Teil XIII

Simulation mit PDEs: Wärmeleitungsgleichung

ODE vs. PDE

- Differentialgleichungen bei der Molekulardynamik:
  - Nur eine unabhängige Variable: Zeit
  - *gewöhnliche* Differentialgleichungen (ODE)
- Bei vielen physikalischen Problemen:
  - zwei oder mehr unabhängige Variablen: Zeit und bis zu drei Raumrichtungen
  - partielle Ableitungen nach allen Variablen, deshalb *partielle* Differentialgleichung (partial differential equation, PDE)
- Einsatz der Modellwerkzeuge ODE und PDE auch alternativ:
  - höhere Genauigkeit bei PDE (räumliche Heterogenitäten)
  - höherer Aufwand bei PDE (Diskretisierung von Zeit und Raum)
  - Beispiel: Populationsdynamik

Raumauflösende Populationsmodelle

- Einerseits: rein zeitabhängige Modelle manchmal zu grob
  - Bevölkerungsentwicklung in den USA (1850er): starke Ost-West-Komponente
  - Migration der Weltbevölkerung im 21. Jahrhundert
  - Vorhersage von Heuschreckenplagen in Afrika: flüchige Ausbreitung, diffusive und andere Effekte
- deshalb Zielgröße eher $p(x, t)$ oder $p(x, y, t)$ anstelle von $p(t)$
- Erhöhung der Komplexität:
  - Modelle: Zusammenhang von Raum und Zeit?
  - Numerik: Speicher- und Rechenaufwand u.v.m.
- andererseits: höhere Genauigkeit überhaupt erforderlich?
  - Europa: viele Auswanderer (egal, wo das Gold ist)
  - USA: wichtig zu wissen, wo Infrastruktur bereitzustellen

Physikalische Phänomene, die PDEs erfordern

Strömungsmechanik/Thermodynamik

- Wo entsteht ein Tornado?
- Ist die gegebene Karosserie aerodynamisch günstig?

Strukturmechanik

- Hält das Gebäude einer Belastung stand?
- Wo sind Sollbruchstellen?

Verfahrenstechnik

- Wo wird es wie heiß in einem (nuklearen / chemischen / biologischen) Reaktor?

Elektromagnetismus

- Wo im Transistor ist die Elektronendichte wie hoch?

Geologie

- Wann, wo und wie heftig wird es Erdbeben geben?

...

Mit oder ohne Zeit?

stationäre Phänomene

- keine Zeit-, sondern nur Ortsabhängigkeit
- bei eindimensionalem Raum: wieder ODE!
- Beispiele: Gleichgewichtssituationen
  - Auflösung einer Substanz in Wasser ohne äußere Einflüsse
  - Temperaturverteilung in konstant beheiztem Raum

instationäre Phänomene

- Zeit- und Ortsabhängigkeit
- auf jeden Fall PDE!
- Beispiele:
  - Oszillationen: mechanische Belastung einer Schiffschaukel
  - Turbulenz (vgl. Strömung über Wehr, Wirbel im Nachlauf startender Flugzeuge)
  - Regelkreis (ständig angepasste Randbedingungen)

Beispiel: Wärmeleitung

Kernproblem der Thermodynamik

- Wärme beeinflusse die Oberfläche eines Objekts
- Ziel: Ausbreitung bzw. Verteilung vorhersagen
- An der Oberfläche: Randbedingungen
- Beginn der Simulation: Anfangsbedingungen
- Materialeigenschaften (Wärmeleitfähigkeit etc.) beeinflussen Wärmeleitung

Beispiele

- ein Hitzdraht
- ein Kochtopf auf einer Herdplatte
- Kühlwasser im Reaktor eines Kernkraftwerks
- ein Zimmer im Winter: wo die Heizung platzieren?
- ein Zimmer im Sommer: Aufheizung an Fensterflächen

Objekt der Begierde i.W.: Temperatur T

$$T(x;t) \quad \text{oder} \quad T(x,y;t) \quad \text{oder} \quad T(x,y,z;t)$$

Szenario: Kochtopf

- Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, Gebietsrand $\partial\Omega$, Zeitintervall $[0, \tau]$
- Zu Beginn: Topf und Herdplatte kalt
- Nach dem Einschalten: Platte schnell heiß, Wasser erhitzt sich langsam
- Am restlichen Gebietsrand: Kühlung

1D?

- Nur die Höhe als Raumdimension (unten heiß, oben kalt)
- Aber: Kühlung am Rand, Platte evtl. kleiner als Topf

2D?

- Zusätzlich zur Höhe noch den Abstand zur Höhenachse
- Aber: Ist die Herdplatte wirklich rotationssymmetrisch?

3D?

- Auflösung des kompletten Raumes
- Aber: Sehr rechen- und speicheraufwändig

Herleitung des Modells

Die folgenden zwei Modellteile müssen hergeleitet werden

PDE

- Beschreibt die Wechselwirkungen von Temperaturänderungen in Bezug auf Raum und Zeit
- Eine Gleichung für eine gesuchte Funktion ausreichend
- Gleichung bestimmt Schar von Lösungen

Anfangs- und Randbedingungen

- Zur eindeutigen Festlegung der gesuchten Lösung
- Anfangsbedingungen: Temperaturfeld im gesamten Gebiet zum Startzeitpunkt (wie bei ODE)
- Randbedingungen: Temperaturdaten am Rand des Gebiets zu allen Zeiten

Instrumentarium: Differentialoperatoren

Gradient ∇ (Nabla-Operator)

- Angewandt auf skalare Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$
- Vektor der partiellen Ableitungen
- Zeigt in die Richtung des steilsten Anstiegs
- Die Länge ist ein Maß für die Steilheit

Divergenz div

- Angewandt auf Vektorfeld $\vec{F} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$
- $\operatorname{div} \vec{F} \;:=\; \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F_i}{\partial x_i}$
- Gibt für jeden Punkt des Feldes an, ob etwas zu- oder abfließt
- Positive Werte: Quellen, Negative Werte: Senken

Laplace-Operator Δ

- Angewandt auf skalare Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$
- Ist definiert als die Divergenz des Gradienten
- $\Delta f \;:=\; \operatorname{div} \nabla f \;=\; \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}.$

Prinzipielle Vorgehensweise

- Start bei einem grundlegenden physikalischen Gesetz:
  - Der berühmte Apfel
  - Die Erhaltung von Masse
  - Die Erhaltung von Energie oder ...
- Daraus Gewinnung einer Bilanzgleichung (typischerweise ein summatorischer Zusammenhang mit Integralen)
- Zuhilfenahme der Analysis: Vereinfachung
  - z.B. Gaußscher Integralsatz
    $\int_G \operatorname{div} \vec{F}(\vec{x})\mathrm{d}\vec{x} \quad = \quad \int_{\partial G} \vec{F}(\vec{x})\vec{n}\,\overrightarrow{\mathrm{d}S}$
  - „Integral verschwindet stets“zieht „Integrand Null“nach sich
- Vereinfachung durch physikalische Einschränkungen
  - Keine Quellterme etc.
- Am Ende dann die gewünschte (Differential-) Gleichung

Herleitung der Wärmeleitungsgleichung

Annahme: homogenes Material

- Dichte ρ konstant
- spezifische Wärmekapazität c konstant (Wärmekapazität beschreibt, wieviel Energie benötigt wird, eine bestimmte Menge des Stoffs auf eine bestimmte Temperatur zu bringen)

Wärmeänderung

- Betrachtung eines endlichen Volumenstücks V
- Wärme: $Q = \int_V c\rho T(x;t)\,\mathrm{d}x$
- Innerhalb V Energieerhaltung (Sofern keine Quellen und Senken)
- Änderung der Wärme nur durch Zu- und Abfluß über Oberfläche
- Änderung proportional zur Normalenableitung $\frac{\partial T}{\partial n}$ an der Oberfläche, also proportional zum Skalarprodukt von ∇T und $\vec{n}$
- Proportionalitätsfaktor: Wärmeleitfähigkeit k

Bilanzgleichung

- Änderung der Wärme entspricht Zu- und Abflüssen

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} = \int_V c\rho \frac{\partial T}{\partial t}(\vec{x};t)\,\mathrm{d}\vec{x} = \int_{\partial V} k \nabla T(\vec{x};t)\vec{n}\,\mathrm{d}\overrightarrow{S}$$

- Gaußscher Integralsatz

$$\int_V c\rho \frac{\partial T}{\partial t}(\vec{x};t)\,\mathrm{d}\vec{x} = \int_V k \Delta T(\vec{x};t)\,\mathrm{d}\vec{x}$$

- Gilt für jedes beliebige Volumenstück

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t}(\vec{x};t) = k\Delta T(\vec{x};t)$$

- Mit $\kappa = k/(c\varrho)$ folgt die Wärmeleitungsgleichung:

$$\frac{\partial T(\vec{x};t)}{\partial t} = \kappa \Delta T(\vec{x};t)\ ,$$

Partielle Differentialgleichungen

Motivation

- Bisher nur Beispiele mit gewöhnlichen Differentialgleichungen
- Z.B. bei Molekülen: Bewegung jedes Moleküls durch eine ODE beschrieben, nur Abhängigkeit von der Zeit
- Viele physikalische Prozesse lassen sich nur in Abhängigkeit von mehreren Variablen beschreiben
- Häufiger Fall: Zeitabhängigkeit und zwei oder drei Raumvariablen

Allgemeine PDE in zwei Dimensionen

$$F(x, y, u(x, y), \frac{\partial u(x, y)}{\partial x}, \frac{\partial u(x, y)}{\partial y}, \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2}, ..., \frac{\partial^{(i+j)}}{\partial x^i \partial y^j}) = 0$$

Lineare PDE zweiter Ordnung (konstante Koeffizienten)

$$a\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + b\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + ... + e\frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + fu(x, y) = g(x, y)$$

Diskretisierung

- Prinzip ähnlich wie bei ODEs (Euler-Methode)
- Behandlung kontinuierlicher Gleichung in endlicher Zeit mit endlichem Speicher
- Zerlegung eines Gebiets (n-Dimensional) in eine endliche Zahl kleinerer Einheiten
- Zerlegung wird meist Gitter genannt

Gitter

- Je nach Diskretisierungsmethode und Problemstellung unterschiedliche Gitter
- strukturierte Gitter (z.B. kartesisch): Gitterpunkte müssen nicht explizit gespeichert werden
- unstrukturierte Gitter: Koordinaten und Topologie müssen gespeichert werden
- Bei unstrukturierten Gittern ist Adaptivität leichter umzusetzen

Adaptivität

- Feineres Gitter $\Rightarrow$ teuerer und genauer
- Oft ist die hohe Genauigkeit nur an wenigen Stellen nötig
  - Strukturmechanik: „Sollbruchstellen“
  - Strömungsmechanik: Wirbel
  - Wärmeleitung: dünne Bauteile

Ansätze

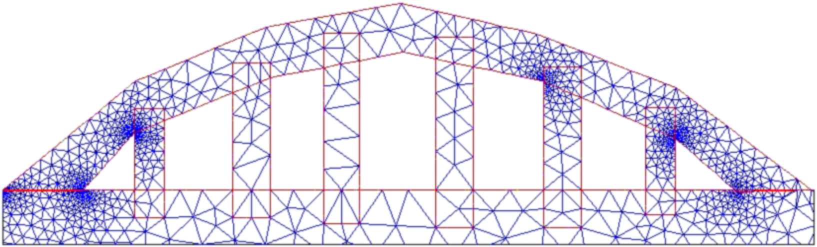
- Finite Volumen
- Finite Elemente
- Finite Differenzen

Finite Volumen

- Das Gebiet wird in endliche Zahl an Zellen zerlegt
- Strukturierte und unstrukturierte Gitter möglich
- Für jede Zelle gilt ein Erhaltungssatz (Wärme verschwindet nicht)
- Mittlere Temperatur: Integral über das Volumen der Zelle
- Gaußscher Integralsatz: Integral über den Rand der Zelle
- $\Rightarrow$ Wärmeänderung nur durch Zu- und Abflüsse über den Rand
- Man erhält für jede Zelle eine gewöhnliche Differentialgleichung
- $\Rightarrow$ Diskretisierung gibt algebraische Gleichung
- Für jede Zelle gibt es daher eine Gleichung
- Insgesamt ein lineares Gleichungssystem

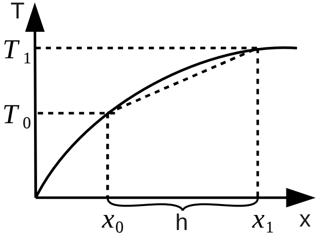
Finite Elemente

- Zu kompliziert, um hier erklärt zu werden
- Gebiet wird in (unstrukturierte) Elemente unterteilt
- PDE wird nicht überall erfüllt, sondern nur gemittelt
- Letztlich erhält man für jeden Freiheitsgrad eine Gleichung
- Damit auch wieder ein lineares Gleichungssystem



Finite Differenzen

- Vergleichsweise einfach (strukturierte Gitter, einfache Theorie)
- PDE wird direkt diskretisiert: Ersetzung der Ableitungen durch Differenzenquotienten
- Bei erster Ableitung: Approximation durch Sekante
- Vorwärtsdifferenzenquotient: $T'(x_0) \doteq \frac{T(x_0+h)-T(x_0)}{h}$
- Rückwärtsdifferenzenquotient: $T'(x_0) \doteq \frac{T(x_0)-T(x_0-h)}{h}$
- Beide Male: Differenz zweier Funktionswerte durch Differenz der x-Werte

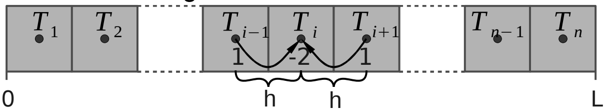


3-Punkte-Stern

- Für die 1D Wärmeleitungsgleichung
- Diskretisierung der zweiten Ableitung
- Analog zur ersten Ableitung: Differenz zweier Ableitungswerte durch die Differenz der zugehörigen x-Werte
- Die beiden Ableitungswerte erhält man durch Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzenquotient

$$
\begin{aligned}
T''(x_0) &\doteq \frac{\frac{T(x_0+h)-T(x_0)}{h} - \frac{T(x_0)-T(x_0-h)}{h}}{h} \\
&= \frac{T(x_0+h) - 2T(x_0) + T(x_0-h)}{h^2} \; .
\end{aligned}
$$

- Maschenweite h bestimmt wieder Aufwand und Genauigkeit
- Veranschaulichung an einem Stab:



Anwendung auf die stationäre Wärmeleitungsgleichung

- stationäre Wärmeleitungsgleichung: $\kappa \Delta T(x) = 0$
- Für jeden der n diskreten Punkte gilt:

$$\kappa \cdot \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2} = 0$$

- Und nach Vereinfachung:

$$T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1} = 0$$

- Daraus folgt ein Lineares Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \vdots \\ 0 & 1 & -2 & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_{n-1} \\ T_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -T_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -T_{n+1} \end{pmatrix} .$$

5-Punkte-Stern

- Bei 2D-Gleichung: zwei partielle zweite Ableitungen $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ und $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$
- In beiden Dimensionen analog zur 1D-Vorgehensweise

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &\doteq \frac{T(x+h,y) - 2T(x,y) + T(x-h,y)}{h^2} \, , \\
\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} &\doteq \frac{T(x,y+h) - 2T(x,y) + T(x,y-h)}{h^2} \, .
\end{aligned}$$

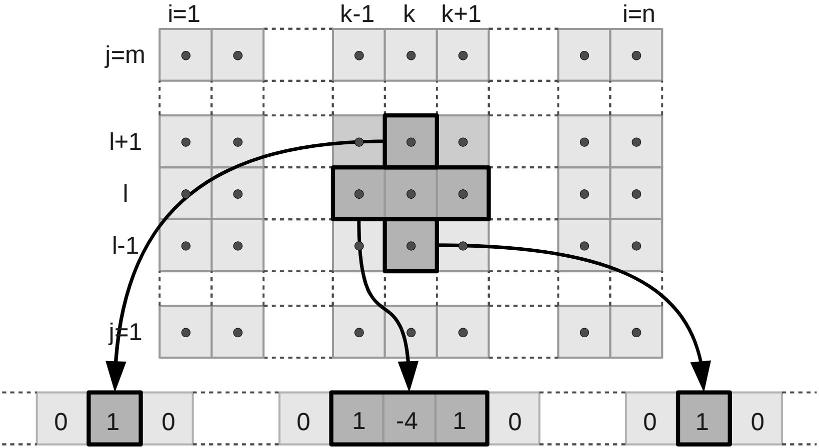
- Anwendung auf $\kappa \Delta T(x) = 0$, Temperatur in Gitterzellen $T_{i,j}$

$$\kappa \left(\frac{T_{i+1,j} + T_{i,j+1} - 4T_{i,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j-1}}{h^2} \right) = 0$$

- Wieder vereinfachen:

$$T_{i+1,j} + T_{i,j+1} - 4T_{i,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j-1} = 0 \, .$$

Veranschaulichung der 2D-Diskretisierung



LGS für 2D-Diskretisierung

- Anordnung der Zellen aus dem 2D-Gitter zeilenweise im 1D-Vektor der Unbekannten
- In der folgenden Darstellung: 3x3 Gitterzellen
- Daher nur eine Zelle nicht am Rand (und damit rechte Seite gleich Null)

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc}
-4 & 1 & & 1 & & & & & \\
1 & -4 & 1 & & 1 & & & & \\
 & 1 & -4 & & & 1 & & & \\
\hline
1 & & & -4 & 1 & & 1 & & \\
 & 1 & & 1 & -4 & 1 & & 1 & \\
 & & 1 & & 1 & -4 & & & 1 \\
\hline
 & & & 1 & & & -4 & 1 & \\
 & & & & 1 & & 1 & -4 & 1 \\
 & & & & & 1 & & 1 & -4
\end{array}\right) \cdot \begin{pmatrix} T_{1,1} \\ T_{1,2} \\ T_{1,3} \\ T_{2,1} \\ T_{2,2} \\ T_{2,3} \\ T_{3,1} \\ T_{3,2} \\ T_{3,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -T_{0,1} - T_{1,0} \\ -T_{0,2} \\ -T_{0,3} - T_{1,4} \\ -T_{2,0} \\ 0 \\ -T_{2,4} \\ -T_{3,0} - T_{4,1} \\ -T_{4,2} \\ -T_{4,0} - T_{3,4} \end{pmatrix}$$