

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PLASMAPHYSIK
GARCHING BEI MÜNCHEN

Implizite Lösungsverfahren für Systeme von nichtlinearen,
zeitabhängigen, mehrdimensionalen partiellen
Differentialgleichungen

Ulrich Schwenn

IPP 6/176

Oktober 1978

*Die nachstehende Arbeit wurde im Rahmen des Vertrages zwischen dem
Max-Planck-Institut für Plasmaphysik und der Europäischen Atomgemeinschaft über die
Zusammenarbeit auf dem Gebiete der Plasmaphysik durchgeführt.*

Vollständiger Abdruck der von Ulrich Schwenn - geboren am 8.8.1946
zu München - eingereichten und vom Fachbereich Physik der Technischen
Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: o. Prof. Dr.-Ing. P. Kienle

1. Prüfer: Honorarprof. Dr. D. Pfirsch

2. Prüfer: o. Prof. Dr. H.-J. Mang

Die Dissertation wurde am 5.10.77 bei der Technischen Universität
München eingereicht und durch den Fachbereich Physik am 13.12.77
angenommen. Tag der Promotion: 22.12.77.

IPP 6/176

U. Schwenn

Implicit Methods of Solving Systems
of Nonlinear, Time-dependent,
Multi-dimensional Partial Differential
Equations

October 1978 (in German)

Abstract:

The implicit methods developed here for numerically solving systems of nonlinear, time-dependent, partial differential equations in two and three spatial dimensions afford a wider range of application involving fewer and much less severe constraints than available difference methods. The proposed formulation allows largely automatic conversion of differential terms to implicit difference expressions. The consistently implicit structure of these methods makes them particularly suitable for solving systems of nonlinear parabolic differential equations with mixed derivatives. Three characteristic examples from magnetohydrodynamics are taken as test cases.

1. I N H A L T S V E R Z E I C H N I S

	Seite
1. <u>Inhaltsverzeichnis</u>	1
2. <u>Einleitung</u>	3
2.1 Problemstellung	3
2.2 Differenzenverfahren fuer Fluessigkeitsmodelle	4
2.3 Motivation fuer ein allgemeines implizites 2-D Verfahren	11
3. <u>Das I N I M - Verfahren</u>	13
3.1 Einfuehrung	13
3.2 Integration und Diskretisierung im Ort	14
3.2.1 "Exakte" Integrationen	15
3.2.2 Integration mit Interpolationsfunktionen	16
3.3 Diskretisierung und Linearisierung in der Zeit	21
3.4 Randbedingungen	23
3.5 Das algebraische Gleichungssystem	25
3.5.1 Struktur und allgemeine Eigenschaften	25
3.5.2 Loesung durch Rekursionsansaetze	27
3.5.3 Diagonaldominanz, Bandbreitenbeschraenkung	30
3.5.4 Matrizenalgorithmen	31
3.6 Praktische Durchfuehrung	35
3.6.1 Der Programmgenerator	35
3.6.2 Das Rahmenprogramm	38
4. <u>Anwendungen</u>	43
4.1 Einfuehrung	43
4.2 Nichtlineare Diffusion	44
4.2.1 Einige Eigenschaften der Gleichung	44
4.2.2 Anfangs- und Randbedingungen	45
4.2.3 Erzeugung der Koeffizienten	47
4.1.4 Numerische Ergebnisse	47
4.3 Ideale, kompressible Hydrodynamik	56
4.3.1 Das Gleichungssystem	56
4.3.2 Anfangs- und Randbedingungen	57
4.3.3 Erzeugung der Koeffizienten	59
4.3.4 Numerische Ergebnisse	60

4.4 MHF - Gleichungen	69
4.4.1 Das Gleichungssystem	69
4.4.2 Geometrie und Anfangsbedingungen	71
4.4.3 Erzeugung der Koeffizienten	74
4.4.4 Numerische Ergebnisse	76
5. <u>Diskussion der Ergebnisse, Erweiterungen</u>	86
5.1 Die INIM - Diskretisierungsvorschriften	86
5.2 Aufloesung des Gleichungssystems	88
5.3 Numerische Ergebnisse	90
5.4 Erweiterung auf 3-D Modelle	92
5.4.1 3-D Differenzengleichungen	92
5.4.2 Loesung des 3-D Gleichungssystems	93
5.4.3 3-D Loesung durch 2-D "Splitting"	94
6. <u>Zusammenfassung</u>	97
7. <u>Literaturverzeichnis</u>	98

Diese Arbeit wurde mit dem Textverarbeitungssystem ROFF fuer die IBM 360/91 des Max Planck Instituts fuer Plasmaphysik geschrieben.

2. E I N L E I T U N G

2.1 Problemstellung

Die vorliegende Arbeit wurde durch Fragestellungen aus der makroskopischen Theorie der Plasmen veranlasst, bei denen es um die Lösung parabolischer und hyperbolischer partieller Differentialgleichungen geht. Dazu gehören die Gleichungen der Magnetohydrodynamik (MHD) /1/. Die Untersuchung hat aber darüber hinausgehende Bedeutung überall dort, wo man es mit Gleichungen des genannten Typs zu tun hat.

Die analytische Behandlung solcher Gleichungen ist nur in stark vereinfachten Fällen möglich. Obwohl dadurch wichtige Erkenntnisse gewonnen werden können, bleibt doch die Notwendigkeit, auch realistischere Systeme theoretisch behandeln zu können. In der Plasmaphysik wird dies in dem Maße dringlicher, als die Experimente immer teurer und zeitraubender werden und damit einer genaueren theoretischen Fundierung bedürfen.

Die näherungsweise Lösung mit Hilfe numerischer Rechenverfahren stimuliert deshalb schon seit Jahrzehnten die Entwicklung immer leistungsfähigerer Rechenanlagen. Zur Lösung von Flüssigkeitsgleichungen, etwa aus der Hydrodynamik, oder den MHD - Gleichungen, setzten sich vor allem die Differenzenverfahren durch. Der Abschnitt (2.2) gibt einen Überblick über die gängigsten Methoden und verdeutlicht die Vorteile impliziter Verfahren gerade bei der Untersuchung von MHD - Modellen.

Es wird sich zeigen, dass bei mehrdimensionalen Modellen die Erweiterung einfacher eindimensionaler Verfahren nur mit Einschränkungen zu akzeptablen Ergebnissen führt. Das Ziel dieser Arbeit ist es daher, von vorneherein implizite Verfahren zur numerischen Lösung mehrdimensionaler Modelle zu entwickeln. Die Argumente dafür werden im letzten Abschnitt dieses Kapitels ausführlich diskutiert.

Ausgangspunkt für das in Kapitel 3 zu entwickelnde Verfahren ist ein System von nichtlinearen, zeitabhängigen, partiellen Differentialgleichungen in zwei Raumdimensionen.

Das Kapitel 4 bringt drei charakteristische Anwendungsbeispiele. Die Auswahl erfolgte nach dem Gesichtspunkt, für alle wesentlichen Teile der MHD - Gleichungen relevante Aussagen machen zu können.

Im Kapitel 5 werden diese Ergebnisse diskutiert, und mögliche Erweiterungen angeführt, die vor allem für die Lösung dreidimensionaler Modelle von Bedeutung sind.

2.2 Differenzenverfahren fuer Fluessigkeitsmodelle

Eine Uebersicht ueber die Anwendung von Differenzenverfahren in der Plasmaphysik findet sich in dem Review - Artikel von Potter und Roberts und in einer neueren Arbeit von Killeen et al. / 2,3 /. Die im Folgenden angegebenen Referenzen sollen als Beispiele betrachtet werden und erheben nicht den Anspruch vollstaendig zu sein.

Die theoretischen Grundlagen von Differenzenverfahren sollen hier nur kurz angesprochen werden. Das Buch von Richtmyer und Morton behandelt diese ausfuehrlich, so dass die dort verwendeten Begriffe und Definitionen auch dieser Arbeit zu Grunde gelegt werden /4/.

Die Begriffe der Konsistenz und Konvergenz werden wie ueblich verwendet. Als stabil werden ueblicherweise solche Verfahren bezeichnet, bei denen kleine Stoerungen der Loesung waehrend der Rechnung nicht exponentiell anwachsen. Dabei koennen durchaus noch unphysikalische Schwingungen auftreten, die die praktische Verwendung dieser Loesung verbieten. Von Bedeutung sind deshalb nur physikalisch sinnvolle ("glatte") Ergebnisse, dies wird bei den Beispielen in Kapitel 4 deutlich.

Es gibt explizite und implizite Differenzgleichungen, dabei werden im weiteren nur Einschrittverfahren behandelt.

Der Vektor \underline{w} enthalte die N Werte aller Variablen zur Zeit t, $w(i)$ sei das i-te Element von \underline{w} . Die unbekanntene Werte der Variablen zur neuen Zeit $t=t+\Delta t$ werden entsprechend in $\hat{\underline{w}}$ zusammengefasst.

Ein explizites Differenzschema hat die Form:

$$\hat{w}(i) = f(\underline{w}, \Delta t, i), i = 1, N. \quad (2.2.1)$$

Jedes Element von $\hat{\underline{w}}$ kann unabhaengig von allen anderen berechnet werden.

Dagegen haben implizite Differenzen die Form:

$$g(\hat{\underline{w}}, \underline{w}, \Delta t) = 0. \quad (2.2.2)$$

Dieses Gleichungssystem verknuepft alle unbekanntene Variablen, bei nichtlinearen Differentialgleichungen ist es zunaechst auch nichtlinear. Es kann im Gegensatz zu (2.2.1) nur simultan geloest werden.

Die Unterschiede in den Stabilitaetseigenschaften expliziter und impliziter Differenzenverfahren lassen sich an zwei einfachen Differentialgleichungen zeigen, an der Kontinuitaetsgleichung mit vorgegebener Geschwindigkeit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (2.2.3)$$

und der linearen Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}. \quad (2.2.4)$$

Explizite Differenzapproximationen fuer (2.2.3) unterliegen der Stabilitaetsbedingung

$$|u| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (2.2.5)$$

Fuer die Diffusionsgleichung (2.2.4) gilt die strengere Bedingung

$$\kappa \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (2.2.6)$$

Die Geschwindigkeit in (2.2.5) ist die maximale Signalgeschwindigkeit im physikalischen Modell. Das kann die Stroemungsgeschwindigkeit aus (2.2.3) sein, in MHD - Modellen kann aber die thermische Schallgeschwindigkeit, oder die Alfvengeschwindigkeit wesentlich groesser sein, die expliziten Stabilitaetsbedingungen koennen dann den zulaessigen Zeitschritt unpraktikabel verkleinern.

Dies aendert sich bei impliziten Differenzgleichungen. Ein implizites Differenzschema fuer (2.2.4) in einem aequidistanten Gitter lautet beispielsweise:

$$\frac{\hat{w}_i - w_i}{\Delta t} = \frac{\kappa}{(\Delta x)^2} \{ \theta (\hat{w}_{i+1} - 2\hat{w}_i + \hat{w}_{i-1}) + (1-\theta) (w_{i+1} - 2w_i + w_{i-1}) \}. \quad (2.2.7)$$

Fuer Gleichungen dieser Art erhaelt man unbeschraenkte Stabilitaet unter der Bedingung $1/2 \leq \theta \leq 1$, fuer andere θ gilt

$$\kappa \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \frac{1}{(1-2\theta)}. \quad (2.2.8)$$

Implizite Verfahren fuer lineare hyperbolische Gleichungen, etwa fuer (2.2.3), sind ebenfalls unbeschraenkt stabil /5/.

Die Genauigkeit mit der eine Differentialgleichung approximiert werden kann, haengt vom Diskretisierungs- oder Abschneidefehler ab. Der Differentialoperator D soll durch den Differenzenoperator D' angenaehert werden. Der Abschneidefehler ist dann $\Delta D = D(m,n) - D'(m,n)$. Die Indizes m und n kennzeichnen den Ort und den Zeitpunkt, an dem ΔD berechnet werden soll. Setzt man in D'

Taylorentwicklungen der Variablen nach dem Ort und der Zeit um den Punkt (m, n) ein, so heisst die Differenzengleichung konsistent mit der Differentialgleichung, wenn ΔD bei Verkleinerung der Schrittweiten gegen null geht.

Die Ordnung in Δt mit der ΔD verschwindet, wird bei der Differenzengleichung (2.2.7) durch Θ bestimmt. Fuer $\Theta = 1/2$ ist ΔD von der Ordnung Δt^2 , fuer $\Theta = 1$ proportional Δt .

Der Parameter Θ beeinflusst zusaetzlich die Ausbreitung und Anwachsraten von numerischen Stoerungen in Abhaengigkeit von Δt . Ist Δt sehr gross im Vergleich zu dem expliziten Wert aus (2.2.6) und waehlt man $\Theta = 1/2$, so werden numerische Schwingungen nur noch sehr schwach gedaempft, waehrend $\Theta = 1$ maximale Daempfung ergibt.

Die Folgerungen aus den eben skizzierten Eigenschaften der beiden Klassen von Differenzengleichungen sind:

Explizite Verfahren sind bei Gleichungen des Typs (2.2.3) ausreichend, wenn die, die numerische Stabilitaet bestimmende, Signalgeschwindigkeit in der Groessenordnung der Stromungsgeschwindigkeit liegt.

Fuer Diffusionsgleichungen ist wegen der haerteren Bedingung (2.2.6) eine implizite Loesung vorzuziehen. Wegen der hoeheren Genauigkeit wird meistens $\Theta = 1/2$ verwendet.

Betrachtet man gemischte Systeme, wie etwa die MHD - Gleichungen, kann die Entscheidung wegen der erwaehnten stark unterschiedlichen Zeitskalen nur unter Beruecksichtigung des zu untersuchenden physikalischen Prozesses erfolgen. Bei einem Modell mit Konvektion und Waermeleitung kann explizit vorgegangen werden, wenn die beiden Bedingungen (2.2.5) und (2.2.6) annaeherd gleiche Werte fuer Δt liefern. Muss der Ortsschritt verkleinert werden, so erzwingt der Diffusionsanteil eine quadratische Aenderung des Zeitschrittes, implizite Differenzen sind dann wieder von Vorteil.

Der Schluss aus diesen Argumenten kann also nur die Forderung nach impliziten Differenzenapproximationen fuer Fluessigkeitsmodelle sein, die verschiedene Transportprozesse und Zeitskalen enthalten. Dies ist aber wegen der Struktur der impliziten Gleichungen (2.2.2) mit entsprechend hohem Aufwand verbunden. Daher werden derzeit fuer groessere Systeme, insbesondere in zwei, oder drei Ortsdimensionen, implizite Verfahren noch nicht konsequent eingesetzt. Einige Gruende dafuer, sowie die zusaetzlichen Schwierigkeiten bei der Entwicklung von impliziten Verfahren fuer mehrdimensionale Modelle werden nun diskutiert.

a) 1-D Modelle

Die implizite Lösung von eindimensionalen Flüssigkeitsmodellen bietet heute kaum noch Probleme. Als Beispiel seien die MHD - Rechnungen von Hain und die Vielzahl der heute verwendeten Transportcodes genannt /6,7,8/.

Die Differenzgleichungen werden dazu so konstruiert, dass nur die Variablen an drei benachbarten Gitterpunkten miteinander verknüpft werden. Das Gleichungssystem (2.2.2) wird dann tridiagonal, bzw. bei Systemen von Differentialgleichungen blocktridiagonal.

Sind die Differentialgleichungen nichtlinear, so können die dann ebenfalls nichtlinearen Differenzgleichungen linearisiert werden. An einer nichtlinearen Diffusionsgleichung wurde gezeigt, dass mit einer geeigneten Linearisierung und $\theta = 1/2$ wieder Abschneidefehler der Ordnung Δt^2 erreicht werden /9/. Die Stabilitätsgrenze wurde fuer derartige Gleichungen theoretisch noch nicht bestimmt, praktische Erfahrungen zeigen aber, dass mit weit grösseren Werten gearbeitet werden kann, als bei expliziten Verfahren. Diese Vorschriften werden auch mit Erfolg auf Systeme angewendet.

Die Aufloesung der dadurch gegebenen algebraischen Gleichungen erfolgt mit einem effektiven Rekursionsalgorithmus. Er gleicht dem Block - Gauss - Algorithmus und wurde schon frueh zur Loesung einer einzelnen Diffusionsgleichung verwendet /10/. Wegen seiner, auch fuer mehrdimensionale Modelle entscheidenden Bedeutung soll er kurz skizziert werden.

Gegeben sei ein System von n_w (nichtlinearen) Differentialgleichungen, der Typ kann parabolisch, hyperbolisch oder gemischt sein. Die (linearisierte) Differenzgleichung fuer die n_w unbekanntnen Variablen $\hat{w}(i)$ am Gitterpunkt i lautet:

$$\underline{C}_1 \hat{w}(i-1) + \underline{C}_2 \hat{w}(i) + \underline{C}_3 \hat{w}(i+1) = \underline{d}. \quad (2.2.9)$$

Man macht den folgenden Rekursionsansatz fuer $\underline{w}(i)$:

$$\hat{w}(i) = \underline{G}(i) \hat{w}(i+1) + \underline{f}(i), \quad i=n-1, \dots, 1. \quad (2.2.10)$$

\underline{G} , $\underline{C}_1 - \underline{C}_3$ sind $n_w * n_w$ - Matrizen, n ist die Zahl der Gitterpunkte. Kombiniert man (2.2.9) mit (2.2.10), erhaelt man die Rekursionsformeln fuer $\underline{G}(i)$ und $\underline{f}(i)$, mit $i=2, \dots, n$:

$$(C_1 \underline{g}(i-1) + C_2) \underline{g}(i) = -C_3 \quad (2.2.11)$$

$$(C_1 \underline{g}(i-1) + C_2) \underline{f}(i) = -C_1 \underline{f}(i-1) + d.$$

Die Randbedingungen liefern $\underline{g}(1)$, $\underline{f}(1)$, und $\hat{w}(n)$.

Mit diesem Algorithmus koennen eine Vielzahl von Problemen behandelt werden, durch die allgemeine Formulierung sind Erweiterungen des Gleichungssystems moeglich, ohne eine wesentliche Aenderung des Rekursionsformalismus notwendig zu machen.

b) 2-D Modelle

Die Argumente fuer implizite Verfahren bleiben bei zweidimensionalen Modellen voll gueltig. Dabei treten aber zwei wesentliche Schwierigkeiten auf. Die Konstruktion impliziter Differenzgleichungen, analog zu den 1-D Modellen, wird wesentlich komplizierter, und die Loesung des linearen Gleichungssystems wuerde sehr viel mehr Speicherplatz und Rechenzeit benoetigen.

Deshalb wurden und werden immer noch explizite Verfahren verwendet /11,12/. Gleichzeitig entwickelten sich zwei Methoden, die Vorteile impliziter Verfahren zu erhalten, ohne den zuvor erwahnten Aufwand erforderlich zu machen. Diese sind jedoch nur beschraenkt anwendbar, deshalb sollen die wichtigsten Nachteile hier beschrieben werden.

Die Aufloesung impliziter Differenzgleichungen durch Iterationsverfahren ist moeglich /13,14/. Dies kann fuer ein ganzes System, oder nur fuer einzelne Gleichungen erfolgen, die anderen werden dann explizit geloest. Moeglich ist auch die block-iterative Loesung /15/. Obwohl die iterative Loesung die Stabilitaetseigenschaften der impliziten Differenzen weitgehend erhaelt, steigt die Zahl der Iterationsschritte, die fuer einen Zeitschritt notwendig sind, jenseits der expliziten Stabilitaetsgrenze sehr stark an. Dadurch wird der Gewinn aus dem groesseren Zeitschritt durch den schneller wachsenden Rechenaufwand wieder ausgeglichen /16/.

Der zweite Weg wird als "Alternating - Direction - Implicit" Verfahren (ADI) bezeichnet und geht auf Peaceman und Rachford zurueck /17/. Dieses Verfahren wird sehr anschaulich von Lindemuth fuer ein MHD - Modell beschrieben /18/.

Besteht ein Differentialoperator allein aus Termen, die sich in zwei Teile aufspalten lassen, die nur laengs einer der beiden Ortskoordinaten wirken, so gilt dies auch fuer den Differenzenoperator. Dazu gehoeren alle ersten und bestimmte zweite Ableitungen, beispielsweise:

$$\frac{\partial w}{\partial x}, \quad w_1 \frac{\partial w_2}{\partial y}, \quad \frac{\partial w_1}{\partial x} \cdot \frac{\partial w_2}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(w_1^\alpha \frac{\partial w_2}{\partial x} \right), \dots$$

Eine Differentialgleichung der beschriebenen Art sei

$$\frac{\partial w}{\partial t} = Xw + Yw \quad (2.2.12)$$

X und Y sind geeignete Differentialoperatoren, X' und Y' die entsprechenden Differenzenoperatoren. Man loest nun zuerst die Gleichung

$$\frac{\tilde{w}_i - w_i}{\Delta t} = X' \tilde{w} + Y' w, \quad (2.2.13)$$

zeilenweise in x - Richtung fuer das gesamte Gitter und danach

$$\frac{\hat{w}_i - \tilde{w}_i}{\Delta t} = X' \tilde{w} + Y' \hat{w} \quad (2.2.14)$$

spaltenweise in y - Richtung. Die Gleichung (2.2.13) ist bezueglich x eine implizite 1-D Differenzengleichung und (2.2.14) bezueglich y. Daher kann fuer diese beiden Gleichungen wieder das aus a) bekannte Rekursionsverfahren und die Diskretisierung in der Zeit angewendet werden.

Eine weitere Vereinfachung liefert ein Verfahren, das unter dem Namen "Splitting" oder "Fractional - Step" - Methode bekannt ist /19/. Dabei werden in den beiden Teilschritten (2.2.13) und (2.2.14) jeweils die expliziten Operatoren ganz weggelassen, so dass nur noch zwei reine 1-D Gleichungen uebrig bleiben.

Sind diese Bedingungen nicht erfuehlt, beispielsweise bei gemischten Ableitungen der Form

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(w_1 \frac{\partial w_2}{\partial y} \right),$$

dann sind ADI - Methoden nicht mehr anwendbar.

Solche Terme sind aber gerade in komplizierteren MHD - Modellen recht zahlreich, etwa die stark anisotrope Waermeleitung bezueglich der Richtung des Magnetfeldes. Durch die Konstruktion eines zu den Flussflaechen orthogonalen Koordinatensystems nach jedem Zeitschritt, koennen die anisotropen Transporttensoren unter Umstaenden wieder diagonalisiert werden /20, 21/.

Die denkbare explizite Behandlung von gemischten Ableitungen zusammen mit impliziten Differenzen fuer andere Terme, verschlechtert die Genauigkeit und den Stabilitaetsbereich der numerischen Loesung.

Im Gegensatz zu den eindimensionalen Rechnungen existiert also fuer zweidimensionale Modelle noch kein Verfahren, das die Konstruktion und Loesung von impliziten Differenzgleichungen, z.B. fuer Diffusionsgleichungen mit gemischten Ableitungen, ohne die angefuhrten Einschränkungen bezueglich des Rechenaufwandes, oder der Form der Differentialgleichungen erlaubt.

c) 3-D Modelle

Diese Komplikationen und Einschränkungen treten noch verstaerkt bei dreidimensionalen Modellen auf. Zwar wurde schon 1969 von Petravac et al. An Hand eines expliziten "Leap - Frog" - Schemas fuer ein MHD - Modell mit 8 Variablen gezeigt, dass dies z.B. auf einer IBM 360/91 fuer ein Gitter mit $64 \times 64 \times 64$ Punkten durchfuehrbar sein sollte, aber dieses Verfahren ist numerisch nicht stabil /22/.

Die Konstruktion von ADI - oder "Splitting" Verfahren ist nur unter den in b) genannten Bedingungen moeglich. Die Elimination gemischter Ableitungen durch geeignete Koordinatensysteme ist nur in Ausnahmefaellen zu verwirklichen.

Als Beispiel fuer ein erprobtes Verfahren sei ein Programm von Brackbill genannt /23/. Die Gleichungen werden zum Teil explizit und zum Teil implizit durch Iteration jeloest. Besonders elegant ist dabei die gemischte Euler - Lagrange - Formulierung durch Einfuehrung einer frei wahlbaren Relativgeschwindigkeit zwischen Gitter und Fluessigkeit.

Ein spezielles explizites Verfahren ist die von Schlueter und Chodura verfolgte Methode zur Erweiterung der Stabilitaetsgrenze (2.2.6) fuer Diffusionsgleichungen. Dabei soll ein Diffusionsgleichungssystem zur Berechnung dreidimensionaler MHD - Gleichgewichte dienen /24/. Dieses Gleichungssystem wird in Kapitel 4 als 2-D Testbeispiel verwendet.

2.3 Motivation fuer ein allgemeines implizites 2-D Differenzenverfahren

Eine Beurteilung der verschiedenen, eben angesprochenen Verfahren ergibt folgendes Bild.

Die eindimensionalen Verfahren lassen sich formal zu den Gleichungen (2.2.9) - (2.2.11) zusammenfassen.

Die Differenzengleichungen koennen implizit aufgebaut werden, durch geeignete Vorschriften lassen sich die Ausdruecke fuer die Koeffizienten der unbekanntnen Variablen sogar durch die Rechenmaschine selbst erzeugen /25/. Dies erlaubt die Erweiterung einzelner Gleichungen um zusaetzliche Terme ohne die urspruenglichen Gleichungen neu verschlüsseln zu muessen.

Fuer die Aufloesung des linearisierten Gleichungssystems gibt es einen Loesungsalgorithmus, der einmal programmiert, fuer verschiedene Probleme unveraendert eingesetzt werden kann. Dabei muss nur die Zahl der Gleichungen, also die Dimension der Matrizen in (2.2.9) - (2.2.11), als Parameter eingefuehrt werden.

Die Art der Aufloesung des Gleichungssystems erlaubt die Ausnutzung des vollen Stabilitaetsbereiches impliziter Differenzen, dadurch wird der Einfluss verschiedener Zeitskalen auf die numerische Loesbarkeit verringert.

Bei den zwei- und dreidimensionalen Verfahren werden mehrere spezielle Wege verfolgt. Dazu gehoeren die ADI - Methoden, deren Einsatz bei der Behandlung gemischter Ableitungen nicht moeglich ist. Diese Einschraenkung entfaellt zwar bei der iterativen Loesung, da fuer steigt der Rechenaufwand fuer deutlich ueber der expliziten Stabilitaetsgrenze liegende Zeitschritte zu stark an.

Haeufig werden die Gleichungen eines Systems nicht simultan fuer einen Zeitschritt geloest oder nur teilweise implizit formuliert. Solche Hybridverfahren sind deshalb von Fall zu Fall speziell zu entwickeln. Schon kleine Aenderungen des physikalischen Modells koennen dabei ein voellig neues Programmkonzept erzwingen.

Das Ziel dieser Arbeit ist es daher, ein Verfahren zu entwickeln, das die Konstruktion und Loesung von impliziten Differenzengleichungen fuer mehrdimensionale Fluessigkeitsmodelle erlaubt. Der Aufbau der Differenzengleichungen soll so erfolgen, dass die Vorschriften auf moeglichst viele der in Fluessigkeitsmodellen auftretenden Differentialgleichungen anwendbar sind. Dazu gehoeren insbesondere die MHD - Gleichungen.

Die Aufgabe, Differenzengleichungen mit kontrollierbaren Konsistenz- und Stabilitaetseigenschaften zu erzeugen, wird durch Integration der Differentialgleichungen ueber das

Volumen der Gitterzellen mit Hilfe geeigneter Interpolationsfunktionen gelöst. Die Diskretisierung in der Zeit erfolgt analog zu den erwähnten impliziten Differenzenverfahren fuer nichtlineare Diffusionsgleichungen in einer Raumdimension.

Die "INtegral - IMplizit" - Methode (INIM) ermöglicht den Aufbau eines Programmgenerators. Dieser soll symbolisch formulierte Differentialgleichungen oder einzelne Differentialterme automatisch in Ausdrücke fuer die Koeffizienten eines linearen Gleichungssystems umwandeln. Die dazu erforderlichen algebraischen Umformungen sind sehr umfangreich. Dies legt den Einsatz algebraischer Programmiersprachen nahe.

Zur Aufloesung des algebraischen Gleichungssystems wird ein effektives Verfahren beschrieben, das abgesehen von Rundungsfehlern exakt ist. Iterationsverfahren werden also auch wegen der schon angesprochenen Nachteile ausgeschlossen.

Das Verfahren fuer die Aufloesung wird so aufgebaut werden, dass es fuer einzelne Gleichungen und fuer Systeme gleichermaßen verwendbar wird. Dadurch wird der Kernteil des Programmes, die Neuberechnung der unbekanntten Werte der Variablen aus dem Gleichungssystem unabhængig von Typ und Zahl der zu loesenden Differentialgleichungen.

3. D A S I N I M V E R F A H R E N

3.1 Einfuehrung

Die Argumente fuer die Entwicklung eines impliziten Loesungsverfahrens fuer zweidimensionale Fluessigkeitsmodelle wurden im vergangenen Kapitel gegeben. Dabei spielten vor allem die Stabilitaetseigenschaften und die vielseitige Anwendungsmoeglichkeit eine besondere Rolle. Ohne diese einzuschaerfen, muessen derzeit drei Voraussetzungen erfuehrt sein, damit das INIM - Verfahren einsetzbar ist.

Es werden nur orthogonale Koordinatensysteme zugelassen und die Differentialgleichungen muessen in diesen Koordinaten in Euler'scher Form geschrieben werden koennen. Dies trifft fuer eine grosse Klasse von interessanten Fluessigkeitsmodellen zu, bei mehreren Fluessigkeiten mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten, oder komplizierteren Stroemungen kann dies sogar die einzige Moeglichkeit sein.

Die Untersuchung der zu entwickelnden Differenzen auf ihre Eignung fuer verschiedene typische Differentialgleichungen aus Fluessigkeitsmodellen ist ein Hauptziel dieser Arbeit. Dazu erweist sich ein rechteckiges Indexgitter als ausreichend. Die Behandlung der Randbedingungen wird uebersichtlicher, und vor allem die Aufloesung der linearen Gleichungssysteme ohne fuer das Verfahren zunaechst uninteressante Komplikationen moeglich.

Die Ableitung der Diskretisierungsvorschriften setzt, abgesehen von einigen allgemeinen Regeln, keine speziellen Eigenschaften der Differentialgleichungen voraus. Dadurch ergeben sich die geforderte Allgemeinheit der Methoden und die Moeglichkeit zur getrennten Behandlung des linearen Gleichungssystems.

Diese Zweiteilung erleichtert auch die praktische Durchfuehrung. Durch den getrennten Aufbau eines Programmgenerators und eines Rahmenprogramms wird die Vielseitigkeit des INIM - Verfahrens begruendet.

3.2 Integration und Diskretisierung im Ort

Hier werden die Vorschriften entwickelt, nach denen die zu loesenden Differentialgleichungen durch Integration im Ort unter Anwendung einfacher Integralsaetze und geeigneter Interpolationsfunktionen in "Differenzgleichungen" umgewandelt werden, die folgende Eigenschaften haben sollen:

Die zeitliche Entwicklung der einzelnen Variablen wird nicht punktweise, sondern durch Integralwerte fuer das Volumen der Gitterzellen beschrieben;

die physikalischen Eigenschaften, z.B. die Flusserhaltung bei Divergenztermen, werden konsequent erhalten;

die Konsistenz mit den Differentialgleichungen soll bei aequidistanten Gittern mindestens von zweiter Ordnung in den Ortsschrittweiten sein, sie wird durch die Beruecksichtigung von Termen hoeherer Ordnung noch verbessert;

die Differentialgleichungen koennen Ableitungen bis zu zweiter Ordnung enthalten, dies ermoeoglicht die Approximation aller zugelassenen Differentialterme fuer die Werte der Variablen in maximal neun benachbarten Gitterzellen.

Zur Demonstration der Integrationsvorschrift geht man von einer Gleichung in der allgemeinen Form (3.2.1) aus:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = L(w) \quad (3.2.1)$$

Hier steht w fuer eine der abhaengigen Variablen, $L(w)$ enthaelt die Ortsoperatoren, die im Falle eines Systems auch auf die anderen Variablen wirken werden. Die Integration ueber das Volumen $V(k)$ der k -ten Zelle liefert dann:

$$\frac{\partial}{\partial t} w(k) = \int_{V(k)} L(w) dV \quad (3.2.2)$$

Hier wurde $w(k)$ als Integralwert der Groesse w in der Zelle k eingefuehrt.

Die Integration im Ort erfolgt in zwei Stufen.

Zunaechst werden durch Anwendung einfacher Integralsaetze (Gauss'scher Satz, partielle Integration etc.) alle zweiten Ableitungen eliminiert, oder allgemeiner gesagt, die Ordnung der vorkommenden Ableitungen so weit wie moeglich reduziert. Dieser Schritt wird mit "exakte" Integration bezeichnet, da in die dabei entstehenden Integro - Differentialgleichungen noch keine Naehierungen eingesetzt werden.

Der zweite Schritt, die Integration mit Hilfe von geeigneten Ansätzen fuer den Funktionsverlauf zwischen den Gitterpunkten, liefert die gesuchten nichtlinearen algebraischen Gleichungen, die dann in der Zeit diskretisiert werden. Die Ableitungen werden fuer ein x-y Koordinatensystem demonstriert, die Uebertragung auf andere orthogonale Koordinatensysteme ist danach in einfacher Weise moeglich.

3.2.1 "Exakte" Integrationen

Darunter sind alle Integrationsschritte zu verstehen, die sich ohne Kenntnis des Funktionsverlaufes durch exakte Rechnungen ausfuehren lassen.

Als erstes Beispiel dient die Kontinuitaetsgleichung

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div}(g) = 0 \quad (3.2.3)$$

Hier steht w fuer eine beliebige Erhaltungsgroesse, z.B. Teilchenzahl, Impuls, oder Energie, und g fuer die Teilchen-, Impuls-, oder Energiestromdichte.

Die Anwendung des Gauss'schen Satzes liefert ein Oberflaechenintegral:

$$\frac{\partial}{\partial t} w(k) + \int_{S(k)} g \underline{df} = 0 \quad (3.2.4)$$

$S(k)$ ist dabei die $V(k)$ einhuellemde Flaechen, und \underline{df} der nach aussen gerichtete Normalenvektor mit dem Betrag des Flaechenelementes. Die Beschaerung auf orthogonale Gitter fuehrt zu einer wesentlichen Vereinfachung der Rechnungen. In einem zweidimensionalen Modell besteht (3.2.4) dann nur aus einer Summe von einfachen Integralen ueber je eine der Komponenten von g laengs der dazu orthogonalen Ortsvariablen.

Aehnlich kann man bei Differentialausdruecken der Form

$$\frac{\partial g(w)}{\partial x}, \quad g(w) := g(w, \frac{\partial w}{\partial x}, \frac{\partial w}{\partial y})$$

vorgehen:

$$\int_{x_1 y_1}^{x_2 y_2} \frac{\partial g(w)}{\partial x} dx dy = \int_{y_1}^{y_2} g(w) \Big|_{x_1}^{x_2} dy \quad (3.2.5)$$

$g(w)$ ist eine beliebige Funktion von w und dessen ersten Ableitungen. Auch hier reduziert sich die Ordnung der Ableitungen, und es entstehen einfache Integrale.

Analoge Ueberlegungen erlauben fuer einige Typen von Termen die Umwandlung durch partielle Integration. Dabei wird ebenfalls die Ordnung der Ableitungen um eins erniedrigt, allerdings bleibt diesmal neben einem einfachen Integral auch ein Doppelintegral.

$$\int_{x_1 y_1}^{x_2 y_2} \frac{\partial g(w)}{\partial x} h(w) dx dy = \int_{y_1}^{y_2} g(w) h(w) \Big|_{x_1}^{x_2} dy - \int_{x_1 y_1}^{x_2 y_2} g(w) \frac{\partial h(w)}{\partial y} dx dy \quad (3.2.6)$$

Hier ist g definiert wie in (3.2.5), h haengt nur von w ab.

Damit ist die Vorbereitung der Differentialgleichungen fuer die weitere Verarbeitung mit dem in Abschnitt 3.6 naeher beschriebenen Programmgenerator abgeschlossen. Die wesentlichen Punkte dabei waren:

Der Ortsoperator einer Differentialgleichung kann soweit integriert werden, dass die im Integranden vorkommenden Ableitungen von hoechstens erster Ordnung sind. Es gibt zwei Integraltypen: Einfache Integrale, die z.B. nach Anwendung des Gauss'schen Satzes entstehen, bzw. Doppelintegrale als Ergebnis einer partiellen Integration oder bei Termen, die ohne Kenntnis des Funktionsverlaufes nicht analytisch vorbehandelt werden koennen.

3.2.2 Integration mit Interpolationsfunktionen

Die Annahmen ueber den Funktionsverlauf im Inneren und auf den Raendern der Zellen ist von entscheidender Bedeutung fuer die Durchfuehrbarkeit und den Erfolg des Verfahrens, vergleichbar mit der Auswahl von Basisfunktionen bei der Methode der finiten Elemente. Abgesehen von deren Einfluss auf Konsistenz, Konvergenz und Stabilitaet, bestimmen sie auch die Struktur des algebraischen Gleichungssystems, das bei der impliziten Loesung entsteht.

Die Ortsschrittweiten, die Definitionspunkte der Variablen und das Integrationsgebiet werden anhand von Bild (3.1) festgelegt. Das Bild zeigt einen Ausschnitt aus einem orthogonalen nichtaequidistanten Gitter. Das stark gezeichnete Gitter repraesentiert die Unterteilung des Rechengebietes in die Elementarvolumina, ueber die die Integrationen ausgefuehrt werden. Das durch die Knotenpunkte laufende duennere bestimmt die jeweiligen

Koordinaten, z.B. $x(i)$, $y(j)$, und die entsprechenden Ortschrittweiten.

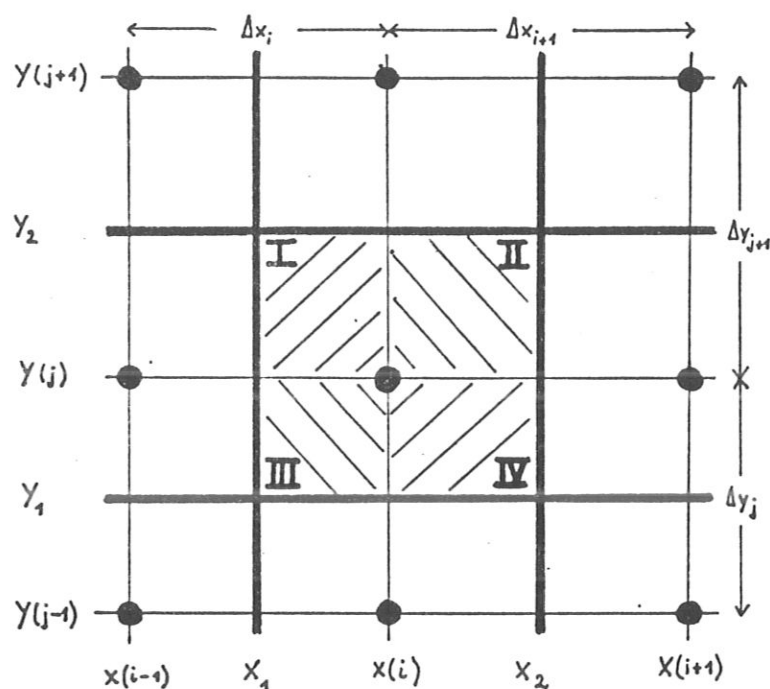


Bild (3.1) Das Integrationsgebiet, Ortsschrittweiten

Die Integralwerte der Variablen in den einzelnen Zellen werden den Knotenpunkten des Gitters zugeordnet. Das Integrationsgebiet und das Zellenvolumen $V(i, j)$ sind gegeben durch:

$$x_1 \leq x \leq x_2, \quad y_1 \leq y \leq y_2, \quad V(i, j) = (x_2 - x_1) (y_2 - y_1),$$

$$x_1 = (x(i) + x(i-1))/2, \quad \dots, \quad y_2 = (y(j+1) + y(j))/2. \quad (3.2.7)$$

Das Integral aus 3.2.2 erhaelt die Form:

$$\frac{\partial}{\partial t} w(i, j) = \iint_{x_1 y_1}^{x_2 y_2} L(w) \, dx \, dy. \quad (3.2.8)$$

Die Interpolationsfunktionen fuer die Variablen muessen

- zur Darstellung der Integranden in (3.2.4) mindestens einmal differenzierbar sein,
- zur Gewaehrleistung lokaler physikalischer Erhaltungseigenschaften ueber die Zellenwaende stetig sein, und
- die Minimalisierung des Aufwandes fuer die symbolischen Rechnungen erlauben.

Versucht man einen Ansatz zu finden, der ueber das ganze Zellenvolumen definiert ist, stellt man fest, dass diese Forderung nicht zusammen mit der Stetigkeitsbedingung erfuehrt werden kann.

Die Loesung bietet sich aber in Bild (3.1) direkt an: Das duennere Gitter teilt die durch neun Knotenpunkte begrenzte Flaechen in vier Quadranten, im Bild gekennzeichnet durch die roemischen Ziffern I - IV. Den Knotenpunkten wurden schon frueher die Integralwerte der sie umgebenden Zelle zugeordnet. Der einfachste Ansatz, der die obengenannten Forderungen erfuehrt, ist eine Taylorentwicklung in jedem Quadranten bis zur ersten Ordnung in den Koordinaten x und y unter Hinzunahme des bilinearen Gliedes:

$$w(x,y) = k^1xy + k^2x + k^3y + k^4. \quad (3.2.9)$$

Die Koeffizienten $k^1 \dots k^4$ werden durch die Forderung eindeutig bestimmt, dass der Ansatz (3.2.9) an den Eckpunkten eines Quadranten, also den Knotenpunkten, die dort definierten Werte einnimmt. Die $k^1 \dots k^4$ haengen nur von den vier Eckwerten und den Ortsschrittweiten ab. Diese Bilinearfunktionen sind stetig ueber die Zellenwaende und nach beiden Koordinaten je einmal differenzierbar.

Die damit gebildeten Naehierungsfunktionen fuer die Integranden sind einfache Potenzreihen in den Koordinaten und eignen sich daher besonders fuer die Integration mit einer symbolischen Programmiersprache. Es werden vorlaeufig nur Integranden zugelassen, in denen ganzzahlige Potenzen mit Exponenten > 0 vorkommen. Die allgemeine Form dafuer lautet mit m Produktermen:

$$I(x,y) = \sum_{l=1}^m a(l) \prod_{k=1}^{nw} \left[w(k)^{\alpha(k,l)} \left(\frac{\partial w(k)}{\partial x} \right)^{\beta(k,l)} \left(\frac{\partial w(k)}{\partial y} \right)^{\gamma(k,l)} \right], \quad (3.2.10)$$

$$\alpha(k,l), \beta(k,l), \gamma(k,l) = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Alle Terme in (3.2.10) sind durch Ansaetze der Form (3.2.9) und deren ersten Ableitungen darstellbar. Zusammenfassung nach Potenzen von x und y liefert die Reihe

$$I(x,y) = \sum_{l=0}^{1 \max} p(l)x^l + \sum_{k=0}^{k \max} q(k)y^k + \sum_{m=1}^{m \max} \sum_{n=1}^{n \max} r(m,n)x^m y^n. \quad (3.2.11)$$

Die maximalen Potenzen sind durch (3.2.10) festgelegt, damit ist $I(x,y)$ elementar integrierbar.

Oberflaechen- und verwandte Integrale bestehen aus einer Summe von einfachen Integralen ueber je eine der unabhaengigen Ortskoordinaten laengs der Raender der Teilintervalle, Volumenintegrale aus Doppelintegralen ueber beide Koordinaten in den vier Quadranten.

Daraus lassen sich einige Symmetrieeigenschaften ablesen, die fuer die Oberflaechenintegrale spezielle Speichertaktiken ermoeglichen. Dies ist in Bild (3.2) verdeutlicht.

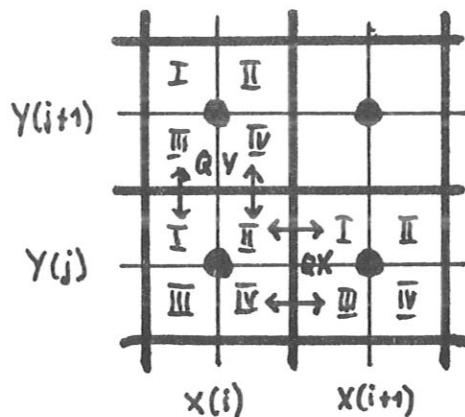


Bild (3.2) Umspeicherung bei Oberflaechenintegralen

Wegen der Stetigkeit aller Funktionen ueber die Zellenwaende lassen sich beim Uebergang von der Zelle (i, j) zu (i+1, j) oder von (i, j) nach (i, j+1) die Integrale ueber die Flussterme QX bzw. QY, und damit alle Koeffizienten nach der Vorschrift (3.2.12) uebergeben:

$$\begin{array}{ll}
 (i, j) \rightarrow (i+1, j) & (i, j) \rightarrow (i, j+1) \\
 QX-II \rightarrow -QX-I & QY-I \rightarrow -QY-III \\
 QX-IV \rightarrow -QX-III & QY-II \rightarrow -QY-IV
 \end{array} \quad (3.2.12)$$

In jeder Zelle muessen also nur QY-I/II und QX-II/IV neu berechnet werden, ausser an den Raendern bei $i=1$ und $j=1$, wo Startwerte fuer die Umspeicherung benoetigt werden.

Die Volumenintegrale werden fuer jeden Quadranten gesondert ausgefuehrt, die entsprechenden Terme heissen V-I...IV.

Die QX-, QY- und V-I...IV bestehen aus nichtlinearen Produkten der einzelnen Entwicklungskoeffizienten KP (l, k) und den durch die Integrationen entstandenen Geometriefaktoren.

Die $k^1 \dots k^4$ aus (3.2.9) fuer alle Variablen werden nun in die integrierten Ausdruecke eingesetzt, dabei muss die Einteilung in die vier Quadranten beruecksichtigt werden.

Solche Ausdruecke lassen sich allgemein durch eine Summe von Produkten der $w(i, j, k)$ darstellen. Die Zahl der Multiplikatoren in den einzelnen Summanden ist durch den urspruenglichen Differentialterm bestimmt.

$$S = \sum_{l=1}^m s(1) \prod_{k=1}^{nw} w(p(1), q(k))^{\delta(1,k)}, \quad \delta(1,k) = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.13)$$

Der Index $p(1)$ symbolisiert die dabei auftretenden Permutationen der Ortsindizes, $q(k)$ die der Variablenindizes.

Als Beispiel diene der Konvektionsterm

$$\underline{q} = n \cdot \underline{v}, \quad \underline{v} = (v_x, v_y) \quad (3.2.14)$$

Die Anwendung des Gauss'schen Satzes liefert im zweiten Quadranten:

$$\int_{x(i)y(j)}^{x_2 y_2} q \, dx \, dy = \int_{x(i)}^{x_2} (n v_y) \Big|_{y_2} dx + \int_{y(j)}^{y_2} (n v_x) \Big|_{x_2} dy + U \quad (3.2.15)$$

Die Integrale laengs $x=x(i)$ und $y=y(j)$, hier zusammengefasst zu U , heben sich wegen der Stetigkeit und der erwaehnten Symmetrieeigenschaften nach der Addition der Integrale aus allen Quadranten gerade heraus. Die Variablen werden durch die Ansaetze

$$\begin{aligned} n(x,y) &= k_n^1 xy + k_n^2 x + k_n^3 y + k_n^4 \\ v_x(x,y) &= k_x^1 xy + k_x^2 x + k_x^3 y + k_x^4 \\ v_y(x,y) &= k_y^1 xy + k_y^2 x + k_y^3 y + k_y^4 \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

dargestellt. Die einzelnen Integrale in (3.2.15) lauten

$$\int_{x(i)}^{x_2} \{ (y_2)^2 k_n^1 k_y^1 + \dots \} x^2 + \{ \dots + y_2 k_n^2 k_y^3 + \dots \} x + \{ \dots + y_2 k_n^3 k_y^4 + \dots \} dx$$

$$\int_{y(j)}^{y_2} \{ (x_2)^2 k_n^1 k_x^1 + \dots \} y^2 + \{ \dots + x_2 k_n^2 k_x^3 + \dots \} y + \{ \dots + x_2 k_n^3 k_x^4 + \dots \} dy \quad (3.2.17)$$

Setzt man nun die Entwicklungskoeffizienten aus (3.2.16) in (3.2.17) ein, ergibt sich die gewünschte Form. Sie enthält nur noch Produkte der Variablen an den Eckpunkten und Ortsfaktoren.

3.3 Diskretisierung und Linearisierung in der Zeit

Die Diskretisierung im Ort führte zu den nichtlinearen Gleichungen (3.2.13). Diese müssen nun in linearisierte implizite "Differenzgleichungen" umgewandelt werden, die für eine direkte Auflösung des dadurch gebildeten algebraischen Gleichungssystems geeignet sind.

Implizite Differenzgleichungen haben die allgemeine Form (siehe Kapitel 2):

$$g(\hat{\underline{w}}, \underline{w}, \Delta t) = 0. \quad (2.2.2)$$

Dabei ist g eine nichtlineare Funktion der N unbekannt Werte zur "neuen" Zeit $\hat{t} = t + \Delta t$, der N bekannten zur Zeit t , und des Zeitschrittes Δt . Die verwendeten Zeitniveaus verdeutlicht Bild (3.3).

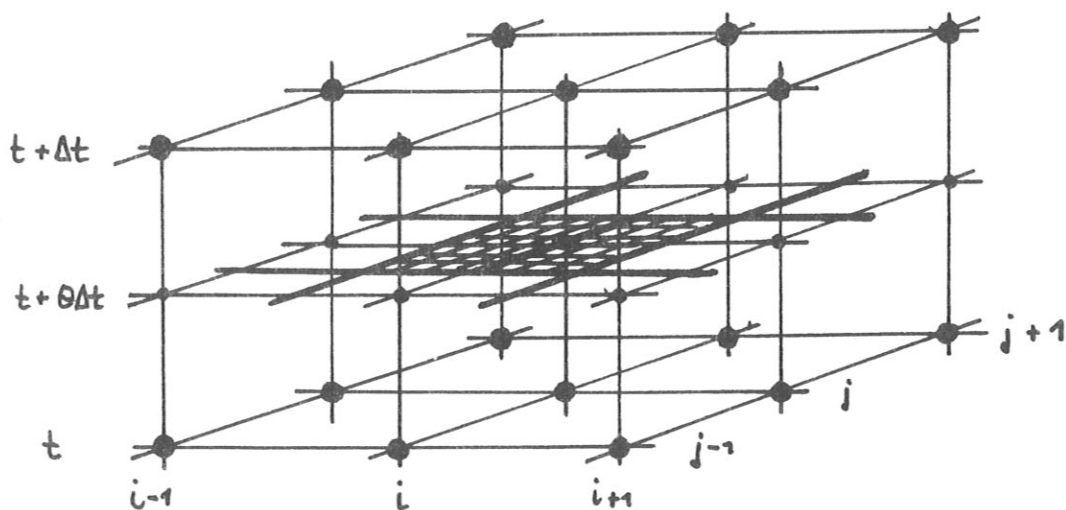


Bild (3.3) Die Zeitniveaus

Man sieht zwei Hauptniveaus und ein Zwischenniveau, in

dem das in Bild (3.1) festgelegte Integrationsgebiet gekennzeichnet ist. Die Gleichung (2.2.2) enthaelt nur zwei Zeitniveaus, das Zwischenniveau muss durch Interpolation dargestellt werden. Alle Zeitableitungen werden durch die uebliche Differenz angenaehert und sind um $t+\Delta t/2$ zentriert:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w(i,j)) \approx \frac{1}{\Delta t} (\hat{w}(i,j) - w(i,j)) \quad (3.3.1)$$

Die nichtlinearen Ortsterme sollen bei $t+\theta\Delta t$ dargestellt werden. Dazu werden die in Kapitel 2 erwahnten Linearisierungsvorschriften fuer 1-D Gleichungen verwendet. Eine analytische Untersuchung der dabei entstehenden Diskretisierungsfehler ist wegen der ungleich komplizierteren Gleichungen nicht moeglich.

Mit Hilfe einer algebraischen Programmiersprache kann durch Einsetzen von Taylorentwicklungen fuer die Variablen in die Differenzgleichungen fuer einzelne Gleichungen zumindest die Konsistenz ueberprueft werden.

Die Wahl von $\theta \geq 1/2$ sollte zu Stabilitaetseigenschaften und Diskretisierungsfehlern fuehren, die denen von 1-D Differenzgleichungen aequivalent sind.

Zur Linearisierung entwickelt man alle Variablen um die Zeit t in eine Taylorreihe bis zur ersten Ordnung in Δt und vernachlaessigt in Produkttermen ebenfalls alle Glieder hoeherer Ordnung. Dann lautet die Linearisierungsvorschrift fuer ein allgemeines Produkt von m Variablen mit beliebigen Exponenten

$$\begin{aligned} \widetilde{\prod_{l=1}^m w_l^{\alpha_l}} &\approx \left(\prod_{l=1}^m w_l^{\alpha_l} \right)^{-1} \cdot \left\{ \theta \sum_{k=1}^m (\alpha_k \hat{w}_k \prod_{j=1}^m w_j \prod_{j=k+1}^m w_j) \right. \\ &\quad \left. + (1 - \theta \sum_{k=1}^m \alpha_k) \prod_{k=1}^m w_k \right\} \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Einige einfache, haeufig auftretenden Kombinationen lauten mit $\theta = 1/2$:

$$\widetilde{w_1} = \frac{1}{2} (\hat{w}_1 + w_1), \quad \widetilde{w_1^2} = \hat{w}_1 w_1, \quad \widetilde{w_1^3} = \frac{1}{2} w_1^2 (3\hat{w}_1 - w_1),$$

$$\widetilde{w_1 w_2} = \frac{1}{2} (\hat{w}_1 w_2 + w_1 \hat{w}_2), \quad \widetilde{w_1 w_2^2} = \frac{1}{2} w_2 (w_1 w_2 + 2w_1 \hat{w}_2 - w_1 w_2) \quad (3.3.3)$$

$$\widetilde{w_1 w_2 w_3} = \frac{1}{2} (\hat{w}_1 w_2 w_3 + w_1 \hat{w}_2 w_3 + w_1 w_2 \hat{w}_3 - w_1 w_2 w_3)$$

Die Vorschrift (3.3.2) wird auf alle Terme aus (3.2.13) angewendet und fuehrt nach der Zusammenfassung der Beitraege aus allen Quadranten auf die linearisierte Differenzgleichung in einer Gitterzelle:

$$\sum_{l=i-1}^{i+1} \sum_{m=j-1}^{j+1} \sum_{k=1}^{nw} c(l,m,k) \cdot \hat{w}(l,m,k) = d \quad (3.3.4)$$

Die $c(l,m,k)$ entsprechen den Koeffizienten von $\hat{w}(1)$ bis $\hat{w}(m)$ zur Zeit $t+\Delta t$ aus (3.3.2), zusammen mit Integrationskonstanten. Die zentralen Koeffizienten $c(i,j,k)$ enthalten zusaetzlich die $1/\Delta t$ Terme aus den diskretisierten Zeitableitungen (3.3.1). Gleichung (3.3.4) verknuepft wie eingangs verlangt neun benachbarte Zellen miteinander. Hierbei laeuft der Index k ueber nw , die Zahl der Variablen. Es gibt bei nw Gleichungen $nw \cdot (9 \cdot nw)$ Koeffizienten $c(l,m,k)$ und nw Terme $d(k)$, die fuer $(ni-2) \cdot (nj-2)$ Punkte bestimmt werden.

Die nichtlinearen Integro - Differentialgleichungen aus Abschnitt 3.2.1 koennen also durch eindeutig bestimmte Operationen in einen Satz von Koeffizienten fuer die unbekanntene Werte der Variablen bei $t+\Delta t$ verwandelt werden. Die algebraische Darstellung (3.3.4) ist in ihrer Grundstruktur unabhaengig von Typ und Zahl der Terme in den Differentialgleichungen und bestimmt zusammen mit den diskretisierten Randbedingungen das lineare Gleichungssystem, das in Abschnitt 3.5 behandelt wird.

3.4 Randbedingungen

Bei dem verwendeten rechteckigen Gitter gibt es zwei Moeglichkeiten, den physikalischen Rand zu definieren:

- Der Rand wird mit Zellenwaenden identifiziert, er liegt also zwischen zwei Knotenpunkten, dann koennen Randbedingungen beruecksichtigt werden, die erste Ableitungen (und die Variablen) enthalten;
- der Rand geht durch Knotenpunkte, dann lassen sich nur Funktionen der Variablen selbst vorgeben.

Die beiden Moeglichkeiten zeigt Bild (3.4) am Beispiel einer Randzelle bei $i=1,2$. Im ersten Fall sind die Randzellen genauso definiert wie im Inneren, und die Punkte ausserhalb des Randes dienen nur zur Darstellung der Randbedingungen (Bild (3.4a)). Im zweiten Fall bestehen die Randzellen nur aus zwei, statt vier Teilvolumina (Bild (3.4b)). Die Diskretisierung der Randbedingungen in den

Randzellen kann durch analoge Integrationen wie bei den Differentialgleichungen im Inneren erfolgen - die Linearisierung wird dann ebenfalls beibehalten.

In einfachen Faellen, etwa bei der Vorgabe der Variablen als Funktion der Zeit auf dem Rand, koennen die Randbedingungen ohne Integration oder Linearisierung zur neuen Zeit beruecksichtigt werden.

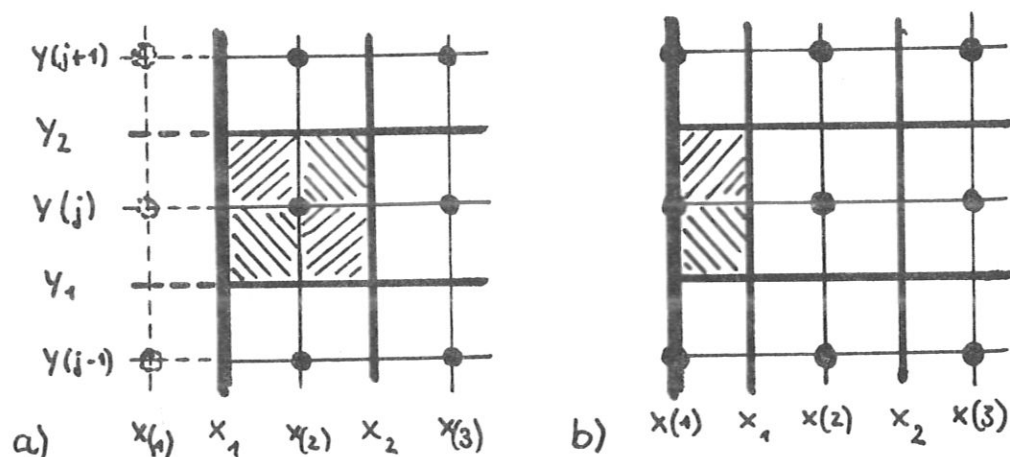


Bild (3.4) Festlegung des physikalischen Randes:
 a) Rand identisch mit Zellengrenze
 b) Rand durch Knotenpunkte

Unabhaengig von der gewaehlten Diskretisierung werden die Randbedingungen als lineare Beziehung zwischen den Variablen in sechs Randzellen geschrieben. Die Gleichung fuer die Zelle bei $i=1,2$ und j lautet:

$$\sum_{l=1}^2 \sum_{m=j-1}^{j+1} \sum_{k=1}^{nw} b(l,m,k) \cdot \hat{w}(l,m,k) = a \quad (3.4.1)$$

Eine solche Formulierung ist bei parabolischen Differentialgleichungen immer moeglich. Bei hyperbolischen Problemen mit aus dem Rechengebiet laufenden Charakteristiken, etwa bei Ueberschallstroemungen durch den Rand, muessen geeignete Extrapolationsformeln gesucht werden. Darauf soll hier nicht naeher eingegangen werden, da dies nur bei bestimmten Problemen auftritt und deshalb keine spezifische Beschraenkung des INIM - Verfahrens darstellt.

3.5 Das Algebraische Gleichungssystem

In den ersten Abschnitten dieses Kapitels wurde die Ableitung der linearisierten Differenzgleichungen (3.3.4) und (3.4.1) beschrieben. Dabei gingen vor allem die lokalen Eigenschaften der Differentialgleichungen und des Gitters ein. Die Bedingung, in der Gleichung (3.3.4) nur neun, bzw. in (3.4.1) nur sechs benachbarte Gitterpunkte zuzulassen, bestimmt die Struktur des algebraischen Gleichungssystems.

Zur Verdeutlichung dieser Eigenschaften dient das in Bild (3.5) gezeigte Indexgitter.

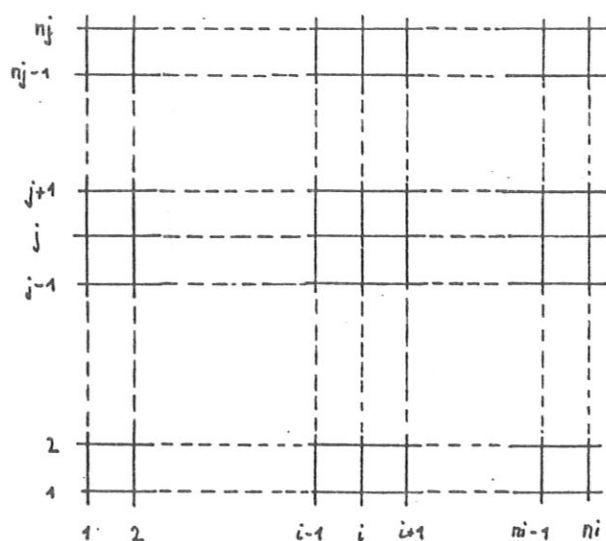


Bild (3.5) Das Indexgitter

Es wird bewusst auf die Zuordnung von konkreten Koordinaten an die Indizes verzichtet, da die folgenden Ausführungen fuer jedes solche Indexgitter gelten. Die Zahl der Knotenpunkte in i -Richtung ist n_i , die in j -Richtung n_j . Die Zahl der Gleichungen wurde schon frueher mit n_w bezeichnet. Die Gesamtzahl der waehrend eines Zeitschritts neu zu berechnenden Werte ist

$$N = n_i * n_j * n_w .$$

Die Zuordnung der in Bild (3.1) und (3.3) eingefuehrten Indizes an das Gitter sind einsichtig.

3.5.1 Struktur und allgemeine Eigenschaften

Die Aufstellung des Gleichungssystems geschieht durch die Zusammenfassung der unbekanntenen Variablen in einen Vektor \hat{w} .

der Laenge N . Die Reihenfolge ist dabei durch i, j und k festgelegt - das m -te Element von \hat{w}' wird wie folgt $\hat{w}(i, j, k)$ zugeordnet:

$$\hat{w}' := (\hat{w}(1, 1, 1), \hat{w}(1, 1, 2), \dots, \hat{w}(i, j, k), \dots, \hat{w}(n_i, n_j, n_w))$$

$$m = k + (i-1) \cdot n_w + (j-1) \cdot n_w \cdot n_i$$

Da die algebraischen Beziehungen (3.3.4) und (3.4.1) fuer jede einzelne Gitter- (Rand-) Zelle bekannt sind, ist die Koeffizientenmatrix \underline{c}' und das Gleichungssystem bestimmt:

$$\underline{c}' * \hat{w}' = \underline{d}' \quad (3.5.1)$$

Bei nichtlinearen Differentialgleichungen muss die Koeffizientenmatrix waehrend jedes Zeitschritts vollkommen neu berechnet werden, da die Koeffizienten in (3.3.4) und (3.4.1) die Werte der Variablen zur Zeit t enthalten. Die Struktur der Koeffizientenmatrix \underline{c}' zeigt Bild (3.6). Man erkennt eine zweifache tridiagonale Einteilung, die drei globalen Diagonalbaender haben den Abstand $n_i \cdot n_w$. Die Breite ist jeweils $3 \cdot n_w$, abgesehen von den Zeilen im Abstand $n_i \cdot n_w$, die die Koeffizienten der Randbedingungen enthalten.

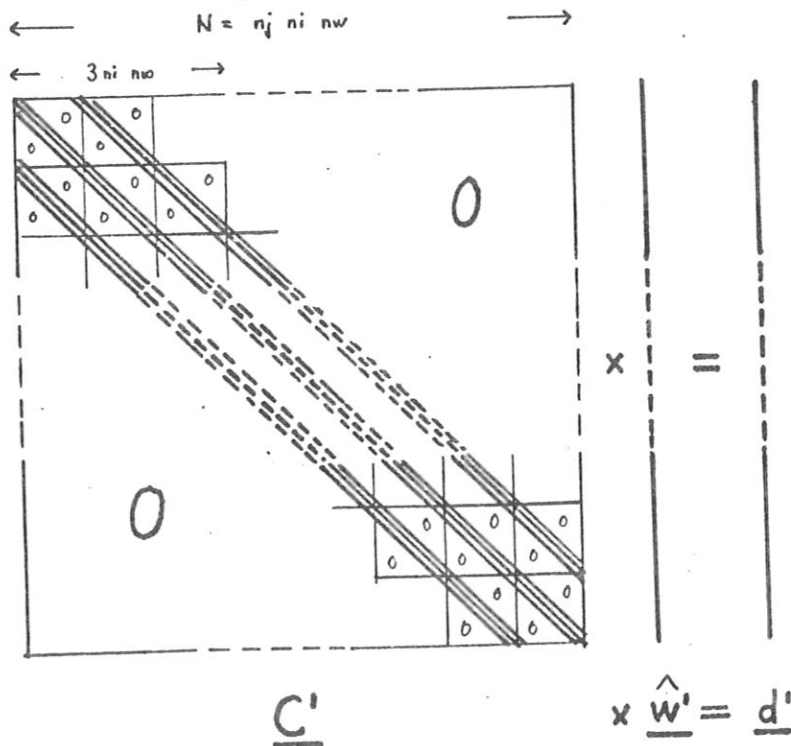


Bild (3.6) Aufbau des Gleichungssystems (3.5.1)

Die rechte Seite des Gleichungssystems, \underline{d}' , enthaelt die d und b aus Gleichung (3.3.4) und (3.4.1).

Die Zahl der von 0 verschiedenen Elemente in der Koeffizientenmatrix ist dann

$$P \approx 9 * n_i * n_j * n_w^2, \quad (3.5.2)$$

die Gesamtzahl der Elemente ist dagegen

$$N^2 = (n_i * n_j * n_w)^2. \quad (3.5.3)$$

Das Gleichungssystem ist also extrem duenn besetzt. Bei Anwendung eines der bekannten Loesungsverfahren, (Gauss-Seidel-Elimination etc.) waere eine volle Besetzung der invertierten Matrix die Folge, der "fill-in" waere maximal. Elementare Abschaetzungen zeigen sofort, dass die Zahl der Operationen und Speicherplaetze fuer einen einzigen Zeitschritt bei einem "durchschnittlichen" Modell ($n_w=4, n_i=30, n_j=30$) diese Art der Loesung verbietet.

Der erste Schritt zu einer Einschraenkung des Aufwandes kann in einer vorherigen Dreieckszerlegung der Matrix \underline{C} bestehen. Dabei wird der "fill-in" auf die durch die aeusseren Diagonalbaender festgelegte Bandbreite beschraenkt (ein typisches Verfahren dafuer ist die Crout-Reduction fuer Band - Matrizen /26/). Nimmt man wieder die Zahlen aus dem Beispiel von oben ($n_i=n_j=30, n_w=4$), dann laesst sich der Speicherbedarf unter Beruecksichtigung der Bandstruktur wie folgt abschaetzen. P' ist die Zahl der Elemente einschliesslich der "fill-in" Regionen zwischen den Diagonalbaendern:

$$P' \approx (n_i * n_w)^2 * (2 * n_j - 1) (\approx 800\ 000) \quad (3.5.4)$$

Nimmt man eine Wortlaenge von vier Byte an, ergibt sich ein Speicherbedarf von 3.2 Megabyte allein fuer die Matrix \underline{C} . Solche Speicher haben aber derzeit nur die groessten Rechenmaschinen.

Daher muss ein geeignetes Rekursionsverfahren entwickelt werden, das die Zahl der gleichzeitig in der Zentraleinheit der Rechenmaschine benoetigten Daten durch Verwendung externer schneller Speicher reduziert.

3.5.2 Loesung durch Rekursionsansatze

In Kapitel 2 wurde bei den Loesungsmethoden fuer eindimensionale implizite Differenzgleichungen ein Verfahren beschrieben, das durch eine zweifache gegenlaeufige Rekursion die effektive Loesung solcher Probleme erlaubt.

Verwandte Rekursionsvorschriften lassen sich auch zur vollimpliziten Loesung von 2-D Modellen aufstellen: Dazu

fasst man die Werte der Variablen in einer Zeile, also fuer ein j zu einem Vektor $\underline{w}(j)$ mit $n_i \cdot n_w$ Komponenten zusammen:

$$\underline{w}(j) = (w(1, j, 1), \dots, w(n_i, j, n_w)) \quad (3.5.5)$$

Verwendet man die diskretisierten Darstellungen (3.3.4) und (3.4.1), so ergibt sich eine "Differenzgleichung" fuer $\hat{w}(j)$, die aus Matrizen der Ordnung $(n_i \cdot n_w)$ besteht, und formal mit (2.2.9) uebereinstimmt:

$$\underline{c}_1 \hat{w}(j-1) + \underline{c}_2 \hat{w}(j) + \underline{c}_3 \hat{w}(j+1) = \underline{d}. \quad (3.5.6)$$

Diese Gleichung verknuepft drei aufeinanderfolgende Zeilenvektoren $\hat{w}(j-1)$, $\hat{w}(j)$ und $\hat{w}(j+1)$. erinnert man sich an die Struktur des Gesamtsystems (3.5.1), so koennen die Matrizen in (3.5.3) mit drei nebeneinander angeordneten Tridiagonalbloecken in Bild(3.6) identifiziert werden. Daher laesst sich nun auch die Gestalt von \underline{c}_1 , \underline{c}_2 , und \underline{c}_3 angeben. Die einzelnen Bloecke in Bild(3.7) haben n_w Zeilen und 3 n_w Spalten, mit Ausnahme des ersten und letzten mit 2 n_w Spalten. Sie enthalten die diskretisierten Randbedingungen bei $i = 1, 2$ und $i = n_i - 1, n_i$.

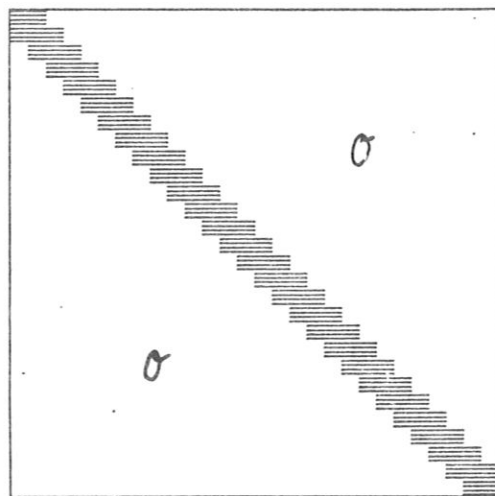


Bild (3.7) Besetzung von $\underline{c}_1 - \underline{c}_3$ ($n_i=28, n_w=4$)

Man macht nun fuer \hat{w} den Rekursionsansatz

$$\hat{w}(j) = \underline{g}(j) \hat{w}(j+1) + \underline{f}(j). \quad (3.5.7)$$

Nimmt man den Ansatz (3.5.7) fuer $j-1$, setzt $\hat{w}(j-1)$ in (3.5.6) ein, und vergleicht die Koeffizienten von $\hat{w}(j)$ und $\hat{w}(j+1)$ in den Gleichungen (3.5.6) und (3.5.7), so erhaelt

man fuer $\underline{G}(j)$ und $\underline{f}(j)$ die gesuchten Rekursionsformeln.

$$\begin{aligned} (\underline{C}_1 \underline{G}(j-1) + \underline{C}_2) \underline{G}(j) &= -\underline{C}_3 \\ (\underline{C}_1 \underline{G}(j-1) + \underline{C}_2) \underline{f}(j) &= -\underline{C}_1 \underline{f}(j-1) + \underline{d} \end{aligned} \quad (3.5.8)$$

Die Randbedingungen bei $j = 1, 2$ lauten als Matrixgleichung zwischen $\hat{\underline{w}}(1)$ und $\hat{\underline{w}}(2)$:

$$\underline{B}_1 \hat{\underline{w}}(1) + \underline{B}_2 \hat{\underline{w}}(2) = \underline{b} \quad (3.5.9)$$

Die Struktur von \underline{B}_1 und \underline{B}_2 ist die gleiche, wie die von \underline{C}_1 - \underline{C}_3 in Bild (3.6) gezeigte. \underline{B}_1 ist dabei immer eine nichtsingulaere Matrix, \underline{B}_2 kann auch null sein. In \underline{b} stehen alle konstanten Terme, entsprechend \underline{d} in (3.5.6).

Eine Umformung von (3.5.9) analog zur Rekursionsformel fuer $\underline{G}(j)$ und $\underline{f}(j)$ liefert das Gleichungssystem fuer $\underline{G}(1)$ und $\underline{f}(1)$:

$$\begin{aligned} \underline{B}_1 \underline{G}(1) &= -\underline{B}_2 \\ \underline{B}_1 \underline{f}(1) &= \underline{b} \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

Die Randbedingung bei $j = n_j-1, n_j$ lautet dementsprechend:

$$\underline{B}_1 \hat{\underline{w}}(n_j-1) + \underline{B}_2 \hat{\underline{w}}(n_j) = \underline{b} \quad (3.5.11)$$

Zusammen mit dem Ansatz (3.5.7) ergibt sich das Gleichungssystem fuer $\hat{\underline{w}}(n_j)$:

$$(\underline{B}_1 \underline{G}(n_j-1) + \underline{B}_2) \hat{\underline{w}}(n_j) = -\underline{B}_1 \underline{f}(n_j-1) + \underline{b} \quad (3.5.12)$$

Die gesamte Zweifachrekursion besteht dann aus den 4 Schritten:

- 1) Berechnung von $\underline{G}(1)$ und $\underline{f}(1)$ aus den Randbedingungen bei $j = 1, 2$, nach (3.5.10);
- 2) Rekursion von $\underline{G}(j)$ und $\underline{f}(j)$, fuer $j = 2 \dots n_j-1$, nach (3.5.8);
- 3) Berechnung von $\hat{\underline{w}}(n_j)$ aus $\underline{G}(n_j-1)$, $\underline{f}(n_j-1)$ und den Randbedingungen bei $j = n_j-1, n_j$, nach (3.5.12);
- 4) Rekursion von $\hat{\underline{w}}(j)$, fuer $j = n_j-1 \dots 1$, nach (3.5.7).

Nach diesen vier Schritten sind alle Variablen fuer $t+\Delta t$ bekannt.

Der wesentliche Vorteil gegenueber der direkten Loesung von (3.5.1) besteht darin, dass waehrend eines Rekursionsschrittes fuer $\underline{G}(j)$ nur $\underline{C}_1, \underline{C}_2, \underline{C}_3, \underline{d}$, sowie $\underline{G}(j-1)$ im Zentralspeicher der Rechenmaschine sein muessen. Der Speicherbedarf fuer die Matrizen reduziert sich also ungefaehr um den Faktor $n_j/3$, schaezt man den Speicherplatz fuer $\underline{C}_1 - \underline{C}_3$ nach oben mit dem fuer ein $\underline{G}(j)$ ab.

3.5.3 Diagonaldominanz, Bandbreitenbeschraenkung

Die Matrix \underline{C}_2 in (3.5.4) enthaelt in der Hauptdiagonale Terme proportional zu $1/\Delta t$. Dasselbe gilt auch fuer die Matrix, die in (3.5.8) durch Addition des Produkts von \underline{C}_1 und $\underline{G}(j-1)$ entsteht. Die Inversion dieser Matrix bei der Loesung von (3.5.8) ist ohne Pivotsuche, also Zeilen- und Spaltenumordnungen moeglich, da sie wegen der $1/\Delta t$ Terme diagonaldominant und damit gut konditioniert ist.

Bei stark zeitabhaengigen Problemen wird dies noch verstaerkt, wenn die zeitlichen Aenderungen durch eine charakteristische Geschwindigkeit bestimmt werden. Dies kann bei Stroemungsproblemen, aber auch bei nichtlinearen Diffusionsvorgaengen auftreten. Daher ist zu erwarten, dass in den Rekursionsmatrizen \underline{G} die Elemente in den von der Hauptdiagonalen weiter entfernten Bereichen im Vergleich zu den Diagonalelementen immer kleiner werden.

Wird ein Element von \underline{G} wesentlich kleiner als das mit der Rechengenauigkeit ϵ multiplizierte Diagonalelement der entsprechenden Spalte, so wird dies bei geeigneter Normierung der Variablen fuer das gerade zu berechnende Element $\hat{w}(i,j,k)$ im Rundungsfehler untergehen. Daher liegt es nahe dieses ganz zu vernachlaessigen. Der Parameter zur Bandbreitenbeschraenkung wird im Weiteren mit ϵ bezeichnet und bleibt frei wahlbar.

Die Besetzung von \underline{G} mit Elementen, die groesser als diese Schranke sind, ist in Bild (3.8) schraffiert skizziert.

Diese Bandstruktur kann bei allen Matrizenoperationen ausgenutzt werden, wenn nur Multiplikationen zwischen Elementen ausgefuehrt werden, die innerhalb der jeweiligen Baender liegen. Dabei wird bei allen Matrizen innerhalb der Baender eine volle Besetzung angenommen.

Die drastische Verringerung der Zahl der Rechenoperationen liegt auf der Hand, deshalb werden im naechsten Abschnitt die Matrizenroutinen von vorneherein fuer Bandmatrizen formuliert.

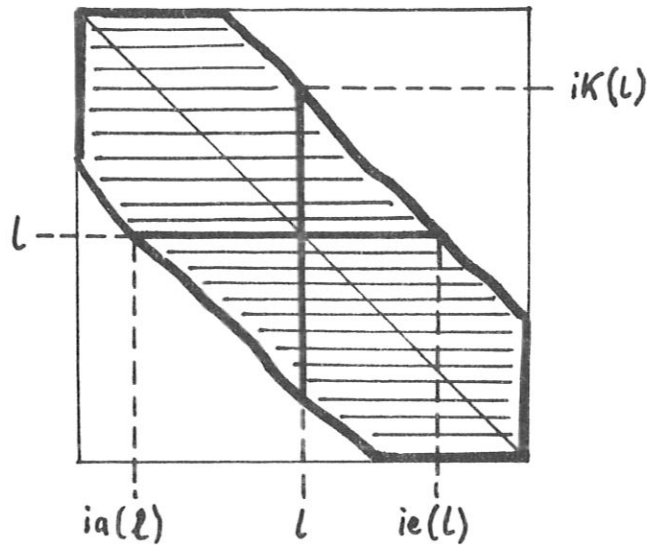


Bild (3.8) Bedeutung der Indizes bei den Bandmatrizen

3.5.4 Matrizenalgorithmen

Abgesehen von den Randbedingungen bei $j=1,2$ und $j=nj-1,nj$ müssen die Gleichungen (3.5.8) für jedes j gelöst werden. Dazu führt man die Matrix \underline{R} und den Vektor \underline{r} ein:

$$\underline{R} \{ \underline{G}(j), \underline{f}(j) \} = \{ -\underline{C3}, \underline{r} \} \quad (3.5.13)$$

Hier wurde $\underline{G}(j)$ mit $\underline{f}(j)$ und $-\underline{C3}(j)$ mit \underline{r} zu Matrizen mit $n=n_i \cdot n_w$ Zeilen und $n+1$ Spalten zusammengefasst. Man bestimmt \underline{R} und \underline{r} nach der Vorschrift:

$$\{ \underline{R}, \underline{r} \} = \underline{C1} \{ \underline{G}(j-1), -\underline{f}(j-1) \} + \{ \underline{C2}, \underline{d} \} \quad (3.5.14)$$

Die Berechnung der Elemente $r(i,j)$ von \underline{R} erfolgt nach Gleichung (3.5.15)

$$r(i,j) = \sum_{l=1_{\min}}^{l_{\max}} c_1(i,l) g(l,j) + c_2(i,j), \quad (3.5.15)$$

$$l_{\min} = \max(ia_{C1}(1), ia_G(1)), \quad l_{\max} = \min(ie_{C1}(1), ie_G(1))$$

Die Indizes ia und ie sind die Anfangs- und Endindizes der Zeilen in $\underline{C1}$ bzw. der Spalten in \underline{G} . Es werden also nur Operationen in dem Ueberlappungsgebiet von $\underline{C1}$ und \underline{G} ausgefuehrt, dabei ergeben sich die ia und ie fuer \underline{R} . Fuer die Summenbildung in (3.5.15) und in allen weiteren Faellen gilt die Konvention, dass der Wert der Summe gleich null ist, wenn $l_{max} < l_{min}$ wird. Die Koeffizientenmatrizen $\underline{C1}$ und $\underline{C2}$ werden zeilenweise gespeichert.

Zur Loesung des Gleichungssystems (3.5.13) fuer \underline{G} (j) und \underline{f} (j) wird ein von Doolittle beschriebenes Verfahren verwendet, bei dem zunaechst die Koeffizientenmatrix in zwei Dreiecksmatrizen zerlegt wird, und danach die Loesungsmatrix aus der rechten Seite ($-\underline{C3}$ und \underline{r}) konstruiert wird /26/. Die Methode eignet sich fuer dieses Problem besonders, da bei der Dreieckszerlegung kein "fill-in" auftritt, und zeilenweise Bearbeitung von \underline{R} moeglich ist. Es werden jeweils die allgemeinen Formeln und Hinweise auf die Versionen mit verkuerzter Speicherung gegeben. Die Elemente der unteren (lower) Dreiecksmatrix \underline{L} sind $l(k, j)$, die der oberen \underline{U} (upper) sind $u(k, j)$, beide werden in \underline{R} erzeugt.

$$l_{kj} = r_{kj} - \sum_{p=1}^{j-1} l_{kp} u_{pj}, \quad j = 1, 2, \dots, k,$$

$$\rightarrow r(k, j) = r(k, j) - \sum_{p=ia(k)}^{j-1} r(k, p) r(p, j), \quad j = ia(k), \dots, k.$$

$$u_{kj} = \{r_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp} u_{pj}\} / l_{kk}, \quad j > k, \quad (3.5.16)$$

$$\rightarrow r(k, j) = \{r(k, j) - \sum_{p=p_{max}}^{k-1} r(k, p) r(p, j)\} / r_{kk}, \quad j = k+1, \dots, ie(k),$$

$$p_{max} = \max(ia(k), ik(p)), \quad ia, ie \text{ und } ik \text{ von } \underline{R}.$$

Die rechte Seite von (3.5.13) besteht aus der $n \times n$ Blocktridiagonalmatrix $-\underline{C3}$ und dem Vektor \underline{r} . Die Erzeugung von \underline{G} (j) und \underline{f} (j) beginnt mit (3.5.17).

$$g(k, j) = \{-c_3(k, j) - \sum_{p=p_{max}}^{k-1} r(k, p) g(p, j)\} / r(k, k), \quad (3.5.17)$$

$$j = 1, 2, \dots, n, \quad k = ia_{C1}(j), \dots, n, \quad p_{max} = \max(ia_R(k), ia_{C3}(k))$$

Die Vorwaertsrekursion bearbeitet mit aufsteigendem k und j die Elemente inner- und unterhalb des blocktridiagonalen Bandes von \underline{C}_3 .

Die Rueckwaertsrekursion fuer die m -te Spalte lautet:

$$c_3(k,m) = g(k,m) - \sum_{p=k+1}^{ie_R(k)} r(k,p) c_3(p,m), \quad (3.5.18)$$

$$m = n, \dots, 1, \quad k = n, \dots, 1.$$

Sie laeuft in der entgegengesetzten Richtung wie (3.5.17). Die Spalten werden dabei ebenfalls von $m = n$ bis $m = 1$ erzeugt.

Die Ergebnismatrix \underline{C}_3 wuerde nun voll besetzt sein, also n^2 Elemente haben, obwohl die Ausgangsmatrizen Bandform bzw. Blocktridiagonalgestalt hatten, wenn nicht schon waehrend der Berechnung die Bandbreite beschraenkt wuerde.

Dazu wird waehrend der Vorwaerts- und Rueckwaertsrekursion (3.5.17/18) in den k - Schleifen innerhalb einer Spalte jedes neue Element mit der in Abschnitt (3.5.3) definierten Schranke verglichen. Ist es kleiner, kann die Spalte an dieser Stelle unter gewissen Bedingungen abgeschlossen werden - dabei ist zu beachten, dass eine Spalte erst dann abgeschnitten werden darf, wenn nw aufeinanderfolgende Elemente die Bedingung erfuehlt haben. Sind einzelne Variable naemlich null oder sehr klein, kann die Abschneidebedingung formal erfuehlt sein, obwohl danach noch fuer die anderen Variablen wesentliche Elemente kaemen.

Die Beschneidung waehrend der Vorwaertsrekursion ergibt den neuen Spaltenendindex ie_g . In der Rueckwaertsrekursion fuer die selbe Spalte wird die k - Schleife deshalb nicht bei n , sondern erst bei diesem ie beginnen. Dadurch wird auch die innere Schleife in (3.5.18) beeinflusst, die dann nur noch bis zum kleineren Wert von $ie(k)$ und $ie(k)$ laeuft. Die Abbruchbedingung ergibt dann das neue ia_6 dieser Spalte.

Das Ergebnis, das wegen der rueckwaerts laufenden Indizes in (3.5.18) noch "verkehrt" gespeichert ist, muss zuletzt in die richtige Anordnung gebracht werden, und ein Rekursions-Schritt gemaess der Gleichung (3.5.8) ist abgeschlossen.

Die Berechnung von $\underline{f}(j)$ aus \underline{g} und den Dreiecksmatrizen in \underline{R} ist mit gleichen Methoden kein Problem.

Zur Berechnung von $\underline{g}(j+1)$ sind nur die neuen Koeffizienten und $\underline{g}(j)$ notwendig, alle vorher berechneten \underline{g}

(k) , $k < j$, koennen deshalb auf einen externen Speicher geschrieben werden. Dadurch erreicht man die schon angesprochene drastische Reduzierung des Zentralspeicherbedarfs, gegenueber der Loesung des Gesamtsystems (5.3.1). Zusammen mit den Matrizen werden auch die dazugehoerigen Indexvektoren ausgelagert, beide werden ja erst wieder bei der Rekursion von \hat{w} benoetigt.

Die Berechnung der Startwerte $\underline{g}(1)$, $\underline{f}(1)$ und $\hat{w}(nj)$, aus den Gleichungen (3.5.10) und (3.5.12), ist auf Grund der vorhergegangenen Ausfuehrungen ebenfalls leicht zu verwirklichen. Es sind die selben Verkuerzungen zu beruecksichtigen, wie bei der Berechnung von $\underline{g}(j)$ und $\underline{f}(j)$.

Die Rekursion (3.5.7) fuer $\hat{w}(j)$ wird analog zu (3.5.14) geloest. Dazu wird jeweils $\underline{g}(j)$ und $\underline{f}(j)$ vom externen Speicher eingelesen.

3.6 Praktische Durchfuehrung

Die Realisierung der bisher entwickelten Methoden gliedert sich in zwei grosse Abschnitte. Da ist zum einen die Erzeugung von Differenzgleichungen, die unabhaengig von Typ und Zahl der Differentialgleichungen in die Form (3.3.4) gebracht werden. Mit Ausnahme der exakten Integrationen ist dies Aufgabe des Programmgenerators.

Der gleichbleibende formale Aufbau der impliziten Differenzen erlaubte einen Rekursionsalgorithmus fuer die Aufloesung, der weitgehend unabhaengig von den Differentialgleichungen ist. Die Kenntnis einiger Eigenschaften des untersuchten Problems kann dabei zu einer weiteren Reduzierung des Rechenaufwandes fuehren, ist aber nicht Bedingung. Die rekursive Aufloesung des Gleichungssystems erfolgt in einem Rahmenprogramm, das durch Aenderung weniger Parameter fuer wesentlich verschiedene Probleme verwendet werden kann.

3.6.1 Der Programmgenerator

Der erste Schritt des INIM - Verfahrens besteht aus der exakten Integration der Ortsoperatoren, soweit dies ohne Kenntnis des Funktionsverlaufes moeglich ist. In einem einmal festgelegten Koordinatensystem entstehen dabei Integro - Differentialgleichungen, die ein- oder zweifache Integrale mit Ableitungen bis zu erster Ordnung in den Integranden umfassen.

Die Darstellung der Integranden durch die Bilinearansaetze in den vier Quadranten, die Ausfuehrung der restlichen Integrationen, die Linearisierung in der Zeit und die Koeffizientenbildung erfordern formal einfache, aber aeusserst umfangreiche algebraische Manipulationen. Die Verwendung einer algebraischen Programmiersprache zum Aufbau eines Programmgenerators bietet sich daher an.

Dabei werden einige elementare Forderungen an die verfuegbare Sprache gestellt, die im Folgenden kurz aufgezahlt werden:

- Definierbarkeit mehrfach indizierter Variablen;
- Loesung von algebraischen Gleichungen;
- Verarbeitung von Potenzreihen;
- Differenziation und Integration;

- Substitution einzelner algebraischer Ausdruecke;
- Erzeugung von FORTRAN - Anweisungen;
- Verwendbarkeit externer Speichermedien.

Diese Forderungen werden z.B. von REDUCE erfuehlt, das dem Autor zur Verfuegung stand /27/.

Bild (3.9) zeigt ein Flussdiagramm des gesamten Programmgenerators. Die wesentlichen Teile sind unabhaengig vom Typ der Differentialgleichung. In dieser Form kann er fuer alle vorkommenden Integranden und Integrationen eingesetzt werden. Fuehrt eine Differentialgleichung zu verschiedenen Integralen, ist jeweils ein Lauf notwendig. Selbstverstaendlich koennen deshalb auch einzelne Terme bearbeitet werden. Die in der verwendeten Programmiersprache formulierten Integranden koennen entweder im Programmgenerator direkt definiert werden, oder von externen Datentraegern eingelesen werden. Die Wahl des Integraltyps erfolgt durch logische Steuerparameter, die auch die Bezeichnung der Koeffizienten aendern.

Die Entwicklungskoeffizienten werden in einem gesonderten Programm berechnet und extern gespeichert, da sie fuer verschiedene Gleichungen verwendet werden koennen. Dasselbe gilt fuer Indexpermutationen, die bei der Linearisierung in der Zeit benoetigt werden.

Bei der Aufspaltung in die Koeffizienten kann durch geeignete Kommandos die Ausklammerung gemeinsamer Faktoren erreicht werden. Dadurch werden die Ausdruecke kuerzer und die Berechnung benoetigt weniger Zeit.

Die Verwendung externer Speichermedien fuer Zwischenergebnisse kann besonders bei umfangreicheren Gleichungssystemen Rechenzeit sparen, ist aber nicht prinzipiell notwendig. Die Moeglichkeit zur Erzeugung von FORTRAN - Anweisungen und deren Ausgabe sollte zur Vermeidung von Schreibfehlern bei der Uebertragung auf jeden Fall vorhanden sein.

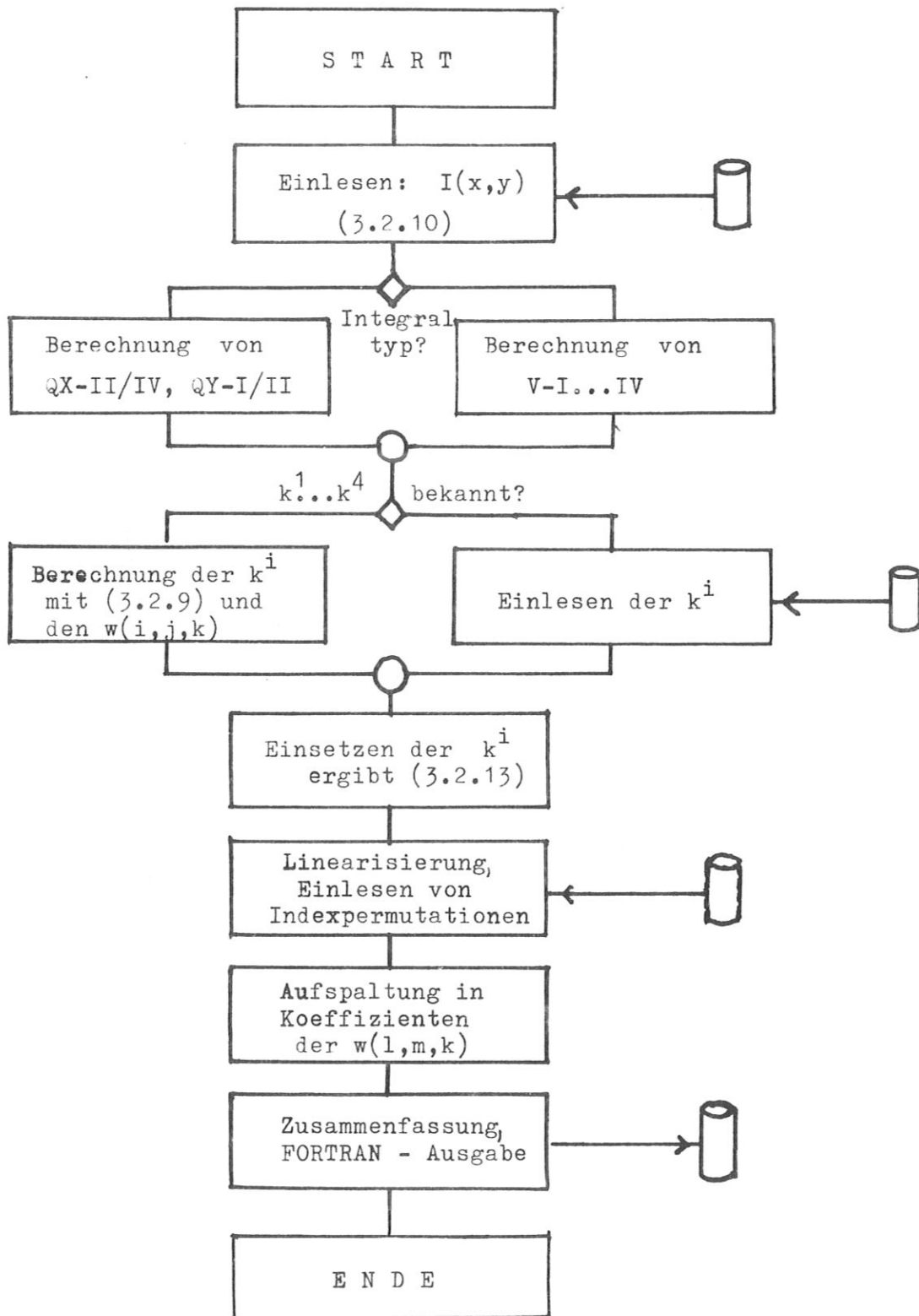


Bild (3.9) Flussdiagramm des Programmgenerators

3.6.2 Das Rahmenprogramm

Da die in Abschnitt 3.5 behandelten Algorithmen unabhängig von den Differentialgleichungen sind, sieht man von den Parametern n_w und ab , liegt der Aufbau eines Rahmenprogramms nahe, das fuer alle Anwendungen weitgehend unverändert beibehalten werden kann.

Die Programmierung der Matrizenroutinen aus Abschnitt (3.5.5) haengt wesentlich von der Speicherung der Matrizen a_{ij} , die zunaechst beschrieben werden soll. Dabei spielen als Parameter vor allem die Zahlen n_i, n_j, n_w , und der Abschneideparameter eine Rolle. Diese bestimmen auch den benoetigten Speicherbedarf, der in einer Tabelle angegeben wird.

a) Speicherung der Matrizen

Die Besetzung der Koeffizientenmatrizen, wie auch die der B 's in den Randbedingungen zeigte Bild (3.7). Selbstverstaendlich koennen auch in dem verbleibenden blocktridiagonalen Band noch Elemente unbesetzt sein. Dies wird aber immer durch die spezielle Differentialgleichung verursacht und wird deshalb nicht beruecksichtigt. Eine Erweiterung des zu loesenden Systems durch zusaetzliche Terme koennte sonst eine Aenderung des Loesungsalgorithmus erforderlich machen.

Es wird daher der allgemeinste Fall vorausgesetzt: Es sind n_w Gleichungen mit n_w abhaengigen Variablen zu loesen, die alle miteinander (nichtlinear) verkoppelt sind. Dann sind alle Koeffizienten $c(l,m,k)$ und $b(l,m,k)$ besetzt.

Alle Matrizen werden in eindimensionalen Arrays gespeichert. Dabei werden nur die Elemente beruecksichtigt, die fuer die Rechnung von Bedeutung sind. Das heisst bei den Koeffizientenmatrizen $C_1 - C_3$ oder B_1 und B_2 , dass nur die Tridiagonalbloেকে gespeichert werden. Die dazu notwendigen Indexinformationen werden einmal berechnet und in einem Vektor ic aufgehoben. Die ersten $n=ni*n_w$ Zahlen definieren die Zeilen-(Spalten-) -Anfangsindizes, die naechsten n die entsprechenden Endindizes. Die Entscheidung fuer zeilen- und spaltenweise Speicherung ist durch die unterschiedlichen Operationen festgelegt. Die Matrizen C_1 und C_2 werden zeilenweise, C_3 spaltenweise gespeichert.

Komplizierter ist die Situation bei R und der Rekursionsmatrix $G(j)$ wegen der Bandbreitenbeschraenkung. Dies fuehrte zu einer zeit- und ortsabhaengigen Besetzung. Damit muessen fuer jedes j waehrend eines Zeitschritts die fuer die Matrizenoperationen notwendigen Indizes bestimmt und gespeichert werden. Dazu sind die vier Indizes

ausreichend, die in Abschnitt 3.5.4 definiert wurden. Dabei ist es unerheblich, ob spalten- oder zeilenweise Speicherung benoetigt wird. Es sind dann nur entsprechend immer Spalten- mit Zeilen- Indizes zu vertauschen. Diese verkuerzten Spalten (Zeilen) werden direkt hintereinander in einem Vektor gespeichert.

Die l-te Spalte/Zeile wird durch den Anfangsindex $ia(l)$, den Endindex $ie(l)$, und ihren Anfangsindex $iv(l)$ in der verkuerzten Speicherung beschrieben. Dazu kommen die jeweils komplementaeren Zeilen/Spalten - Anfangsindizes $ik(l)$. Der Anfangsindex $iv(l)$ einer Spalte (Zeile) in der verkuerzten Speicherung berechnet sich nach (3.6.1).

$$iv(l) = \sum_{k=1}^{l-1} (ie(k) - ia(k) + 1) + 1 \quad (3.6.1)$$

Die Indizes fuer die verschiedenen Matrizen werden jeweils in einem Vektor aehnlich zu ic angeordnet, zuerst alle ia , dann die ie , die iv , und zuletzt die ik .

b) Speicherbedarf

Es wurde schon mehrfach der, im Vergleich zu expliziten Verfahren, groessere Speicherplatzbedarf bei impliziten Methoden erwaehnt. Dieser soll nun kurz abgeschaezt werden. Dabei geht es nur um die Speicherplaetze, die fuer die Variablen und alle Hilfsgrößen wie Matrizen, Koeffizienten, Indexarrays usw. notwendig sind. Die Groesse des vom Programmgenerator erzeugten Programms fuer die Koeffizienten ist weitgehend durch Zahl und Typ der Differentialgleichungen bestimmt und kann deshalb erst anhand konkreter Beispiele angegeben werden. Im Vergleich zu expliziten Verfahren werden die Koeffizienten wegen der durch die Linearisierung bedingten Aufsplitterung der Ausdruecke umfangreicher sein. Dies wird im Verhaeltnis zu dem fuer die Aufloesung benoetigten Rechenaufwand jedoch keine Rolle spielen.

Die Tabelle (3.1) gibt eine Uebersicht ueber die Einteilung des Speicherplatzes und trennt die fuer die implizite Loesung zusaetzlich verwendeten Felder von den in jedem Falle fuer die Variablen benoetigten. Die Speicher fuer die Matrizen G und R sind als variabel angegeben, ebenso fuer $C3$, das als Zwischenspeicher verwendet wird. Es ist zu erwarten, dass bei zeitabhaengigen Problemen die Zahl der tatsaechlich zu speichernden Elemente nicht den Maximalwert erreicht.

Feld	Groesse	$n_i=n_j=30, n_w=4$
$w(i,j,k)$	$n_i \cdot n_j \cdot n_w$	3600
$\hat{w}(i,j,k)$	"	"
C_1, C_2, d	$2(3(n_i-1)+1)n_w^2 + n_i n_w$	2936
G, R, C_3, f, r	$3(n_i \cdot n_w)^2 + 2 \cdot n_i \cdot n_w$	43440

Tabelle
(3.1)

Es liessen sich noch weitere Einsparungen vornehmen, etwa bei der Speicherung der Variablen, von denen zur Berechnung der Koeffizienten nur drei aufeinanderfolgende Zeilenvektoren gleichzeitig verfuegbar sein muessen. Praktische Versuche zeigten aber, dass die zusaetzlichen Ein- und Ausgabeoperationen die Ausfuehrung in der Rechenmaschine dann zu stark verlangsamten.

c) Allgemeine Organisation, Flussdiagramm

Zur Verdeutlichung der Organisation des Rahmenprogramms dient das Flussdiagramm in Bild (3.10). Es zeigt die grundsaeztliche Unterteilung in Zeitschleifen und den fuer jeden Zeitschritt zu durchlaufenden Block mit den ortsabhaengigen Teilen.

Der Block INIT bestimmt die Anfangsbedingungen, d.h. hier werden entweder neue berechnet, oder im Fall der Fortsetzung eines fruerehen Laufes die notwendigen Daten von externen Datentraegern eingelesen.

Die doppelte Zeitschleife dient im wesentlichen der vereinfachten Ausgabe durch die Routine OUTPUT. Dabei werden in vorgewaehlten Abstaenden waehrend der Rechnung alle zur Fortsetzung benoetigten Daten abgespeichert, sowie Zwischenergebnisse ausgedruckt.

Wegen des, im Vergleich zu expliziten Verfahren, deutlich hoeheren Rechenzeitbedarfs je Zeitschritt ist eine laufende Kontrolle der noch verbleibenden Rechenzeit angebracht, um einen Zeitschritt vollstaendig abschliessen zu koennen.

Den Ablauf eines einzelnen Zeitschritts ist durch die in den Abschnitten 3.5.3 und 3.5.4 erlaeuterten Schritte bestimmt, deren Durchfuehrung den Kern des Programms darstellt.

Der erste Block (BDS) umfasst die Berechnung der Randbedingungen bei $j=1,2$. Hierbei ist es ohne Bedeutung, welche physikalische Randbedingung programmiert werden soll, der Ablauf ist durch die Forderung nach einem Startwert fuer

\underline{G} (1) bestimmt.

Der naechste Block (GREK) enthaelt eine Ortsschleife fuer $j=2..n_j-1$. Hier werden fuer jedes j die Randbedingungen bei $i=1,2$ und $i=n_i-1,n_i$, sowie die $c(l,m,k)$ fuer $i=2..n_i-1$ bestimmt. An dieser Stelle werden die durch den Programmgenerator erzeugten Programnteile fuer die Koeffizienten eingesetzt.

Damit sind auch $\underline{C}_1 - \underline{C}_3$ gegeben, und die Gleichungen fuer \underline{G} (j) und \underline{f} (j) koennen geloest werden. Alle \underline{G} und \underline{f} werden auf eine schnelle externe "direct - access" Einheit geschrieben, da wegen der unterschiedlichen Laenge der Matrizen die Anfangsadressen der einzelnen Bloecke gespeichert werden muessen.

Nachdem \underline{G} (n_j-1) als letzte Matrix berechnet worden ist, benoetigt man fuer die gegenlaeufige Rekursion der $\hat{\underline{w}}$ (j) den Startwert $\hat{\underline{w}}$ (n_j). Dieser ist durch die Randbedingungen bei $j = n_j-1,n_j$ gegeben, und wird im Block (BDN) berechnet.

Nun werden in (WREK) fuer $j=n_j-1..1$ die $\hat{\underline{w}}$ (j) berechnet. Dazu werden die \underline{G} und \underline{f} wieder einzeln eingelesen. Damit sind die Werte aller Variablen zur neuen Zeit bekannt.

Im letzten Teil eines Zeitschrittes (CONTROL) werden einige Kontrollprogramme durchlaufen. Diese dienen zur Steuerung und Neubestimmung von Δt auf Grund von Stabilitaets- oder Genauigkeits- Bedingungen, die vom jeweiligen Problem abhaengen. Verletzen die neuen $\hat{\underline{w}}$ eine dieser Bedingungen, so kann der Zeitschritt wiederholt werden. Dies bedingt selbstverstaendlich die Speicherung der Variablen zur alten Zeit bis zu diesem Stand der Rechnung.

Weitere Kontrollen, etwa die Ueberpruefung von Erhaltungssaetzen, werden ebenfalls an dieser Stelle durchgefuehrt. Dies wird bei den Anwendungen genauer erlaeutert.

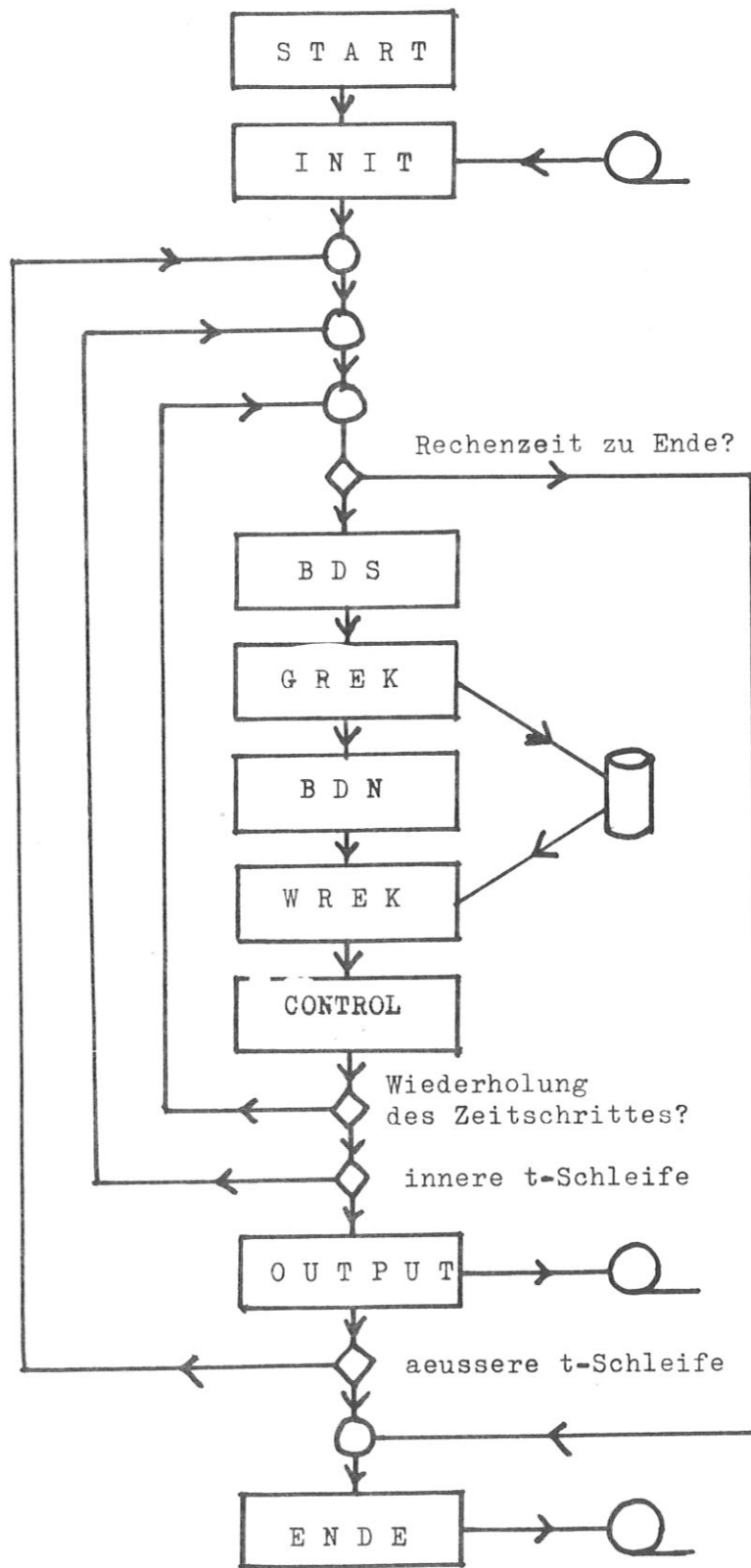


Bild (3.10) Flussdiagramm des Rahmenprogramms

4. A N W E N D U N G E N

4.1 Einfuehrung

Die wesentlichen Anwendungsgebiete impliziter Naehervsverfahren wurden in Kapitel 2 angefuehrt. Als erstes Problem wurde deshalb eine nichtlineare Diffusionsgleichung ausgewaehlt, fuer die eindimensionale analytische und numerische Loesungen existieren. Dadurch ist ein direkter Vergleich der Stabilitaetseigenschaften moeglich.

Da die meisten MHD - Modelle hyperbolische Bestandteile haben, wurde als zweites Beispiel der Gleichungssatz der idealen kompressiblen Hydrodynamik ausgewaehlt. Hier existieren zwar explizite Verfahren, die ausgezeichnete Ergebnisse liefern, aber durch gemischt parabolische und hyperbolische Probleme kann wiederum der Einsatz eines impliziten Verfahrens notwendig werden. Zusaetzlich wird an diesem System auch die Aufloesung des linearen Gleichungssystems und der damit verbundene Rechenaufwand genauer untersucht.

Das dritte Beispiel ist ein Gleichungssystem, das zur Berechnung stabiler MHD - Gleichgewichte dienen soll. Es besteht aus nichtlinearen Diffusionsgleichungen, die stark verkoppelt sind und fast ausschliesslich gemischte Ableitungen enthalten. Dadurch werden die ADI - Verfahren ausgeschlossen, so dass nur eine vollimplizite Loesung uebrigbleibt, sieht man von speziellen, nur auf dieses Problem orientierten expliziten Methoden ab.

Alle Rechnungen wurden im Rechenzentrum des Max Planck Instituts fuer Plasmaphysik auf einer IBM 360/91 und einer Amdahl 470 V/6 durchgefuehrt. Die Angaben ueber Rechenzeiten sind im wesentlichen auf der 360/91 ermittelt worden.

Bei allen Beispielen werden die Ergebnisse von INIM mit anderen Verfahren verglichen, so dass eine gruendliche Bewertung moeglich ist.

4.2 Nichtlineare Diffusion

Der Energietransport durch die Waermeleitfaehigkeit der Elektronen kann in einem vollionisierten Plasma durch die nichtlineare Diffusionsgleichung (4.2.1) beschrieben werden:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} \{ \kappa T^{5/2} \nabla T \}, \quad (4.2.1)$$

Die Groesse κ enthaelt noch eine schwache logarithmische Abhaengigkeit von T , die hier vernachlaessigt werden kann. Die Wahl der Einheiten erfolgt dann so, dass $\kappa = 1$ wird. Ausserdem werden der Einfachheit halber keine Quellen beruecksichtigt.

Eine Waermeleitung diesen Typs wird in vielen Modellen lasererzeugter Plasmen oder in anderen MHD - Modellen laengs des Magnetfeldes eingesetzt.

In eindimensionaler Geometrie gibt es zwei analytische Loesungen, die den Vergleich der numerischen Ergebnisse zulassen. Diese 1-D Probleme und die physikalischen Grundlagen wurden vom Autor in einer frueheren Arbeit ausfuehrlich behandelt /28/.

4.2.1 Einige Eigenschaften der Gleichung

Durch die Abhaengigkeit des Diffusionskoeffizienten von der Loesung selbst ergeben sich mehrere charakteristische Eigenschaften.

Als Beispiel betrachten wir die Ausbreitung einer zur Zeit $t=0$ in einer Ebene ($x=0$) konzentrierten Energiemenge $E(0)$ in ein Gebiet, in dem die Temperatur $T=0$ ist. Fuer $t>0$ lautet die Temperaturverteilung /28/:

$$T(x,t) = 0.82 \left(\frac{E}{t} \right)^{2/9} \left[1 - \left(\frac{x}{x_F} \right)^2 \right]^{2/5}, \quad (4.2.2)$$

$$x_F = 1.48 (E^{5/2} t)^{2/9}$$

Die Front der Waermewelle ist bei x_F . Bild(4.1) zeigt typische Profile, hierbei ist wegen der symmetrischen Loesung (4.2.2) nur das Gebiet $x \geq 0$ gezeichnet:

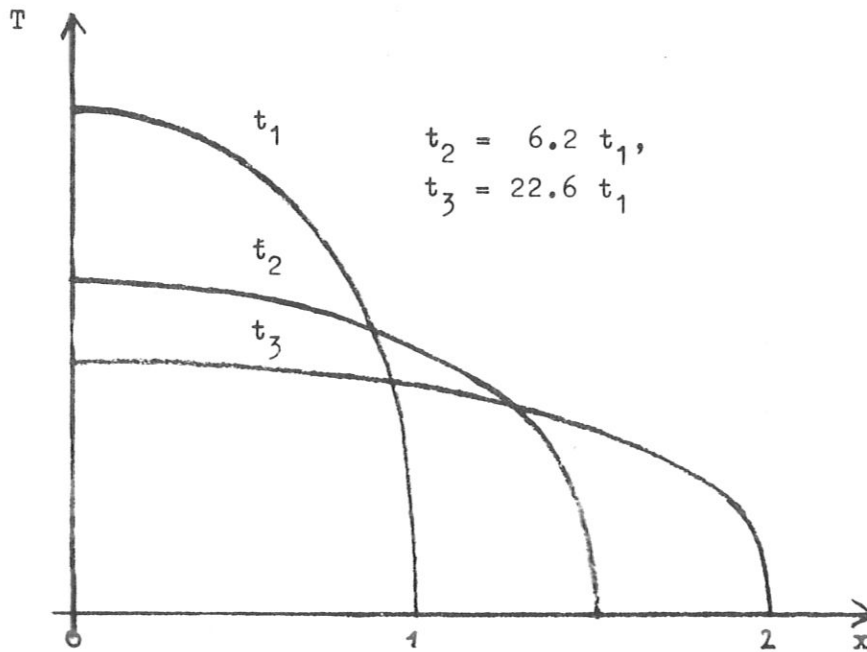


Bild (4.1) Temperaturprofile nach (4.2.2)

An der Front ($x=x_F$) muss $\text{grad}(T)$ gegen unendlich gehen, wenn $T=0$ fuer $x \geq x_F$ ist und der Waermestrom endlich bleiben soll. Am Ursprung $x=0$ muss der Waermestrom aus Symmetriegrunden verschwinden, deshalb muss dort $\text{grad}(T) = 0$ sein. Die eindimensionalen Rechnungen zeigten, dass insbesondere die Darstellung der Waermefront bei $x=x_F$ Aufschluss ueber die Guete des numerischen Verfahrens gibt. Deshalb werden zwei Testbeispiele behandelt. Das eine erlaubt den Vergleich mit 1-D Ergebnissen und damit mit analytischen Loesungen. Das andere zeigt die Ausbreitung einer kreisfoermigen Waermewelle in einem x - y Koordinatensystem, so dass die Besonderheiten zweidimensionaler Probleme untersucht werden koennen.

4.2.2 Anfangs- und Randbedingungen

Das Rechengebiet, in dem die Gleichung (4.2.1) geloeset werden soll, ist quadratisch, das Intervall ist $(0 \leq x \leq 1), (0 \leq y \leq 1)$. Die Randbedingungen lauten:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=1} = 0 \quad (4.2.3)$$

Es fliesst also keine Energie durch die "Waende" des Intervalls. Dadurch wird die Ueberpruefung der Erhaltungseigenschaften vereinfacht. Nach dem in Kapitel 3 ueber die Behandlung der Randbedingungen Gesagten wird der physikalische Rand zwischen die beiden aeussersten Gitterebenen gelegt.

Das erste Testproblem zeigt Bild (4.2) :

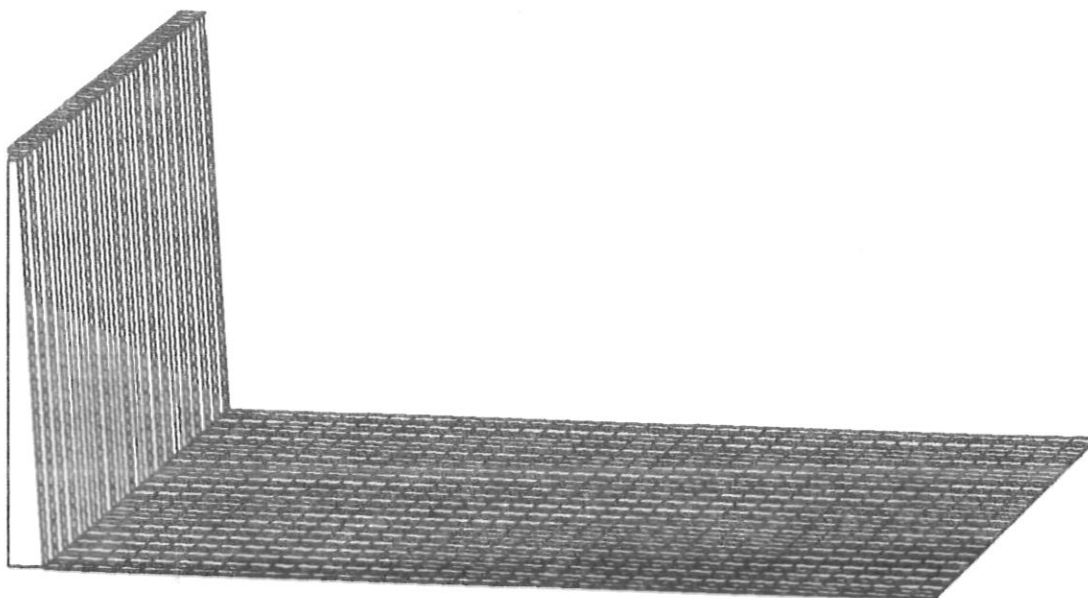


Bild (4.2) Das erste Testproblem, $T_{\max}=38$, $E(0)=1$

Dies entspricht dem 1-D Beispiel aus Bild (4.1). Das Gitter hat 40×40 Punkte und ist aequidistant ($\Delta x = 1/(n_i-2)$, $\Delta y = 1/(n_j-2)$). Das zweite Anfangsprofil zeigt Bild (4.4a).

Zur Kontrolle der Energieerhaltung wird jeweils das Integral

$$\int_0^1 \int_0^1 T(x,y,t) \, dx dy$$

durch die diskrete Summe $E(t)$

$$E(t) = \sum_{i=2}^{n_i-1} \sum_{j=2}^{n_j-1} T(i,j,t) \Delta x \Delta y \quad (4.2.4)$$

approximiert und mit dem Wert von $E(0)$ verglichen. Wegen der Randbedingungen (4.2.3) laufen die Summen nur von $2 \dots n_i-1$ und von $2 \dots n_j-1$.

4.2.3 Erzeugung der Koeffizienten

Die Erzeugung der Koeffizienten $c(l,m,k)$ erfolgt gemäss den in Kapitel 3 beschriebenen Vorschriften. Die Zahl der Gleichungen, n_w , ist 1, so dass eine zusätzliche Vereinfachung eintritt. Zur Durchfuehrung wird der ortsabhaengige Teil von (4.2.1) in x-y Koordinaten geschrieben:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (T^{5/2} \frac{\partial T}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (T^{5/2} \frac{\partial T}{\partial y}) \quad (4.2.1a)$$

Aus den 1-D Rechnungen ist bekannt, dass der Exponent 5/2 im Diffusionskoeffizienten in 2 und 1/2 aufgespalten werden kann - der Wurzelterm wird dann an den Mittelpunkten der Zellenseiten zur alten Zeit berechnet (siehe Bild 3.1). Der Rest wird mit dem Gauss'schen Satz umgeformt, und mit dem Programmgenerator verarbeitet, dabei entstehen die QX und QY. Die Umspeicherung der QX/Y-I/IV wurde in Kapitel 3 beschrieben, Neuberechnet werden in jeder Zelle nur QY-I, QY-II, QX-II, und QX-IV. Diese Ausdruecke sind nichtlinear in dritter Ordnung in T und werden nach (3.3.2) mit $\theta = 1/2$ linearisiert und in die Beitraege fuer die Koeffizienten $c(l,m,k)$ und d aufgespalten (hier nimmt k nur den Wert 1 an). Ein Lauf des Programmgenerators benoetigte auf der IBM 360/91 etwa 4 Minuten.

Die Diskretisierung der Randbedingungen (4.2.3) erfolgt direkt, etwa bei $i=1,2$ und j :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \rightarrow \hat{T}(1,j) = \hat{T}(2,j), \hat{T}(n_i,j) = \hat{T}(n_i-1,j) \quad (4.2.5)$$

Damit sind alle Elemente fuer die Koeffizientenmatrizen $\underline{C1}$ - $\underline{C3}$ etc. festgelegt und koennen in das Rahmenprogramm eingesetzt werden.

4.2.4 Numerische Ergebnisse

Die beiden Anfangsverteilungen gemäss Bild(4.2) und (4.4a) fuehren zu einer starken zeitlichen Aenderung der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Waermewellen. Dies ist aus der Zeitabhaengigkeit von x_F nach (4.2.2) ersichtlich. Wegen der Stabilitaetseigenschaften impliziter Loesungsverfahren sollte die Wahl des Zeitschrittes in weiten Grenzen beliebig erfolgen koennen. Durch die starken

raeumlichen Gradienten in den hier gewaehlten Beispielen spielt aber auch die Diskretisierung im Ort eine Rolle, so dass ein Grenzwert fuer Δt zu erwarten ist. Auch die Existenz einer endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit, $u_F = d(x_F)/dt$ laesst dies erwarten.

Deshalb wird eine Vorschrift zur Berechnung des jeweils naechsten Wertes von Δt verwendet, die sich schon bei den erwaehnten 1-D Rechnungen bewaehrt hat. Hierzu wird nach jedem Zeitschritt, d.h. nach der Berechnung aller Werte zur neuen Zeit, die maximale relative Aenderung der Variablen an allen Gitterpunkten waehrend des vergangenen Schritts bestimmt:

$$\Delta_{\max} = \max_{Vi,j} \left| \frac{2(\hat{T}(i,j) - T(i,j))}{\hat{T}(i,j) + T(i,j) + T_{\min}} \right| \quad (4.2.6)$$

Der Parameter T_{\min} unterdrueckt den Einfluss der starken relativen Aenderungen von T vor und an der Front. T_{\min} wird zwischen ein und zehn Prozent des maximalen Wertes von T betragen.

Wegen der Diskretisierung, d.h. einer Entwicklung nach der kleinen Groesse $\Delta T = \hat{T} - T$, gibt man ein Δ_0 vor, mit dem man Δ_{\max} vergleicht und das neue Δt berechnet:

$$\Delta t_{\text{neu}} = \Delta t_{\text{alt}} \frac{\Delta_0}{\Delta_{\max}} \quad (4.2.7)$$

Die Beziehung (4.2.7) dient auch als Vorschrift zur Wiederholung eines Zeitschrittes: War die Aenderung Δ_{\max} groesser als Δ_0 , so wird der Schritt wiederholt, um eine Entwicklung numerischer Stoerungen zu unterdruecken. Die Zahl Δ_0 wird im Abschnitt c) deshalb zur Untersuchung des Stabilitaetsbereiches benuetzt.

Die Groesse von Δt hat, wie in Kapitel 3 angedeutet, auch Einfluss auf die Diagonaldominanz der Rekursionsmatrizen. Dieser, und die Wirkung verschiedener ϵ bei der Unterdrueckung kleiner Matrixelemente zur Beschraenkung der Bandbreiten, wird in Abschnitt 4.3 untersucht. Bei dem Diffusionsproblem in diesem Abschnitt wird ϵ so gewaehlt, dass es keine Auswirkungen auf die numerische Loesung hat ($\epsilon \leq 10^{-7}$).

a) Vergleich mit der analytischen Loesung (4.2.2)

Das Bild (5.3) zeigt ein Profil, das sich zu spaeterer Zeit aus der Anfangsverteilung in Bild(4.1) ergibt. Die Zeit t und T_{\max} sind angegeben, der Masstab ist gegenueber Bild(4.1) aber neu normiert.

Der Zeitschritt wird, ausgehend von $\Delta t = 10^{-7}$, mit $\Delta_0 = 1.0$

und $T_{\min} = T_{\max}/20$ nach (4.2.7) berechnet. Zur Berechnung waren 40 Zeitschritte notwendig. Der Fehler in der Energieerhaltung $\Delta_E = 1 - E(t)/E(0)$ ist $3 \cdot 10^{-5}$, $E(t)$ berechnet nach (4.2.4). Der Ort der Waerme front stimmt innerhalb der Gitteraufloesung mit der analytischen Loesung (4.2.2) ueberein, das Temperaturmaximum bis auf zwei Prozent. Die theoretischen Werte sind jeweils in Klammern angegeben.

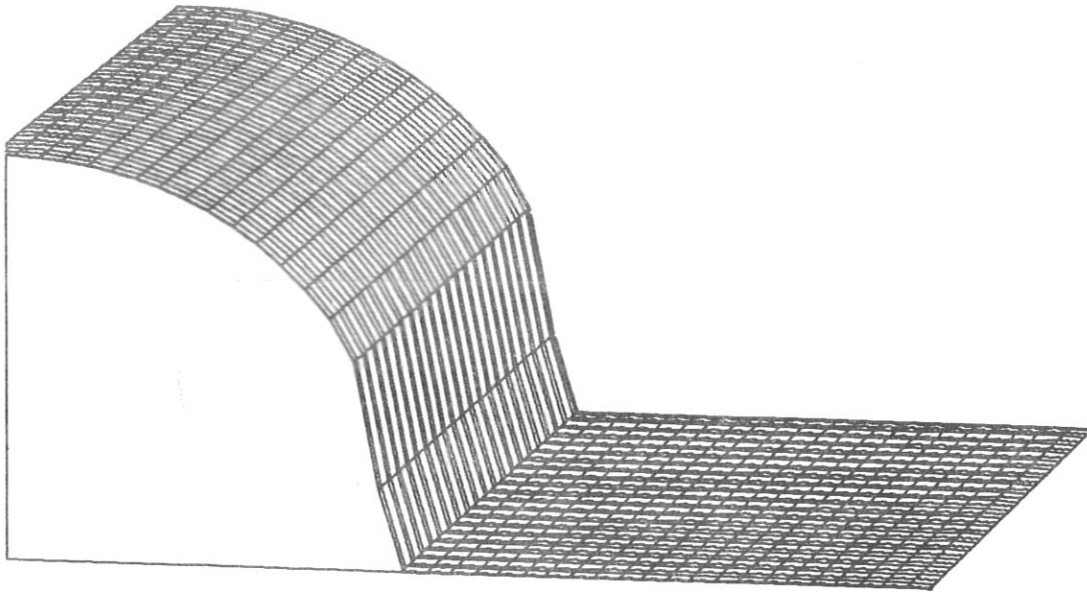


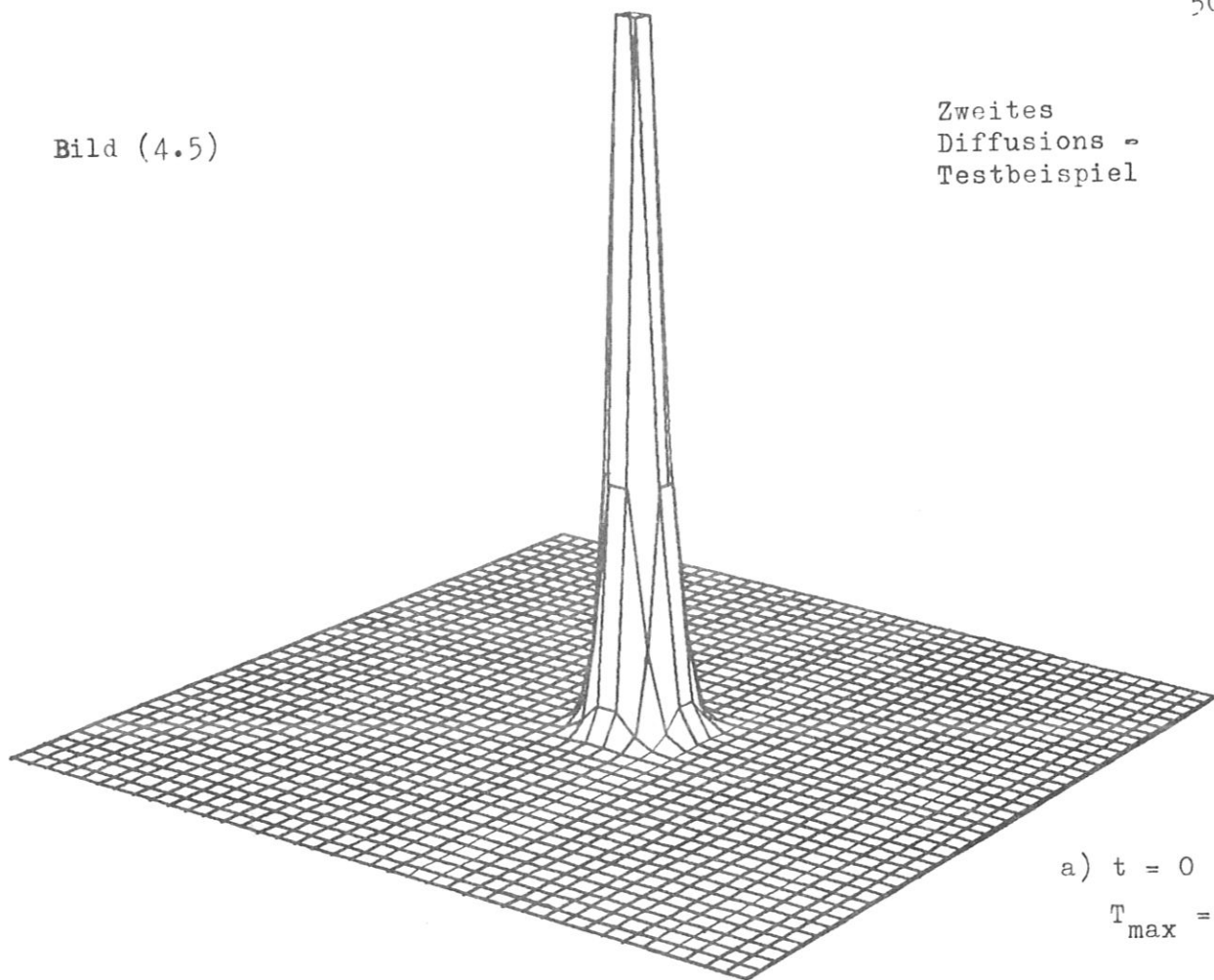
Bild (4.3) Temperaturprofil nach 40 Zeitschritten,
 $T_{\max} = 2.92$ (2.900), $x_F = 0.42$ (0.4184), $\Delta_E = 3 \cdot 10^{-5}$

b) Testproblem Bild (4.4)

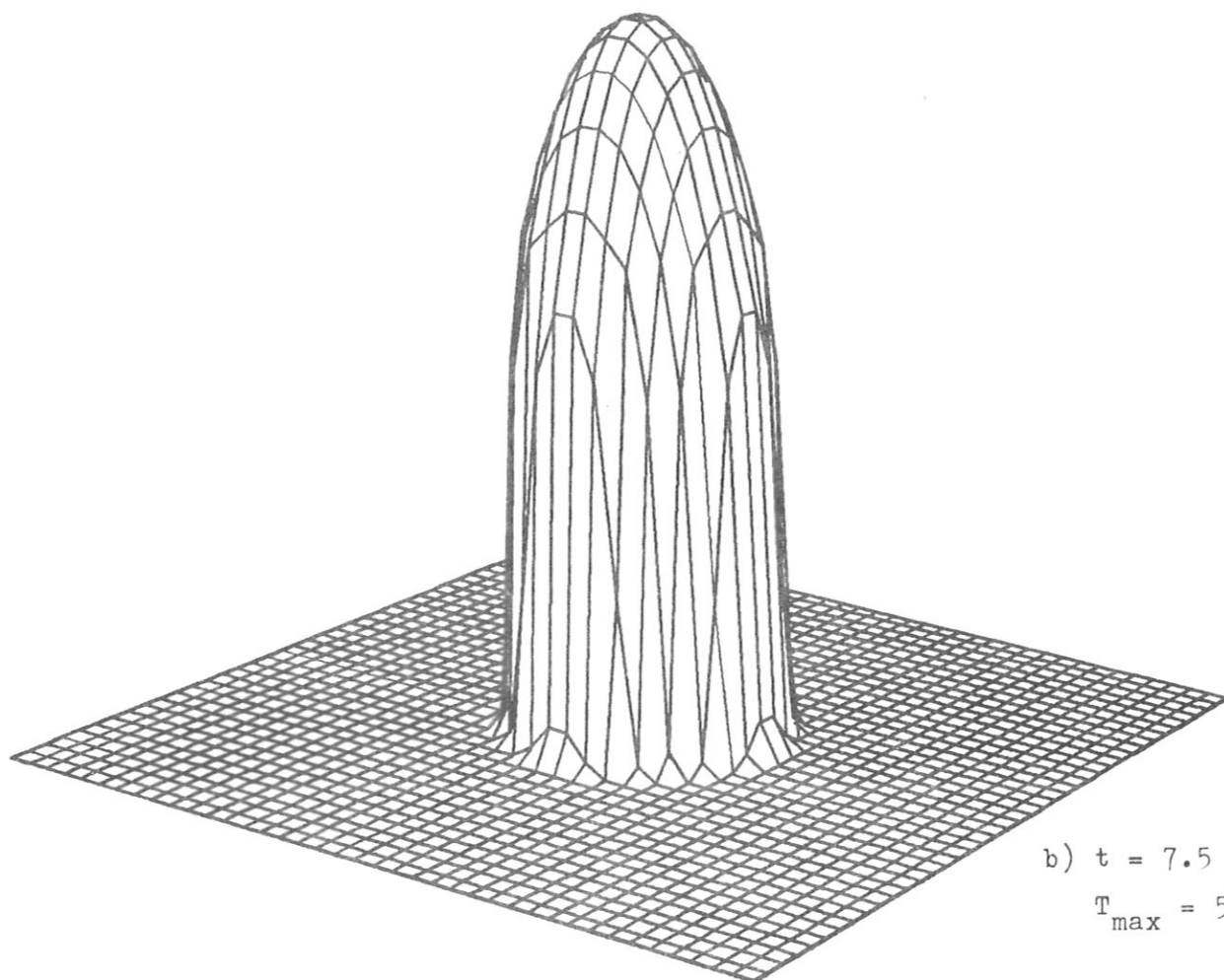
Das Beispiel aus Bild (4.4a) liefert nun Aussagen ueber das Verhalten der Loesung bei zweidimensionaler Waermeausbreitung. Bild 4.4b-f zeigt die zeitliche Entwicklung im Abstand von jeweils zehn Zeitschritten mit $\Delta_o = 1.0$. Der Masstab wurde gegenueber Bild (4.4a) neu bestimmt, aber fuer b-f dann beibehalten. Die wesentlichen Parameter sind jeweils angegeben. Der Fehler in der Energie bleibt unter 10^{-4} . Die Gesamtrechnzeit fuer einen Lauf entsprechend Bild (4.4) betrug 80 Sekunden auf der IBM 360/91. Die Rechnzeit pro Zeitschritt aenderte sich dabei wegen des Einflusses der variablen Bandbreiten der Matrizen von 1.4 - 2.5 Sekunden.

Bild (4.5)

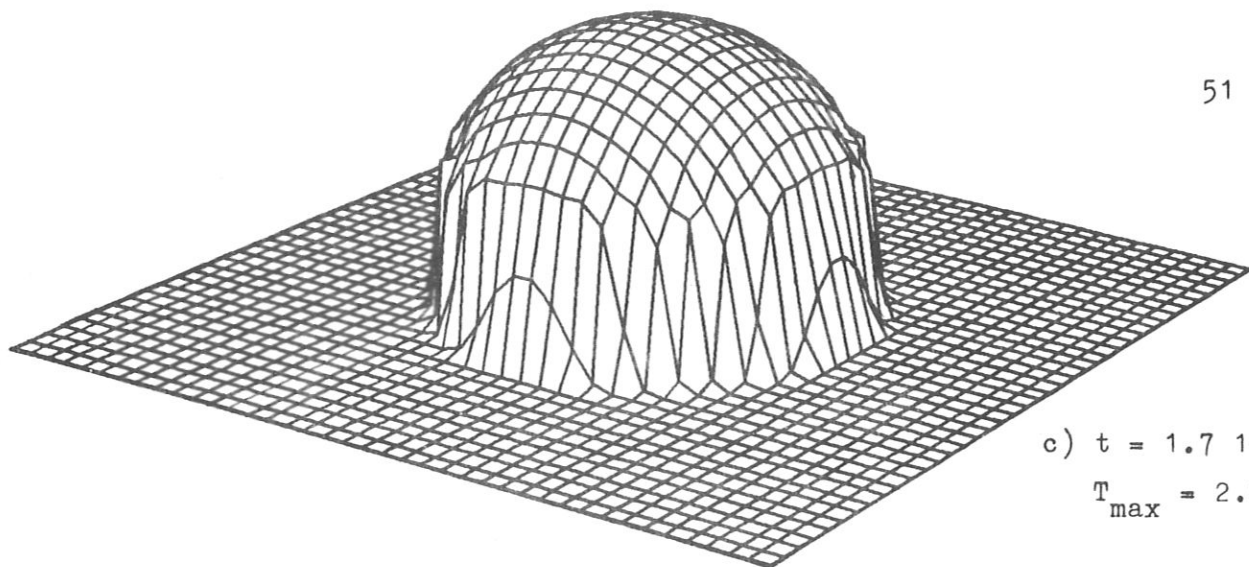
Zweites
Diffusions -
Testbeispiel



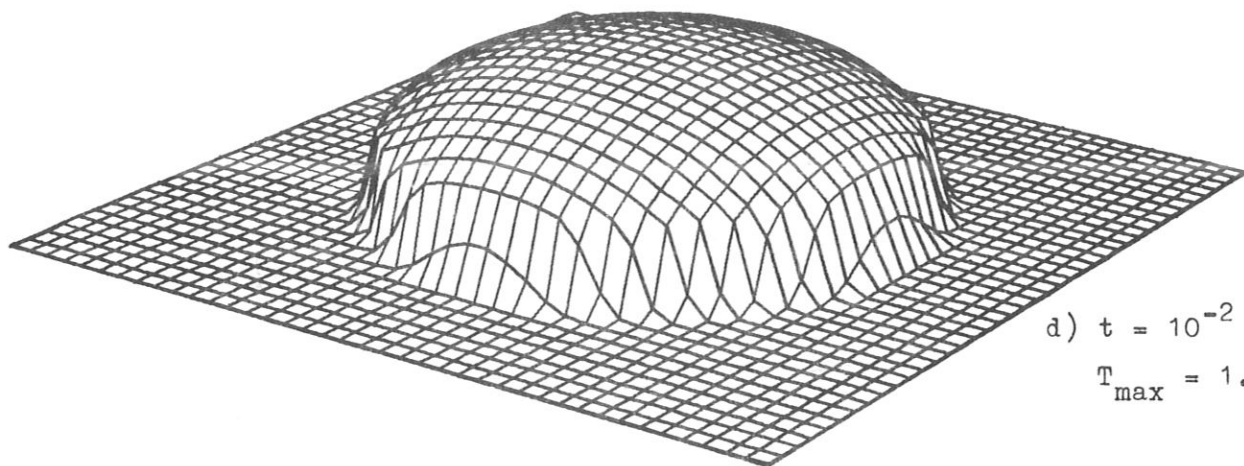
a) $t = 0$
 $T_{\max} = 60$



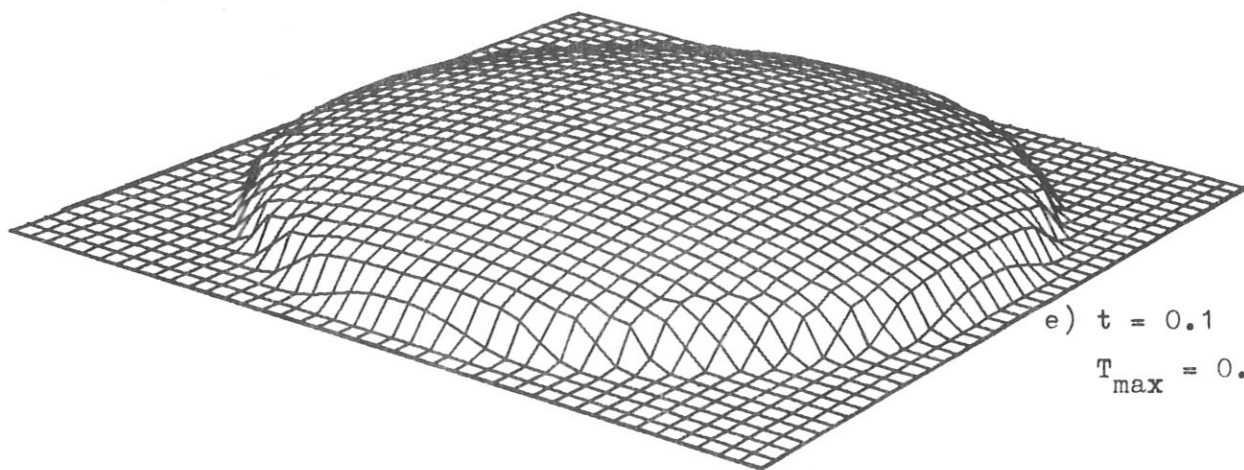
b) $t = 7.5 \cdot 10^{-5}$
 $T_{\max} = 5.3$



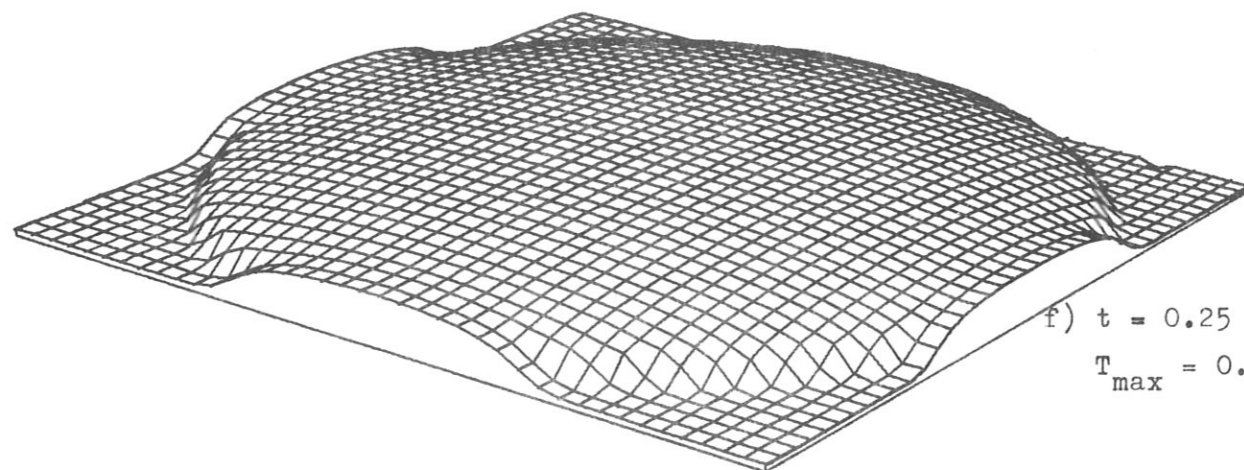
c) $t = 1.7 \cdot 10^{-3}$
 $T_{\max} = 2.2$



d) $t = 10^{-2}$
 $T_{\max} = 1.3$



e) $t = 0.1$
 $T_{\max} = 0.7$



f) $t = 0.25$
 $T_{\max} = 0.55$

c) Stabilitätsbereich

Der Bereich, in dem Δt variiert werden kann, ohne ein Entstehen numerischer Instabilitäten zu bewirken, ist von besonderem Interesse. Wegen der starken Zeitabhängigkeit des Zeitschritts in den beiden Testbeispielen, wird nicht Δt direkt zur Bestimmung des Stabilitätsbereiches verwendet, sondern der Parameter Δ_0 . Dieser bestimmt durch die Gleichung (4.2.7) den Wert von Δt nach jedem Schritt neu.

Der Einfluss von Δ_0 auf die Lösung wird in Bild (4.5) fuer $\Delta_0 = 1.75$ und 2.5 gezeigt.

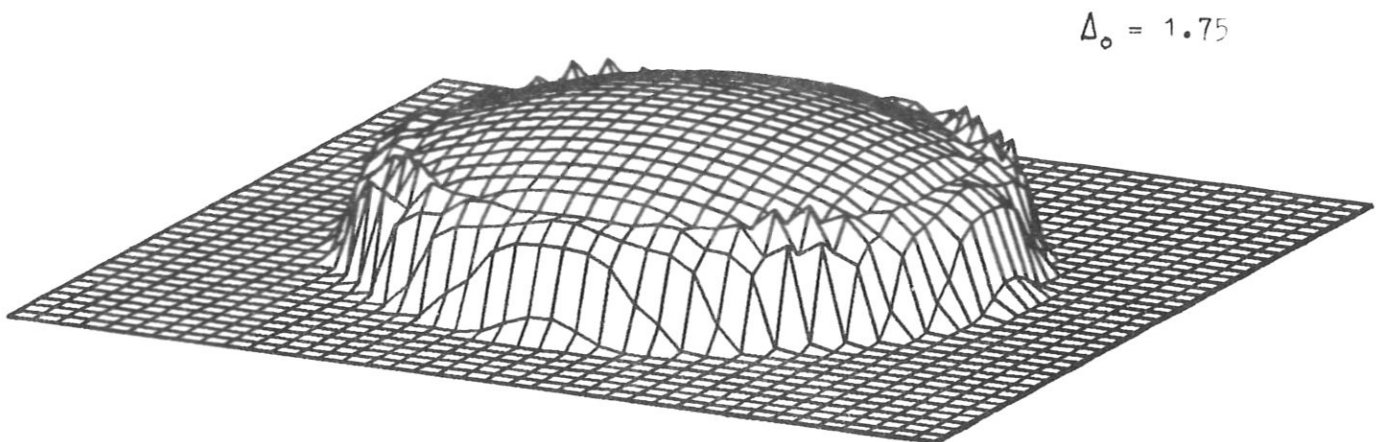
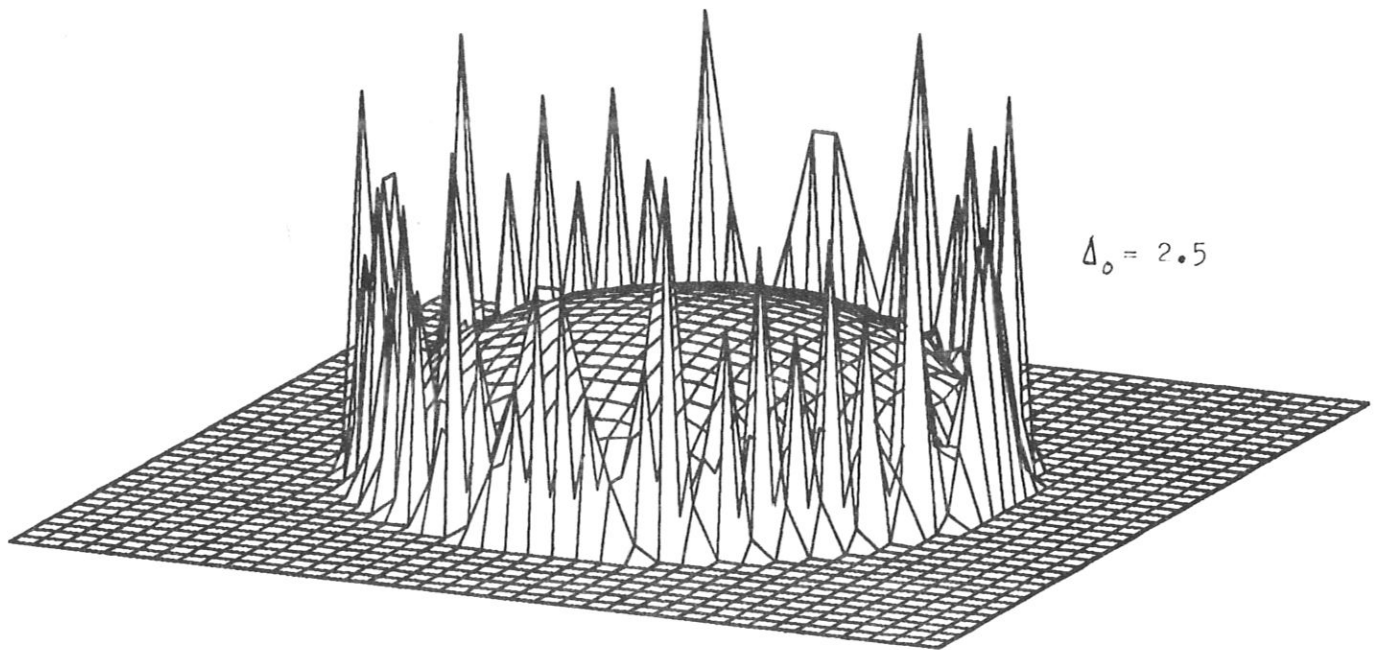


Bild (4.5) Ergebnisse mit $\Delta_0 = 1.75$ und $\Delta_0 = 2.5$

Man erkennt deutlich das Anwachsen der Schwingungen im Vergleich zu Bild (4.5). Wählt man in diesem Beispiel $\Delta_0 > 2.5$, werden die Schwingungen so stark, dass sie auch durch das Herabsetzen von Δ_0 fuer einige Schritte nicht mehr gedaempft werden koennen.

Mit $\Delta_0 = 1.75$ breitet sich die Waermefront waehrend eines Zeitschrittes gerade um einen Gitterschritt im Ort aus. Dies war auch schon bei den 1-D Rechnungen der Fall und entspricht der in Kapitel 2 angefuehrten Bedingung (2.2.5), in der fuer u die Ausbreitungsgeschwindigkeit u_f eingesetzt wurde. Diese Tatsache ist aber auf die hier behandelten Testbeispiele beschraenkt, bei dem dritten Anwendungsbeispiel wird sich zeigen, dass die mit dem INIM - Verfahren erzeugten Differenzen dort nahezu beliebige Zeitschritte zulassen.

Die Berechnung eines Diffusionskoeffizienten aus der hoechsten Temperatur und die Auswertung der Stabilitaetsbedingung (2.2.6) fuer lineare Gleichungen und explizite Verfahren liefert einen Zeitschritt, der etwa $1/10$ des maximalen Wertes bei der impliziten Loesung betraegt.

d) Vergleich mit Alternating-Direction (ADI) Verfahren

Zu den am haeufigsten verwendeten Differenzenverfahren fuer mehrdimensionale Modelle gehoeren die ADI - Methoden. Der Grundgedanke all dieser Verfahren besteht in der Konstruktion von Differenzengleichungen, die nur in einer Richtung im Ort implizit sind und sich dann mit den bekannten Verfahren fuer 1-D Probleme aufloesen lassen.

Um einen Anhalt fuer die Genauigkeit, die Stabilitaetseigenschaften, und den Rechenaufwand des INIM - Verfahrens zu erhalten, wurden deshalb drei verschiedene ADI - Differenzengleichungen fuer die Gleichung (4.2.1) programmiert. Gerechnet wurde das Testproblem aus Bild(4.4a).

Die Unterschiede zwischen den 3 Verfahren liegen in der Behandlung des Teils des Ortsoperators aus (4.2.1.a), der den Waermefluss orthogonal zur jeweiligen Aufloesungsrichtung des ADI - Algorithmus beschreibt - diese Unterschiede werden in Bild(4.6) verdeutlicht.

Die Skizze (4.6a) zeigt das Vorgehen bei der Fractional-Step Methode. Der zur Richtung der impliziten Loesung orthogonale Teil des Ortsoperators wird weggelassen.

Das zweite Schema entspricht einer impliziten Formulierung des Stroms laengs der Rekursionsrichtung und einer rein expliziten quer dazu (Bild(4.6b)).

Das dritte bezieht die schon bekannten Werte bei $t+\Delta t$ in der vorhergehenden Zeile mit ein (Bild(4.6c)). Das fuehrt aber zu einer drastischen Verletzung der lokalen

Erhaltungseigenschaften. Diese werden bei den anderen Methoden und natuerlich besonders bei INIM durch die Diskretisierung erzwungen.

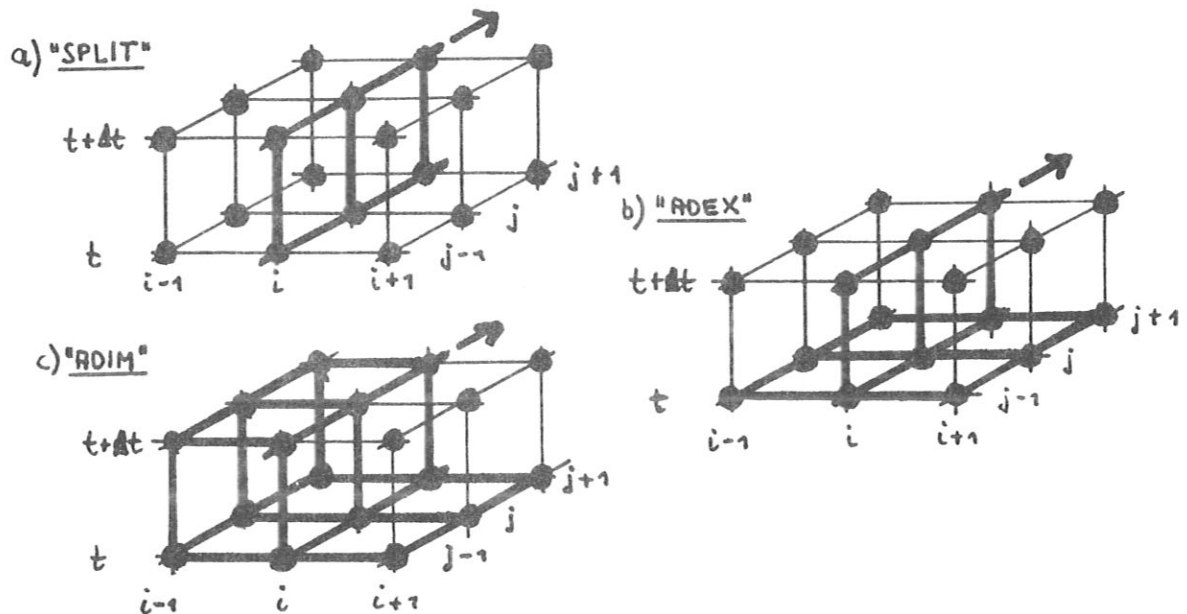


Bild (4.6) Zeitniveaus bei den ADI - Verfahren

Die Vergleichsrechnungen liefern folgende Ergebnisse: Die Bestimmung des Zeitschrittes erfolgte dabei immer nach dem Kriterium (4.2.7). Alle drei ADI - Verfahren fuehren zu numerisch stabilen Loesungen, die aber zum Teil erheblich von der INIM - "Normalloesung" abweichen.

Das in Bild (4.6) als ADIM bezeichnete Verfahren hat einen mit INIM vergleichbaren Stabilitaetsbereich. Wegen der inkonsistenten Formulierung musste aber der Zeitschrittparameter Δ_0 auf 1/100 des INIM - Wertes gesenkt werden, um den Fehler in der Energieerhaltung unter einem Prozent zu halten.

Das naechste Verfahren (ADEX), entspricht dem in der Literatur am haeufigsten vertretenen ADI - Schema. Der Fehler Δ_E liegt unter 10^{-3} , allerdings ist wegen der expliziten Teile der Differenzen eine Reduzierung von Δ_0 auf 1/5 des Wertes bei INIM notwendig.

Die besten Ergebnisse aller ADI - Schemata liefert das SPLIT (von "Splitting") genannte Fractional-Step Verfahren. Es hat einen mit INIM vergleichbaren Stabilitaetsbereich und aehnlich kleine Fehler in der Energiebilanz.

Der Vergleich des Rechenaufwandes faellt zunaechst eindeutig zu Gunsten von SPLIT aus, da sowohl die Differenzendarstellungen, als auch die Aufloesung rein eindimensional sind. Der tatsaechliche CPU - Zeitbedarf liegt fuer eine Rechnung bis zu dem Zeitpunkt in Bild(4.4.d) bei 4-5 Sekunden auf der 360/91.

ADEX ist etwa 5 mal langsamer als SPLIT. Der Aufwand fuer ADIM dagegen ist wegen der viel kleineren Zeitschritte sogar etwas groesser wie bei INIM.

Wie in Kapitel 2 gezeigt, sind alle ADI - Verfahren, insbesondere aber die "Splitting" Methode, nur beschraenkt anwendbar. Besonderes die Existenz gemischter zweiter Ableitungen verbietet ein "Splitting" und koennte nur mit einem ADIM - aehnlichen oder rein expliziten Schema beruecksichtigt werden.

4.3 Ideale, Kompressible Hydrodynamik

Die Auswahl des naechsten Anwendungsbeispiels erfolgte nach zwei Gesichtspunkten. Die Gleichungen der idealen kompressiblen Hydrodynamik bilden den Kernteil fast aller Fluessigkeitsmodelle. Die numerische Behandlung dieser Gleichungen ist von gleich grossem Interesse wie die der Diffusionsgleichungen, unterliegt aber besonders bei expliziten Verfahren anderen Stabilitaetsbedingungen.

Ein zweidimensionales Modell wird durch vier nichtlineare verkoppelte partielle Differentialgleichungen beschrieben. Gegenueber der Diffusionsgleichung aus dem letzten Abschnitt wird der Programmgenerator des INIM - Verfahrens also erstmals auf ein System angewendet. Deshalb werden an diesem Problem die Besonderheiten der impliziten Loesung von Systemen von Differentialgleichungen untersucht. Dazu gehoert die Bestimmung des Rechenaufwandes, der gegenueber einer einzelnen Gleichung stark ansteigen wird.

Zum Vergleich der physikalischen Ergebnisse wurde wieder ein erprobtes Verfahren herangezogen. Es handelt sich um das Lax-Wendroff Zweischrittverfahren, das fuer diese Gleichungen und verwandte Systeme seit langem erfolgreich verwendet wird.

4.3.1 Das Gleichungssystem

Das gewuenschte Gleichungssystem erhaelt man aus den ersten drei Momenten der Boltzmann - Gleichung unter der Annahme, dass die Stossterme gleich null sind (siehe Huang/29/). Die Gleichungen fuer die Teilchenzahl n , den Impuls $n m \underline{v}$, und die innere Energie $\frac{3}{2} n k T$ lauten:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} (n \underline{v}) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n m \underline{v}) + \text{div} (n m \underline{v} \cdot \underline{v}) = - \nabla p, \quad (4.3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n k T \right) + \text{div} \left(\frac{3}{2} n k T \underline{v} \right) = - p \text{div} (\underline{v}).$$

Dazu kommt die Zustandsgleichung $p = n k T$.

Die Schallgeschwindigkeit ist

$$c = \left(\frac{5}{3} \frac{p}{n m}\right)^{1/2} \quad (4.3.2)$$

Fuer die numerischen Rechnungen wird (4.3.1) dimensionslos formuliert. Alle Variablen sollen ausser von t nur von x und y abhaengen, die Geschwindigkeit \underline{v} hat nur die Komponenten v_x und v_y . Das zu loesende Gleichungssystem wird zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(n v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(n v_y) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(n v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(n v_x^2) + \frac{\partial}{\partial y}(n v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(n T) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(n v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(n v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(n v_y^2) + \frac{\partial}{\partial y}(n T) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(n T) + \frac{\partial}{\partial x}(n T v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(n T v_y) + \frac{2}{3} n T \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y}\right) &= 0 \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

Die Energiegleichung in (4.3.3) ist im Gegensatz zu den drei anderen Gleichungen nicht in Erhaltungsform fuer die Gesamtenergie formuliert. Dies hat bei der Behandlung von MHD-Modellen, in denen der grosste Anteil der Gesamtenergie im Magnetfeld steckt, Vorteile durch genauere Berechenbarkeit der thermischen Energie des Plasmas. Genauere Untersuchungen ueber die Auswirkungen verschiedener Formulierungen der Energiegleichungen wurden von Lindemuth an einem eindimensionalen Modell durchgefuehrt /30/.

Die Schallgeschwindigkeit, die fuer das Stabilitaetskriterium bei einer expliziten Loesung gebraucht wird, berechnet sich nach (4.3.4):

$$c = \left(\frac{5}{3} T\right)^{1/2} \quad (4.3.4)$$

4.3.2 Anfangs- und Randbedingungen

Im Gegensatz zu der Diffusionsgleichung bereitet die Auswahl eines Testbeispiels fuer das Gleichungssystem (4.3.3) etwas groessere Schwierigkeiten. In der Literatur haeufig verwendete 1-D Beispiele lassen auch die Entstehung von Stosswellen und deren Behandlung mittels einer kuenstlichen Viskositaet zu (siehe dazu z.B. die Arbeiten

von Hicks, Crowley /31,9/).

Um dies, und die moeglichen Einschränkungen bei der Vorgabe von Randbedingungen fuer alle Variablen zu vermeiden, wird in den weiter unten beschriebenen Faellen keine Stroemung durch die Raender zugelassen. Die Normalkomponente von \underline{v} an den Raendern ist also null, und die Randbedingungen sind:

$$\nabla n|_n = 0, \quad \underline{v}|_n = 0, \quad \nabla \underline{v}|_t = 0, \quad \nabla T|_n = 0. \quad (4.3.5)$$

Das Subscript n steht fuer die Normal-, t fuer die Tangentialkomponenten. Wegen der Vorgabe von Gradienten am Rand laeuft der physikalische Rand wieder zwischen den beiden aeussersten Gitterebenen.

Das Rechengebiet ist durch das Intervall

$$(-1 \leq x \leq 1), (-1 \leq y \leq 1)$$

gegeben. Die Anzahl der Gitterpunkte in x-Richtung ist n_i , die in y-Richtung n_j . Die Ortsschrittweiten - unabhaengig von x und y - berechnen sich dann zu:

$$\Delta x = 2/(n_i - 2) \quad \text{und} \quad \Delta y = 2/(n_j - 2) \quad (4.3.6)$$

Fuer die verschiedenen Tests bewaehrte sich ein Anfangsprofil fuer die Dichte, das aus einer Kombination von Gauss-Kurven besteht:

$$n(x,y) = n_0 (1 + \alpha e^{-\beta(x^2 + y^2)}). \quad (4.3.7)$$

Mit der Vorschrift (4.3.7) wird das in Bild (4.7a) gezeigte Dichteprofil erzeugt.

Zu Beginn der Rechnung werden die Geschwindigkeiten null gesetzt. Die Temperatur wird nach der Adiabatenbeziehung bestimmt:

$$T(x,y,0) = (n(x,y,0))^{2/3} \quad (4.3.8)$$

Die Ueberpruefung der Erhaltungssaetze ist durch zu (4.2.5) analoge Formeln moeglich. Die Teilchenerhaltung wird durch den Vergleich von $N(0)$ mit $N(t)$ kontrolliert:

$$N(t) = \sum_{i=2}^{n_i-1} \sum_{j=2}^{n_j-1} n(i,j,t). \quad (4.3.9)$$

Die Gesamtenergie $E(t)$ setzt sich aus kinetischer und thermischer Energie zusammen:

$$E(t) = \sum_{i=2}^{n_i-1} \sum_{j=2}^{n_j-1} \left[n(i,j,t) \cdot \left(\frac{3}{2} T(i,j,t) + \frac{1}{2} (v_x(i,j,t)^2 + v_y(i,j,t)^2) \right) \right] \quad (4.3.10)$$

4.3.3 Erzeugung der Koeffizienten

Die Anordnung der vier abhaengigen Variablen n , v_x , v_y , und T in den Zeilenvektoren erfolgt analog zur Vorschrift (3.5.5):

$$\underline{w}(j) := (n(j,1), v_x(j,1), \dots, v_y(j,n_i), T(j,n_i))$$

Waehrend bei der Gleichung (4.2.1a) nur ein einmaliger Lauf des Programmgenerators notwendig war, ist der Aufwand zur Bearbeitung des Systems (4.3.3) hoeher. Die maximale Zahl der Koeffizienten $c(l,m,k)$ war in Kapitel 3 mit $9 \cdot n_w \cdot n_w$ (=144 fuer $n_w=4$) angegeben worden. Die tatsaechlich zu bestimmende Zahl ist jedoch geringer, da in (4.3.3) nicht jede Variable in allen Gleichungen mit allen uebrigen Variablen verknuepft ist. Es gibt folgende Kombinationen:

$$n \cdot v_x, \quad n \cdot v_y, \quad n \cdot T,$$

$$n \cdot v_x \cdot v_x, \quad n \cdot v_x \cdot v_y, \quad n \cdot v_y \cdot v_y, \quad n \cdot v_x \cdot T, \quad n \cdot v_y \cdot T.$$

Die restlichen $c(l,m,k)$ werden vom Programmgenerator automatisch auf null gesetzt. Durch die Aufteilung der Gitterzelle in vier Quadranten werden je Zelle nur die Produktterme der obigen Kombinationen an den vier Eckpunkten des Quadranten II neu berechnet. Die Produktterme in den anderen drei Quadranten sind durch Umspeicherung verfuegbar. Dies reduziert die Zahl der numerischen Operationen, erhoehrt aber den Aufwand im Programmgenerator. Dieser muss dazu alle vorkommenden Permutationen von Orts- und Variablenindizes bereitstellen.

In allen vier Gleichungen steht ein Divergenzterm, der durch Anwendung des Gauss'schen Satzes umgeformt wird. Dazu kommt in den Gleichungen fuer v_x und v_y je ein Volumenintegral aus $\text{grad}(p)$, in der Energiegleichung eines ueber $p \cdot \text{div}(v)$. In jeder Zelle gibt es daher fuer alle Gleichungen Ausdruecke vom Typ QY-I, QY-II, QX-II, QX-IV und fuer die zuvor genannten drei Gleichungen Volumenterme V-I...IV. Die Erzeugung aller Koeffizienten erfordert also sieben Durchgaenge des Programmgenerators. Dazu wurden etwa 45 Minuten Rechenzeit benoetigt.

Die Diskretisierung der Randbedingungen (4.3.5) kann

Wieder direkt vorgenommen werden, z.B. bei $i = 1, 2$ und j :

$$n(1, j, \hat{t}) = n(2, j, \hat{t}), \quad v_x(1, j, \hat{t}) = -v_x(2, j, \hat{t}), \quad \text{usw.}, \quad \hat{t} = t + \Delta t. \quad (4.3.11)$$

Die Zeitableitungen in (4.3.3b-d) werden zunaechst ausdifferenziert und dann durch Differenzen ersetzt, z.B.:

$$\frac{\partial}{\partial t} (nT) = n \frac{\partial T}{\partial t} + T \frac{\partial n}{\partial t} \approx \frac{1}{\Delta t} \left[n(\hat{T}-T) + T(n-n) \right]_{i,j} \quad (4.3.12)$$

In den Zeitableitungen haben v_x, v_y und T zur Zeit $t + \Delta t$ ein $n(t)$ (und umgekehrt) im Koeffizienten. Da die Dichte n notwendig positiv und groesser null sein muss, hat die oben angegebene Anordnung der Variablen in \hat{w} (j) gerade die geforderte Eigenschaft, die Diagonalelemente von $\underline{C2}$ mit Termen proportional $1/\Delta t$ zu besetzen.

An der Kontinuitaetsgleichung wurden mit Hilfe von REDUCE die Diskretisierungsfehler untersucht. Dazu wurden, wie schon in Abschnitt 3.3 erwaeht, die Variablen durch Tayloransaetze um den Punkt (i, j) dargestellt und in die Differenzengleichung eingesetzt. Dabei ergab sich ein Diskretisierungsfehler im Ort von der Ordnung Δx^α und Δy^α , $\alpha \geq 2$ fuer ein aequidistantes Gitter. Bei veraenderlichen Schrittweiten kommt noch ein Term der Ordnung $\Delta x(i) - \Delta x(i-1)$ und $\Delta y(j) - \Delta y(j-1)$ dazu. Der Abschneidefehler in der Zeit war mit $\Theta = 1/2$ von der Ordnung Δt^2 .

4.3.4 Numerische Ergebnisse

Die in Abschnitt (4.2) fuer die Diffusionsgleichung entwickelte Vorschrift zur Berechnung des Zeitschritts wird in erweiterter Form auch bei diesem Beispiel benutzt. Fuer jede Variable wird nach jedem Zeitschritt die groesste relative Aenderung im ganzen Gitter gesucht. Der groesste der vier Werte $\Delta_k(1-4)$ dient dann zur Neufestsetzung von Δt .

$$\Delta_k = \max_{i,j} \left[\frac{2(\hat{w}(i,j,k) - w(i,j,k))}{\hat{w}(i,j,k) + w(i,j,k) + w(k)} \right]_{\min} \quad (4.3.13)$$

$$\Delta t_{\text{neu}} = \Delta t_{\text{alt}} \min_{k=1,4} \frac{\Delta k_0}{\Delta_k}.$$

Die vier Minimum-Angaben dienen wieder zur Unterdrueckung des Einflusses zu kleiner Werte, etwa bei Vorzeichenwechsel der Geschwindigkeitskomponenten.

Eine Beurteilung des Stabilitaetsbereiches erlaubt die zum Vergleich verwendete Bedingung (2.2.5) fuer Δt bei expliziten Verfahren.

$$(c + |v|) \frac{\Delta t_N}{\Delta a} \leq 1 ; \Delta a = \min (\Delta x, \Delta y). \quad (4.3.14)$$

Da die Gleichungen (4.3.3) adiabatische Vorgaenge beschreiben, wird ausgehend von dem nach dem Adiabatengesetz bestimmten Anfangsprofil fuer die Temperatur aus (5.3.8), diese Beziehung zwischen Dichte und Temperatur zu spaeteren Zeiten ueberprueft.

a) Genauigkeit und Stabilitaet

Das Profil in Bild(4.7.a) wurde zur Kontrolle der Symmetrieeigenschaften des Verfahrens benutzt. Die Vertauschung von x- und y-Richtung ergab keine sichtbaren Unsymmetrien (fuer Werte des Abschneideparameters $\xi < 10^{-7}$ bei der Bandbreitenbeschraenkung - siehe unten).

Die Bilder (4.7b-f) zeigen die zeitliche Entwicklung zu fuenf spaeteren Zeiten. Gezeichnet ist jeweils die Dichteverteilung, die Normierung erfolgte auf $n(\max) - n(\min)$ aus Bild (4.7.b). Die Zeitschrittparameter Δ_0 wurden so gewaehlt, dass sich der Wert von Δt auf den Maximalwert der Bedingung (4.3.14) einstellte. Numerische Schwingungen traten dabei nicht auf. Der Fehler in der Teilchenerhaltung $\Delta_N = 1 - N(t)/N(0)$ war waehrend der gesamten Rechnung kleiner als $5 \cdot 10^{-5}$. Der Fehler in der Energieerhaltung erreichte am Ende derselben Rechnung 10^{-2} . Zu diesem Zeitpunkt sind durch die mehrfache Reflektion und Interferenz der Wellen die Wellenlaengen schon so kurz geworden, dass das Ortsgitter zu deren Aufloesung zu grob geworden ist. Die Ueberpruefung der Beziehung zwischen Temperatur und Dichte an Hand von (4.3.8) ergibt am Ende der Rechnung einen Fehler von maximal fuenf Prozent.

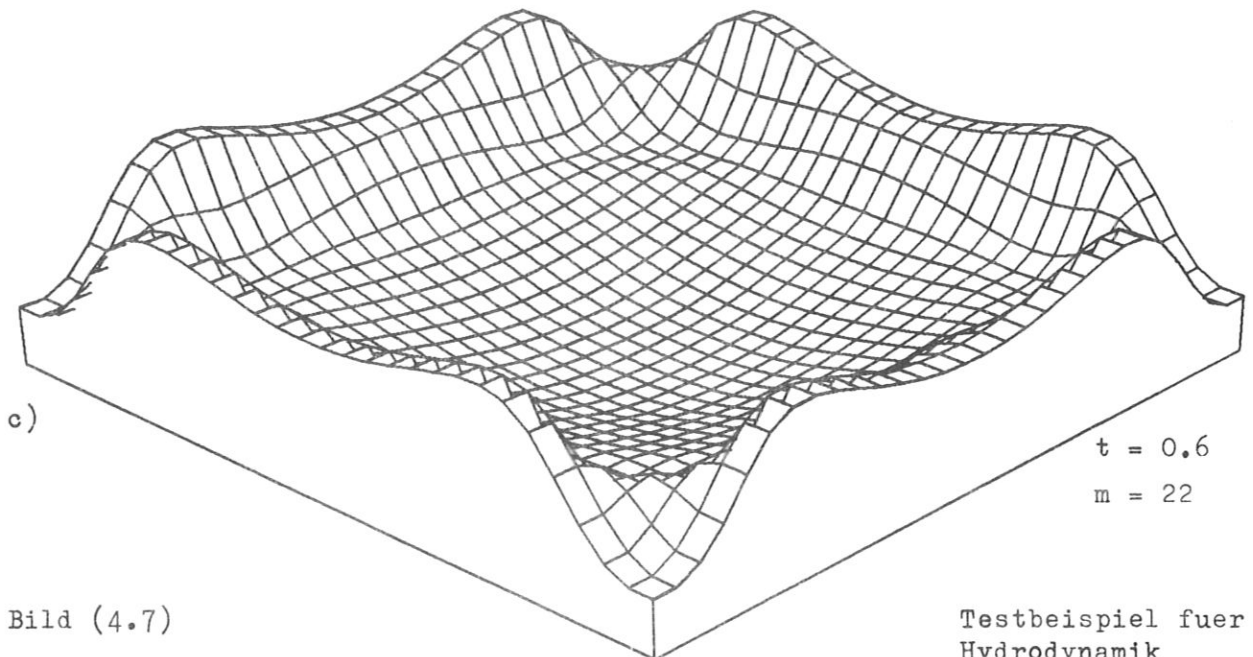
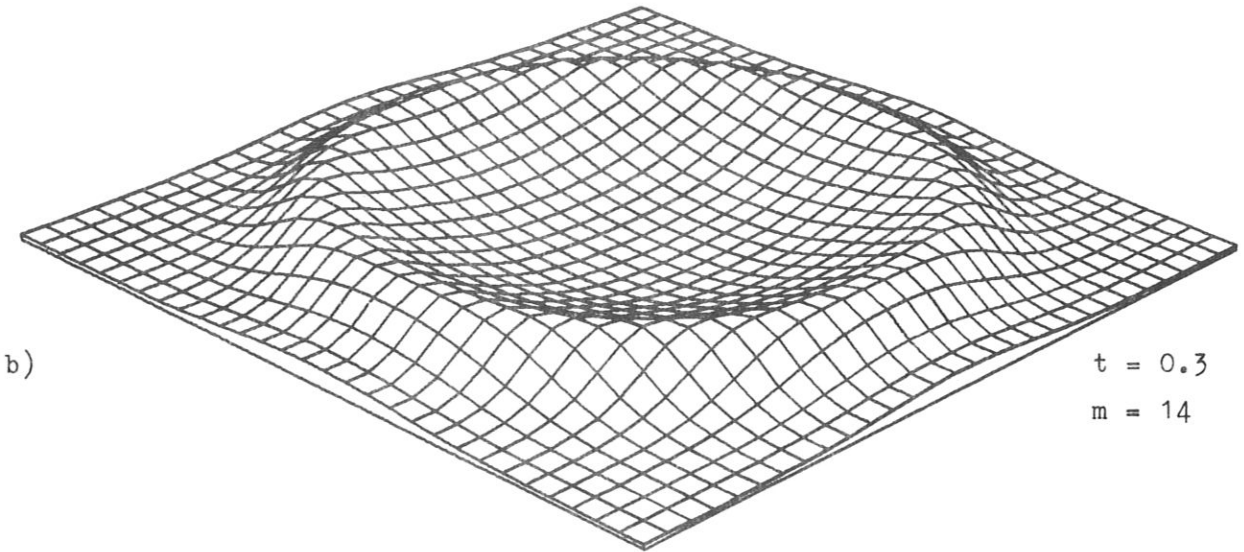
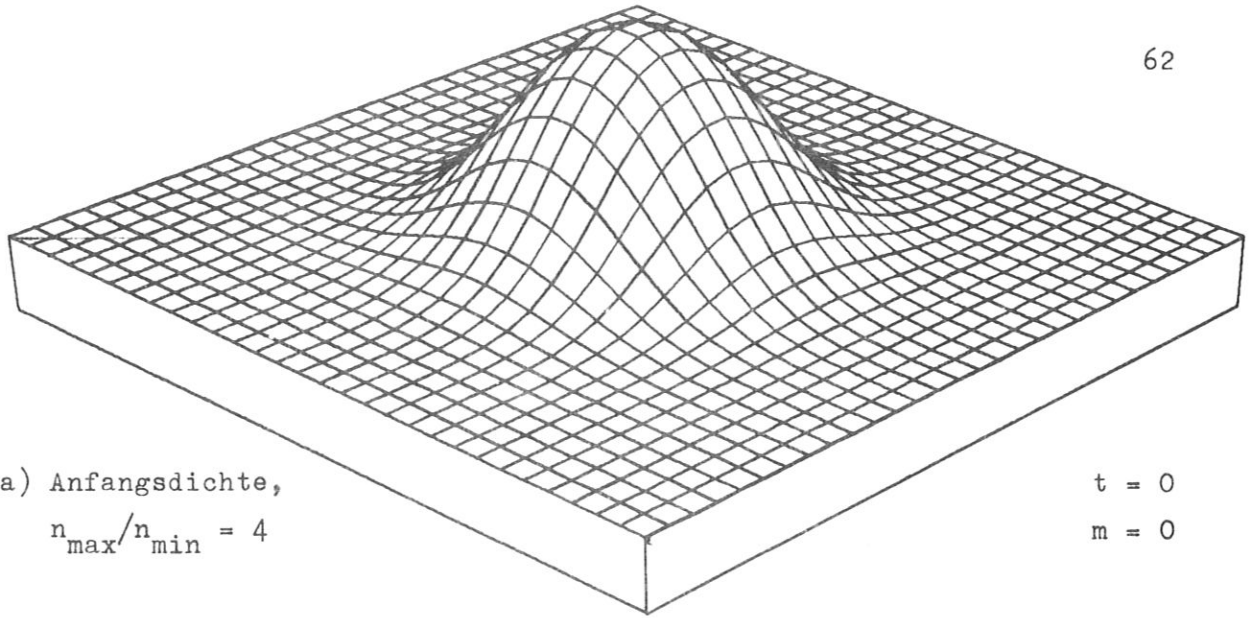
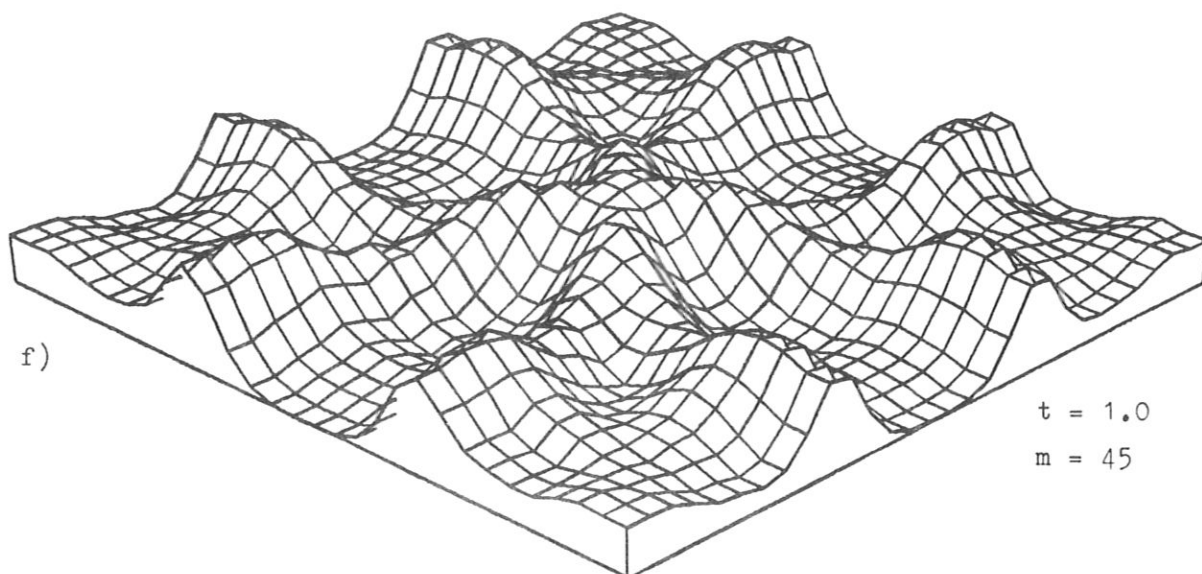
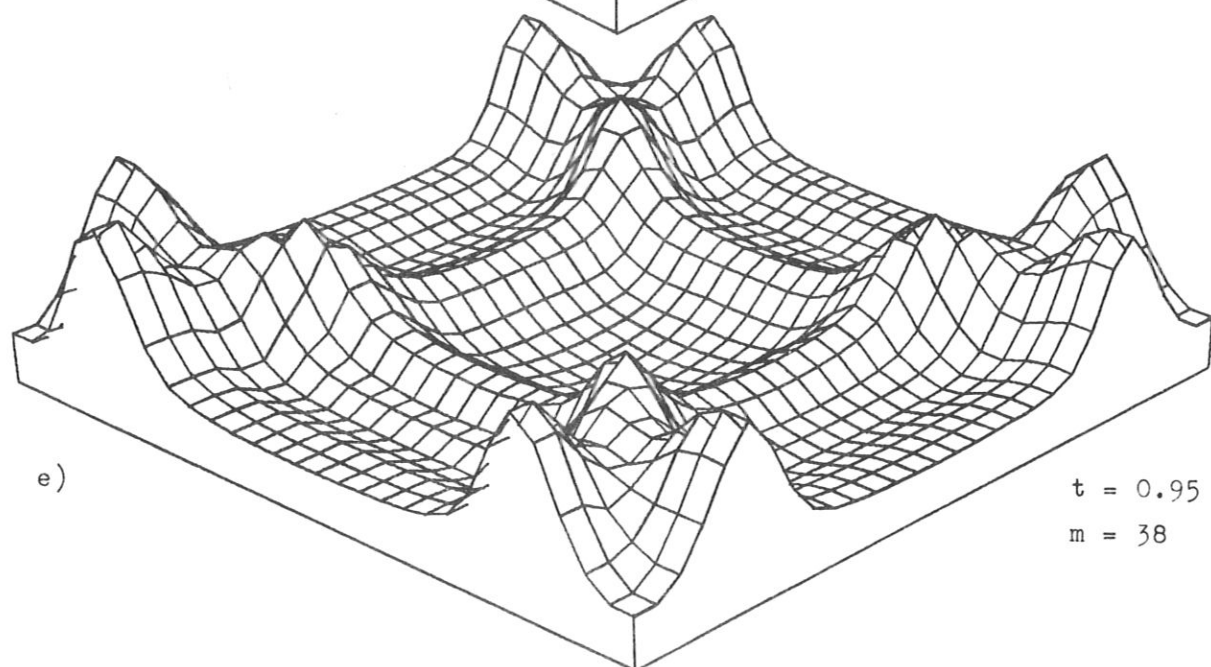
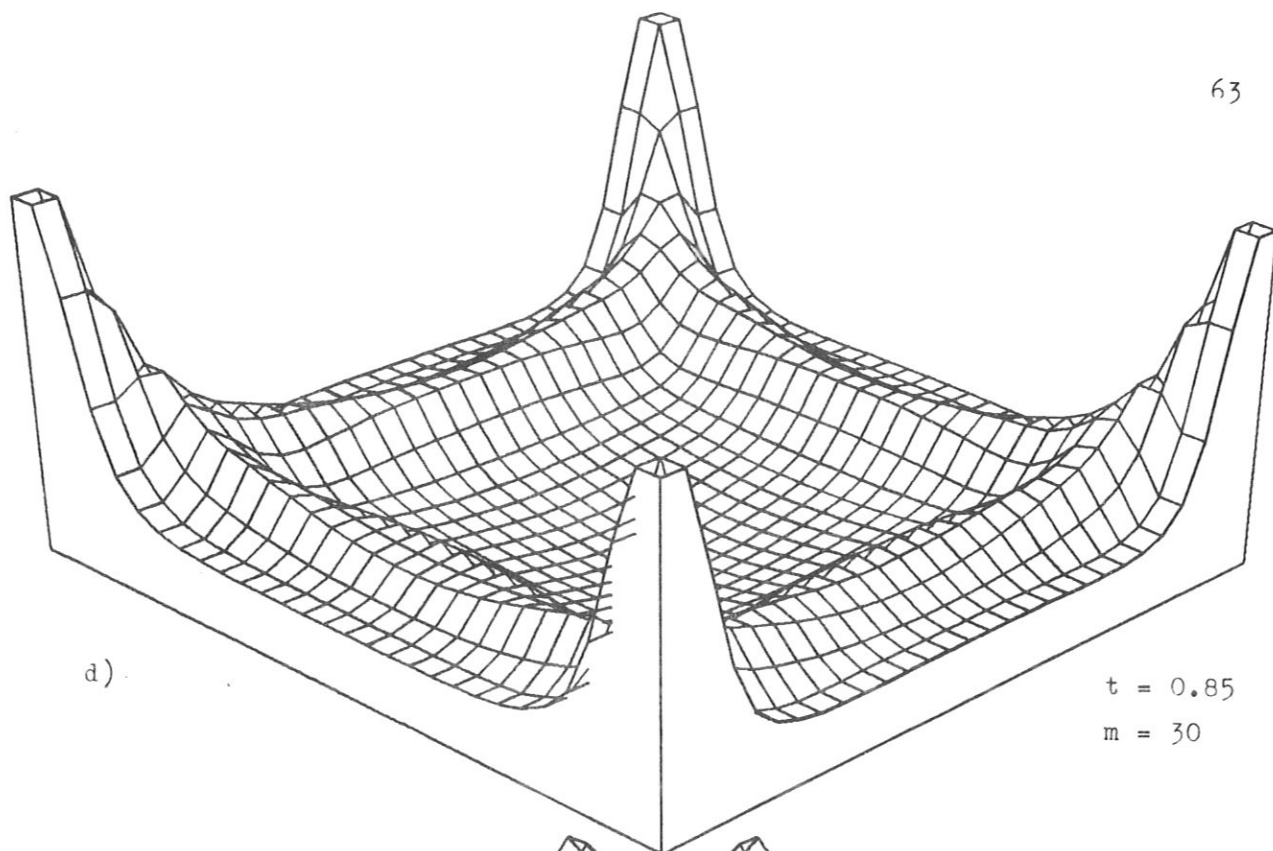


Bild (4.7)



Die Untersuchung des Stabilitätsbereiches erfolgte in einem Bereich von $\Delta t/\Delta t_N = 1/4 \dots 4$ bezogen auf den durch (4.3.14) gegebenen Wert. Das Anfangsprofil war jeweils identisch.

Wie erwartet, blieb die numerische Lösung stabil auch bei Werten von $\Delta t/\Delta t_N > 1$. Dabei nahmen allerdings die Fehler in der Temperatur ab $\Delta t/\Delta t_N > 1.5$ ständig zu. Die hier nicht näher untersuchten Ursachen dürften u.a. in den grösseren Phasenfehlern impliziter Verfahren (siehe z.B. Crowley/9/), und in der speziellen Formulierung der Energiegleichung liegen.

Als Vergleichsverfahren wurde für das Gleichungssystem (4.3.3) ein Lax-Wendroff Differenzschema programmiert (siehe /4/). Dieses explizite zweistufige Verfahren wurde im selben Bereich von Δ_0 untersucht. Ab Werten von $\Delta t/\Delta t_N > 1.2$ entstanden erwartungsgemäss Gitterschwingungen, die ab 1.5 zu instabilen Lösungen führten. Diesem ungünstigeren Stabilitätsverhalten stehen der wesentlich geringere Rechenaufwand und kleinere Fehler in der Lösung der Temperaturgleichung gegenüber ($\Delta E = 10^{-4} \dots 10^{-3}$). In dem gewählten Beispiel war die, den Zeitschritt bei expliziten Verfahren beschränkende Signalgeschwindigkeit von der selben Größenordnung, wie Strömungs- und Schallgeschwindigkeit. Wird sie grösser, so muss Δt im expliziten Fall entsprechend verkleinert werden, während dies bei dem INIM - Verfahren nicht notwendig ist.

b) Rechenaufwand und Bandbreitenbeschränkung

Der tatsächliche Rechenaufwand soll in diesem Abschnitt etwas ausführlicher untersucht werden, als dies bisher geschehen ist. Anders als bei expliziten Verfahren lassen sich bei dem INIM - Verfahren keine direkten Beziehungen zwischen den Parametern für die Diskretisierung (Ortsschrittweiten, Zahl der Gitterpunkte, Zeitschritte usw.) und dem Aufwand angeben.

Das liegt an der Verwendung variabler Bandbreiten bei der Berechnung und Speicherung der Rekursionsmatrizen $\underline{G}(j)$. Die Auswirkungen auf Speicherplatz, Rechenzeit und vor allem auf die Lösung sollen nun behandelt werden.

Bei den bisher beschriebenen Rechnungen wurde der Parameter ϵ immer kleiner als 10^{-7} gesetzt. Dies ist die relative Genauigkeit, die auf einer IBM 360/91 bei einfacher Stellenzahl erreichbar ist.

Bei gleichbleibender Vorschrift für Δt und identischen Anfangsbedingungen wurde nun von 0 bis 10^{-3} verändert. Ein Einfluss auf die Lösung wird für $\epsilon \geq 10^{-7}$ im Fehler in der Teilchenerhaltung sichtbar, der bisher bei 10^{-6} lag. Der Fehler ΔN wächst danach ungefähr linear mit ϵ . Diese Abhängigkeit zeigten auch Vergleichsrechnungen, die an der Diffusionsgleichung durchgeführt wurden.

Mit $\epsilon \geq 10^{-6}$ wird die Symmetrie der Anfangsbedingung im Laufe der Rechnung zunehmend verletzt. Eine Erhöhung von ϵ auf 10^{-3} führt zu völlig instabilen Lösungen (negative Dichten etc.).

Die Wahl von ϵ beeinflusst primär die erreichbare Genauigkeit der Lösung. Die Überprüfung der Erhaltungsgroessen liefert dafür einen Anhalt, falls die Differenzgleichungen auch in Erhaltungsform konstruiert wurden. Dies ist bei der Kontinuitätsgleichung aus (4.3.3) der Fall, ebenso bei der Diffusionsgleichung (4.1).

Die Verkleinerung von ϵ unter 10^{-7} erhöht nur noch die Zahl der zu speichernden Matrizenelemente und der notwendigen Operationen während der Rekursionen für $\underline{G}(j)$ und $\hat{w}(j)$. Dadurch wird aber vor allem die Rechenzeit je Zeitschritt vergrößert, ohne zusätzliche Information gewinnen zu können.

Diese Abhängigkeit zeigt Bild(4.8). Die Zahl der zu speichernden Matrixelemente und die Rechenzeit pro Zeitschritt wurden für ein 30×30 Gitter bestimmt. Dabei wurde immer bis zur selben physikalischen Zeit gerechnet und die zu diesem Zeitpunkt grösste Matrix $\underline{G}(j)$ berücksichtigt.

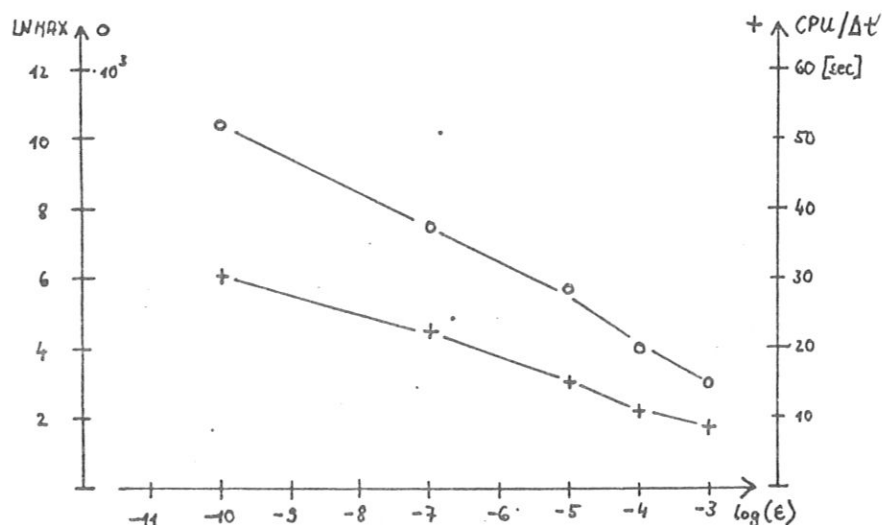


Bild (4.8) Rechenzeit ($CPU/\Delta t$) und Zahl der Elemente von \underline{G} ($LNMAX$) fuer verschiedene ϵ

Die Rechenzeiten wurden wiederum auf einer IBM 360/91 ermittelt. Dabei wurden alle Matrizenroutinen in der Maschinsprache PL 360 programmiert. Dies ergab gegenueber fruerehen FORTRAN Versionen eine Beschleunigung um das drei- bis vierfache. Diese Zeitersparnis und die allgemeine Verwendbarkeit der Routinen rechtfertigt die etwas muhsamere Programmierung umfangreicher Algorithmen in Maschinsprachen. Die Rechenzeit fuer die Auswertung der Koeffizienten ist natuerlich unabhaengig von ϵ und wird nur durch die Zahl der Gitterpunkte festgelegt. Fuer ein 30×30 Gitter wurden 3.3 Sekunden benoetigt, also 0.003 Sekunden je Gitterzelle.

Diese Art der Bandbreitenbeschneidung wird vor allem durch die Diagonaldominanz der Koeffizienten- und Rekursionsmatrizen ermoeeglicht. Wie schon fruеher erlaeutert, haengt diese Eigenschaft von den $1/\Delta t$ Termen in der Hauptdiagonalen von \underline{C}_2 ab. Den Einfluss von Δt auf den Rechenaufwand zeigt Bild (4.9). Dazu wurde wieder $\Delta t/\Delta t_N$ von $1/4$ bis 4 veraendert.

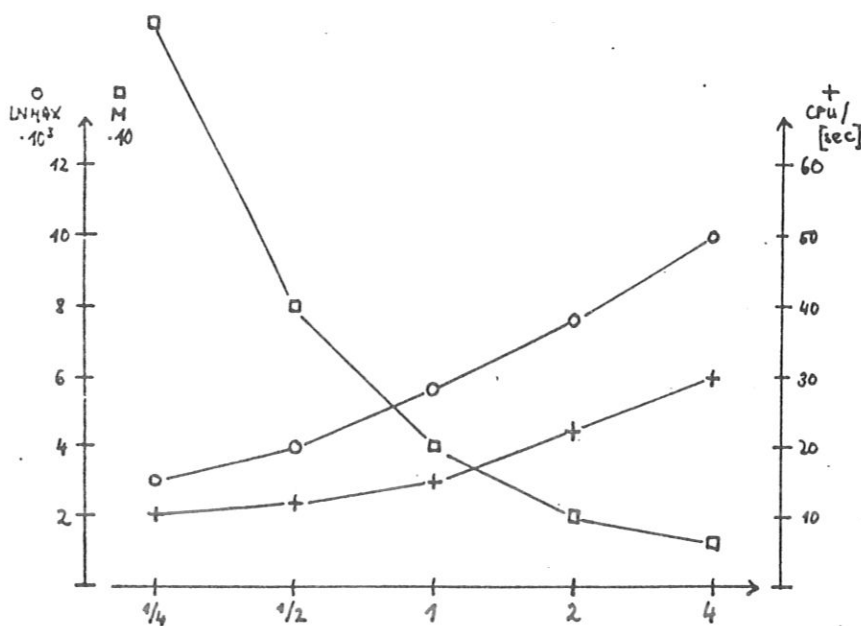


Bild (4.9) Rechenzeit, Zahl der Elemente und Zahl der Zeitschritte (M) fuer $\Delta t / \Delta t_M = 1/4 \dots 4$

Bei kleinen Werten von Δt ist die Rechenzeit pro Zeitschritt nahezu konstant, der Gesamtaufwand steigt wie bei expliziten Verfahren umgekehrt proportional zu Δt .

Bei grossen Werten von t steigen sowohl Rechenzeit pro Schritt als auch die Zahl der Elemente so stark an, dass die Gesamtzeit fuer die Loesung dieses Problems bei Vergrößerung von Δt nur noch sehr langsam abnimmt. Erst wenn die Matrizen die maximale Besetzung erreicht haben - das ist etwa bei $\Delta t = 10 \cdot \Delta t_M$ der Fall - nimmt der Rechenaufwand mit Erhöhung von Δt wieder ab.

Das Optimum liegt in dem Bereich, wo der Fehler in der Temperaturverteilung noch toleriert werden kann, also bei $\Delta t \leq 1.5 \Delta t_M$.

Die Zunahme des Rechenaufwandes bei Vergrößerung der Punktzahl des Gitters ist ebenfalls von Interesse. Auch hier spielt die Bandbreitenbeschränkung eine Rolle. Wählt man n_i und n_j nicht gleich gross, so sollte die Zusammenfassung zu den \underline{w} (j) in Richtung des kleineren Wertes, die Rekursion in Richtung des grosseren erfolgen.

Die Abhängigkeit der Rechenzeit je Zeitschritt und der Zahl der Matrixelemente von n_i und n_j zeigt Tabelle (5.1). Das physikalische Problem und die Vorschriften fuer Δt wurden unverändert gelassen, n_i und n_j wurden beide von 20 bis 80 verändert.

Die Rekursionsrichtung zeigt in Richtung von n_j . Ein Verhaeltnis $n_i/n_j \geq 4$ verdoppelt also ungefaehr die

Rechenzeit gegenueber $n_j/n_i \leq 4$, die Zahl der Elemente nimmt dabei sogar staerker zu.

Tabelle (4.1) Rechenzeit und Zahl der Elemente fuer verschiedene n_i und n_j

n_i	n_j	LNMAX(ca)	CPU/ Δt
20	20	3000	5.5
20	40	2600	10.
20	80	2000	15.
30	30	5500	16.5
40	20	7700	16.5
40	40	7700	32.
60	60	11000	75.
80	20	15000	30.

Der Zentralspeicherbedarf liegt fuer ein 30×30 Gitter bei 360 Kilobytes (KB), fuer ein 60×60 Gitter bei 720 KB. Dazu kommt der externe Speicherplatz fuer die Rekursionsmatrizen von ca. 600 KB, bzw. 3000 KB. Das Verhaeltnis zwischen reiner Rechenzeit und Verweildauer in der Maschine erreichte 9:10, wenn eine IBM Trommel 2301 exklusiv zur Verfuegung stand.

4.4 MHF - Gleichungen

Die Ergebnisse der letzten beiden Abschnitte ergaben, dass das INIM - Verfahren die direkte implizite Lösung von partiellen Differentialgleichungen in zwei Dimensionen ermöglicht, die sowohl parabolischen als auch hyperbolischen Charakter haben koennen. Da bisher nur auf die Moeglichkeit der Behandlung gemischter Ableitungen hingewiesen worden ist, dient das Beispiel in diesem Abschnitt dazu, tatsaechlich Gleichungen dieser Art zu loesen. Gleichzeitig wird erprobt, wie weit die explizite Stabilitaetsgrenze mit einem impliziten Verfahren fuer nichtlineare Gleichungen ueberschritten werden kann, und welchen Einfluss der Zentrierungsparameter θ dabei hat.

Dazu bot sich ein Gleichungssystem an, das von A. Schlueter zur Berechnung stabiler magnetohydrodynamischer Gleichgewichte vorgeschlagen wurde /32/. Es besteht aus einem Satz nichtlinearer verkoppelter parabolischer Differentialgleichungen. Durch die stark nichtlineare Verkopplung, verbunden mit ueberwiegend gemischten Ableitungen, laesst sich dieses System mit ADI - Methoden nicht behandeln. Chodura und Schlueter haben fuer ein dreidimensionales Modell explizite Verfahren entwickelt, die durch spezielle Vorschriften bei der Zeitschrittberechnung eine Ueberschreitung der Courant - Friedrichs - Loewy Bedingung um bis zu 100 zulassen /25/. Dieses Verfahren wird, angewendet auf ein rotationssymmetrisches Problem in Verbindung mit einem analytischen Gleichgewicht, zum Vergleich mit dem fuer INIM erforderlichen Aufwand herangezogen.

4.4.1 Das Gleichungssystem

Die Ableitung des MHF - Gleichungssystems soll hier nur soweit skizziert werden, als dies fuer das Verstaendnis der Randbedingungen, der Erhaltungseigenschaften und einiger weiterer Besonderheiten notwendig ist. Eine genauere Abhandlung wird in den schon erwaehnten Arbeiten von Chodura und Schlueter gegeben.

Ausgangspunkt sind die dynamischen Gleichungen der idealen Magnetohydrodynamik:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho \underline{v}),$$

$$\rho \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \rho (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} = - \nabla p + \frac{1}{c} \underline{j} \times \underline{B},$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \nabla \cdot (p \underline{v}) - (\gamma - 1) p \nabla \cdot \underline{v},$$

$$\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} = \nabla \times (\underline{v} \times \underline{B}), \quad (4.4.1)$$

$$\underline{j} = \frac{c}{4\pi} \nabla \times \underline{B}, \quad \frac{dp}{p} = \gamma \frac{d\rho}{\rho}.$$

Es werden vorausgesetzt: Ideales Gas, isotroper Druck, isentrope Zustandsaenderungen, keine Waermeleitung oder Viskositaet, und unendliche elektrische Leitfaehigkeit.

Das Prinzip der MHF - Modelle liegt in einer geeigneten Aenderung der MHD - Gleichungen, so dass sich deren Loesungen asymptotisch stabilen Gleichgewichten naehnern. Dies kann durch die Ersetzung des Traegheitstermes in der Bewegungsgleichung in (4.4.1) durch ein "Reibungsglied" erfolgen:

$$\rho \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \rho (\underline{v} \nabla) \underline{v} \rightarrow \rho_0 \underline{v}. \quad (4.4.2)$$

Dabei soll ρ_0 positiv sein. Identifiziert man ρ_0 nicht mit der Dichte, so braucht die Kontinuitaetsgleichung nicht weiter benuetzt werden. Das verbleibende Gleichungssystem lautet dann:

$$\rho_0 \underline{v} = -\nabla p + \frac{1}{4\pi} (\nabla \times \underline{B}) \times \underline{B},$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla(p\underline{v}) - (\gamma-1) p \underline{v}. \quad (4.4.3)$$

$$\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} = \nabla \times (\underline{v} \times \underline{B}),$$

Dazu muss die Gleichung gelten:

$$\nabla \cdot \underline{B} = 0 \quad (4.4.4)$$

Das Plasma reicht bis zu einer materiellen Wand mit verschwindendem Widerstand. Die Randbedingungen fuer die Normalkomponenten von \underline{v} und \underline{B} lauten:

$$\underline{v} \cdot \underline{n} = 0, \quad \underline{B} \cdot \underline{n} = 0. \quad (4.4.5)$$

Es gibt fuer dieses System einen Energiesatz:

$$\int \rho_0 \underline{v}^2 dV = -\frac{d}{dt} \int \left\{ \frac{p}{\gamma-1} + \frac{B^2}{2} \right\} dV \quad (4.4.6)$$

Die Integrale umfassen das gesamte Volumen, dabei kann die potentielle Energie nur abnehmen.

Die in cgs - Einheiten formulierten Gleichungen werden nun fuer die numerischen Rechnungen durch die folgenden Zuordnungen normiert:

$$\begin{aligned}
 t(\text{sec}) &\rightarrow 10^{-6} t, \\
 n(\text{cm}^{-3}) &\rightarrow 10^{16} n, \\
 \underline{B}(\text{Gau\ss}) &\rightarrow 456.7 \cdot A^{1/2} \underline{B}, \\
 kT(\text{erg}) &\rightarrow 1.66 \cdot 10^4 \cdot A \cdot p,
 \end{aligned}
 \tag{4.4.7}$$

Dabei bleibt als einziger numerischer Parameter die Groesse

$$\rho_o = 1.66 \cdot 10^{-2} \cdot A \cdot \frac{n_o}{\tau}$$

uebrig, die im weiteren gleich 1 gesetzt wird, da sie nur in die Normierung der (zeitaehnlichen) Variablen t eingeht. Das MIF - System lautet dann:

$$\begin{aligned}
 \underline{v} &= -\nabla p + (\nabla \times \underline{B}) \times \underline{B}, \\
 \frac{\partial p}{\partial t} &= -\nabla(p\underline{v}) - (\gamma-1)p\underline{\nabla v}, \\
 \frac{\partial \underline{B}}{\partial t} &= \nabla \times (\underline{v} \times \underline{B}) .
 \end{aligned}
 \tag{4.4.8}$$

4.4.2 Geometrie und Anfangsbedingungen

Die am haeufigsten verwendete Konfiguration zum magnetischen Einschluss von Plasmen ist ein Torus. Dem weiteren wird deshalb eine r - z Geometrie zu Grunde gelegt, die in Bild(4.10) skizziert ist. Der Querschnitt ist rechteckig, das Intervall im Bild definiert. Die Ortsschrittweiten sind $\Delta r = 2/(n_i - 2)$ und $\Delta z = 2\eta / (n_j - 1)$.

Der physikalische Rand liegt wieder zwischen den zwei jeweils aeussersten Gitterebenen. Durch Vorgabe eines grossen Wertes von R^o also einem hohen Aspektverhaeltnis R^o/r^o , koennen die Toruseffekte unterdrueckt werden.

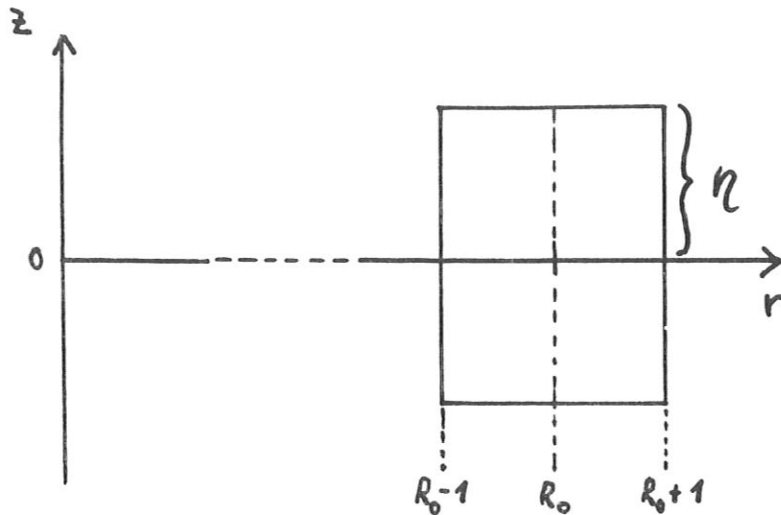


Bild (4.10) Koordinatensystem und Rechenintervall

Alle Ableitungen nach ϕ sollen verschwinden, die Anordnung ist rotationssymmetrisch. Die Komponenten von \underline{v} lauten dann:

$$v_r = -\frac{\partial p}{\partial r} + B_z \left(\frac{\partial B_r}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial r} \right) - B_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rB_\phi),$$

$$v_\phi = B_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rB_\phi) + B_z \frac{\partial B_\phi}{\partial z}, \quad (4.4.9)$$

$$v_z = -\frac{\partial p}{\partial z} - B_r \left(\frac{\partial B_r}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial r} \right) - B_\phi \frac{\partial B_\phi}{\partial z}.$$

Die Druckgleichung hat die Form:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rpv_r) - \frac{\partial}{\partial z} (pv_z) - (\gamma-1) p \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} rv_r + \frac{\partial}{\partial z} v_z \right). \quad (4.4.10)$$

Die Aufloesung der Feldgleichung nach den Komponenten ergibt die drei Gleichungen

$$\frac{\partial B_r}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} (v_z B_r - v_r B_z),$$

$$\frac{\partial B_\phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} (v_\phi B_z - v_z B_\phi) - \frac{\partial}{\partial r} (v_r B_\phi - v_\phi B_r), \quad (4.4.11)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (v_z B_r - v_r B_z).$$

Diese erfuellen exakt $\text{div } \underline{B} = 0$ - ist also $\text{div } \underline{B} = 0$ fuer $t = 0$, so bleibt dies wegen der Randbedingungen (4.4.5) auch fuer $t > 0$ erhalten. Diese Aussage gilt nur fuer die Differentialgleichungen, bei den numerischen Loesungen muss sie daher ueberprueft werden.

Der Aufbau der Gleichungen fuer B_r und B_z und die Divergenzfreiheit legen die Einfuehrung einer Flussfunktion Ψ nahe:

$$\Psi = v_z B_r - v_r B_z \quad (4.4.12)$$

Damit ist das System vollstaendig: Es besteht aus den vier Gleichungen (4.4.10), (4.4.11a-c) und den Randbedingungen (4.4.5). Die Gleichung fuer \underline{v} enthaelt keine Zeitableitungen. Wird sie in die vier zeitabhaengigen Gleichungen eingesetzt, ergibt sich das endgueltige System mit den vier abhaengigen Variablen

$$p, B_r, B_\phi, \text{ und } B_z.$$

Dieses hat die erwaehnten parabolischen Eigenschaften und ist der Ausgangspunkt fuer die Diskretisierung mit dem INIM-Verfahren.

Das Anfangsprofil soll die Bedingung (4.4.4) erfuellen und nicht zu trivialen Gleichgewichten (z.B. $p(r,z) = \text{const}$) fuehren. Fuer die Untersuchungen in dieser Arbeit wurde ein, auch von Chodura verwendetes, analytisches Gleichgewicht fuer ein gerades Plasma mit rechteckigem Querschnitt gewaehlt, das von Schneider et al. angegeben worden ist /33/.

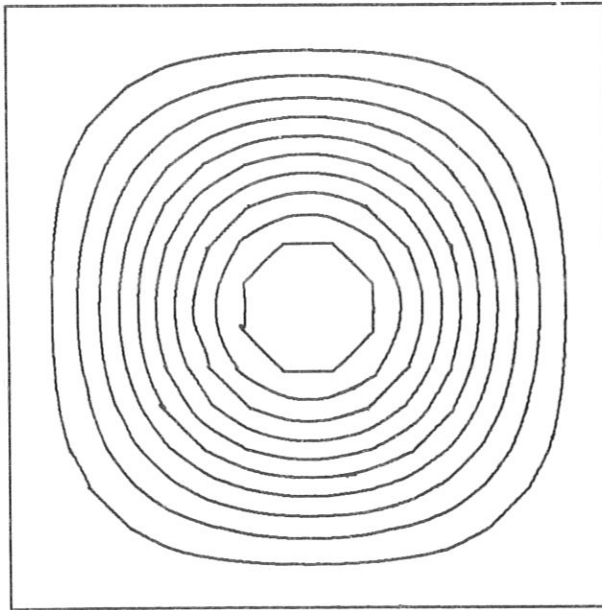
Die Gleichgewichtsverteilung wird durch eine Flussfunktion dargestellt und lautet mit $r' = r - R^0$ und $R^0 \gg 1$:

$$\begin{aligned} \Psi(r', z) &= \Psi_c \sin\left(\frac{\pi}{2} (r'-1)\right) \sin\left(\frac{\pi}{\eta} (z - \frac{\eta}{2})\right) \\ \Psi_c &= J_c / \left(\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{\eta}\right)^2 \right), \quad p(r', z) = \frac{1}{2} p_0 J_c \Psi^2(r', z) / \Psi_c, \quad (4.4.13) \\ B_r(r', z) &= -\frac{\partial}{\partial z} \Psi(r', z), \quad B_z(r', z) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \Psi(r', z)) \end{aligned}$$

Der Parameter p^0 in dem Ansatz fuer p ist im Gleichgewicht 1, kann aber veraendert werden, um eine Nicht-Gleichgewichtsverteilung zu erreichen.

Zusaetzlich kann eine Stoerung des Gleichgewichtes durch Ueberlagerung einer bestimmten Mode im Druckprofil erzeugt werden.

Bild (4.11) zeigt eine Hoehenlinien - Darstellung des durch die Gleichungen (4.4.13) gegebenen Druckprofils fuer einen quadratischen Querschnitt.



Bild(4.11) Isobaren der Anfangsbedingung
Nach dem Gleichgewicht (4.4.13)

5.4.3 Erzeugung der Koeffizienten

Bei der Aufstellung der Interpolationsansatze muss in r-z Geometrie beruecksichtigt werden, dass $r(i)$ nicht mehr gleich null ist, die Entwicklungen also $r-r(i)$ als Parameter haben. Bei Integrationen ist dies mit etwas hoeherem Aufwand verbunden. Wie sich zeigen wird, spielt dies jedoch bei den MHP - Gleichungen keine Rolle.

Die Anordnung der Variablen in $\underline{w}(j)$ ist:

$$\underline{w}(j) = (p(j,1), Br(j,1), \dots, B\phi(j,ni), Bz(j,ni))$$

Die Diskretisierung der Gleichungen (4.4.10) und (4.4.11a-c) koennte nun direkt mit dem INIM - Formalismus erfolgen.

Diesbezügliche Versuche ergaben aber die Schwierigkeit, dass dann die Gleichung $\text{div } \underline{B} = 0$ in diskretisierter Form nicht erfüllbar ist. Untersucht man dies näher, so findet sich die Ursache in Unstetigkeiten von Ψ und \underline{v} an den Eckpunkten nach der Integration.

Der Ausweg bietet sich durch die Definition von Ψ und \underline{v} an den Eckpunkten der Zellen an. Dort können beide Differentialausdrücke durch die Ansätze für p und \underline{B} eindeutig dargestellt werden. Diese Definitionen verdeutlicht Bild (4.12). Zur Approximation der Ψ und \underline{v} enthaltenden Differentialterme werden auch erste Ableitungen von Ψ und \underline{v} benötigt. Dazu werden Ψ und \underline{v} ebenfalls durch Bilinearansätze dargestellt, die durch die Ausdrücke an den Punkten I..IV bestimmt sind, im Gegensatz zu den üblichen, auch hier für \underline{B} und p verwendeten, die in den Quadranten definiert sind.

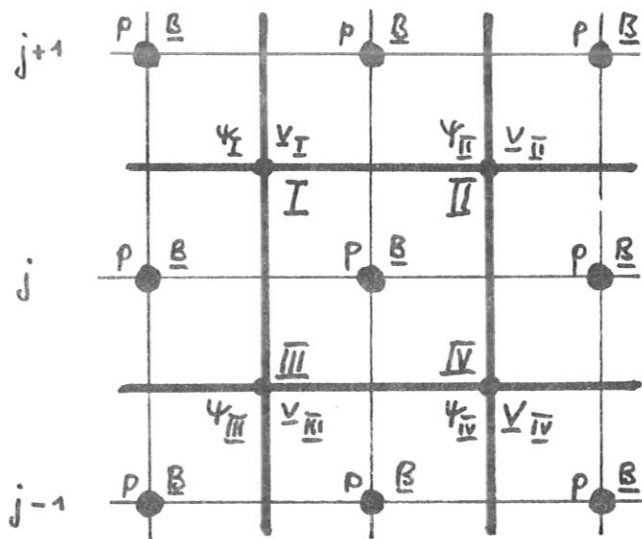


Bild (4.12) Definitionspunkte für Ψ und \underline{v}

Damit ist $\text{div } \underline{B} = 0$ an den Punkten I...IV auch in der diskretisierten Form exakt erfüllt.

Im Programmgenerator können also die Ortsoperatoren direkt durch Ψ , \underline{B} , und \underline{v} ausgedrückt werden. Dabei ergeben sich noch zusätzliche Möglichkeiten zur Umspeicherung und damit zur Reduzierung des Rechenaufwands. In jeder Zelle müssen nur Ψ und die erforderlichen Produkte von \underline{B} und \underline{v} am Punkt II berechnet werden. Die Gleichung für B_r wird beispielsweise durch

$$\frac{\partial}{\partial t} B_r \approx -\frac{1}{\Delta z} \left\{ \frac{1}{2} (\psi_I + \psi_{II}) - \frac{1}{2} (\psi_{III} + \psi_{IV}) \right\}. \quad (4.4.14)$$

approximiert, die Darstellung der anderen Gleichungen erfolgt analog dazu.

Die so entstandenen Ausdrücke enthalten noch nichtlineare Terme zweiter und dritter Ordnung. In diesem Fall sind fast alle möglichen Kombinationen vorhanden, z.B.:

$$p \cdot Br, Br \cdot Bz^2, p \cdot Br \cdot Bz, \dots$$

Die Linearisierung erfolgt nach der Vorschrift (3.3.3) mit θ als freien Parameter. Für die Erzeugung der Koeffizienten aus den Gleichungen für Br und Bz ist nur ein Lauf zur Berechnung von Ψ II notwendig, bedingt durch die Umspeicherung und die Ableitung aus der Flussfunktion. Dazu werden auf der IBM 360/91 600 KB Speicherplatz und 10-12 Minuten Rechenzeit benötigt. Die Gleichung für p erfordert zwei Läufe, die für B_ϕ einen, jeweils mit etwa 15 Minuten Rechenzeit.

Die Randbedingungen (4.4.5) werden unter Berücksichtigung der globalen Flussverhaltung (kein materieller oder magnetischer Fluss durch die Wände) wie folgt diskretisiert, beispielsweise bei $r = R^0 - 1$:

$$B_r(j,1) + B_r(j,2) = 0, B_\phi(j,1) = B_\phi(j,2), B_z(j,1) = B_z(j,2), \quad (4.4.15)$$

$$p(j,1) = p(j,2).$$

4.4.4 Numerische Ergebnisse

Zur näherungsweise Berechnung ebener Anordnungen wird R^0 gross gewählt ($R^0 = 10^{20}$). Zusätzlich wird B_ϕ gleich null gesetzt, das entspricht einem reinen z - Pinch. Die Gleichung für B_ϕ wird aber mitgelöst, so dass die Angaben über Rechenzeit und Aufwand für das volle System gelten.

Die Berechnung des jeweils neuen Zeitschritts erfolgt nach denselben Kriterien wie bei der Hydrodynamik, solange merkliche Änderungen der Variablen während eines Zeitschritts stattfinden. Die Parameter Δ_0 (1-4) werden zwischen 0.1 und 10 Prozent variiert. In der Nähe eines stationären Zustandes würde das so bestimmte Δt beliebig gross werden. Deshalb wird eine Schranke vorgegeben, die den maximalen Zeitschritt auf ein Vielfaches der expliziten Stabilitätsbedingung (2.2.6) beschränkt. Der Diffusionskoeffizient wird dazu für das nichtlineare MHP - System durch

$$\kappa = \max_{i,j} \left(p + \frac{B^2}{2} \right) \quad (4.4.16)$$

ersetzt. Die Abhängigkeit der Lösungen von den Maximalwerten für Δt wird im Abschnitt (4.4.4b) behandelt.

Der Energiesatz (4.4.6) wird in zwei Teile aufgespalten, die gesondert berechnet werden. Das Integral ueber \underline{v}^2 wird wie folgt bestimmt: Die Komponenten von \underline{v} werden an den Punkten I...IV dargestellt. Da die Zeitableitung vor dem Integral ueber die potentielle Energie um $t+\Delta t/2$ zentriert ist, werden in den Ansaetzen fuer \underline{v} die Werte von p, B_r, B und B_z zu dieser Zeit bestimmt:

$$\tilde{p} = \frac{1}{2}(\hat{p} + p), \quad \tilde{B}_r = \frac{1}{2}(\hat{B}_r + B_r), \dots$$

Da die Berechnung der Integrale erst nach Abschluss eines Zeitschrittes erfolgt, sind alle Variablen an beiden Zeitniveaus bekannt, die diskretisierte Form lautet dann

$$\int \underline{v}^2 dV \approx 2\pi \Delta r \Delta z \sum_{k=1/2}^{n_i-1/2} \sum_{l=1/2}^{n_j-1/2} \underline{v}^2(k,l) \cdot r_k \quad (4.4.17)$$

Das Integral ueber die potentielle Energie laesst sich ebenfalls fuer jedes Zeitniveau ausfuehren, die Zeitableitung erfolgt durch Differenzenbildung.

$$d(W_{\text{pot}})/dt = \frac{d}{dt} \int \left\{ \frac{p}{\gamma-1} + \frac{B^2}{2} \right\} dV. \quad (4.4.18)$$

Die nach (4.4.17/18) berechneten Werte sollten wegen (4.4.6) betragsmaessig gleich sein.

Zum Vergleich mit den Ergebnissen von Chodura und Schlueter werden die beiden Teilintegrale auf das Quadrat des Anfangswertes der potentiellen Energie normiert:

$$\langle v^2 \rangle = \int \underline{v}^2 dV / W^2; \quad \langle \dot{W} \rangle = (d(W_{\text{pot}})/dt) / W^2. \quad W^2 = W_{\text{pot}}^2(0) \quad (4.4.19)$$

Die Gesamtenergie muss wegen der Anfangs- und Randbedingungen erhalten bleiben. Zur Kontrolle wird deshalb waehrend der gesamten Rechnung das Integral

$$E(t) = \int_0^t \int \underline{v}^2 dV dt + W(t) \quad (4.4.20)$$

analog zu (4.4.17/18) und daraus der Fehler Δ_E berechnet:

$$E(t) \approx \sum_{m=1}^M \{ \Delta t_m \cdot \int \underline{v}_m^2 dV \} + W_{\text{pot}}(t_M), \quad (4.4.21)$$

$$\Delta E = 1 - \frac{E(t)}{E(0)}.$$

$\text{Div } \underline{B} = 0$ ist an den Definitionspunkten von Ψ und \underline{v} auch in Differenzendarstellung exakt erfuehlt. Zusaetzlich kann diese Gleichung ueber eine Gitterzelle mit den INIM - Vorschriften integriert werden. Diese beiden Werte werden jeweils zur neuen Zeit ermittelt. Damit laesst sich auch die globale Flusserhaltung ueberpruefen. Dies erfolgt durch Aufsummierung aller lokalen Werte.

Die Anfangswerte fuer p und \underline{B} werden aus dem analytischen Gleichgewicht (4.4.13) $i=2, n_i-1$ und $j=2, n_j-1$ berechnet, die Randwerte entsprechend der Randbedingungen (4.4.15).

Das Gleichgewicht (4.4.13) liefert $p=\text{const}$ auf dem Rand. Die eben beschriebene Spiegelung der Werte ueber den Rand erzeugt aber eine davon leicht abweichende Verteilung. Es ist also zu erwarten, dass die numerische Loesung, ausgehend von dieser Anfangsbedingung, sich noch dem Gitter anpassen wird.

Da die MHF - Gleichungen den Weg zu einem stationaeren Zustand beschreiben, koennen die zeitlichen Aenderungen sehr klein werden. Deshalb werden alle Rechnungen in doppelter Genauigkeit ausgefuehrt. Das sind 16 Stellen auf der IBM 360/91. Der Zusammenhang zwischen $\Delta t, \epsilon$ und der Besetzung der Rekursionsmatrizen wurde bei dem System der Hydrodynamik untersucht. Hier wird $\epsilon \leq 10^{-16}$ gesetzt. Zusammen mit der geringen Zahl von Gitterpunkten werden die Matrizen im allgemeinen voll besetzt sein.

- a) Vergleich mit dem analytischen Gleichgewicht,
Einfluss von Θ in der Naehة des Gleichgewichts

Die Stabilitaetsgrenze fuer Δt , liefert nach (4.4.16) und (2.2.6) einen Wert von 0.3. Um einen genauen Anfangswert fuer die Energien zu bekommen, wird ein kompletter Schritt mit $\Delta t=10^{-2}$ ausgefuehrt. Danach stellt sich Δt nach der Vorschrift (4.3.13) selbst ein, bis der vorgegebene maximale Wert $\Delta t(\text{max})$ erreicht ist. Von da an wird Δt bis zum Ende der Rechnung konstant gehalten.

Die zeitliche Entwicklung der beiden Energie - Kontrollwerte waehrend der ersten 10 Schritte zeigt Bild (4.13). Die Werte fuer $\Delta_0(1-4)$ waren 10^{-2} , $\Delta t(\text{max})$ war 10^6 . Der Zeitniveauparameter Θ betraegt $1/2$. Es sind aufgetragen $\log(|\langle \dot{W} \rangle|)$ und $\log\langle v^2 \rangle$.

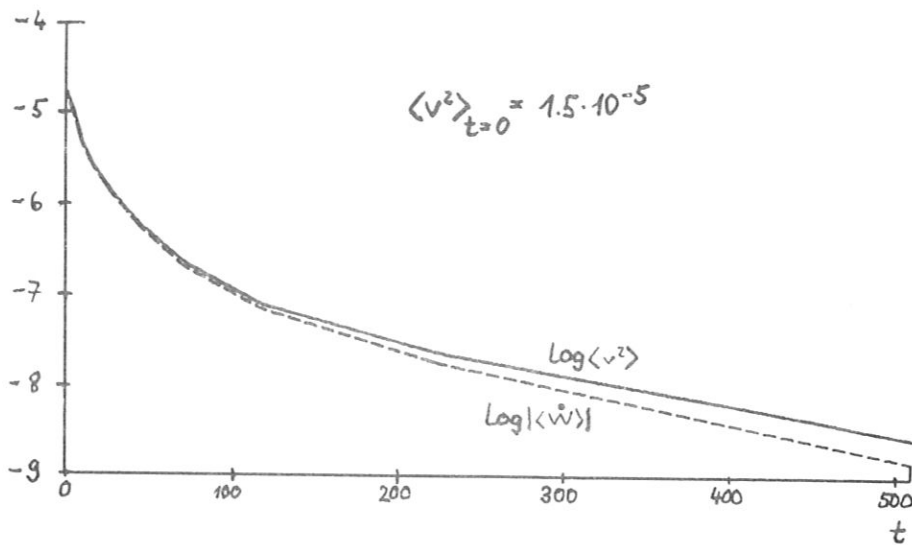


Bild (4.13) Entwicklung von $\langle v^2 \rangle$ und $|\langle \dot{w} \rangle|$

Der Zeitschritt waechst dabei von $\Delta t = 4.2$ in 9 Schritten auf den maximalen Wert $\Delta t = 280$.

Wie erwartet stellt sich auf dem Rand ein konstanter Druck ein. Die wesentlichen Aenderungen gehen deshalb in der Nachbarschaft des Randes und auf ihm vor sich. Das Maximum von p aendert sich um weniger als 10^{-4} gegenueber der Anfangsverteilung.

Die Ueberpruefung von $\text{div } \underline{B} = 0$ nach den oben skizzierten Methoden ergibt an den Definitionspunkten von \underline{y} nach neun Zeitschritten lokale Fehler $< 10^{-12}$, die Integralform liefert Werte $\leq 10^{-4}$. Die totale Flusserhaltung ist besser als 10^{-12} bzw. $5 \cdot 10^{-12}$.

Die Rechnung beginnt mit einem $\langle v^2 \rangle = 1.5 \cdot 10^{-5}$. Der Wert von $|\langle \dot{w} \rangle|$ stimmt damit nach dem Schritt mit $\Delta t = 10^{-2}$ bis auf 7 Stellen ueberein. Waehrend der naechsten Zeitschritte ($t \leq 100$), bleibt die Abweichung kleiner als 10 Prozent. Wird $\langle v^2 \rangle$ kleiner als 10^{-7} , werden die Abweichungen groesser. Die Kontrolle der Gesamtenergieerhaltung zeigt bei $t = 500$ einen Fehler $\Delta_E = 1.7 \cdot 10^{-6}$.

Veraendert man die Zeitschrittparameter $\Delta_0(1-4)$, so zeigt sich die erwartete quadratische Abhaengigkeit der Fehler von Δt , da $\theta = 1/2$ gesetzt worden war. In Tabelle (4.2) sind jeweils der Wert von $\Delta_0(1-4)$, der Fehler Δ_E bei $t \approx 500$ und die Zahl der Zeitschritte angegeben.

$\Delta_o(1-4)$	ΔE	M
0.001	$2 \cdot 10^{-8}$	>40
0.0033	$3.2 \cdot 10^{-7}$	24
0.01	$1.7 \cdot 10^{-6}$	12
0.033	$4 \cdot 10^{-5}$	5

Tabelle (4.2)

Die Fortsetzung der Rechnung ueber einige Zeitschritte mit $\Delta t(\max)$ sollte nun in die Naehelike eines stationaeren Zustandes fuehren, insbesondere sollten $\langle v^2 \rangle$ und $\langle \dot{W} \rangle$ exponentiell abklingen und einen, im wesentlichen durch die Rechengenauigkeit bedingten, kleinen Wert erreichen. Tatsaechlich nehmen sie nur sehr langsam, unter staendiger Zunahme des Fehlers ΔE ab.

Zur Untersuchung dieses Effektes wurden die beiden Bestandteile von $\langle \dot{W} \rangle$ getrennt berechnet. Das zeitliche Verhalten dieser beiden Groessen zeigt eine Stoerung im Takt der Zeitschritte, die wie ein numerischer "Energieaustausch" zwischen Plasma und Magnetfeld wirkt. Die Amplitude der Druckaenderung liegt bei $10^{-7} \dots 10^{-5}$ des Druckmaximums, bei kaum merklicher Daempfung ueber einige Zeitschritte.

Auf eine Anregung von A. Schlueter wurde der Zentrierungsparameter θ statt $1/2$ gleich 1 gesetzt [34]. Die Wirkung von θ auf den Diskretisierungsfehler und die Fortpflanzung numerischer Stoerungen wurde in Kapitel 2 angesprochen, dabei geht mit $\theta=1$ die zweite Ordnung des Crank - Nicholson Verfahrens verloren, dafuer verbessert sich die Daempfung numerischer Schwingungen bei grossen Δt .

Eine entsprechende exakte Aussage fuer die hier betrachteten nichtlinearen und verkoppelten Gleichungen zu machen ist nicht moeglich. Durch gezielte Veraenderung der Parameter $\Delta_o(1-4)$, Δt und θ koennen aber einige qualitative Eigenschaften festgestellt werden. Daraus ergibt sich eine Regel fuer die Wahl von θ .

Als Mass fuer den Diskretisierungsfehler bei dem MHF - Modell wurde in Tabelle (4.2) ΔE verwendet, das die fuer $\theta=1/2$ erwartete quadratische Abhaengigkeit zeigte. Vergleichsrechnungen mit $\theta=1$ ergaben eine lineare Abhaengigkeit von $\Delta_o(1-4)$. Wegen der verschiedenen Fehlerfunktionen, die aber beide mit Δt gegen null gehen, muss es einen Wert fuer Δt geben, ab dem der Fehler mit $\theta=1/2$ groesser wird, als der mit $\theta=1$.

Ausgehend von einem Zwischenstadium der zeitlichen Entwicklung - $\langle v^2 \rangle$ betraegt noch etwa $10^{-6} \dots 10^{-5}$ - wurden mit festem Δt jeweils zehn Zeitschritte gerechnet. Vergleichbare Werte fuer Δ_E ergaben sich fuer $\Delta t \approx 100$.

Dabei wurden gleichzeitig die Fortpflanzung numerischer Stoerungen kontrolliert. Mit $\Theta = 1$ wurde keinerlei Schwingung festgestellt, obwohl Δt von 1 bis 10^6 variiert wurde.

Dagegen waren mit $\Theta = 1/2$ schon ab $\Delta t = 10$ die erwaehnten Schwingungen zu erkennen, die allerdings selbst mit $\Delta t = 100$ noch innerhalb weniger Zeitschritten auf $1/e$ der Anfangsamplitude abnahmen. Die Abfallrate ist dabei natuerlich von den Anfangsbedingungen abhaengig, genauso wie die Amplitude der Stoerung nach dem ersten Zeitschritt. Eine Erhoehung von Δt ueber 2..500 ergab unter diesen Bedingungen eine maximale Amplitude, die bis $\Delta t = 10^6$ fast konstant blieb. Die Daempfung war dabei nur noch minimal.

Diese Ergebnisse weisen auf einen optimalen Umschaltunkt von $\Theta = 1/2$ auf $\Theta = 1$ von $\Delta t = 50 \dots 500 * \Delta t_N$ hin. Die Rechnung aus Bild (4.13) wurde deshalb mit dieser Regel wiederholt. Nach der Umschaltung auf $\Theta = 1$ sinken die beiden Integralwerte in 3 Zeitschritten bis auf 10^{-15} ab. Die Amplitude der Aenderungen im Druckprofil waehrend eines Zeitschrittes faellt bis auf 10^{-13} .

In den folgenden Zeitschritten mit $\Delta t(\max) = 10^6$ aendert sich nur noch $\langle v^2 \rangle$ bis auf 10^{-21} . In die Berechnung von $\langle \dot{w} \rangle$ geht direkt die Genauigkeit der Rechenanlage ein, da p und B nur mit endlicher Stellenzahl berechnet werden koennen. Da $\langle v^2 \rangle$ immer aus den gemittelten Werten von zwei Zeitniveaus bestimmt wird, wird der Einfluss der Rundungsfehler abgeschwaecht. Die probeweise Berechnung von $\langle v^2 \rangle$ mit den Werten eines Zeitniveaus bestaetigte dies.

b) Einfluss von $\Delta t(\max)$ auf die Stabilitaet

Der Wert fuer $\Delta t(\max)$, der bisher benutzt wurde, war ohne weitere Begrueendung auf 10^6 festgesetzt worden. Nun wird untersucht, welche Werte fuer Δt in der Praxis moeglich sind. Dazu wird jeweils die Bild (4.13) zu Grunde liegende Rechnung mit verschiedenen Werten von $\Delta t(\max)$ fortgesetzt. Zur Kontrolle dienen das erreichbare Minimum in $\langle v^2 \rangle$ und die Zunahme des Fehlers Δ_E nach 10 Schritten mit $\Delta t(\max)$.

Die Tabelle (4.3) gibt einen Ueberblick ueber die Ergebnisse mit Werten von $\Delta t(\max)$ im Bereich von 10^4 bis 10^{11} .

$\Delta t(\max)$	$\langle v \rangle_{\min}^2$	ΔE_{10}
10^5	$1.3 \cdot 10^{-22}$	10^{-9}
10^6	$2.9 \cdot 10^{-21}$	10^{-8}
10^7	$3.5 \cdot 10^{-19}$	10^{-7}
10^8	$5.9 \cdot 10^{-18}$	10^{-6}
10^9	$2.9 \cdot 10^{-17}$	10^{-4}
10^{10}	"	$(>10^{-2})$
10^{11}	"	$(>10^{-1})$

Tabelle (4.3)

Die zeitliche Entwicklung fuer $\Delta t(\max) = 10^5$ und 10^9 zeigt Bild (4.14).

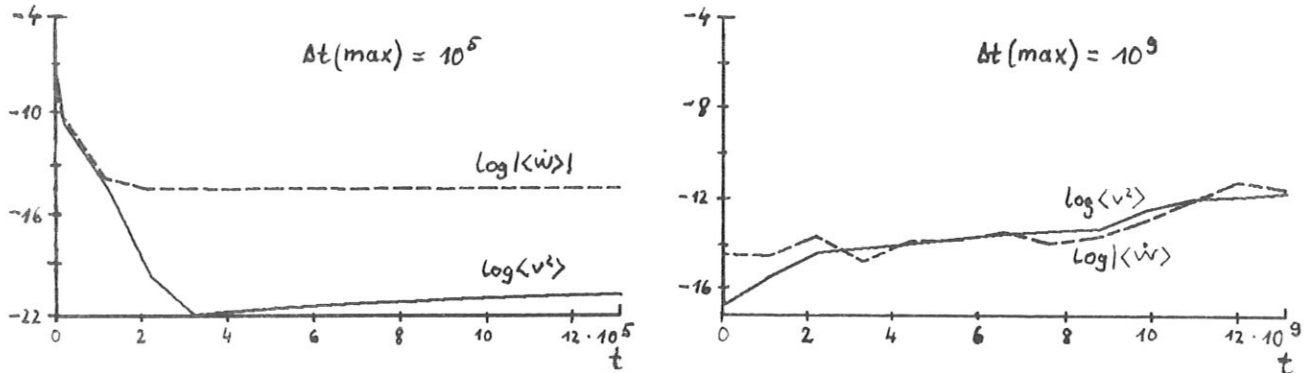


Bild (4.14) zeitliche Entwicklung von $\langle v^2 \rangle$ und $|w|$ fuer $\Delta t(\max) = 10^5$ und 10^9

Die absolute Stabilitaetsgrenze liegt also bei 10^9 , darueber wird die Loesung nach ein bis zwei Zeitschritten voellig instabil. Dies wird durch das Loesungsverfahren verursacht, bei dem die Diagonaldominanz der zu invertierenden Matrizen Voraussetzung war. Die praktisch verwertbare Grenze duerfte deshalb bei $\Delta t(\max) = 10^6 \dots 10^8$ liegen.

c) Ergebnisse mit anderen Anfangsbedingungen

Die Ergebnisse in a) und b) lieferten Aussagen ueber das Verhalten der numerischen Loesung in der Naehة eines analytischen Gleichgewichtes. Eine Anfangsbedingung, die nicht einem analytischen Gleichgewicht entspricht, erhaelt man auf einfache Weise durch Veraenderung des Druckprofils mit einem konstanten Faktor. Dabei bleibt natuerlich $\text{div } \underline{B} = 0$ fuer $t = 0$.

Das Bild (4.15) zeigt die zeitliche Entwicklung waehrend der ersten 18 Zeitschritte fuer eine Druckaenderung um den Faktor 1.33.

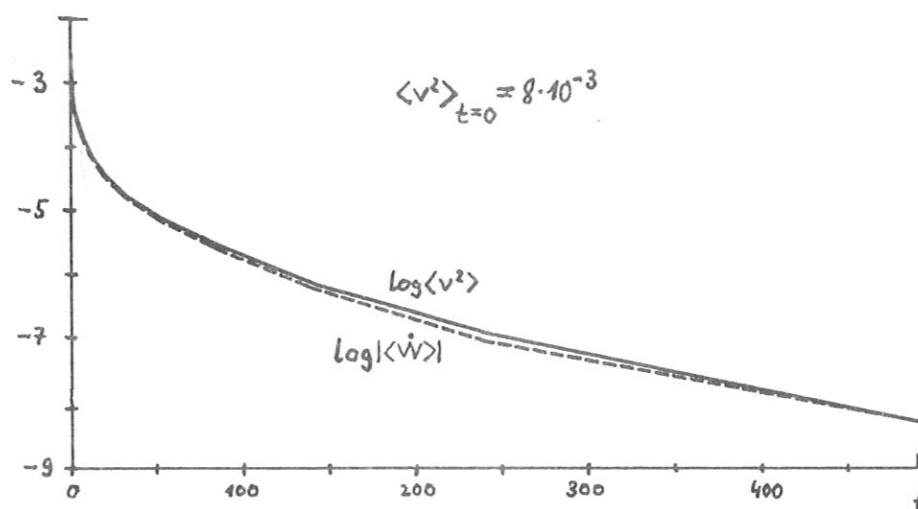
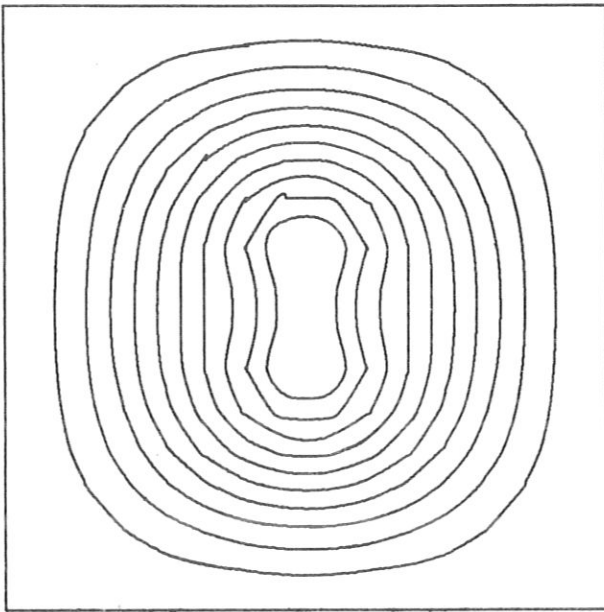
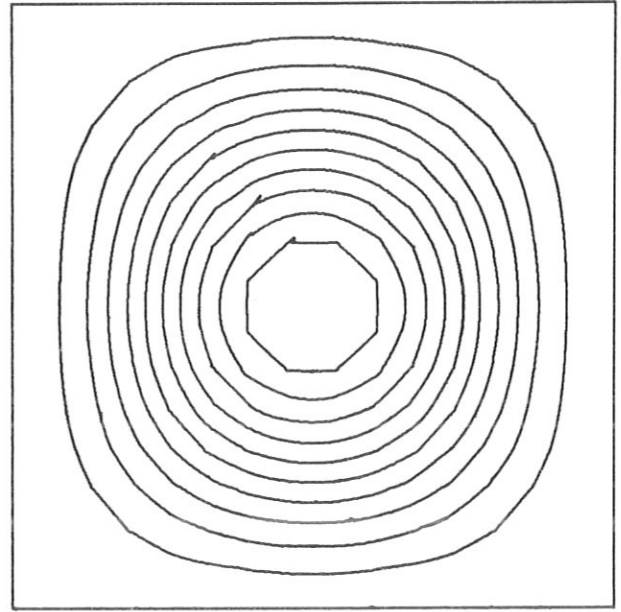


Bild (5.15) Entwicklung von $\langle v^2 \rangle$ und $|\langle \dot{v} \rangle|$ nach einer Stoerung des Gleichgewichtes

Die Parameter $\Delta(1-4)$ waren 0.033, die Umschaltung auf $\Theta = 1$ erfolgte fuer alle $\Delta t \geq 100$. Der maximale Fehler Δ_E liegt bei 10^{-5} , in Uebereinstimmung mit den Werten aus Tabelle (4.2). Die weitere Entwicklung dieser Rechnung gleicht der in Abschnitt a) und b), das Abklingen von $\langle v^2 \rangle$ und $\langle \dot{v} \rangle$ geht in der selben Weise vor sich.

Die zweite Stoerung erfolgte durch Ueberlagerung einer $m=2$ Mode auf das analytische Druckprofil (5.4.13). Die maximale Aenderung betrug 15 Prozent, ein Hoehenlinienbild des gestoerten Druckprofils zeigt Bild (4.16a).

a) $t=0$,

b) nach 17 Zeitschritten

Bild (4.16) Isobarenbilder des Druckprofils

Das Bild (4.16b) zeigt das Druckprofil nach 17 Zeitschritten, wobei alle Parameter der vorhergegangenen Rechnung beibehalten wurden. Die auftretenden Fehler in den Energiekontrollwerten sind von der selben Groessenordnung wie die zuvor angegebenen und werden deshalb nicht gesondert aufgefuehrt.

d) Rechenaufwand, Vergleich mit expliziten Verfahren

Es ergaben sich bei den MHF - Rechnungen wegen der hier benötigten hohen Genauigkeit einige Änderungen bezüglich Rechenzeiten und Speicherplatzbedarf im Vergleich zu den ersten beiden Anwendungen.

Die mögliche Reduzierung des Speicherplatzes für die Rekursionsmatrizen durch die Beschränkung der Bandbreiten spielt nur während der stark zeitabhängigen Phasen eine Rolle. Sobald Δt etwa zehnmal grösser als der im expliziten Fall zulaessige Wert wird, sind alle Matrizen voll besetzt. Dies wird durch die Wahl von $\epsilon < 10^{-16}$, und das nur 18×18 Gitterpunkte umfassende Netz noch verstärkt. Die Matrizen müssen also mit dem maximalen Wert aus der Tabelle (4.1) dimensioniert werden. Dies ergibt in Verbindung mit der doppelten Genauigkeit einen Speicherplatz von ca. 250 KB für die im Kernspeicher stehenden Matrizen. Dazu kommen etwa 800 KB externer Speicherplatz für die Rekursionsmatrizen.

Die hohe Verkopplung und Nichtlinearität der MHF - Gleichungen führt zu entsprechend umfangreichen Ausdrücken für die Koeffizienten $c(i, j, k)$. Die für das vollständige System durch den Programmgenerator erzeugten FORTRAN - Anweisungen benötigen etwa 60 KB.

Zusammen mit dem fast unveränderten Rahmenprogramm sind insgesamt 400 KB Zentralspeicher ausreichend.

Die Rechenzeit pro Zeitschritt beträgt zwischen 5 und 6 Sekunden auf der IBM 360/91, davon entfällt eine Sekunde auf die Berechnung der Koeffizienten. Das eingangs erwähnte explizite 3-D Verfahren benötigt etwa 0.5 Sekunden je Zeitschritt für ein Gitter mit $18 \times 18 \times 7$ Punkten /35/. Eine grobe Abschätzung der Rechenzeit für ein 2-D Modell ergibt dann eine 50...100- fache Rechenzeit je Zeitschritt für die INIM - Lösung. Berücksichtigt man eine bis zu 100- fache Beschleunigung des expliziten Verfahrens in der Nähe des stationären Endzustandes, wird die Lösung mit dem INIM - Verfahren für die behandelten 2-D Probleme mit Zeitschritten $\Delta t \geq 10^3$ schneller.

5. DISKUSSION DER ERGEBNISSE, ERWEITERUNGEN

Die mit dem INIM - Verfahren erzielten Ergebnisse sollen abschliessend nochmals diskutiert werden. Die Forderungen, die in Kapitel 2 an ein implizites Verfahren zur numerischen Loesung zweidimensionaler Fluessigkeitsmodelle gestellt worden sind, lassen sich in drei Gruppen einteilen.

Ob die INIM - Vorschriften zur Konstruktion von impliziten Differenzgleichungen die verlangten Eigenschaften haben ist Gegenstand des ersten Abschnittes.

Danach wird das Verfahren zur Aufloesung der algebraischen Gleichungen besprochen. Dabei geht es besonders um die Frage des Rechenaufwandes, der die Einsatzmoeglichkeiten entscheidend mitbeeinflusst.

Die numerischen Ergebnisse werden im Abschnitt 5.3 zusammenfassend gewertet, dazu gehoeren Aussagen ueber Vor- und Nachteile gegenueber anderen Verfahren.

Abschliessend wird die Frage nach moeglichen Erweiterungen der INIM - Methode auf dreidimensionale Modelle diskutiert.

5.1 Die INIM - Diskretisierungsvorschriften

Die Bedingungen, die bei einer zeitabhaengigen nichtlinearen partiellen Differentialgleichung oder bei einem System von verkoppelten Gleichungen dieser Art fuer eine Anwendung der INIM - Methode erfuellt sein muessen, wurden in Kapitel 3 angegeben. Es waren parabolische, hyperbolische und gemischte Gleichungen zugelassen, die in euler'scher Darstellung bis zu zweite Ableitungen enthalten duerfen.

Die zweite Forderung betraf das Koordinatensystem, hier waren nur orthogonale Systeme betrachtet worden. Dadurch waren die einzelnen Schritte waehrend der Diskretisierung klarer und einfacher durchzufuehren. Alle Beispiele wurden in aequidistanten Gittern bezueglich der einzelnen Koordinaten behandelt, die Herleitung der Vorschriften erfolgte aber fuer den allgemeineren Fall eines nichtaequidistanten Gitters.

Die Konstruktion der Differenzgleichungen geht in drei Stufen vor sich. Die Differentialgleichungen werden analytisch soweit integriert, dass in den Integralgleichungen hoechstens erste Ableitungen verbleiben. Dies ist in allen Faellen moeglich, allerdings kann, wie bei den MHF - Gleichungen, die Integration entfallen, wenn durch die notwendige Erfuellung einer zusaetzlichen Differentialgleichung der erste Schritt der Differenzenbildung direkt vorgeschrieben ist.

Die (nichtlinearen) Differenzgleichungen, die maximal neun benachbarte Gitterpunkte umfassen, werden mit den angegebenen Interpolationsansätzen durch weitere Integration, bzw. direktes Einsetzen der Ansätze erzeugt. Diese, zumeist nichtlinearen, Gleichungen sind konsistent mit den Differentialgleichungen in einer bestimmten Ordnung in den Ortsschrittweiten. Für die Kontinuitätsgleichung aus Abschnitt 4.3 ergeben sich in einem äquidistanten Gitter durch die erwähnten Methoden Diskretisierungsfehler der Ordnung Δx^2 und Δy^2 . Nichtäquidistante Gitter führen zu Fehlern, die linear von der Differenz zwei aufeinander folgender Ortsschrittweiten abhängen.

Die Verwendung der allgemeinen Formalismen zur Integration und Annäherung der Differentialgleichungen mit den Bilinearansätzen ohne zusätzliche Massnahmen ist nur für Differentialterme möglich, in denen die abhängigen Variablen mit ganzzahligen Exponenten > 0 vorkommen. Negative oder nichtganzzahlige Exponenten müssen gesondert behandelt werden. Dies geschah bei der nichtlinearen Diffusionsgleichung in Kapitel 4 durch Abspaltung eines Wurzelterms, der dann explizit berücksichtigt wurde. Für Ausdrücke mit negativen Exponenten können ebenfalls Auswege gefunden werden, dabei kann die Linearisierung in der Zeit beibehalten werden.

Die Zentrierung in der Zeit erfolgte mit einer Vorschrift, die unter freier Wahl des Zentrierungsparameters θ gleichzeitig die Linearisierung enthielt. Ein $\theta = 1/2$ ergab bei den untersuchten Beispielen Diskretisierungsfehler der Ordnung Δt^2 . Dies wurde an der Kontinuitätsgleichung wie zuvor bei den Ortsschrittweiten mit Hilfe von REDUCE getestet. Die gleiche Abhängigkeit ergaben Parameterstudien an dem MHF - Modell. Auch für $\theta = 1$ stimmten die Ergebnisse qualitativ mit dem Verhalten bei linearen Diffusionsgleichungen überein.

Unter den zuvor genannten Voraussetzungen, die die Differentialgleichung betrafen, stellt die Verwendung des Programmgenerators eine ganz erhebliche Arbeitserleichterung beim Aufbau eines Programms dar. Abgesehen von der Formulierung der Integranden in der algebraischen Programmiersprache, und der Festsetzung einiger Parameter für die Zahl der Gleichungen, das Koordinatensystem, den Integraltyp und die Ausgabe, ist für die Erzeugung der Koeffizienten der Variablen zur neuen Zeit in der allgemeinen "Differenzgleichung" (3.3.4) kein manueller Eingriff notwendig. Die dadurch erzielte Beweglichkeit und Sicherheit in der Programmierung liegt auf der Hand.

Selbst, wenn nicht das volle Integrationsschema zur Anwendung kommen kann, genügen wenige Änderungen am Programmgenerator, um weiter damit arbeiten zu können. Besonders die Linearisierung und die Aufspaltung in Koeffizienten ist bei den impliziten Differenzgleichungen zeitraubend. Die Rechenzeit, die der Programmgenerator

dafuer benoetigt, steht in keinem Verhaeltnis zu dem Arbeitsaufwand bei manueller Umformung.

Damit bietet sich das INIM - Verfahren zur Diskretisierung in allen Faellen an, in denen eine der einfacheren Methoden, also explizite oder ADI - Verfahren versagen, aber auch wenn es wuensenswert ist, in einem bestimmten Fluessigkeitsmodell verschiedene Transportkoeffizienten auf ihre physikalische Wirkung zu untersuchen. Das INIM - Verfahren erlaubt dann die Erprobung solcher Zusatzterme mit geringstem Aufwand, da die Verschlusselung im Programmgenerator und die nachfolgende Ergaenzung der Koeffizienten durch die neu erzeugten Ausdruecke trivial und ohne besondere Kenntnis des restlichen Programms erfolgen kann.

5.2 Aufloesung des Gleichungssystems

Der Grund, warum in frueheren Arbeiten nicht die direkte Loesung eines impliziten Gleichungssystems ohne Iterationsverfahren versucht wurde, ist in dem zunaechst erschreckend hohen Rechenaufwand zu sehen. Die in Kapitel 3 erwaehten Zahlenbeispiele ergaben fuer ein System von vier gekoppelten Differentialgleichungen in einem 30×30 Gitter einen Speicherplatz fuer die Koeffizientenmatrix, der trotz Ausnutzung der Bandstruktur von C_i noch bei 3.2 Megabyte lag. Dazu kam die hohe Zahl an Rechenoperationen, die fuer die Aufloesung dieses Systems erforderlich war, obwohl dessen Besetzung auesserst duenn ist.

Mit den in dieser Arbeit vorgeschlagenen Rekursionsalgorithmen koennen diese beiden Nachteile einer impliziten Loesung weitgehend abgebaut werden, ohne von einer direkten Aufloesung des algebraischen Gleichungssystems abzugehen.

Die Verringerung des Speicherbedarfs ergab sich durch den Aufbau der Rekursionsen, bei denen die Zahl der gleichzeitig benoetigten Daten nur etwa $n_j/3$ des Wertes fuer C_i betraegt - dabei soll $n_j \geq n_i$, der Zahl der Gitterpunkte in der zweiten Ortskoordinate sein.

Die Einsparungen an der Rechenzeit werden durch die konsequente Beruecksichtigung der Bandform der Koeffizientenmatrizen moeglich. Die Matrixoperationen, wie Addition, Multiplikation oder die Dreieckszerlegung werden durch die, die Bandform beschreibende Indexgruppen so gesteuert, dass abgesehen bei zufaellig verschwindenden Elementen, nur das jeweilige Ueberlappungsgebiet verwendet wird.

Durch den Aufbau der Differenzengleichungen in der Form (3.3.4) konnte das Rahmenprogramm fuer die Rekursionsalgorithmen so allgemein gehalten werden, dass

lediglich 4 Parameter notwendig sind, um das Programm einem veraenderten Gitter, oder einer Vergrößerung der Zahl der Variablen anzupassen. Dies bewahrte sich bei allen drei Anwendungsbeispielen, fuer die nur eine Aenderung bei der Ein- und Ausgabe und den Speicheranforderungen, bzw. eine Umstellung auf doppelte Genauigkeit erforderlich war. Das eigentliche Programm, nach dem in Abschnitt 3.6 beschriebenen Flussdiagramm, blieb unveraendert.

Bei der Behandlung der stark zeitabhaengigen Probleme in Abschnitt 4.2 und 4.3 konnte der Rechenaufwand nochmals gesenkt werden. Die Bandbreiten der Rekursionsmatrizen wurden schon waehrend der Umkehrung des Gleichungssystems fuer G beschraenkt. Dazu wurde ein ϵ verwendet, das durch die Rechengenauigkeit bestimmt, aber auch frei gewaehlt werden konnte. Alle Elemente, die betragsmaessig kleiner als das mit ϵ multiplizierte Diagonalelement der betroffenen Spalte waren, wurden dann vernachlaessigt, und die Spalte an dieser Stelle abgeschlossen. Dadurch reduzierte sich bei der naechsten Matrizenoperation nochmals die Zahl der Multiplikationen und Additionen.

Diese Verkuerzung ist aber von der Hoehe der Diagonaldominanz und der Zahl der Gitterpunkte abhaengig. Beide werden vor allem von dem physikalischen Problem bestimmt. Eine Beschraenkung der Bandbreiten ist dann moeglich, wenn die zeitliche Entwicklung der Variablen durch endliche Signalgeschwindigkeiten bestimmt ist, wie etwa bei dem Gleichungssatz der Hydrodynamik, oder den, bei der nichtlinearen Diffusionsgleichung betrachteten, speziellen Anfangs- Randwertproblemen.

Eine Erhoehung von n_i , der Zahl der Gitterpunkte, die die Groesse der Matrizen bestimmt, fuehrte ab einem gewissen Wert nur noch zu einer linearen Erhoehung der Zahl der Matrixelemente in den G_i in die Koeffizientenmatrizen $C_1 - C_3$ geht n_i ohnehin nur linear ein.

Eine wesentliche Annahme, die bei der Aufstellung der Randbedingungen und besonders fuer die Rekursionalgorithmen von Bedeutung ist, war die ausschliessliche Betrachtung von rechteckigen Indexgittern. Diese waren ausreichend zur Demonstration des INIM - Verfahrens, sowohl fuer die Diskretisierung, als auch die Aufloesung der algebraischen Gleichungen.

Soll ein nicht rechteckiges Rechenintervall mit einem orthogonalen Gitter ueberzogen werden, so ist diese Annahme nicht mehr erfuehrt. Die Zahl der Gitterpunkte in der einen Richtung ist dann abhaengig von der zweiten Koordinate. Das hat zweierlei Auswirkungen. Zum einen kann zwischen drei aufeinander folgenden Zeilen nicht mehr direkt eine Differenzgleichung in Matrizenform aufgestellt werden, da die Dimension der einzelnen Matrizen zwangslaeufig nicht mehr uebereinstimmt. Dazu kommt die Darstellung von Randbedingungen, die nicht mehr wie in Abschnitt 3.4 erfolgen kann.

Durch Einfuehrung zusaetzlicher fiktiver Punkte ausserhalb des Rechenintervalls kann fuer jede Zeile die Dimension der kleineren der jeweils groessten angepasst werden. Die Koeffizienten fuer diese kuenstlichen Punkte koennen durch Spiegelung der echten Randbedingungen erzeugt werden. Dabei ist nur zu gewaehrleisten, dass die Diagonaldominanz von C_2 erhalten bleibt, die ja die Invertierbarkeit bedingt. Die Matrizenalgorithmen bleiben unveraendert, lediglich der Parameter n_i muss von Zeile zu Zeile angepasst werden. Das gilt auch fuer die Rekursion der Variablen, bei der die selben Randbedingungen beruecksichtigt werden muessen.

5.3 Numerische Ergebnisse

Die Auswahl von Testbeispielen sollte demonstrieren, dass das INIM - Verfahren fuer die wichtigsten Typen von Differentialgleichungen aus Fluessigkeitsmodellen anwendbar ist. Durch den impliziten Aufbau der Differenzgleichungen sollten die bekanntermassen guten Eigenschaften eindimensionaler impliziter Differenzen auf die zweidimensionalen Gleichungen uebertragen werden. Die Ergebnisse mit den drei Anwendungsbeispielen wurden in Kapitel 4 anderen Verfahren gegenuebergestellt, eine zusammenfassende Beurteilung soll nun erfolgen.

Allen Beispielen gemeinsam waren die Rekursionsalgorithmen zur Aufloesung. Dabei zeigte sich, dass die Umkehrung der Gleichungssysteme in allen Faellen ohne Pivotsuche, also Umordnung von Zeilen oder Spalten zur Verbesserung der Kondition der Matrizen moeglich war.

Die Genauigkeit der Loesung der Gleichungssysteme konnte auf indirektem Wege bestimmt werden. Dazu koennen etwa die in Erhaltungsform aufgebauten Differentialgleichungen, wie die Diffusionsgleichung (4.2.1) oder die Kontinuitaetsgleichung aus (4.3.3) herangezogen werden. In beiden Faellen werden die Erhaltungseigenschaften durch die Differenzgleichungen lokal, in Verbindung mit den speziellen Randbedingungen sogar fuer das gesamte Rechenintervall, exakt garantiert. Die Abweichung in den numerischen Ergebnissen ist dann ein Mass fuer die Genauigkeit der Aufloesung des linearen Gleichungssystems, vorausgesetzt die Berechnung der Koeffizienten erfolgt so, dass keine Ausloeschungen durch Differenzenbildung fast gleich grosser Zahlen auftritt. Dies kann aber durch geeignete Ordnungsvorschriften im Programmgenerator erreicht werden.

Die ersten zwei Beispiele wurden mit einfacher Genauigkeit auf der IBM 360/91 gerechnet, das entspricht einem Rundungsfehler von etwa 10^{-7} . Dieser Wert wurde zunaechst auch fuer den Abschneideparameter ϵ eingesetzt, dabei ergaben sich Fehler in den Erhaltungsgrößen zwischen

10^{-5} und 10^{-4} . Waehrend der Vielzahl der Operationen bei der Berechnung der Koeffizienten und der Invertierung der Matrizen gehen also nur maximal zwei bis drei wesentliche Stellen bezogen auf die Maschinengenauigkeit verloren.

Ein zweiter Beleg fuer die Zuverlaessigkeit des Rekursionsverfahrens folgt aus den Ergebnissen der MHF - Rechnungen. Die Differentialgleichungen, und damit auch die Differenzengleichungen fuehren in den betrachteten Faellen zu stationaeren Zustaenden und damit zu einem Verschwinden der Zeitableitungen. Durch Variation des maximalen Zeitschritts wurde gezeigt, dass die Invertierung fuer Werte von Δt , die um $10^6 \dots 10^9$ ueber dem expliziten Vergleichswert liegen, noch stabil bleibt. Die noch verbleibende Aenderung der einzelnen Variablen ist dabei fuer Δt zwischen 10^3 und 10^7 in der Groessenordnung 10^{-13} bis 10^{-10} , bezogen auf die doppelte Genauigkeit der IBM 360/91. Waehrend der zeitabhaengigen Phase solcher Rechnungen, also fuer $\Delta t = 10^1 \dots 10^4$ bleiben die Rundungsfehler ebenfalls auf zwei bis drei Stellen beschraenkt.

Die Analyse der Rechenzeiten, die mit dem INIM - Verfahren bei den verschiedenen Beispielen ermittelt wurden, ergab folgendes Bild. Den Hauptanteil an der Rechenzeit je Zeitschritt hatte die Durchfuehrung der Rekursionsalgorithmen. Er schwankte zwischen etwa 90 Prozent bei der Hydrodynamik und jeweils etwa 80 Prozent bei der Diffusionsgleichung und dem MHF - Modell. Dieser Sachverhalt muss bei der vergleichenden Beurteilung des Rechenaufwandes beruecksichtigt werden. Waehrend bei einem expliziten Verfahren, oder der iterativen Loesung impliziter Differenzengleichungen, der Umfang der Differenzengleichungen direkt in die Zahl der notwendigen Operationen eingeht, spielt er bei dem INIM - Verfahren nur eine dem genannten Prozentsatz entsprechende kleinere Rolle.

Die Programmierung der Matrizenroutinen in der Maschinensprache PL360 ergab eine Beschleunigung gegenueber FORTRAN - Versionen um das 3...4-fache. Dies war unabhaengig von dem Typ der Differentialgleichung, lediglich die Groesse der Matrizen, also n_i und n_w , hatten einen geringen Einfluss, der aber fuer $n_i > 20$ bei allen Beispielen verschwand.

Zusammenfassend liegen die Hauptvorteile des INIM - Verfahrens in seinen vielseitigen Anwendungsmoeglichkeiten. Es erlaubt die fast automatische Erzeugung von Differenzengleichungen ohne wie bei anderen Verfahren tiefergehende Kenntnisse von Differenzenverfahren vorauszusetzen. Da die Programmierung des Rahmenprogramms abgesehen von kleinen Aenderungen nur einmal zu erfolgen braucht, verringert sich der Gesamtaufwand nochmals. Damit ist auch fuer Gleichungen, die mit speziellen Verfahren im Einzelfall geringere Rechenzeiten erfordern wuerden, eine Arbeitserleichterung fuer den Numeriker gegeben.

5.4 Erweiterung auf 3-D - Modelle

Alle bisher beschriebenen Methoden und Ergebnisse sind ausschliesslich fuer zweidimensionale Modelle entwickelt und erprobt worden. Dabei waren besonders die vielseitige Anwendbarkeit des Programmgenerators, die effektive Aufloesung des Gleichungssystems, und die erzielten Ergebnisse vielversprechend. Deshalb liegt die Frage nach einer moeglichen Erweiterung auf dreidimensionale Modelle nahe.

Die Schwierigkeiten, die bei dem Uebergang von einer auf zwei Dimensionen bei der Konstruktion der Differenzgleichungen entstanden, treten nun erneut auf.

Das INIM - Verfahren laesst sich formal auf dreidimensionale Modelle erweitern. Die Interpolationsfunktionen werden statt wie bisher 4, nun 8 Koeffizienten haben und ebensoviele benachbarte Punkte miteinander verbinden. Obwohl dabei keine prinzipiellen Schwierigkeiten auftreten, von einer Erhoehung des Rechenaufwandes fuer die algebraischen Manipulationen im Programmgenerator, und einer nicht unwesentlichen Vergroesserung des erzeugten Programms abgesehen, zeigt sich aber bei der Untersuchung der Aufloesungsmoeglichkeiten fuer das lineare Gleichungssystem die praktische Grenze solcher Methoden sehr bald. Einige elementare Abschaetzungen werden in Abschnitt (5.4.2) durchgefuehrt.

Eine wesentlich rationellerer Weg wird dagegen im letzten Abschnitt angedeutet. Er besteht in der Uebertragung der Grundidee, die zu den "Fractional - Step" Methoden im Kapitel 2 gefuehrt hatte, auf ein 3 - Schritt 3-D Verfahren, unter der Umgehung der wichtigsten, frueher genannten Einschränkungen.

5.4.1 3-D Differenzgleichungen

Die Forderungen, die in Kapitel 3 an die Diskretisierung im Ort gestellt wurden, muessen auch hier entsprechend erweitert erfuehrt sein.

Die Eigenschaften der Differentialgleichungen sollten konsistent auf die Integralbeschreibung einer Gitterzelle uebertragen werden. Dazu durften 9 benachbarte Zellen miteinander verbunden werden, dann war die Beruecksichtigung von bis zu zweiten Ableitungen nach den beiden Ortskoordinaten moeglich. Es werden auch hier der Einfachheit halber orthogonale x-y-z Koordinaten angenommen. Dann erhaelt man Gleichungen, die $3 \cdot 3 \cdot 3 = 27$ benachbarte Knotenpunkte miteinander verknuepfen. Die Forderung nach Stetigkeit der Ansaetze und der damit angenaeherten Integranden fuehrte in zwei Dimensionen zur Einteilung in

vier Quadranten. Das bedeutet hier eine Einteilung in 8 Wuerfel, die zusammen das Volumen zwischen den 27 Knoten ausfuellen.

In jedem Wuerfel stellt man einen Ansatz auf, der an den Knoten die dort definierten Werte einnimmt und auf den Seitenflaechen der Wuerfel in die frueher benutzten Bilinearansaetze uebergeht.

$$w(x,y,z) = k^1xyz + k^2xy + k^3xz + k^4yz + k^5x + k^6y + k^7z + k^8. \quad (5.4.1)$$

Die Koeffizienten $k^1 \dots k^8$ sind durch die 8 Stuetzwerte eindeutig bestimmt, alle benoetigten Integranden also darstellbar und elementar integrierbar.

Die dabei entstandenen nichtlinearen Gleichungen koennen nach den bekannten Regeln linearisiert werden und liefern nach der Zusammenfassung aller acht Teilausdruecke die allgemeinen "Differenzgleichungen" fuer einen Elementarwuerfel:

$$\sum_{m=i-1}^{i+1} \sum_{n=j-1}^{j+1} \sum_{r=k-1}^{k+1} \sum_{l=1}^{nw} c(m,n,r,l) \hat{w}(m,n,r,l) + d(l) = 0 \quad (5.4.2)$$

Dabei sind i, j, k die Indizes in x, y, z Richtung, l zaehlt die nw Variablen des Systems. Zusammen mit geeignet diskretisierten Randbedingungen ist dadurch ein lineares Gleichungssystem gegeben, dessen Aufloesbarkeit im Folgenden untersucht werden soll.

5.4.2 Aufloesung des 3-D Gleichungssystems

Die Zahl der Gitterpunkte in den einzelnen Richtungen sei $n_i, n_j,$ und n_k , die Zahl der Gleichungen wieder nw . Das ergibt ein Gleichungssystem mit $N = (n_i * n_j * n_k * nw)$ Variablen.

Eine direkte Loesung ist nach dem frueher Gesagten und den einfachsten Abschaetzungen unvertretbar. Bei kleinen Werten fuer die vier Zahlen, insbesondere bei wenig Punkten in mindestens einer Dimension und nur ein bis zwei Gleichungen, koennte man, analog zu der Anordnung der Variablen in den Zeilenvektoren (3.5.4), noch die Werte in einer weiteren Dimension zusammenfassen. Das wuerde fuer jede Schicht in der dritten Richtung die Aufloesung eines Systems erfordern, das eine aehnliche Struktur wie (3.5.1) haette. Dabei ist nw durch $n_k * nw$ zu ersetzen.

Als Beispiel soll der Aufwand fuer die Loesung einer Gleichung in einem $20 \times 20 \times 16$ Gitter ($n_i=20$, $n_j=20$, $n_k=16$, $n_w=1$), unter der Voraussetzung vergleichbarer Verhaeltnisse, aus den Werten in Tabelle (5.1) abgeschaezt werden. Ein Zeitschritt in dem Fall eines 80×20 Gitters dauerte ca. 30 Sekunden. Dieser Wert galt fuer eine optimale Beschraenkung der Bandbreiten. In dem 3-D Gleichungssystem ist die minimale Bandbreite aber sicher wesentlich groesser, da etwa die Tridiagonalbloecke in den Koeffizientenmatrizen jetzt durch $n_j = 16$ bestimmt werden, und nicht wie bei der Hydrodynamik durch $n_w = 4$. Der tatsaechliche Rechenaufwand duerfte also mindestens viermal so gross sein.

Die Entscheidung, ob dieser hohe Aufwand gerechtfertigt ist, haengt unter anderem davon ab, ob andere Loesungsmethoden nicht zur Verfuegung stehen, oder ob, wie bei den zweidimensionalen Ergebnissen angesprochen, ein Vergleich mit einfacheren Methoden mit nicht genau bekannten Eigenschaften erfolgen soll.

Eine Ausweichmoeglichkeit bietet sich durch die Iterationsverfahren an. Dazu koennen ebenfalls die Differenzgleichungen in der Form (5.4.2) benuetzt werden, der Aufwand wird natuerlich geringer, wenn die noch nicht linearisierten Gleichungen zur Iteration verwendet werden.

Ein grundlegend anderes Vorgehen zur impliziten Loesung von 3-D Modellen wird im naechsten Abschnitt entworfen.

5.4.3 3-D Loesung durch 2-D "Splitting"

Ein Verfahren, das unter Verwendung der 2-D INIM Methoden die Loesung dreidimensionaler Modelle erlaubt, erhaelt man durch die folgenden Ueberlegungen.

Das Ziel ist, Systeme von Differentialgleichungen numerisch zu loesen, die parabolisch und/oder hyperbolisch sind. Wie schon bei den zweidimensionalen Verfahren liegen die Vorteile einer impliziten Loesung auch hier vor allem bei den Diffusionsgleichungen

Die Ableitungen werden deshalb an einer allgemeinen Diffusionsgleichung durchgefuehrt, die Beruecksichtigung hyperbolischer Terme ist evident. Systeme von Differentialgleichungen sind ebenfalls eingeschlossen.

Die hoechsten vorkommenden Ableitungen sind zweiter Ordnung, deshalb kann die allgemeine Gleichung (3.1.1) in maximal sechs Operatoren aufgespalten werden, die nur in den durch je zwei Koordinaten bestimmten Ebenen wirken.

$$L(w) = L_{xx} + L_{yy} + L_{zz} + L_{xy} + L_{xz} + L_{yz} \quad (5.4.3)$$

Man ueberzeugt sich leicht, dass dies die allgemeinste Form einer Differentialgleichung in orthogonalen Koordinaten und Euler'scher Darstellung ist. Die Teiloperatoren symbolisieren jeweils Differentialausdruecke, die alle Eigenschaften der in Kapitel 3 und 4 zugelassenen zweidimensionalen Ortsoperatoren haben koennen.

Mit Hilfe des INIM - Formalismus erzeugt man nun 3 "Differenzen - Operatoren", die so definiert sind:

$$\begin{aligned} L'_1 &= L'_{xy} + \frac{1}{2} (L'_{xx} + L'_{yy}), \\ L'_2 &= L'_{xz} + \frac{1}{2} (L'_{xx} + L'_{zz}), \\ L'_3 &= L'_{yz} + \frac{1}{2} (L'_{yy} + L'_{zz}) \end{aligned} \quad (5.4.4)$$

Hier wurden die xx , yy , und zz Terme zu halben Teilen je zwei der drei gemischten Operatoren zugeteilt. Eine andere Moeglichkeit ist:

$$\begin{aligned} L'_1 &= L'_{xy} + L'_{xx}, \\ L'_2 &= L'_{xz} + L'_{zz}, \\ L'_3 &= L'_{yz} + L'_{yy} \end{aligned} \quad (5.4.5)$$

Ein vollstaendiger Zeitschritt, der die physikalische Zeit von t auf $t+\Delta t$ erhoehrt, besteht dann aus den drei Schritten:

$$\begin{aligned} w^a &= w + \Delta t L'_1(w, w^a, \theta) \\ w^b &= w^a + \Delta t L'_2(w^a, w^b, \theta) \\ \hat{w} &= w^b + \Delta t L'_3(w^b, \hat{w}, \theta) \end{aligned} \quad (5.4.6)$$

Die Zahlen n_i, n_j , und n_k haben wieder die Bedeutung wie im vorausgegangenen Abschnitt.

Die Ergebnisse mit dem "Splitting" Verfahren in Kapitel 4 lieferten fuer die dort behandelte Diffusionsgleichung INIM - aequivalent gute Ergebnisse. Daher ist zu erwarten, dass auch das hier entworfene 3 - Schrittverfahren gleichwertige Resultate liefert. Der grosse Vorteil bestaende darin, dass keine Einschraenkungen bezueglich der vorkommenden Differentialterme gemacht werden muessen, und alle Teile des INIM - Verfahrens direkt uebernommen werden koennten. Dies gilt sowohl fuer den kompletten Programmgenerator, als auch fuer das Rahmenprogramm.

Der Rechenaufwand vergroessert sich nur bezueglich der

Rechenzeit, da der Speicherbedarf waehrend eines Unterschnittes gleich dem eines zweidimensionalen Modells ist. Natuerlich werden zusaetzliche Speicherplaetze fuer die Variablen benoetigt, nach den Erfahrungen in Kapitel 4 spielt dies jedoch im Verhaeltnis zu den Rekursionsmatrizen nur eine untergeordnete Rolle.

Der Rechenzeitbedarf fuer einen kompletten Zeitschritt ist gegeben durch:

$$f_3 = n_k * f(n_i, n_j) + n_j * f(n_i, n_k) + n_i * f(n_j, n_k). \quad (5.4.7)$$

Dabei ist $f(n, m)$ die Rechenzeit fuer eine 2-D Loesung mit $n = n_i$ und $m = n_j$. Die Werte fuer $f(n, m)$ lassen sich aus Tabelle (4.1) und den anderen Angaben ueber die Rechenzeiten abschaezen. Das System aus Abschnitt (5.4.2) wuerde demnach etwa 20 Sekunden pro Zeitschritt benoetigen. Ein 3-D MHF Modell mit $18*18*7$ Punkten duerfte mit 80 Sekunden je Zeitschritt realisierbar sein.

6. ZUSAMMENFASSUNG

Die Vorzuege impliziter Differenzengleichungen zur numerischen Loesung von Fluessigkeitsmodellen wurden bisher nur bei eindimensionalen Problemen voll ausgenutzt, fuer zwei- und dreidimensionale Modelle fehlten einheitliche Vorschriften zur Konstruktion und Aufloesung solcher Gleichungen.

Ausgehend von dem allgemeinen Fall eines Systems von nichtlinearen verkoppelten parabolischen und hyperbclischen Differentialgleichungen in Euler'scher Darstellung in einem orthogonalen zweidimensionalen Koordinatensystem wurden implizite Differenzenverfahren entwickelt, die fuer eine Vielzahl solcher Gleichungen die automatische Erzeugung von einheitlichen 9 - Punkt Differenzengleichungen erlauben.

Dies wurde durch Integration der Differentialgleichungen ueber das Volumen der Gitterzellen unter Verwendung von Bilinearansaetzen fuer die abhaengigen Variablen erreicht. Durch geeignete Zentrierung und Linearisierung in der Zeit wurden die nichtlinearen Differenzengleichungen in ein lineares Gleichungssystem fuer die unbekanntenen Werte der abhaengigen Variablen zur neuen Zeit umgewandelt.

Zur Aufloesung dieses Gleichungssystems wurde ein Rekursionsverfahren entworfen, das unter Optimierung des Rechenaufwandes weitgehend unabhaengig von Zahl und Typ der Differentialgleichungen anwendbar ist.

Beide Teile des INIM - Verfahrens (INtegral - IMplizit) wurden an einer nichtlinearen Diffusionsgleichung, den Gleichungen der Hydrodynamik fuer ein ideales Gas und einem System von vier nichtlinearen verkoppelten parabolischen Gleichungen erprobt. Die Ergebnisse wurden jeweils mit speziellen Verfahren fuer die einzelnen Probleme verglichen. Sie zeigen, dass das INIM - Verfahren fuer eine Vielzahl von zweidimensionalen Fluessigkeitsmodellen vorteilhaft eingesetzt werden kann.

Die Moeglichkeit zur Erweiterung auf dreidimensionale Probleme und der damit verbundene Rechenaufwand wurden untersucht, dabei wurde ein, direkt aus der INIM - Methode hergeleitetes, erweitertes "Splitting" - Verfahren vorgeschlagen.

7. LITERATURVERZEICHNIS

- /1/ A. Schlueter: "Dynamik des Plasmas", Z. f. Naturforschung 5 , 72 (1950).
- /2/ K. V. Roberts, D. E. Potter: "Magnetohydrodynamic Calculations", Methods in Computational Physics 9 , Academic Press, New York (1970) 340-417.
- /3/ J. Killeen: "Computer Models of Magnetically Confined Plasmas", Nuclear Fusion 165 (1976).
- /4/ R. D. Richtmyer, K. W. Morton: "Difference Methods for Initial-Value Problems", 2nd ed., New York: Interscience 1967.
- /5/ W. P. Crowley: "Numerical Methods in Fluid Dynamics", Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-512824 (1975).
- /6/ K. Hain, G. Hain, K. V. Roberts, S. J. Roberts, W. Koeppendoerfer: Z. f. Naturforsch 15a (12), 1039 (1960).
- /7/ D. Duechs: "Fluid Models for Tokamak Plasmas", Naval Research Laboratory Report 7340 (1972).
- /8/ F. Sardei, D. Duechs: "Evolution of the Densities of Several Impurity Species Simultaneously Present in Tokamak-like Plasmas", Proc. 6th Int. Conf. on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research, Berchtesgaden, 6-13 October 1976, paper B8-2.
- /9/ K. F. v. Finckenstein, D. Duechs: "Differenzenverfahren fuer Diffusionsgleichungen der Plasmaphysik", Lecture Notes in Mathematics 395 (1974) 3, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- /10/ E. Isaacson, H. B. Keller: "Analysis of Numerical Methods", Kap. 3.3, John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sidney (1966).
- /11/ D. Duechs: "Two-Dimensional Theta-Pinch Dynamics with Transverse Magnetic Fields", Phys. Fluids 11 , 2010 (1968).
- /12/ L. L. Lengyel: "A Two-Dimensional Lagrangean Code for Laser-Produced Plasma Applications. Pt.1 Crater Formation in Plane Targets", IPP Laborbericht IPP 4/135 (1975).
- /13/ J. U. Brackbill, W. E. Pracht: "An Implicit, Almost-Lagrangian Algorithm for Magnetohydrodynamics", J. Computational Phys. 13 , 455 (1973).

- /14/ D. Biskamp, H. Welter: "Numerical Studies of Resistive Instabilities", Proc. 2nd Europ. Conf. On Computational Phys. 27-30 April 1976, paper D2.
- /15/ J. Stoer, R. Bulirsch: "Einfuehrung in die Numerische Mathematik II", Kap. 8.5, Heidelberger Taschenbuecher, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (1973).
- /16/ D. Biskamp, H. Welter: Muendliche Mitteilung.
- /17/ D. W. Peaceman, H. H. Rachford Jr.: "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations", J. Soc. Ind. Appl. Math. 3, 28 (1955).
- /18/ I. R. Lindemuth: "The Alternating-Direction Implicit Numerical Solution of Time-Dependent, Two-Dimensional, Two-Fluid Magnetohydrodynamic Equations", Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-51103 (1971).
- /19/ Yanenko: "The Method of Fractional Steps", Springer Verlag Berlin Heidelberg New York (1971).
- /20/ D. E. Potter, G. H. Tuttle: "The Construction of Discrete Orthogonal Coordinates", J. Computational Phys. 13, 483 (1973).
- /21/ D. V. Anderson: "Axisymmetric Multifluid Simulation of High Beta Plasmas with Anisotropic Transport Using a Moving Flux Coordinate Grid", J. Computational Phys. 17, 246 (1975).
- /22/ G. Kuo-Petravic, M. Petravic, K. V. Roberts: "Data Organization for 3-Dimensional Calculations on the IBM 360/91 Using High-Speed Drum Transfers", Culham Laboratory Report CLM-R118 (1973).
- /23/ D. C. Barnes, J. U. Brackbill: "Three-Dimensional, Nonlinear Magnetohydrodynamic Computations of the Postimplosion Dynamics of the Los Alamos SCYLLAC Experiment", Proc. 2nd Europ. Conf on Computational Phys. 27-30 April 1976, paper D1.
- /24/ R. Chodura, A. Schlueter: "In Search of Stable 3 D MHD - Equilibria", *ibid.*, paper C2.
- /25/ D. Duechs, W. Schneider: "DEQTRAN - A Program Generator for the Solution of One-dimensional Systems of Partial Differential Equations", *ibid.*, paper E5.
- /26/ R. P. Tewarson: "Direct Triangular Decomposition", in "Sparse Matrices", Academic Press, New York London, (1973)

- /27/ A. C. Hearn: "REDUCE 2 User's Manual", University of Utah, Laboratory Report UCP-19 (Maerz 1973).
- /28/ U. Schwenn: "Waermeleitung in lasererzeugten Plasmen", Diplomarbeit TU Muenchen 1973.
- /29/ K. Huang: "Transporterscheinungen", in "Statistische Maechanik I", Bibliographisches Institut, Mannheim, BI Hochschultaschenbuecher, 68.
- /30/ I. R. Lindemuth: "Conservation Form in Computational Magnetohydrodynamics", J. Computational Phys. 18, 119 (1975).
- /31/ D. Hicks: "Hydrocode Test Problems", AIRFORCE Weapons Laboratory New Mexico, Technical Report AFWL-TR-67-127 (Februar 1968).
- /32/ A. Schlueter: Sitzungsberichte der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Math. - Naturw. Klasse, 197 (1975)
- /33/ G. Bateman, W. Schneider, W. Gressmann: "Ideal MHD Instabilities as an Initial Boundary-Value Problem", IPP Laborbericht IPP 1/145 (1974).
- /34/ A. Schlueter: Muendliche Mitteilung, (1976).
- /35/ R. Chodura: Muendliche Mitteilung, (1976).

Herrn Professor Dr. D. Pfirsch gilt mein besonderer Dank fuer die Uebernahme der Arbeit, sowie die Moeglichkeit, sie im Max Planck Institut fuer Plasmaphysik auszufuehren. Herrn Dr. D. Duechs danke ich fuer ungezaehlte Anregungen und wertvolle Diskussionen. Die Herren Professor Dr. A. Schlueter, Dr. K. U. v. Hagenow und Dr. R. Chodura unterstuetzten die Arbeit durch ihr stetes Interesse. Mein Dank gilt auch Herrn Dr. J. Steuerwald fuer seine zahlreichen Hinweise zum Gebrauch von REDUCE und Frau E. Schwarz und Herrn L. Ling fuer die Unterstuetzung bei der Programmierung. Die praktische Durchfuehrung waere ohne die Mitarbeiter der Rechenanlage des IPP nur schwer denkbar gewesen.