

Leon Jakobi

Numerik hyperbolischer partieller Differentialgleichungen

Der vorliegende Text dient als Einführung in die numerische Behandlung einer speziellen Klasse von partiellen Differentialgleichungen. Hyperbolische Probleme tauchen in der Anwendung z. B. zur Beschreibung von schwingenden Objekten (etwa die Saiten einer Gitarre) sowie in der Modellierung von Transportprozessen (etwa der Ausbreitung eines Schadstoffs im Boden) auf. Zusammen mit den elliptischen und parabolischen Formulierungen komplettieren sie die drei Grundtypen partieller Differentialgleichungen.

Die folgende Ausarbeitung ist im Zuge des Bachelorseminars *Angewandte Analysis* an der Universität Würzburg im Sommersemester 2023 unter Betreuung von Christian Klingenberg entstanden. Sie gibt die wesentlichen Inhalte des gleichnamigen Vortrags wieder, den der Autor am 4. Juli gehalten hat, geht an einigen Stellen allerdings mehr ins Detail. Als Vorlage diente primär Kapitel 10 im Buch [6] von LeVeque.¹

1. Die lineare Advektionsgleichung

Anstatt allgemeine hyperbolische Probleme zu betrachten, werden wir uns in diesem Vortrag nur auf eine konkrete hyperbolische partielle Differentialgleichung beschränken. Diese wird im Folgenden eingeführt, motiviert und diskutiert.

Zur Lösung der sogenannten *linearen Advektionsgleichung* suchen wir eine Funktion $u : [0, T] \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, die

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) &= 0 && \text{für alle } (t, x) \in [0, T] \times [0, 1], \\ u(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in [0, 1] \end{aligned} \tag{1.1}$$

genügt. Dabei sind $a, T > 0$ bekannte Konstanten und eine Funktion $u_0 : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ vorgegeben. Weiter bezeichnen wir $t \in [0, T]$ als *Zeit-* und $x \in [0, 1]$ als *Ortsvariable*. Die zweite Bedingung in (1.1) kann man dann als *Anfangsbedingung* zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ interpretieren.

Den physikalischen Ursprung der Advektion erläutern wir in folgendem Beispiel, aus dem insbesondere hervorgehen wird, wieso manche Autoren die Bezeichnung *Transportgleichung* vorziehen.

¹Mein Dank gilt Lea Demmler und Selina Kuch, die dieses Manuskript korrekturgelesen haben.

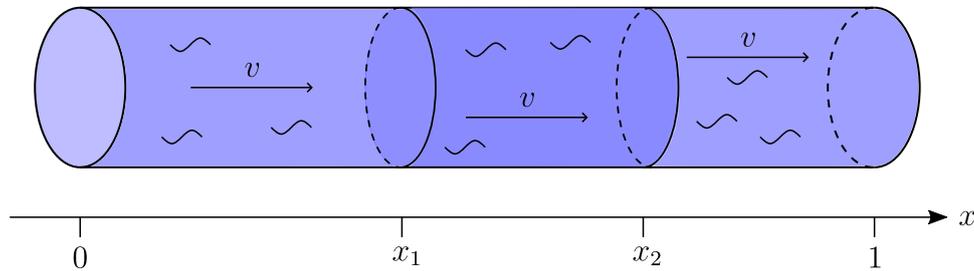
Beispiel 1.1 (Fluss in einem Rohr, [1, 7])

Sei $\varrho(t, x)$ die Dichte einer Substanz (etwa eine Chemikalie), die von einem Medium (etwa Wasser) umgeben ist, zum Zeitpunkt t am Ort x . Wir gehen davon aus, dass sich das Medium in einem Zylinder der Länge 1 befindet, was sich durch passende Wahl der Einheiten stets erreichen lässt. Weiterhin sei die Konzentration ϱ in jedem Querschnitt durch den Zylinder konstant (insbesondere ist $x \in [0, 1]$ also eindimensional).

Die zeitabhängige Masse der Substanz zwischen zwei festen Punkten $x_1, x_2 \in [0, 1]$ ist dann offenbar

$$\int_{x_1}^{x_2} \varrho(t, x) dx.$$

Diese kann sich ausschließlich durch zeitlichen Zu- oder Abfluss verändern, sofern die Substanz nicht zerstört wird (Massenerhaltung) und die Wände des Zylinders undurchlässig sind. Angenommen, das Medium bewege sich mit der konstanten Geschwindigkeit $v > 0$ in positive x -Richtung. Wir bezeichnen mit $\psi(t, x)$ den Fluss, der



angibt, wie viel Substanz zum Zeitpunkt t pro Zeit- und Flächeneinheit durch den Querschnitt an der Stelle x fließt. Im Spezialfall von konstanter Fließgeschwindigkeit v erhalten wir

$$\psi(t, x) = v \cdot \varrho(t, x).$$

Die zeitliche Änderung der Masse im Zylinderstück $[x_1, x_2]$ ist nach obiger Diskussion also nur vom Fluss am linken bzw. rechten Rand abhängig, also

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \varrho(t, x) dx = \overbrace{\psi(t, x_1)}^{\text{Zufluss}} - \overbrace{\psi(t, x_2)}^{\text{Abfluss}}.$$

Vorausgesetzt, ϱ und ψ sind hinreichend glatt (etwa stetig differenzierbar), liefert zunächst der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \varrho(t, x) dx = \int_{x_2}^{x_1} \frac{\partial \psi}{\partial x}(t, x) dx.$$

Äquivalent dazu ist

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \varrho}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial \psi}{\partial x}(t, x) dx = 0$$

(hier geht die Glattheit ein, um Differentiation und Integration zu vertauschen). Da dies nach Herleitung für alle $t \in [0, T]$ und $x_1, x_2 \in [0, 1]$ gültig ist, folgt daraus (etwa per Widerspruchsbeweis), dass ϱ der linearen Advektionsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t}(t, x) + v \frac{\partial \varrho}{\partial x}(t, x) = 0 \quad \text{für alle } (t, x) \in [0, T] \times [0, 1]$$

genügt. ◆

Aus der Anschauung dieses Beispiels würden wir erwarten, dass die Lösung u von (1.1) die gleichförmige Bewegung des Anfangsprofils $u_0(x)$ nach rechts ist. Dass dies für hinreichend gutartiges u_0 in der Tat so ist, besagt der folgende Satz.

Satz 1.2 (Charakterisierung der Lösung, [8])

Gegeben sei die lineare Advektionsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) &= 0 && \text{für alle } (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \\ u(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (1.2)$$

mit einer Konstante $a > 0$ und einer stetig differenzierbaren Funktion $u_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Dann gilt: (1.2) hat genau eine Lösung, nämlich

$$u(t, x) = u_0(x - at). \quad (1.3)$$

Beweis: Dass $u(t, x) := u_0(x - at)$ tatsächlich eine Lösung von (1.2) ist, erhält man sofort aus der Kettenregel, denn es gilt

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = -au_0'(x - at) \quad \text{und} \quad \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = u_0'(x - at),$$

indem man nachdifferenziert.

Sei nun $u(t, x)$ eine beliebige Lösung von (1.2). Wir führen neue Variablen

$$\tau := \tau(t, x) := t \quad \text{und} \quad \xi := \xi(t, x) := x - at$$

ein und definieren damit eine Funktion

$$v : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad v(\tau, \xi) := u(\tau, at + \xi) (= u(t, x)).$$

Die Kettenregel liefert für diese

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) &= \frac{\partial v}{\partial t}(t, x - at) \\ &= \frac{\partial v}{\partial \tau}(\tau, \xi) \cdot \frac{\partial \tau}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial v}{\partial \xi}(\tau, \xi) \cdot \frac{\partial \xi}{\partial t}(t, x) \\ &= \frac{\partial v}{\partial \tau}(\tau, \xi) - a \frac{\partial v}{\partial \xi}(\tau, \xi) \end{aligned}$$

und analog

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) &= \frac{\partial v}{\partial x}(t, x - at) \\ &= \frac{\partial v}{\partial \tau}(\tau, \xi) \cdot \frac{\partial \tau}{\partial x}(t, x) + \frac{\partial v}{\partial \xi}(\tau, \xi) \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x}(t, x) \\ &= \frac{\partial v}{\partial \xi}(\tau, \xi). \end{aligned}$$

Damit lässt sich eine Differentialgleichung für v formulieren:

$$\frac{\partial v}{\partial \tau}(\tau, \xi) = \frac{\partial v}{\partial \tau}(\tau, \xi) - a \frac{\partial v}{\partial \xi}(\tau, \xi) + a \frac{\partial v}{\partial \xi}(\tau, \xi) = \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \stackrel{(1.2)}{=} 0.$$

Integrieren wir diese Identität nun mit dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung, so folgt

$$v(\tau, \xi) - v(0, \xi) = \int_0^\tau \frac{\partial v}{\partial \theta}(\theta, \xi) d\theta = 0$$

und damit letztlich wie behauptet

$$u(t, x) = v(\tau, \xi) = v(0, \xi) = u(0, x - at) = u_0(x - at). \quad \blacksquare$$

Man beachte, dass im vorangegangenen Satz ein anderer Definitionsbereich als in (1.1) zugrunde gelegt wurde. Dieser Fall ist für die Theorie zwar besser geeignet, in der Praxis wird man für die Diskretisierung der Mengen allerdings deren Beschränktheit benötigen. Dann bedarf es neben dem Anfangswert noch einer zusätzlichen Bedingung, auf die wir im Abschnitt 2 noch zu sprechen kommen.

Um ein weiteres theoretisches Resultat festhalten zu können, benötigen wir noch den nachstehenden Begriff, der sich auch für allgemeinere Differentialgleichungen formulieren lässt und der speziell für die lineare Advektionsgleichung eine besonders einfache Form annimmt.

Definition 1.3 (Charakteristik, [8, 2])

Eine Kurve $\gamma : [0, T] \rightarrow [0, 1]$ heißt Charakteristik von (1.1) im Punkt $x_0 \in [0, 1]$, wenn sie dem Anfangswertproblem

$$\gamma'(t) = a, \quad t \in [0, T], \quad \gamma(0) = x_0 \quad (1.4)$$

genügt.

Die auch bei komplizierteren partiellen Differentialgleichungen erfüllte Eigenschaft der Charakteristiken, an der wir interessiert sind, ist, dass Lösungen entlang dieser konstant sind:

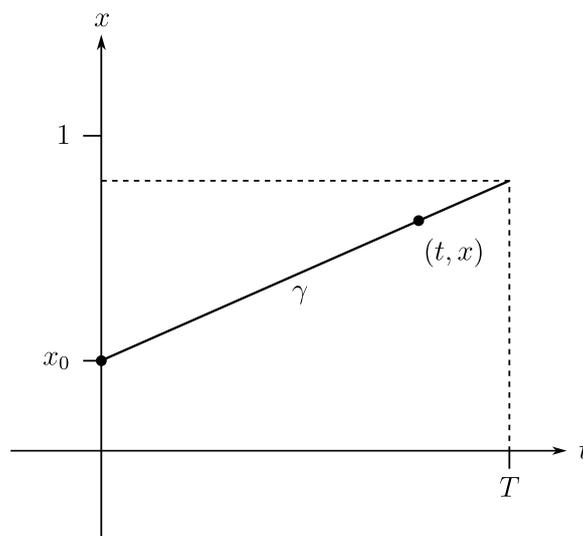


Abbildung 1: Eine (endliche) Charakteristik durch den Punkt (t, x) .

Satz 1.4 Sei $u : [0, T] \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ eine Lösung von (1.1) und $\gamma : [0, T] \rightarrow [0, 1]$ eine Charakteristik von (1.1) im Punkt $x_0 \in [0, 1]$. Dann ist $u(t, \gamma(t))$ konstant für alle $t \in [0, T]$ und es gilt

$$\gamma(t) = at + x_0,$$

d. h., γ ist eine (endliche) Gerade.

Beweis: Wir verwenden erneut die Kettenregel und erhalten für alle $t \in [0, T]$ damit

$$\frac{d}{dt}u(t, \gamma(t)) = \frac{\partial u}{\partial t}(t, \gamma(t)) \cdot 1 + \frac{\partial u}{\partial x}(t, \gamma(t)) \cdot \gamma'(t) \stackrel{(1.4)}{=} \frac{\partial u}{\partial t}(t, \gamma(t)) + a \frac{\partial u}{\partial x}(t, \gamma(t)) \stackrel{(1.1)}{=} 0.$$

Integration des Anfangswertproblems (1.4), das γ nach Voraussetzung erfüllt, ergibt dann noch

$$\gamma(t) = \int_0^t \gamma'(\tau) d\tau + \gamma(0) = at + x_0. \quad \blacksquare$$

Es sei darauf hingewiesen, dass man mit analoger Argumentation für die unbeschränkte Gleichung (1.2) echte (unendliche!) Geraden als Charakteristiken erhält, während wir im obigen Satz üblicherweise von Strecken sprechen würden. Bei komplizierteren Differentialgleichungen können die Charakteristiken dann auch komplizierter geformte Kurven sein.

Wir beschließen diesen Abschnitt mit einer kurzen Bemerkung dazu, wieso wir in diesem Vortrag nur die lineare Advektionsgleichung untersuchen.

Bemerkung 1.5 Für die Verwendung von (1.1) als Idealtyp einer hyperbolischen Gleichung gibt es im Wesentlichen zwei Gründe:

- (1) Durch ihre Einfachheit sind wir in der Lage, eine analytische Lösung anzugeben (vgl. Satz 1.2) und können die noch zu entwickelnden Verfahren dann daran messen. Wie wir sehen werden, treten viele typische Phänomene für hyperbolische Gleichungen bereits bei dieser sehr schlichten Form auf.
- (2) Durch leichte Abwandlung erhält man für die Praxis sehr wichtige lineare partielle Differentialgleichungen wie die Wellengleichung und nichtlineare Gleichungen wie die Burgersgleichung, mit der sich Verkehrsströme modellieren lassen.

Für mehr Details sei der interessierten Leserin das Buch [4] von Iserles empfohlen. \blacklozenge

Eine Frage, die wir bislang nicht beantwortet haben, ist, was man überhaupt unter einer hyperbolischen Gleichung versteht und wieso die Advektionsgleichung hyperbolisch ist. Eine genaue Definition dieses Begriffs ist leider nicht ganz einfach. Im Fall einer skalaren Gleichung erster Ordnung (d. h., es tauchen ausschließlich erste Ableitungen auf) wie der Advektionsgleichung hat man es aber stets mit einem hyperbolischen Problem zu tun. Stünde an Stelle des Skalars $a \in \mathbb{R}$ eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und wäre $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ eine vektorwertige Funktion der entsprechenden Größe, so wäre die d -dimensionale Advektionsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + A \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = 0$$

genau dann hyperbolische, wenn die Matrix A reell diagonalisierbar wäre. Für Gleichungen zweiter Ordnung gibt es wiederum andere Kriterien. Zwecks unsere numerischen Überlegungen spielt all dies aber keine weitere Rolle.

2. Drei Verfahren

In diesem Abschnitt wollen wir numerische Methoden zur Lösung der linearen Advektionsgleichung entwickeln. Dass nicht einfach die Verfahren für parabolische Probleme recycled werden, liegt daran, dass dort im Allgemeinen steife Gleichungen vorliegen, für die deshalb implizite Verfahren eingesetzt werden müssen. Bei hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen reichen explizite Methoden aus. Die Grundideen sind aber durchaus ähnlich und wie schon im Vortrag letzte Woche werden wir auch hier nur auf Finite-Differenzen-Verfahren eingehen.

Bei der Arbeit auf einem beschränkten Gebiet müssen wir zu dem Anfangswert, den wir bereits im Abschnitt zuvor gesehen hatten, noch eine weitere Forderung zur Differentialgleichung hinzunehmen. Prinzipiell gibt es dafür mehrere Möglichkeiten. Wir entscheiden uns für eine, die die Arbeit an den Intervallrändern etwas erleichtert und betrachten deshalb im Folgenden die *lineare Advektionsgleichung mit periodischen Randbedingungen*

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) &= -a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) && \text{für alle } (t, x) \in [0, T] \times [0, 1], \\ u(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in [0, 1], \\ u(t, 0) &= u(t, 1) && \text{für alle } t \in [0, T], \end{aligned} \tag{2.1}$$

wie immer mit Konstanten $a, T > 0$ und einer Funktion $u_0 : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$. Aus der Sicht des Beispiels 1.1 bedeutet dies gerade, dass alles, was rechts abfließt, links wieder zufließt.

Die Idee der Finite-Differenzen-Verfahren besteht nun darin, die Ableitung (also den Differentialquotienten)

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

einer Funktion $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ mit einem festen $h > 0$ durch passende Differenzenquotienten, etwa

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

anzunähern, wofür es zahlreiche Optionen gibt. Wichtig ist dabei neben der Konvergenz gegen $f'(x)$ bei $h \rightarrow 0$ für die Praxis vor allem die Approximationsgüte, um schon für recht große Schrittweiten h passable Näherungen an $f'(x)$ zu erhalten. Der folgende Satz beinhaltet die gängigsten Differenzenquotienten und gibt für diese eine Fehlerabschätzung an.

Satz 2.1 *Seien $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $x \in]a, b[$ und $h > 0$ gegeben, sodass $x-h, x+h \in [a, b]$ ist. Dann gilt:*

(a) *Ist f zweimal stetig differenzierbar, so ist*

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) = O(h) \quad \text{und} \quad f'(x) - \frac{f(x) - f(x-h)}{h} = O(h).$$

(b) *Ist f dreimal stetig differenzierbar, so ist*

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f'(x) = O(h^2).$$

(c) Ist f viermal stetig differenzierbar, so ist

$$f''(x) - \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} = O(h^2).$$

Beweis: Alle Aussagen folgen direkt per Taylor-Entwicklung. Diese liefert im Fall von (a) ein $\xi_1 \in]x, x+h[$ mit

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi_1)$$

und ein $\xi_2 \in]x-h, x[$ mit

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi_2).$$

Umstellen ergibt dann die Behauptung.

Für (b) stiftet der Satz von Taylor ebenso $\xi_1, \xi_2 \in]t-h, t+h[$ mit

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1)$$

und

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2).$$

Subtraktion beider und Division durch $2h$ ergibt

$$\begin{aligned} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} &= f'(x) - \frac{h^2}{12}(f'''(\xi_1) - f'''(\xi_2)) \\ &= f'(x) - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) \end{aligned}$$

mit einem passenden $\xi \in]t-h, t+h[$, dessen Existenz durch den Zwischenwertsatz sichergestellt ist.

Der letzte Teil folgt vollkommen analog durch Taylor-Entwicklung bis zum vierten Glied. ■

Man nennt die Näherungen aus Teil (a) den *vorwärts* bzw. den *rückwärts genommenen Differenzenquotient* und die Näherung aus Teil (b) und (c) den *zentralen Differenzenquotienten*. Um zwischen erster und zweiter Ableitung zu unterscheiden, versteht man diese Begriffe gelegentlich mit dem Zusatz *erster Ordnung* oder *zweiter Ordnung*. Zudem ist klar, dass für den Beweis von Teilaussage (a) bereits die Forderung $x+h \in [a, b]$ für den vorwärts genommenen und die Forderung $x-h \in [a, b]$ für den rückwärts genommenen Differenzenquotienten ausreicht.

Die Grundlage für die Anwendung finiter Differenzen besteht darin, den Definitionsbereich von (2.1) zu diskretisieren. Dazu geben wir gewisse Zeit- und Ortsschrittweiten $k, h > 0$ vor und definieren hiermit ein Gitter

$$\begin{aligned} t_i &:= ik && \text{für alle } i = 0, 1, \dots, M+1, \\ x_j &:= jh && \text{für alle } j = 0, 1, \dots, N+1 \end{aligned}$$

mit $k = T/(M+1)$ und $h = 1/(N+1)$ für $M, N \in \mathbb{N}$, vergleiche Abbildung 2. Mit diesen Vorbereitungen sind wir nun in der Lage, Finite-Differenzen-Verfahren zur Lösung von (2.1) herzuleiten.

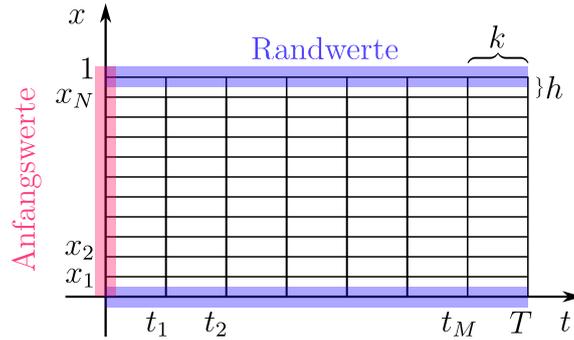


Abbildung 2: Zur Diskretisierung der linearen Advektionsgleichung.

Leapfrog-Verfahren

Für unser erstes Verfahren diskretisieren wir den Definitionsbereich von (2.1) zunächst nur im Ort x mit Hilfe des zentralen Differenzenquotienten und erhalten dann an den festen Linien x_j zu $j = 0, 1, \dots, N + 1$ (vgl. Abbildung 2) je eine gewöhnliche(!) Differentialgleichung in der Variable t . Bei den inneren Linien folgt so

$$u'(t, x_j) \approx -\frac{a}{2h}(u(t, x_{j+1}) - u(t, x_{j-1})) \quad \text{für } j = 2, 3, \dots, N$$

und an den Rändern unter Ausnutzung der Periodizität

$$\begin{aligned} u'(t, x_1) &\approx -\frac{a}{2h}(u(t, x_2) - u(t, x_{N+1})), \\ u'(t, x_{N+1}) &\approx -\frac{a}{2h}(u(t, x_1) - u(t, x_N)) \end{aligned}$$

(man beachte, dass wegen der Periodizität die Differentialgleichung an der Stelle x_0 nicht betrachtet werden muss, da sie bereits an der Stelle x_{N+1} eingeht). Seien jetzt $v_j(t)$ diejenigen Näherungen an $u(t, x_j)$ für $j = 0, 1, \dots, N + 1$, sodass die obigen Gleichungen exakt sind, also

$$\begin{aligned} v_1'(t) &= -\frac{a}{2h}(v_2(t) - v_{N+1}(t)), \\ v_j'(t) &= -\frac{a}{2h}(v_{j+1}(t) - v_{j-1}(t)) \quad \text{für } j = 2, 3, \dots, N, \\ v_{N+1}'(t) &= -\frac{a}{2h}(v_1(t) - v_N(t)). \end{aligned}$$

Dies ist ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten, das wir mittels der Definitionen

$$v(t) := (v_1(t), v_2(t), \dots, v_{N+1}(t))^T \in \mathbb{R}^{N+1}$$

und

$$A := -\frac{a}{2h} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & -1 \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ 1 & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(N+1) \times (N+1)}$$

in die übliche Matrix-Vektor-Schreibweise

$$v'(t) = Av(t) \quad (2.2)$$

überführen können. Der zugehörige Anfangswert $v(0)$ der gewöhnlichen Differentialgleichung (2.2) ist dann gerade durch den Anfangswert u_0 der partiellen Differentialgleichung (2.1) komponentenweise als

$$v_j(0) = u_0(x_j) \quad \text{für } j = 1, 2, \dots, N + 1 \quad (2.3)$$

gegeben.

Je nachdem, mit welchem numerischen Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen man (2.2) nun löst, erhält man ein anderes Verfahren zur Lösung der partiellen Differentialgleichung (2.1). Eine beliebte Wahl ist das explizite 2-Schritt-Verfahren nach Nyström

$$v^{i+1} = v^{i-1} + k2Av^i \quad (i = 1, 2, \dots, M),$$

das auf das sogenannte Leapfrog-Verfahren

$$v_{i+1,j} = v_{i-1,j} - \frac{ak}{h}(v_{i,j+1} - v_{i,j-1}) \quad (i = 1, 2, \dots, M; \quad j = 1, 2, \dots, N + 1)$$

führt. Wie man es von einem 2-Schritt-Verfahren ohnehin erwarten würde, braucht man auch hier zur Initialisierung zwei Startwerte $v^0, v^1 \in \mathbb{R}^{N+1}$. Während wir v^0 aus den Anfangswerten (2.3) erhalten, ist v^1 zunächst unbekannt. Üblicherweise beschafft man sich diesen Vektor durch Anwendung eines geeigneten Einschrittverfahrens auf das Intervall $[t_0, t_1]$. Aus der Periodizität erhält man schließlich noch $v_{i,0}$ aus $v_{i,N+1}$ für alle Zeiten $i = 0, 1, \dots, M + 1$.

Lax-Wendroff-Verfahren

Eine andere Möglichkeit, Verfahren zur Lösung von (2.1) herzuleiten, ergibt sich durch Taylor-Entwicklung der Lösung u . Sei dazu u hinreichend glatt (etwa dreimal stetig differenzierbar). Dann folgt mit dem Satz von Taylor

$$u(t + k, x) = u(t, x) + k \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t, x) + O(k^3).$$

Unter Verwendung der Differentialgleichung (2.1) und des Satzes von Schwarz finden wir

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = -a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x)$$

und

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t, x) = \frac{\partial}{\partial t} \left(-a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \right) = -a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) \right) = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x).$$

Setzt man dies in die Taylor-Entwicklung ein, folgt

$$u(t + k, x) = u(t, x) + ka \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{(ka)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + O(k^3).$$

Nun nähern wir die partiellen Ableitungen nach x durch die zentralen Differenzenquotienten erster und zweiter Ordnung aus Satz 2.1 und erhalten so

$$u(t+k, x) \approx u(t, x) - \frac{ka}{2h}(u(t, x+h) - u(t, x-h)) \\ + \frac{(ka)^2}{2h^2}(u(t, x+h) - 2u(t, x) + u(t, x-h)).$$

Bezeichnet $v_{i,j} \in \mathbb{R}$ jetzt diejenige Näherungen an $u(t_i, x_j)$, sodass diese Gleichungen exakt auf dem üblichen Gitter gelten, so erhalten wir das sogenannte Lax-Wendroff-Verfahren

$$v_{i+1,j} = v_{i,j} - \frac{ak}{2h}(v_{i,j+1} - v_{i,j-1}) + \frac{(ak)^2}{2h^2}(v_{i,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i,j-1})$$

für alle $i = 0, 1, \dots, M$ und $j = 1, 2, \dots, N+1$. Als Startwerte genügen hier bereits die Anfangswerte $v_{0,j}$ ($j = 1, 2, \dots, N+1$), die man analog zum Leapfrog-Verfahren aus (2.3) erhält, denn in der Rekursion wird nur auf einen Zeitschritt zuvor zurückgegriffen (beim Leapfrog-Verfahren waren es zwei). Ebenso erhält man wieder $v_{i,0}$ aus $v_{i,N+1}$ für alle $i = 0, 1, \dots, M+1$.

Upwind-Verfahren

Das letzte Verfahren, das wir vorstellen möchten, greift auf vorwärts genommene Differenzenquotienten in der Zeit und rückwärts genommene Differenzenquotienten im Ort zurück. Wir ersetzen damit die zugehörigen Ableitungen in der Differentialgleichung (2.1) und erhalten

$$\frac{u(t_{i+1}, x_j) - u(t_i, x_j)}{k} \approx -a \frac{u(t_i, x_j) - u(t_i, x_{j-1})}{h}.$$

Bezeichnet $v_{i,j} \in \mathbb{R}$ wieder diejenige Näherungen an $u(t_i, x_j)$, sodass diese Gleichungen exakt auf dem üblichen Gitter gelten, so erhalten wir

$$\frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{k} = -a \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{h}$$

und damit das sogenannte Upwind-Verfahren

$$v_{i+1,j} = v_{i,j} - \frac{ak}{h}(v_{i,j} - v_{i,j-1}) \quad (i = 0, 1, \dots, M; \quad j = 1, 2, \dots, N+1).$$

Auch hier genügen die Anfangswerte aus (2.3) wie beim zuvor besprochenen Lax-Wendroff-Verfahren zur Initialisierung. Wie bei diesem setzt man wieder $v_{i,0} := v_{i,N+1}$ für alle $i = 0, 1, \dots, M+1$.

Alle drei Verfahren greifen rekursiv auf gewisse (bereits berechnete) Werte rund um den im aktuellen Schritt zu bestimmenden Wert $v_{i+1,j}$ zurück. Dies lässt sich graphisch schön anhand der Schablonen (englisch: Stencils) aus Abbildung 3 veranschaulichen, die gerade diese Abhängigkeiten deutlich machen. Man beachte, dass anschaulich die Verfahren die vertikalen Zeitlinien von unten nach oben durchlaufen, bis sie an den Rand des Gitters stoßen und anschließend in die Spalte rechts daneben wechseln,

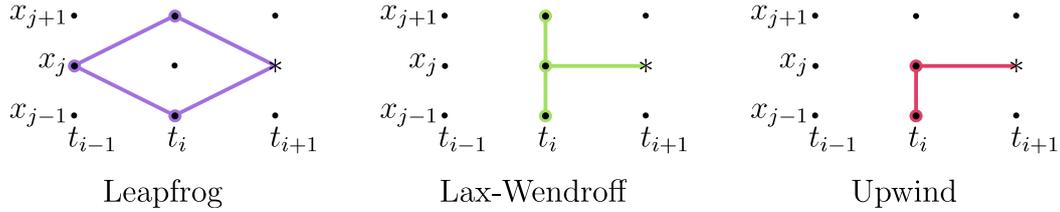


Abbildung 3: Schablonen der drei vorgestellten Verfahren.

um den Vorgang zu wiederholen. Am Rand des Gitters müssen die „überstehenden“ Anteile vermöge der Periodizität vom jeweils anderen Rand des Gitters ausgelesen werden. Man beachte zudem für die Implementation, dass der Wert $v_{i,j}$ in Abbildung 2 nicht (wie sonst üblich) den Eintrag in der i -ten Zeile und j -ten Spalte beschreibt, sondern gerade andersherum.

Zum Abschluss illustrieren wir das numerische Verhalten der drei Verfahren kurz an einem Beispiel. Dazu betrachten wir die zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ nahezu periodische ($u_0(0) \approx u_0(1)$) Ausgangsfunktion

$$u_0(x) := \exp(-2000(x - 0.3)^2) + \exp(-200(x - 0.7)^2),$$

die einen scharfen Peak bei $x = 0.3$ und einen etwas flacheren Peak bei $x = 0.7$ modelliert. Wir betrachten diese im Zeitbereich $[0, T] := [0, 0.8]$ mit der Advektionsgeschwindigkeit $a := 0.5$. Das Leapfrog-Verfahren starten wir mit dem exakten zweiten Startwert an der Stelle $t = k$ (geliefert durch (1.3)) anstatt mit einem Einschrittverfahren, um uns keine vom Leapfrog-Verfahren unabhängigen Fehler einzufangen. Dies ist allerdings der Best Case. Abbildung 4 zeigt nun die numerischen Werte (gepunktet) und die exakten Werte (durchgezogen) für die drei Verfahren für $M := N := 100$ (man beachte, dass also $ak/h = 0.4 < 1$ ist). Als exakte Lösung zum Endzeitpunkt $t = T$ erhält man offenbar die um $a \cdot T = 0.4$ nach rechts verschobene Ausgangsfunktion u_0 , die man periodisch links weiterführt. An den Anfangswerten kann man gut erkennen, dass der breitere Peak besser als der schmalere vom Gitter aufgelöst wird. Entsprechend sind dort auch die numerischen Lösungen besser. Beim Leapfrog- und Lax-Wendroff-Verfahren beobachtet man Dispersion (Zerstreuung) in der Nähe des schmaleren Peaks, während beim Upwind-Verfahren beide Peaks unter Dissipation (Energieverlust) leiden. Beide Phänomene sind hinsichtlich des physikalischen Hintergrunds aus Beispiel 1.1 katastrophal. Dispersion kann zu negativen Dichten führen, was physikalisch unmöglich ist, und Dissipation widerspricht der Massenerhaltung der Substanz.

3. Konvergenz & Stabilität

Wir betrachten in diesem Abschnitt erneut die lineare Advektionsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) &= -a \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) && \text{für alle } (t, x) \in [0, T] \times [0, 1], \\ u(0, x) &= u_0(x) && \text{für alle } x \in [0, 1], \\ u(t, 0) &= u(t, 1) && \text{für alle } t \in [0, T] \end{aligned} \tag{3.1}$$

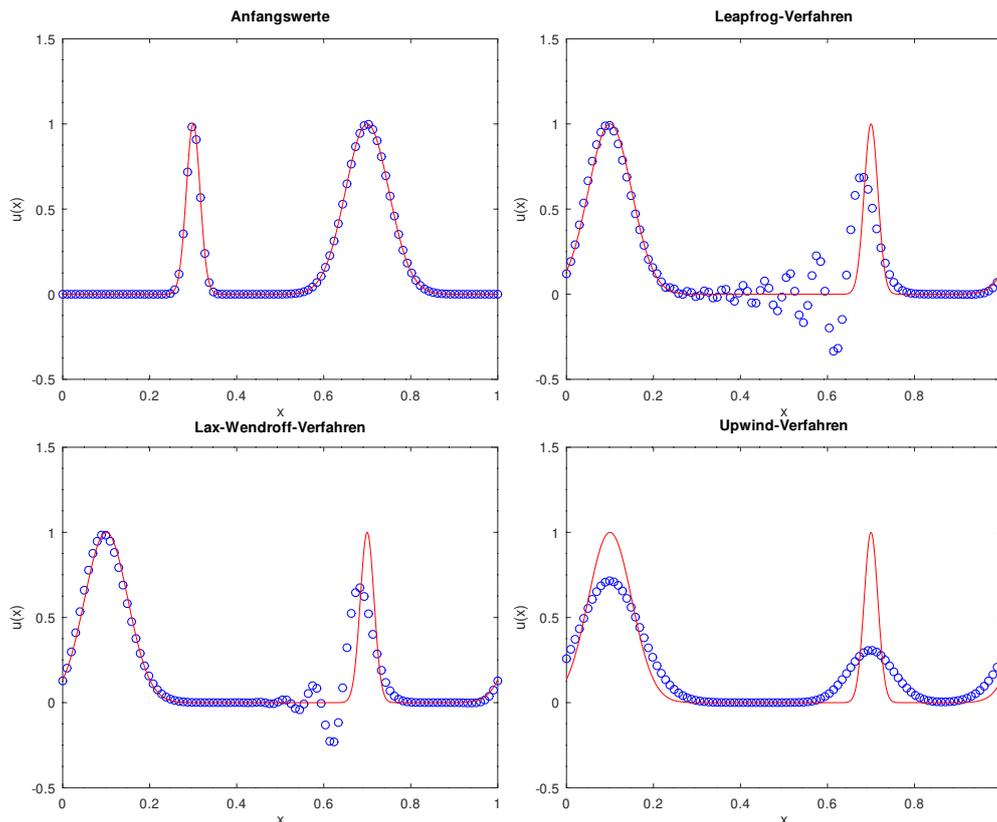


Abbildung 4: Numerische Lösung der linearen Advektionsgleichung.

mit Konstanten $a, T > 0$ und einer Funktion $u_0 : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$. Zu deren numerischer Lösung hatten wir in Abschnitt 2 ein Gitter

$$\begin{aligned} t_i &:= ik && \text{für alle } i = 0, 1, \dots, M + 1, \\ x_j &:= jh && \text{für alle } j = 0, 1, \dots, N + 1 \end{aligned}$$

mit Schrittweiten $k, h > 0$ für $M, N \in \mathbb{N}$ eingeführt. Auf diesem haben wir dann Finite-Differenzenverfahren unter Einsatz von Differenzenquotienten aus Satz 2.1 hergeleitet. In diesem Abschnitt wollen wir uns über die Konvergenz der Verfahren gegen die tatsächliche Lösung bei $k, h \rightarrow 0$ Gedanken machen. Der dazu nötige Begriffsapparat ist leider zu umfangreich, um in der Kürze dieses Vortrags behandelt werden zu können. Wir müssen uns deshalb mit einem intuitiven Verständnis der Konzepte zufriedengeben. Immerhin sind diese denjenigen aus der Numerik von gewöhnlichen Differentialgleichungen sehr ähnlich. Exakte Definitionen finden sich etwa in [9].

Ein Verfahren heißt *konvergent*, wenn es Näherungen erzeugt, die bei $k, h \rightarrow 0$ gegen die tatsächliche Lösung der partiellen Differentialgleichung konvergieren. Der *globale Verfahrensfehler* misst die maximale Abweichung einer Näherung zum exakten Wert an der zugehörigen Gitterstelle. Die Konvergenz ist dann von der Ordnung p in der Zeit und q im Raum, wenn man für den globalen Verfahrensfehler eine Abschätzung der Form $O(k^p + h^q)$ hat. Der *lokale Verfahrensfehler* misst den Fehler, den das Verfahren in einem Schritt macht, lokal, indem die Differenz von exaktem Startwert und damit erhaltener Näherung gebildet wird. Strebt der lokale Verfahrensfehler der Norm nach bei $k, h \rightarrow 0$ gegen 0, spricht man von *Konsistenz* und zwar

erneut von der Ordnung p in der Zeit und q im Raum, wenn man eine Abschätzung der Form $O(k^p + h^q)$ hat.

Da die Ungleichung für die Konvergenz im Allgemeinen sehr schwer zu zeigen ist, stellt sich die Frage, ob man diese bereits aus der (deutlich leichter zu erhaltenden) Konsistenz folgern kann. Es ist klar, dass ein Verfahren notwendigerweise konsistent sein muss, um konvergent zu sein. Dass die Rückrichtung in der Regel nicht erfüllt zu sein braucht, illustriert das folgende Beispiel.

Beispiel 3.1 Wir betrachten erneut die lineare Advektionsgleichung (3.1) mit der Anfangsfunktion

$$u_0(x) := \exp(-2000(x - 0.3)^2) + \exp(-200(x - 0.7)^2)$$

auf $[0, T] := [0, 0.8]$ wie im vorherigen Abschnitt. Allerdings sei nun die Advektionsgeschwindigkeit $a := 1.3$. Zur numerischen Lösung setzen wir das Lax-Wendroff-Verfahren ein, das qua Herleitung konsistent ist (vergleiche auch Satz 2.1). Erneut wählen wir $M := N := 100$, sodass nun $ak/h = 1.04 > 1$ ist. Als numerische Lösung erhalten wir damit die blaue Kurve in Abbildung 5, während die rote Kurve wieder die exakte Lösung darstellt. Offenbar liefert das Verfahren jetzt keine gute Näherung

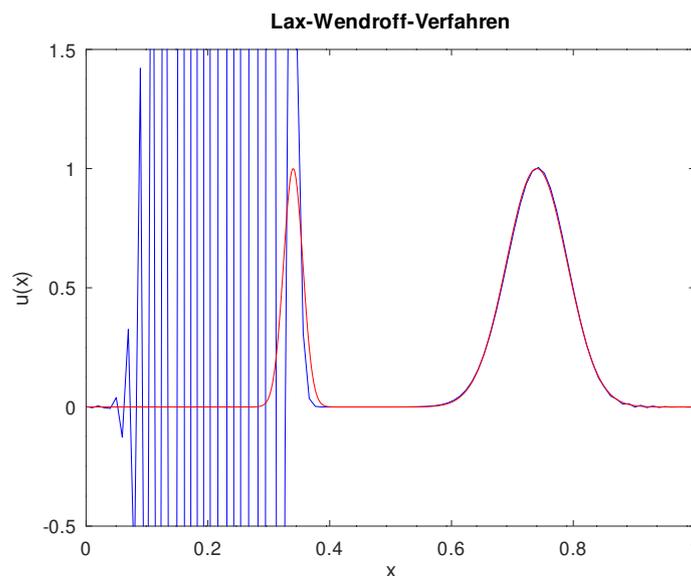


Abbildung 5: Instabilität eines konsistenten Verfahrens.

mehr, obwohl es konsistent ist. ◆

Wie sich zeigt, bedarf es neben der Konsistenz noch der sogenannten *Stabilität*. Darunter versteht man im Wesentlichen die Eigenschaft, dass die Iterierten aus einem numerischen Verfahren nicht „explodieren“, wie es etwa in Beispiel 3.1 zu beobachten war, d. h. beschränkt sind.

Der folgende Satz besagt nun, dass die Konvergenzfrage eines Verfahrens gerade auf dessen Konsistenz und Stabilität zurückgeführt werden kann.

Satz 3.2 (Äquivalenzsatz von Lax)

Ein konsistentes Finite-Differenzen-Verfahren ist genau dann konvergent, wenn es stabil ist.

Einen Beweis findet man etwa in [9]. Es sei aber darauf hingewiesen, dass die für uns entscheidene Rückrichtung bereits im Vortrag von Simon Krotsch bewiesen wurde.

Die Konsistenz erhält man für gewöhnlich durch Taylor-Entwicklung des lokalen Verfahrensfehlers. Dies wollen wir hier nicht im Detail durchführen, da die Herleitungen der drei Verfahren aus Abschnitt 2 bereits vermuten lassen, wieso sie konsistent sind (vgl. Satz 2.1). Das Leapfrog- und Lax-Wendroff-Verfahren haben dabei Ordnung 2 in Zeit und Raum und das Upwind-Verfahren jeweils Ordnung 1 in der Zeit und im Raum.

Hinsichtlich der Stabilität wollen wir zunächst ein notwendiges Kriterium herleiten. Dazu betrachten wir exemplarisch das Lax-Wendroff-Verfahren. In diesem wird zur Berechnung von $v_{i+1,j}$ auf die drei Punkte $v_{i,j-1}, v_{i,j}$ und $v_{i,j+1}$ zurückgegriffen (vgl. den zugehörigen Stencil in Abb. 3). Überlegt man sich nun für diese drei wiederum, welche Gitterpunkte zu deren Berechnung nötig waren und so weiter bis zum Anfangszeitpunkt t_0 , so erhält man ein Dreieck aus Gitterpunkten. Die Menge

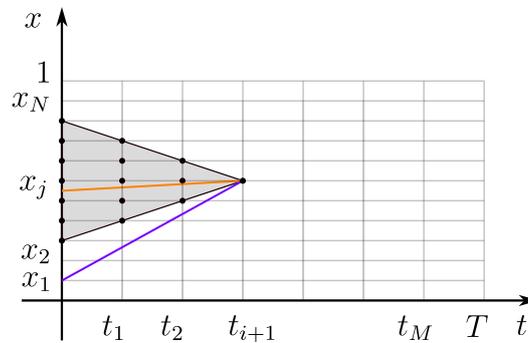


Abbildung 6: Numerischer Abhängigkeitsbereich (grau) des Lax-Wendroff-Verfahrens und zwei Charakteristiken, einmal innerhalb (orange) und einmal außerhalb (lila) dessen.

$D(t_{i+1}, x_j)$ dieser Punkte nennt man aus naheliegenden Gründen den *numerischen Abhängigkeitsbereich* von $v_{i+1,j}$. Ändert sich einer der Werte hier (insbesondere durch Änderungen an den Anfangswerten), so ändert sich im Allgemeinen auch $v_{i+1,j}$. Nun besagt aber Satz 1.4, dass der tatsächliche Wert $u(t_{i+1}, x_j)$ an diesem Gitterpunkt nur von dem Wert $\gamma(x_j - at_{i+1})$ der zugehörigen Charakteristik γ abhängt. Liegt $\gamma(x_j)$ also nicht in $D(t_{i+1}, x_j)$, so kann sich der tatsächliche Wert der Lösung an der Stelle (t_{i+1}, x_j) beliebig ändern, ohne dass das Lax-Wendroff-Verfahren davon etwas mitbekommt.

Da eine analoge Argumentation für alle Finiten-Differenzen-Verfahren geführt werden kann, haben wir damit das folgende notwendige Konvergenzkriterium bewiesen.

Satz 3.3 (CFL-Bedingung)

Für jedes konvergente Finite-Differenzen-Verfahren enthält dessen numerischer Abhängigkeitsbereich den tatsächlichen Abhängigkeitsbereich der partiellen Differentialgleichung.

Man beachte, dass das obige Kriterium nicht notwendig ist. Man kann Beispiele angeben, in denen trotz dessen Erfülltseins keine Stabilität und damit auch keine Konvergenz vorliegt. Trotzdem erklärt der Satz das Verhalten, das wir in Beispiel 3.1

beobachten konnten, denn speziell für das Lax-Wendroff-Verfahren erhält man als numerischen Abhängigkeitsbereich das Dreieck

$$D(t_i, x_j) = \{(t, x) \mid 0 \leq t \leq t_i, \quad x_j - t_i + t \leq x \leq x_j + t_i - t\}$$

und die CFL-Bedingung, die besagt, dass für $0 \leq t \leq t_i$ die Charakteristik durch (t_i, x_j) darin enthalten zu sein hat, führt auf die Forderung

$$\frac{ak}{h} \leq 1, \quad (3.2)$$

was im angesprochenen Beispiel eben nicht erfüllt war, wohl aber im numerischen Test am Ende von Abschnitt 2.

Nach dieser recht allgemeinen Diskussion wollen wir zum Abschluss einen Blick auf die konkreten Verfahren aus Abschnitt 2 werfen. Prinzipiell gibt es verschiedene Zugänge, die Stabilität der dortigen Methoden zu untersuchen. Z. B. kann man die auf der Fourier-Theorie basierende *von Neumann-Analyse* anwenden. Wir gehen hier den naheliegenderen Weg und nutzen die Stabilitätstheorie für gewöhnliche Differentialgleichungen. Exemplarisch dafür steht das Leapfrog-Verfahren (die anderen Methoden lassen sich ebenfalls in die Form von gewöhnlichen Differentialgleichungen bringen). Dabei hatten wir ein Anfangswertproblem

$$v'(t) = Av(t), \quad v_j(0) = u_0(x_j) \text{ für } j = 1, \dots, N+1$$

mit Koeffizientenmatrix

$$A := -\frac{a}{2h} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & -1 \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ 1 & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(N+1) \times (N+1)}$$

und Vektor $v(t) := (v_1(t), v_2(t), \dots, v_{N+1}(t))^T \in \mathbb{R}^{N+1}$ erhalten. Auf dieses System wurde dann das 2-Schritt-Verfahren nach Nyström

$$v^{p+1} = v^{p-1} + (2kA)v^p \quad (p = 1, 2, \dots, M)$$

angewendet (wir schreiben hier als Index p anstatt i wie im vorherigen Abschnitt, da im Folgenden die imaginäre Einheit i auftreten wird). Das Stabilitätsgebiet dieses Verfahrens ist bekanntlich

$$\{i\alpha \in \mathbb{C} \mid \alpha \in]-1, 1[\}.$$

Man kann zeigen, dass die Eigenwerte der Matrix $2kA$ gerade

$$\lambda_\ell = -i \frac{ak}{h} \sin(2\pi\ell h) \quad \text{für } \ell = 1, 2, \dots, N+1$$

sind. Wegen der Schiefensymmetrie $A^T = -A$ sind alle Eigenwerte imaginär. Als Stabilitätskriterium erhält man also

$$|\lambda_\ell| < 1 \quad \iff \quad \left| \frac{ak}{h} \right| < 1$$

(der Betrag wird erst dann relevant, wenn man auch negative Fließgeschwindigkeiten $a < 0$ zulässt). Vergleiche auch die CFL-Bedingung (3.2) für das Lax-Wendroff-Verfahren.

Analog lassen sich ganz ähnliche Kriterien für alle weiteren Verfahren ableiten. Mit etwas mehr Aufwand gewähren die Eigenwerte und Eigenvektoren der zugehörigen Matrizen zudem eine Erklärungsmöglichkeit für das dissipative und dispersive Verhalten, das wir in Abbildung 4 gesehen hatten.

Literatur

- [1] Wolfgang Arendt und Karsten Urban. *Partielle Differenzialgleichungen. Eine Einführung in analytische und numerische Methoden*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2010 (zitiert auf S. 2).
- [2] Günter Bärwolff. *Numerik für Ingenieure, Physiker und Informatiker*. 3. überarbeitete und erweiterte Auflage. Berlin: Springer Spektrum, 2020 (zitiert auf S. 4).
- [3] Thorsten Becker und Boris Kaus. *Numerical Modeling of Earth Systems. An introduction to computational methods with focus on solid Earth applications of continuum mechanics*. Vorlesungsskript, University of Southern California, Version 1.2.2 vom 1.11.2020.
- [4] Arieh Iserles. *A first course in the numerical analysis of differential equations*. 2. Auflage. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge: Cambridge University Press, 2009 (zitiert auf S. 5).
- [5] Christian Kanzow. *Numerik linearer Gleichungssysteme. Direkte und iterative Verfahren*. Berlin: Springer, 2005.
- [6] Randall J. LeVeque. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations. Steady-state and time-dependent problems*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2007 (zitiert auf S. 1).
- [7] Randall J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. 2. Auflage. Basel: Birkhäuser, 1992 (zitiert auf S. 2).
- [8] Peter J. Olver. *Introduction to partial differential equations*. Undergraduate Texts in Mathematics. Cham: Springer, 2014 (zitiert auf S. 3, 4).
- [9] John C. Strikwerda. *Finite difference schemes and partial differential equations*. 2. Auflage. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2004 (zitiert auf S. 12, 14).