j+1)=c2(r(i),0)*v(i-r(i))+c2(r(i),1)*v(i-r(i)+1)
w_bd_plus(i,j+1)=c2(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c2(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)
endif
if (eno_order .eq. 3) then
w_bd_minus(i,j+1)=c3(r(i),0)*v(i-r(i))+c3(r(i),1)*v(i-r(i)+1)+c3(r(i),2)*v(i-r(i)+2)
w_bd_plus(i,j+1)=c3(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c3(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)+c3(r(i)-1,2)*v(i-r(i)+2)
endif
if (eno_order .eq. 4) then
w_bd_minus(i,j+1)=c4(r(i),0)*v(i-r(i))+c4(r(i),1)*v(i-r(i)+1)+c4(r(i),2)*v(i-r(i)+2)+c4(r(i),3)*v(i-r(i)+3)
w_bd_plus(i,j+1)=c4(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c4(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)+c4(r(i)-1,2)*v(i-r(i)+2)+c4(r(i)-1,3)*v(i-r(i)+3)
endif
if (eno_order .eq. 5) then
w_bd_minus(i,j+1)=c5(r(i),0)*v(i-r(i))+c5(r(i),1)*v(i-r(i)+1)+c5(r(i),2)*v(i-r(i)+2)+c5(r(i),3)*v(i-r(i)+3)+c5(r(i),4)*v(i-r(i)+4)
w_bd_plus(i,j+1)=c5(r(i)-1,0)*v(i-r(i))+c5(r(i)-1,1)*v(i-r(i)+1)+c5(r(i)-1,2)*v(i-r(i)+2)+c5(r(i)-1,3)*v(i-r(i)+3)+c5(r(i)-1,4)*v(i-r(i)+4)
endif
enddo
enddo

do i=3,n-2
weight=0.
!calculation of the weights
if (i .lt. n/2) then
stencil_a=0
stencil_b=min(i-1,eno_order-1)
elseif (i .ge. n/2) then
stencil_a=max(eno_order-1-n+i,0)
stencil_b=eno_order-1
endif

!WENO-5 with smoothness indicators
alpha=0.
beta=0.
beta(1)=13./12.*(v(i)-2*v(i+1)+v(i+2))**2+1./4.*(3*v(i)-4*v(i+1)+v(i+2))**2
beta(2)=13./12.*(v(i-1)-2*v(i)+v(i+1))**2+1./4.*(v(i-1)+v(i+1))**2
beta(3)=13./12.*(v(i-2)-2*v(i-1)+v(i))**2+1./4.*(v(i-2)-4*v(i-1)+3*v(i))**2
weight(1)=3./10.
weight(2)=3./5.
weight(3)=1./10.
do j=1,eno_order
alpha(j)=weight(j)/(1.e-6+beta(j))**2
enddo
summe=sum(alpha)
do j=1,eno_order
weight(j)=alpha(j)/summe
enddo
v_bd_minus(i)=0.
do j=1,eno_order
v_bd_minus(i)=v_bd_minus(i)+weight(j)*w_bd_minus(i,j)
enddo
weight(1)=1./10.
weight(2)=3./5.
weight(3)=3./10.
do j=1,eno_order
alpha(j)=weight(j)/(1.e-6+beta(j))**2
enddo
summe=sum(alpha)
do j=1,eno_order
weight(j)=alpha(j)/summe
enddo
v_bd_plus(i)=0.
do j=1,eno_order
v_bd_plus(i)=v_bd_plus(i)+weight(j)*w_bd_plus(i,j)
enddo

! !WENO-5 without smoothness indicators
! alpha=0.
! beta=0.
! weight(1)=3./10.
! weight(2)=3./5.
! weight(3)=1./10.
! v_bd_minus(i)=0.
! do j=1,eno_order
! v_bd_minus(i)=v_bd_minus(i)+weight(j)*w_bd_minus(i,j)
! aux=1
! enddo
! weight(1)=1./10.
! weight(2)=3./5.
! weight(3)=3./10.
! v_bd_plus(i)=0.
! do j=1,eno_order
! v_bd_plus(i)=v_bd_plus(i)+weight(j)*w_bd_plus(i,j)
! enddo

enddo

!finite difference formulation
f_hat(0)=v_bd_plus(1)
f_hat(n)=v_bd_minus(n)
do i=1,n-1

```

```

        f_hat(i)=0.5*(v_bd_plus(i+1)+v_bd_minus(i))
    enddo

endif

if (which_eno .eq. 3) then !fixed stencil approximation

! !2.Ordnung
! f_hat(0)=v(1)
! do i=1,n-1
!     f_hat(i)=0.5*v(i)+0.5*v(i+1)
! enddo
! f_hat(n)=v(n)

!4. Ordnung
f_hat(0)=v(1)
f_hat(1)=0.5*v(1)+0.5*v(2)
do i=2,n-2
    f_hat(i)=-1./12.*v(i-1)+7./12.*v(i)+7./12.*v(i+1)-1./12.*v(i+2)
enddo
f_hat(n-1)=0.5*v(n-1)+0.5*v(n)
f_hat(n)=v(n)

! !6.Ordnung
! f_hat(0)=v(1)
! f_hat(1)=0.5*v(1)+0.5*v(2)
! f_hat(2)=-1./12.*v(1)+7./12.*v(2)+7./12.*v(3)-1./12.*v(4)
! do i=3,n-3
!     f_hat(i)=1./60.*v(i-2)-2./15.*v(i-1)+37./60.*v(i)+37./60.*v(i+1)-2./15.*v(i+2)+1./60*v(i+3)
! enddo
! f_hat(n-2)=-1./12.*v(n-3)+7./12.*v(n-2)+7./12.*v(n-1)-1./12.*v(n)
! f_hat(n-1)=0.5*v(n-1)+0.5*v(n)
! f_hat(n)=v(n)

endif

end subroutine eno

subroutine final_put_out ()
use globals
implicit none

open(unit=output,file='output.plt',form='formatted',position='rewind',status='unknown')
do i=margin+1,n-margin
    write(output,*) i-margin,u(i)
enddo
close(output)

open(unit=output,file='time.txt',form='formatted',position='rewind',status='unknown')
write(output,*) "Der Algorithmus benötigte ", time2-time1, " Sekunden"
close(output)

end subroutine final_put_out

subroutine exact_solution
use globals
implicit none
integer :: output_exact=85,output_fehler=86
double precision, dimension(1:n) :: exact,fehler
open(unit=output_exact,file='exact_solution.plt',form='formatted',position='rewind',status='unknown')
open(unit=output_fehler,file='fehler.plt',form='formatted',position='rewind',status='unknown')
exact=0.
do i=margin+1,n-margin
    exact(i)=exp(-t_max)*cos(x(i))
enddo
do i=margin+1,n-margin
    fehler(i)=u(i)-exact(i)
enddo
do i=margin+1,n-margin
    write(output_exact,*) i-margin,exact(i)
enddo
do i=margin+1,n-margin
    write(output_fehler,*) i-margin,fehler(i)
enddo
close(output_exact)
close(output_fehler)
end subroutine exact_solution

subroutine put_out ()
use globals
implicit none
integer :: output_aux=86
character(len=16) :: filename
character(len=8) :: digit_string

! write(digit_string,FMT='(F8.2)') time
write(digit_string,FMT='(F8.4)') time
filename="u_t" // trim(digit_string) // ".plt"
open(unit=output_aux,file=filename,form='formatted',position='rewind',status='unknown')
do i=margin+1,n-margin
    write(output_aux,*) i-margin,u(i)
enddo
close(output_aux)
end subroutine put_out

```

Literaturverzeichnis

- [1] L.C. Evans, Partial Differential Equations, American Mathematical Society, 1998
- [2] C.A. Hall und T.A. Porsching, Numerical Analysis of Partial Differential Equations, Prentice-Hall, 1990
- [3] A. Harten, S. Osher, B. Engquist und S. Chakravarthy, Some results on uniformly high order accurate non-oscillatory schemes, Applied Numerical Mathematics, v2 (1986), pp.347-377
- [4] A. Harten, B. Engquist, S. Osher und S. Chakravarthy, Uniform High Order Accurate Essentially Non-oscillatory Schemes III, Journal of Computational Physics, v71(1987), pp.231-303
- [5] G.-S. Jiang und C.-W. Shu, Efficient Implementation of Weighted ENO schemes, Journal of Computational Physics, v126 (1996), pp.202-228
- [6] E. Kreyszig, Introductory Functional Analysis with Applications, Wiley, 1978
- [7] Peter D. Lax, Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical theory of Shock Waves, Society of Industrial and Applied Mathematics, 1973
- [8] Randall J. LeVeque, Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods for Astrophysical Fluid Flow, 27th Saas-Fee Advanced Course Lecture Notes, Springer-Verlag, 1998
- [9] X.-D. Liu, S. Osher und T. Chan, Weighted essentially nonoscillatory schemes, Journal of Computational Physics, v115 (1994), pp.200-212
- [10] A. Neumaier, Introduction to Numerical Analysis, Cambridge 2001
- [11] Chi-Wang Shu, Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws, ICASE Report No. 97-65, 1997
- [12] C.-W Shu und S. Osher, Efficient Implementation of Essentially Non-oscillatory Shock-Capturing Schemes, Journal of Computational Physics, v77(1988), pp.439-471

Lebenslauf

Name Christof Obertscheider
Geboren 31. Juli 1978 in Lienz / Osttirol
Nationalität Österreich
Vater Josef Obertscheider, technischer Angestellter
Mutter Martha Obertscheider, Angestellte
Bruder Stefan Obertscheider, Architekturstudent
Führerschein B
Fremdsprachen Englisch, Italienisch
Programmiersprachen Fortran90, Java, MPI

Ausbildung

Oktober 1984 - Juli 1988 Volksschule Ainet / Osttirol
Oktober 1988 - Juli 1996 BG/BRG Lienz, Matura mit ausgezeichnetem Erfolg
1994 Teilnahme am Landeswettbewerb der Österreichischen Mathematik-Olympiade
1996 Teilnahme am Italienisch-Fremdsprachen-Landeswettbewerb
Oktober 1996 - Mai 1997 Präsenzdienst
seit Oktober 1997 Studium Lehramt Mathematik und Physik
Studium Mathematik

Studierendenvertretung

seit Juni 1999 Mitglied der der AktionsGemeinschaft NaWi
seit Juli 1999 Studienrichtungsvertreter für Mathematik
seit November 1999 Mitglied der AktionsGemeinschaft
November 1999 - November 2001 Obmann der AktionsGemeinschaft NaWi
seit Juli 2001 Vorsitzender der Fakultätsvertretung NaWi

Sacherschließung