

Forschungszentrum Karlsruhe

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6017

Godunov-Typ Verfahren für die Gleichungen der Hydrodynamik auf bewegten Gittern

Kirstin Baumann

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Von der Fakultät für Mathematik der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

1997

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Godunov-Typ-Verfahren für die Eulergleichungen auf bewegten Rechengittern entwickelt. Die numerische Methode basiert auf einem Finite-Volumen-Ansatz im Raum-Zeit Gebiet. Die dabei notwendige Ermittlung der Flüsse wird durch das näherungsweise Lösen von Riemannproblemen bewerkstelligt. Verschiedene Arten von Riemannlösern werden auf den Fall bewegter Rechengitter erweitert und Verfahren höherer Ordnung werden entwickelt. Der Schwerpunkt der Anwendung der Methode liegt dabei auf der Simulation bewegter Materialgrenzen. Durch eine Erweiterung der Eulergleichungen um eine zusätzliche Gleichung wird eine Regularisierung der unstetigen Flußfunktion erreicht. Damit können die bekannten Konstruktionsmethoden für näherungsweise Riemannlöser auch an einer Materialgrenze angewandt werden. Um die Stärke dieser Verfahren zu zeigen, werden die Ergebnisse eindimensionaler Testprobleme vorgestellt und diskutiert. Eine weitere Anwendung bilden Überschall-Stoßprobleme, die mit Hilfe des am Forschungszentrum Karlsruhe stehenden Pulsgenerators KALIF (Karlsruhe Light Ion Facility) experimentell untersucht werden können. Die Ergebnisse der Simulationen solcher Experimente zeigen weiterhin die hohe Effizienz und Robustheit dieser Verfahren, insbesondere auch in zwei Raumdimensionen.

Godunov-Type Methods for the Hydrodynamic Equations on Moving Grids

Abstract

The current PhD thesis presents Godunov-type schemes for the Euler equations on moving grids. The numerical method is based on a finite-volume approach in the space-time domain. The fluxes are calculated using the approximate solution of Riemann problems. Several Riemann solvers are extended to moving grids and higher order methods are developed. For application of the method we concentrate on the simulation of moving material interfaces. We extend the Euler equations by an additional equation to get a regularization of the discontinuous flux function. Then the well known methods of constructing approximate Riemann solvers can be used even at a material interface. To show the power of these methods the results of one dimensional test problems are presented and discussed. Another application are supersonic shock problems, that can be experimentally explored at the KALIF (Karlsruhe Light Ion Facility) at Forschungszentrum Karlsruhe. The results of the simulation of such experiments show the high efficiency and robustness of these methods also in two space dimensions.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Erhaltungsgleichungen für ein kompressibles Medium	4
1.1 Das System der Eulergleichungen	4
1.1.1 Die integralen Erhaltungsgleichungen	4
1.1.2 Die differentielle Form	8
1.2 Eigenschaften nichtlinearer hyperbolischer Systeme	8
1.3 Das Riemannproblem	15
2 Finite-Volumen-Verfahren	18
2.1 Eindimensionale Verfahren	18
2.1.1 Das Godunov-Verfahren	19
2.1.2 Godunov-Typ-Verfahren	20
2.2 Diskretisierung in zwei Raumdimensionen	26
2.2.1 Kartesische Gitter	31
2.2.2 Allgemeine strukturierte Vierecksgitter	32
2.2.3 Bewegte Gitter	34
3 Riemannlöser auf bewegten Gittern	36
3.1 Exakter Riemannlöser	37
3.2 Das Roe-Verfahren	39
3.3 Das HLL-Verfahren	40

4	Approximative Riemannlöser für Materialgrenzen	42
4.1	Das erweiterte System	42
4.2	Jacobimatrix, Eigenwerte und Eigenvektoren	45
4.3	Herleitung der Roe-Mittelwerte	46
5	Verfahren höherer Ordnung	54
5.1	Taylorentwicklung für zeitlich veränderliche Gitter	55
5.2	Die Steigungsberechnung	58
6	Eindimensionale Rechnungen	60
6.1	Das Sodproblem	61
6.2	Kontakt-Stoß-Wechselwirkung	70
6.3	Echte Materialgrenzen	83
6.3.1	Ein Konvektionsproblem	83
6.3.2	Das Sodproblem mit Materialgrenze	87
6.3.3	Wechselwirkung eines Stoßes mit einer Luft-Helium-Grenze	94
7	Simulation von Stoßwellenexperimenten	100
7.1	Stoßwellenexperimente an der KALIF-Anlage	100
7.2	Struktur des zweidimensionalen Programmcodes	103
7.2.1	Bewegung der Ränder	105
7.2.2	Gittererzeugung	106
7.2.3	Hydrodynamik-Löser	106
7.3	Ebene Targets	108
7.4	Strukturierte Targets	111
7.4.1	Theorie der Rayleigh-Taylor-Instabilität	112
7.4.2	Beispiel einer Rayleigh-Taylor-Instabilität	113
7.4.3	Theorie der Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten	120
7.4.4	Beispiel eines strukturierten Targets unter Einwirkung eines Ionenstrahls	122

8	Zusammenfassung und Ausblick	128
A	Transformation im dreidimensionalen Raum	130
B	Lineare Stabilitätstheorie für Rayleigh-Taylor-Instabilitäten	132
B.1	Modalanalyse	132
B.2	Die Störungsgleichungen für eine Rayleigh-Taylor-Instabilität	133
B.3	Die Fourierentwicklung	135
B.4	Die Wachstumsraten der Instabilitäten	137
	Symbolverzeichnis	139
	Literaturverzeichnis	141

Einleitung

Die Beantwortung einer Vielzahl von Problemstellungen aus unterschiedlichen Bereichen der Naturwissenschaft und Technik läßt sich eng mit dem Lösen von sogenannten Erhaltungsgleichungen in Beziehung setzen. Eine zentrale Rolle, sowohl für theoretische als auch für praktische Untersuchungen, nehmen dabei Systeme von nichtlinearen hyperbolischen Differentialgleichungen ein [24, 16]. Ein wichtiges Beispiel dieser partiellen Differentialgleichungen sind die Eulergleichungen.

Eine Anwendung bilden Überschall-Stoßprobleme, die mit Hilfe des am Forschungszentrum Karlsruhe stehenden Pulsgenerators KALIF experimentell untersucht werden können [36]. Dabei wird die mit einer gepulsten Hochspannungsanlage gewonnene elektrische Leistung in einer Ionendiode in einen intensiven Ionenstrahl umgewandelt [1]. Die Energie der Ionenstrahlen wird anschließend zur Beschleunigung einer dünnen Aluminiumfolie benutzt [4]. Zur Simulation solcher Stoßprobleme ist man auf hochentwickelte Lösungsverfahren zur numerischen Behandlung der zugrundeliegenden nichtlinearen hyperbolischen Erhaltungsgleichungen angewiesen, da das Auffinden von analytischen Lösungen nur für sehr vereinfachte Fälle gelingt. Als besonders effizient erweisen sich die in den letzten zwei Jahrzehnten entwickelten Godunov-Typ-Verfahren [29].

Eines der grundlegenden Probleme bei solchen Verfahren ist die Behandlung von Stoßfronten und Grenzflächen. Ein typisches Beispiel ist die Simulation der Grenzschicht zweier Materialien, welche sich nicht mischen. Werden numerische Verfahren eingesetzt, die auf einem ortsfesten Rengitter arbeiten, so führt die numerische Approximation unweigerlich zu einem Verschmieren der Materialgrenzen und zu einer künstlichen Mischung der Materialkomponenten. Für diese künstliche Mischzone muß dann eine Zustandsgleichung ohne physikalische Begründung formuliert werden. Wird ein solches Phänomen durch die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie sowie den adäquaten Zustandsgleichungen modelliert, so ist eine scharfe Auflösung dieser Unstetigkeiten für die Qualität des numerischen Verfahrens wesentlich. Physikalische Probleme, bei denen das dynamische Verhalten nicht so sehr von der Dicke der Grenzflächen abhängt, lassen sich mit Verfahren auf ortsfesten Gittern hinreichend genau approximieren, wenn zusätzlich spezielle numerische Methoden, welche die numerische Verschmierung klein halten, eingesetzt werden. Für physikalische Probleme jedoch, deren zeitliche Entwicklung sehr empfindlich auf Lage und Dicke dieser Grenzflächen reagiert, müssen andere numerische Methoden entwickelt

werden. Es sind Konzepte gefragt, welche die Bewegung einer solchen Grenzfläche genauer approximieren.

In dieser Arbeit wird ein Verfahren vorgestellt, das den Euler- mit dem sogenannten Lagrange-Ansatz kombiniert. Dabei wird auf ein mit der Strömung mitbewegtes Koordinatensystem Bezug genommen [42]. Die Idee bei diesem erweiterten Ansatz ist, das betrachtete Rechengebiet in mehrere Teilgebiete zu zerlegen, deren Ränder sich gegeneinander bewegen können. Das heißt, die Gleichungen werden auf einem zeitabhängigen, sogenannten bewegten Gitter approximiert, wobei sich in jedem Teilgebiet nur ein Material befindet. Kontaktflächen verschiedener Materialien oder verschiedener physikalischer Eigenschaften werden bei der Rechnung als Ränder von Teilgebieten betrachtet. In jedem Zeitschritt wird zunächst die Bewegung der Grenzflächen berechnet und die Ränder der Teilgebiete werden entsprechend transportiert. Dadurch gelingt es, ein numerisches Verschmieren zu vermeiden. Notwendig ist dabei ein numerisches Verfahren, welches für ein bewegtes Gitter konstruiert ist. Durch dieses zeitlich veränderliche Gitter entsteht in den zugrundeliegenden Gleichungen ein zusätzlicher Term, der bei der Entwicklung der Verfahren mitberücksichtigt wird. Dieser Term beschreibt gerade die Bewegung des Gitters. Direkt an einer Materialgrenze liegt ein Wechsel der Zustandsgleichung vor. Dies bedeutet im allgemeinen eine Unstetigkeit in der Flußfunktion. Da die meisten Godunov-Typ-Verfahren die Jacobimatrix der Flußfunktion benötigen, ist nicht sichergestellt, daß diese Verfahren auch für unstetige Flußfunktionen ihre Gültigkeit behalten. Daher wird in dieser Arbeit ein Verfahren entwickelt, welches durch die Erweiterung des Systems von Erhaltungsgleichungen um eine zusätzliche Gleichung für einen glatten Übergang zwischen den beiden Flußfunktionen sorgt.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Erweiterung der Godunov-Typ-Verfahren für bewegte Rechengitter. Zur Verifizierung der theoretischen Ergebnisse wurde ein eindimensionales Programm für bewegte Rechengitter entwickelt. Mit ihm wurden einige typische Testprobleme, wie zum Beispiel das Sodproblem [37], gerechnet. Um die Wirkungsweise der Methode der bewegten Gitter zu verdeutlichen, wurden zunächst Beispiele mit nur einem Material gewählt. Um die Güte dieses Verfahrens bei der Approximation bewegter Materialgrenzen zu zeigen, wurden dann drei Beispiele mit Materialgrenzen betrachtet. Die Stoßwellenexperimente dagegen wurden mit einem zweidimensionalen Finite-Volumen-Code simuliert, damit auch das dynamische Verhalten in verschiedene Richtungen berücksichtigt werden kann. Dieser Code wurde vom Institut für chemische Physik in Chernogolovka (Rußland) zur Verfügung gestellt [12] und in Zusammenarbeit mit den Kollegen A. Shutov und O. Vorobiev aus Chernogolovka weiterentwickelt. In diesem Programm ist auch die Energieeinlagerung der Ionenstrahlen in das Aluminiumtarget berücksichtigt. Mit realistischen numerischen Rechnungen läßt sich eine zeitliche und räumliche Auflösung gewinnen, wie sie durch Messungen im Experiment nicht möglich ist.

Im ersten Kapitel wird das System der Eulergleichungen in integraler und differentieller Form vorgestellt. Diese Erhaltungsgleichungen bilden ein nichtlineares hyperbolisches System. In Kapitel 1.2 werden einige Eigenschaften solcher Systeme angegeben, es wird der

Begriff der schwachen Lösung und der Entropielösung eingeführt. Beide Lösungsbegriffe werden später bei der Herleitung der Finite-Volumen-Verfahren benötigt. Am Ende des ersten Kapitels wird das Riemannproblem, ein spezielles eindimensionales Anfangswertproblem, vorgestellt. Das zweite Kapitel enthält die Beschreibung der Finite-Volumen-Verfahren. Es werden verschiedene Riemannlöser und die zugehörigen eindimensionalen Godunov-Typ-Verfahren [14, 17, 34], sowie Diskretisierungen für unterschiedliche strukturierte Vierecksgitter vorgestellt. Im dritten Kapitel werden diese Riemannlöser dann auf den Fall bewegter Rechengitter erweitert, und im vierten Kapitel wird ein Verfahren für das um eine zusätzliche Erhaltungsgleichung erweiterte System hergeleitet. Im fünften Kapitel wird dann untersucht, welchen Einfluß die Gitterbewegung auf die Berechnung von Verfahren höherer Ordnung hat.

In den letzten beiden Kapiteln werden numerische Ergebnisse vorgestellt. Zunächst werden im sechsten Kapitel anhand zweier eindimensionaler Beispiele ohne Materialgrenzen die Möglichkeiten und die Wirkungsweise der Verwendung bewegter Gitter vorgeführt. Dann werden einige eindimensionale Beispiele mit Materialgrenzen betrachtet. Die Ergebnisse werden jeweils mit der bekannten exakten Lösung und mit Verfahren ohne Gitterbewegung verglichen. Im achten Kapitel werden die Ergebnisse der Simulation von Targetexperimenten mit einem zweidimensionalen Code vorgestellt. Dazu werden zunächst die an der KALIF durchgeführten Targetexperimente erklärt, es wird auf die Entstehung von Instabilitäten eingegangen und die Vorgehensweise im Programm beschrieben. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der erzielten Ergebnisse.

Kapitel 1

Erhaltungsgleichungen für ein kompressibles Medium

Probleme der kompressiblen Strömungsmechanik, bei denen Reibung, Viskosität und Wärmeleitung vernachlässigbar sind, werden durch die Eulergleichungen beschrieben. Dabei handelt es sich um ein hyperbolisches System von Erhaltungsgleichungen, welche die Massen-, Impuls- und Energieerhaltung beschreiben. In diesem Kapitel werden zunächst die Eulergleichungen in integraler Formulierung vorgestellt. Die Eulergleichungen in differentieller Form erhält man dann aus den integralen Erhaltungsgleichungen unter Anwendung des Gaußschen Integralsatzes. Dabei wird jedoch die Stetigkeit der Erhaltungsgrößen vorausgesetzt. Da in praktischen Anwendungen häufig sogenannte Stoßwellen auftreten, das heißt Unstetigkeiten in den Erhaltungsgrößen, kann die Stetigkeit nicht grundsätzlich vorausgesetzt werden. Daher ist es von Vorteil, in numerischen Verfahren von den integralen Erhaltungsgleichungen auszugehen. Allgemeinere Lösungsbegriffe für die Differentialgleichungen müssen eingeführt werden. Es werden die Definitionen der verallgemeinerten und der schwachen Lösung angegeben.

Es werden die Transformationseigenschaften der Eulergleichungen beschrieben, da für die im 2. Kapitel beschriebenen zweidimensionalen Finite-Volumen-Verfahren eine Transformation der Gleichungen ausgenutzt wird, um auf eindimensionale Betrachtungen zurückgreifen zu können. Am Ende dieses Kapitels wird dann auf ein spezielles eindimensionales Anfangswertproblem, das sogenannte Riemannproblem, eingegangen.

1.1 Das System der Eulergleichungen

1.1.1 Die integralen Erhaltungsgleichungen

Im folgenden werden Gasströmungen im Raum-Zeit-Gebiet $\Omega = V \times [t_1, t_2]$, $0 \leq t_1 \leq t_2 < \infty$ betrachtet. Dabei ist $V \subset \mathbb{R}^N$ ($1 \leq N \leq 3$) das vom Gas ausgefüllte

Volumen, dessen Rand ∂V als lipschitzstetig vorausgesetzt wird, und $[t_1, t_2]$ das betrachtete Zeitintervall. Das System der reibungsfreien, kompressiblen Strömung wird durch die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie beschrieben. Diese lauten

$$(1.1a) \quad \int_V \frac{\partial \varrho}{\partial t} dV + \int_{\partial V} (\varrho \mathbf{v}) \mathbf{n} dA = 0 ,$$

$$(1.1b) \quad \int_V \frac{\partial (\varrho \mathbf{v})}{\partial t} dV + \int_{\partial V} (\varrho \mathbf{v} \mathbf{v}^T + p \mathcal{I}) \mathbf{n} dA = 0 ,$$

$$(1.1c) \quad \int_V \frac{\partial e}{\partial t} dV + \int_{\partial V} \mathbf{v} (e + p) \mathbf{n} dA = 0 .$$

Dabei ist ϱ die Dichte, $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_N)$ der Geschwindigkeitsvektor mit den Komponenten v_i in Richtung der kartesischen Koordinaten, \mathbf{n} die äußere Einheitsnormale auf ∂V , \mathcal{I} die Einheitsmatrix, p der Druck und e die Gesamtenergie pro Einheitsvolumen,

$$(1.2) \quad e = \varrho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{v} \right) ,$$

die sich aus innerer und kinetischer Energie zusammensetzt. Mit ε wird die spezifische innere Energie bezeichnet. Den Zusammenhang zwischen innerer Energie, Druck und Dichte erhält man aus einer thermodynamischen Zustandsgleichung der Form $p = p(\varrho, \varepsilon)$, die aus physikalischen Gründen nur für positive Dichte definiert und selbst auch positiv ist. In vielen Anwendungen wird die Zustandsgleichung für ideale Gase

$$(1.3) \quad p = p(\varrho, \varepsilon) = (\gamma \Leftrightarrow 1) \varrho \varepsilon$$

verwendet. Die gasspezifische Konstante γ wird als Adiabatenexponent bezeichnet und berechnet sich aus den spezifischen Wärmen bei konstantem Druck c_p bzw. bei konstantem Volumen c_V zu

$$(1.4) \quad \gamma = \frac{c_p}{c_V} , \quad c_p = \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_p , \quad c_V = \left(\frac{\partial q}{\partial T} \right)_V .$$

Dabei ist q die Wärmemenge und T die Temperatur.

Im folgenden wird die Massenerhaltungsgleichung hergeleitet. Die ausführliche Herleitung, auch der anderen beiden Gleichungen, wird in [11] beschrieben. Zur Herleitung der Erhaltungsgleichungen benötigt man das Transporttheorem für die Ableitung von Integralen, das uns bei der Herleitung der numerischen Verfahren auf bewegten Rechengittern in

Kapitel 2.2.3 noch einmal begegnen wird. In beiden Fällen benötigen wir nur die Flußformulierung dieses Theorems, die im folgenden gegeben wird.

Das Transporttheorem

Wir betrachten die Bewegung eines Gases, das zu einem bestimmten Zeitpunkt $t_0 \in [0, \infty)$ ein Gebiet $V_0 := V(t_0)$ ausfüllt. Dann ist $V(t)$ für beliebige $t \in [t_0, \infty)$ das Gebiet, das von derselben Gasmenge zur Zeit t ausgefüllt wird. Die Funktion

$$F : \{(\mathbf{x}, t) \mid t \in [0, \infty), \mathbf{x} \in V(t)\} \rightarrow \mathbb{R}$$

sei eine physikalische Größe.

Betrachten wir eine Gasmenge, die zum Zeitpunkt t ein beschränktes Gebiet $V(t)$ ausfüllt, dann ist die Gesamtmenge der durch die Funktion F gegebenen Größe, die im Volumen $V(t)$ zur Zeit t enthalten ist, gleich dem Integral

$$(1.5) \quad \int_{V(t)} F(\mathbf{x}, t) dV.$$

Uns interessiert die Änderung der Größe F beschränkt auf das betrachtete System von Teilchen, das heißt die Ableitung

$$(1.6) \quad \frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(\mathbf{x}, t) dV.$$

Das Transporttheorem in der Flußformulierung besagt nun, daß

$$(1.7) \quad \frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial F}{\partial t}(\mathbf{x}, t) dV + \int_{\partial V(t)} F(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS$$

gilt, wobei \mathbf{v} die Geschwindigkeit der Teilchen und $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ die äußere Einheitsnormale auf $\partial V(t)$ im Punkt \mathbf{x} ist. Den Beweis des Theorems findet man in [11].

Das Gesetz der Massenerhaltung

Da sich in dem Gebiet $V(t)$ zu jedem Zeitpunkt dieselben Teilchen befinden, ist die Masse m der Gasmenge im Gebiet $V(t)$ von der Zeit unabhängig. Dies bedeutet

$$(1.8) \quad \frac{dm(V(t))}{dt} = 0 \quad , \quad t \in [0, \infty) \quad ,$$

wobei die Masse m über die Dichte ϱ in der Form

$$(1.9) \quad m(V(t)) := \int_{V(t)} \varrho(\mathbf{x}, t) dV$$

definiert ist. Wendet man das Transporttheorem (1.7) auf $\varrho(t)$ an, so erhält man die Integralgleichung

$$(1.10) \quad \int_V \frac{d\varrho}{dt}(\mathbf{x}, t) dV + \int_{\partial V} \varrho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS = 0.$$

Betrachtet man ein festes Volumen V , so besagt diese Gleichung, daß sich die Massenänderung in dem Gebiet V durch den Massenfluß durch den Rand des Gebietes ergibt.

Die Erhaltungsgleichungen in Vektorform

Um die Gleichungen (1.1) kürzer in Vektorform schreiben zu können, führt man den Vektor \mathbf{u} der Erhaltungsgrößen und die physikalischen Flüsse $\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_N$ in Richtung der Koordinatenachsen ein,

$$(1.11) \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho v_1 \\ \vdots \\ \varrho v_N \\ e \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \varrho v_i \\ \varrho v_1 v_i + \delta_{1i} p \\ \vdots \\ \varrho v_N v_i + \delta_{Ni} p \\ (e + p) v_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, N.$$

Dabei ist δ_{ij} das Kroneckersymbol. Speziell für dieses System sind die physikalischen Flüsse auf der offenen Menge

$$(1.12) \quad D = \{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N+2}; u_1 = \varrho > 0, u_j = \varrho v_{j-1} \in \mathbb{R}^1 \text{ für } j = 2, \dots, N+1, \\ u_{N+2} \Leftrightarrow \sum_{j=2}^{N+1} u_j^2 / (2u_1) = g(\varrho, p) > 0 \text{ mit } p > 0\}$$

definiert. Faßt man die Flüsse in der Flußmatrix

$$(1.13) \quad \mathcal{F} = (\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_N) = \begin{pmatrix} f_{11} & \dots & f_{N1} \\ f_{12} & \dots & f_{N2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{1,N+1} & \dots & f_{N,N+1} \\ f_{1,N+2} & \dots & f_{N,N+2} \end{pmatrix}$$

zusammen, so lassen sich die integralen Erhaltungsgleichungen (1.1) in der Kurzform

$$(1.14) \quad \int_V \mathbf{u}_t dV + \int_{\partial V} \mathcal{F}(\mathbf{u}) \mathbf{n} dA = 0$$

schreiben. Integriert man diese Gleichung über das Zeitintervall (t_1, t_2) , so ergibt sich

$$(1.15) \quad \int_{t_1}^{t_2} \int_V \mathbf{u}_t dV dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial V} \mathcal{F}(\mathbf{u}) \mathbf{n} dA dt = 0.$$

Die im 2. Kapitel beschriebenen Finite-Volumen-Verfahren stellen eine Approximation dieser Integralgleichungen dar.

1.1.2 Die differentielle Form

In diesem Abschnitt wird zunächst vorausgesetzt, daß \mathbf{u} und \mathbf{f} stetig sind. Dann läßt sich das Oberflächenintegral in (1.14) mit dem Gaußschen Integralsatz in ein Volumenintegral umwandeln. Man erhält

$$(1.16) \quad \int_V \mathbf{u}_t dV + \int_V \operatorname{div} \mathcal{F}(\mathbf{u}) dV = 0.$$

Da diese Gleichung für beliebig kleine Volumina und beliebige Zeitintervalle gültig ist, ergibt sich das Differentialgleichungssystem

$$(1.17) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathcal{F}(\mathbf{u}) = 0.$$

Die in den letzten beiden Gleichungen verwendete Divergenz ist dabei auf jede Zeile der Matrix \mathcal{F} anzuwenden, das heißt

$$(1.18) \quad \operatorname{div} \mathcal{F} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_{i1}}{\partial x_i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_{i,N+2}}{\partial x_i} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i}.$$

Damit läßt sich das System (1.17) auch in der Form

$$(1.19) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathbf{f}_i(\mathbf{u})}{\partial x_i} = 0$$

schreiben.

1.2 Eigenschaften nichtlinearer hyperbolischer Systeme

Die Gleichung (1.19) läßt sich durch Anwendung der Kettenregel auf die Funktionen $\mathbf{f}_i(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t))$ in das quasilineare System partieller Differentialgleichungen

$$(1.20) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \mathcal{A}_i(\mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} = 0$$

überführen, wobei die Jacobimatrizen

$$(1.21) \quad \mathcal{A}_i(\mathbf{u}) := \frac{d\mathbf{f}_i(\mathbf{u})}{d\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{i,1}(\mathbf{u})}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial f_{i,1}(\mathbf{u})}{\partial u_{N+2}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{i,N+2}(\mathbf{u})}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial f_{i,N+2}(\mathbf{u})}{\partial u_{N+2}} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, N,$$

für alle $\mathbf{u} \in D$ mit D nach (1.12) definiert sind.

Definition 1.1. (aus [11]): *Das System (1.20) heißt hyperbolisch, wenn die Matrix*

$$(1.22) \quad \mathcal{P}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\nu}) = \sum_{i=1}^N \nu_i \mathcal{A}_i(\mathbf{u})$$

für beliebige Vektoren $\mathbf{u} \in D$ und $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \dots, \nu_N) \in \mathbb{R}^N$ reelle Eigenwerte $a_i = a_i(\mathbf{u}, \boldsymbol{\nu})$, $i = 1, \dots, N+2$, besitzt und diagonalisierbar ist. Das heißt, es existiert eine nichtsinguläre Matrix $\mathcal{T} = \mathcal{T}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\nu})$ mit

$$(1.23) \quad \mathcal{T}^{-1} \mathcal{P} \mathcal{T} = \mathcal{D}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\nu}) = \text{diag}(a_1, \dots, a_{N+2}).$$

Die Eulergleichungen (1.19), (1.11) zusammen mit der Zustandsgleichung für ideale Gase

$$(1.24) \quad p = p(\varrho, \varepsilon) = (\gamma \leftrightarrow 1) \varrho \varepsilon$$

bilden ein hyperbolisches System von Differentialgleichungen [11]. Ergänzt man dieses System, betrachtet im \mathbb{R}^N , durch die Anfangswerte

$$(1.25) \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{g}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N,$$

mit einer gegebenen Funktion $\mathbf{g} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^{N+2}$, so spricht man von einem Cauchyproblem. Bei den folgenden theoretischen Untersuchungen wird stets das Cauchyproblem auf dem Raum-Zeit-Gebiet $\Omega = \mathbb{R}^N \times [0, \infty)$ betrachtet.

Definition 1.2. *Eine Funktion $\mathbf{u} \in C^1(\mathbb{R}^N \times [0, T], D)$ mit D gemäß (1.12), die das System (1.19) in Ω und die Anfangsbedingung (1.25) in \mathbb{R}^N erfüllt, wird klassische Lösung des Cauchyproblems genannt.*

Wie bereits erwähnt, können auch bei stetigen Anfangsbedingungen Unstetigkeiten in der Lösung auftreten. Das Konzept der klassischen Lösung ist daher zu einschränkend. Im folgenden wird zunächst die schwache und dann die verallgemeinerte Lösung des Cauchyproblems vorgestellt (vgl. [11]).

Zur Definition der schwachen Lösung benötigen wir die folgenden Bezeichnungen und Voraussetzungen:

- $M \subset \mathbb{R}^s$ sei eine meßbare Menge.
- $[L^\infty(M)]^m$ sei der Raum aller Vektorfunktionen $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_m)$ mit Lebesgue-meßbaren Komponenten $f_i \in L^\infty(M)$ für $i = 1, \dots, m$.
- $\mathbf{f} \in [L^\infty_{loc}(M)]^m$ gelte genau dann, wenn $\mathbf{f}|_{M \cap K} \in [L^\infty(M \cap K)]^m$ für alle kompakten Mengen $K \subset \mathbb{R}^s$.
- $C_0^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, \infty))$ sei der Raum aller unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger in $\mathbb{R}^N \times [0, \infty)$.
- \mathbf{u} sei eine klassische Lösung der Differentialgleichung (1.19) mit der Anfangsbedingung (1.25), wobei weiterhin $\Omega = \mathbb{R}^N \times [0, \infty)$ gilt.

Unter diesen Voraussetzungen folgt aus der Gleichung (1.19) die Gleichung

$$(1.26) \quad \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^N} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathbf{f}_i(\mathbf{u})}{\partial x_i} \right) \varphi \, d\mathbf{x} \, dt = 0$$

für jede Vektorfunktion $\varphi \in [C_0^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, \infty))]^m$. Unter Verwendung der Produktintegration lassen sich die Ableitungen auf die Testfunktion φ überwälzen. Damit erfüllt jede klassische Lösung von (1.19), (1.25) die Gleichung

$$(1.27) \quad \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^N} \left(\mathbf{u} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) d\mathbf{x} \, dt + \int_{\mathbb{R}^N} \mathbf{g}(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} = 0$$

$$\forall \varphi \in [C_0^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, \infty))]^m .$$

Hierbei wurde die Anfangsbedingung (1.25) eingesetzt. Die Gleichung (1.27) gilt auch für Funktionen $\mathbf{u} \in [L^\infty_{loc}(\mathbb{R}^N \times (0, \infty))]^m$, die nicht stetig sind, und führt zu folgender Definition.

Definition 1.3. Sei $\mathbf{g} \in [L^\infty_{loc}(\mathbb{R}^N)]^m$. Dann heißt eine Vektorfunktion \mathbf{u} schwache Lösung des Anfangswertproblems (1.19), (1.25), wenn $\mathbf{u} \in [L^\infty_{loc}(\mathbb{R}^N \times (0, \infty))]^m$ ist und die Gleichung (1.27) erfüllt.

Somit ist jede klassische Lösung auch schwache Lösung und eine schwache Lösung, die stetig differenzierbar ist, ist klassische Lösung. Der schwache Lösungsbegriff eignet sich sehr gut für theoretische Untersuchungen. Zur Herleitung numerischer Verfahren ist die Formulierung (1.27) jedoch weniger geeignet.

Besser geeignet zur Herleitung numerischer Verfahren ist die verallgemeinerte Lösung. Dazu geht man nicht von der Differentialform, sondern von der Integralform (1.15) aus. Ist das räumliche Integrationsgebiet in (1.15) zeitlich konstant, so läßt sich die Reihenfolge der Integrationen vertauschen und es gilt

$$(1.28) \quad \int_{t_1}^{t_2} \int_V \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dV dt = \int_V \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_2) dV \Leftrightarrow \int_V \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_1) dV .$$

Man erhält also für jedes beschränkte Gebiet $V \subset \mathbb{R}^N$ mit lipschitzstetigem Rand ∂V und beliebigen $t_1, t_2 \in [0, \infty), t_1 < t_2$, die Gleichung

$$(1.29) \quad \int_V \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_2) dV \Leftrightarrow \int_V \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_1) dV + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial V} \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) n_i \right) dA dt = 0 .$$

Definition 1.4. Eine verallgemeinerte Lösung der Differentialgleichung (1.19) mit den Anfangswerten (1.25) ist eine stückweise stetig differenzierbare Funktion \mathbf{u} , die die Integralgleichung (1.29) für jedes beschränkte Gebiet $V \subset \mathbb{R}^N$ mit lipschitzstetigem Rand ∂V und beliebigen $t_1, t_2 \in [0, \infty), t_1 < t_2$ und die Anfangswerte (1.25) erfüllt.

G. Bruhn zeigt in [5], daß aus der Gültigkeit des sogenannten schwachen Erhaltungssatzes (1.27) in einem Gebiet $G \subset \mathbb{R}^N \times [0, \infty)$ mit $\mathbf{u}, \mathbf{f} \in L^2(G)$ für jedes Normalgebiet $G_N \subseteq G$ auch die Gültigkeit der Integralform (1.29) des Erhaltungssatzes gilt, wobei er das Randintegral über die Flüsse in der Gleichung (1.29) mit Hilfe einer beliebigen gegen V maßkonvergenten Folge (V_j) von C^2 -Gebieten durch

$$\int_{\partial V} \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) n_i \right) dA := \lim_{j \rightarrow \infty} \int_{\partial V_j} \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) n_i \right) dA$$

definiert.

Die Klasse der schwachen Lösungen ist jedoch zu groß, um eine eindeutige Lösung des Systems (1.19) zu garantieren. Um unter allen möglichen schwachen Lösungen die physikalisch zulässige auszuwählen, muß eine Zusatzbedingung eingeführt werden, die sogenannte Entropiebedingung.

Definition 1.5. Sei D eine konvexe Menge. Dann heißt die konvexe Funktion $U : D \rightarrow \mathbb{R}^1$ Entropiefunktion des Systems (1.19) und die Funktionen $F_1, \dots, F_N : D \rightarrow \mathbb{R}^1$ Entropieflüsse, wenn die Gleichungen

$$(1.30) \quad \text{grad}_{\mathbf{u}} U(\mathbf{u}) \mathcal{A}_i(\mathbf{u}) = \text{grad}_{\mathbf{u}} F_i(\mathbf{u}) \quad , \quad i = 1, \dots, N ,$$

erfüllt sind. Die Bezeichnung $\text{grad}_{\mathbf{u}}$ steht für den Differentialoperator

$$(1.31) \quad \text{grad}_{\mathbf{u}} = \left(\frac{\partial}{\partial u_1}, \frac{\partial}{\partial u_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial u_{N+2}} \right)$$

und die Jacobimatrizen $\mathcal{A}_i(\mathbf{u})$ sind durch die Gleichung (1.21) definiert.

Aus der Bedingung (1.30) folgt für klassische Lösungen der Erhaltungsgleichungen (1.19) direkt die Gültigkeit der zusätzlichen Erhaltungsgleichung

$$(1.32) \quad \frac{\partial U(\mathbf{u})}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial F_j(\mathbf{u})}{\partial x_j} = 0.$$

Für schwache Lösungen gilt diese Aussage nicht mehr. Es können jedoch physikalisch zulässige Lösungen durch die in folgender Definition angegebene Ungleichung ausgewählt werden.

Definition 1.6. *Eine schwache Lösung \mathbf{u} der Gleichung (1.19) ist eine Entropielösung, wenn für alle konvexen Entropiefunktionen $U(\mathbf{u})$ des Systems (1.19) und deren zugehörigen Entropieflüsse $F_j(\mathbf{u})$, die Bedingung*

$$(1.33) \quad \frac{\partial U(\mathbf{u})}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial F_j(\mathbf{u})}{\partial x_j} \leq 0$$

im schwachen Sinn erfüllt ist. Das bedeutet, daß

$$(1.34) \quad \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^N} \left(U(\mathbf{u}) \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \sum_{j=1}^N F_j(\mathbf{u}) \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) dx dt \leq 0$$

$$\forall \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^N \times [0, \infty)) \quad , \quad \varphi \geq 0$$

gilt.

Weitere Formulierungen der Entropiebedingung findet man in [18, 22, 23, 30]. Die hier vorgestellte Formulierung ist bei der Analyse numerischer Verfahren sehr hilfreich. Erfüllt ein numerisches Verfahren eine diskrete Form dieser Entropiebedingung, so kann gezeigt werden, daß dieses Verfahren gegen die Entropielösung konvergiert [17].

Für die Eulergleichungen mit der Zustandsgleichung für ideale Gase erhält man eine Entropiefunktion aus dem Zweiten Hauptsatz der Wärmelehre. Die verbale Formulierung dieses Satzes lautet folgendermaßen.

Zweiter Hauptsatz der Wärmelehre (aus [10]):

„Es ist unmöglich, Wärme von einem kälteren an einen wärmeren Körper übergehen zu lassen, wenn nicht gleichzeitig ein Verbrauch an Arbeit stattfindet.“

Zur mathematischen Formulierung dieser Aussage wird eine weitere Zustandsgröße, die Entropie S , eingeführt. Die Entropie ist der Quotient aus reversibel (umkehrbar) ausgetauschter Wärme und der absoluten Temperatur beim Austausch. Nach dem Ersten Hauptsatz der Wärmelehre [10] ergibt sich die Änderung der inneren Energie $d\varepsilon$ eines

thermodynamischen Systems aus der am System geleisteten Arbeit ($dA = \Leftrightarrow pdV$) und der zugeführten Wärmemenge dq ,

$$(1.35) \quad d\varepsilon = dq + dA .$$

Mit dieser Gleichung gilt für die Entropie

$$(1.36) \quad dS = \frac{d\varepsilon + pdV}{T} .$$

Für das ideale Gas kann die Entropie in der Form

$$(1.37) \quad S = c_V \ln \left(\frac{p}{\varrho^\gamma} \right) + S_0$$

geschrieben werden [10, 32], wobei S_0 eine noch zu bestimmende Konstante ist. Damit läßt sich der Zweite Hauptsatz der Wärmelehre formal schreiben.

Satz 1.1. Zweiter Hauptsatz der Wärmelehre:

In einem geschlossenen, adiabaten System kann die Entropie bei allen natürlichen Vorgängen nur zunehmen, aber niemals abnehmen. Sie kann höchstens im Fall reversibler Vorgänge konstant bleiben. Es gilt somit

$$(1.38) \quad dS \geq 0 .$$

Aus der physikalischen Entropie S läßt sich nun eine Entropiefunktion herleiten. Setzt man in der Gleichung (1.37) $S_0 = 0$, so läßt sich zeigen, daß die Funktion $\Leftrightarrow \varrho S$ strikt konvex ist und daß die Funktionen $\Leftrightarrow \varrho v_j S$, $j = 1, \dots, N$, Entropieflüsse des Systems (1.19) sind. Unter der Voraussetzung der stetigen Differenzierbarkeit der physikalischen Größen gilt die Entropiegleichung

$$(1.39) \quad \frac{\partial(\varrho S)}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial(\varrho v_j S)}{\partial x_j} = 0 .$$

Für schwache Lösungen des Systems (1.19) geht die Entropiebedingung (1.33) über in die Ungleichung

$$(1.40) \quad \frac{\partial(\varrho S)}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial(\varrho v_j S)}{\partial x_j} \geq 0 .$$

Dies stimmt mit dem Zweiten Hauptsatz der Wärmelehre (1.38) überein.

Die letzte Eigenschaft nichtlinearer hyperbolischer Gleichungen, die hier betrachtet wird, ist die Transformationseigenschaft. Sie wird benötigt, da die später vorgestellten mehrdimensionalen Finite-Volumen-Verfahren auf Lösungen spezieller eindimensionaler Anfangswertprobleme basieren. Dazu werden die Integrale über den Rand ∂V des betrachteten

Volumenelements (entspricht der Gitterzelle im numerischen Verfahren) approximiert, indem die Erhaltungsgleichung in Normalenrichtung transformiert wird. Dabei werden wieder speziell die Eulergleichungen betrachtet. Die Herleitung wird für zwei Raumdimensionen angegeben. Der dreidimensionale Fall wird in Anhang A beschrieben.

Das hyperbolische System (1.19) hat in zwei Raumdimensionen die Form

$$(1.41) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{u})}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{f}_2(\mathbf{u})}{\partial x_2} = 0 .$$

Im Fall der Eulergleichungen mit (1.11) ist

$$(1.42) \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho v_1 \\ \varrho v_2 \\ e \end{pmatrix} , \quad \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \varrho v_1 \\ \varrho v_1^2 + p \\ \varrho v_1 v_2 \\ (e + p) v_1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \varrho v_2 \\ \varrho v_1 v_2 \\ \varrho v_2^2 + p \\ (e + p) v_2 \end{pmatrix} .$$

Wir betrachten nun die Flüsse in Richtung der Einheitsnormalen $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$, $|\mathbf{n}| = 1$ bzw. in Richtung der entsprechenden Tangenten $\mathbf{t} = (\Leftrightarrow n_2, n_1)$, die wir mit \mathbf{F}_n und \mathbf{F}_t bezeichnen,

$$(1.43) \quad \begin{aligned} \mathbf{F}_n(\mathbf{u}; \mathbf{n}) &= n_1 \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + n_2 \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) , \\ \mathbf{F}_t(\mathbf{u}; \mathbf{n}) &= \Leftrightarrow n_2 \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + n_1 \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) . \end{aligned}$$

Satz 1.2. *Das System (1.41) ist unter der durch die Transformationsmatrix*

$$(1.44) \quad \mathcal{Q} = \mathcal{Q}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_1 & n_2 & 0 \\ 0 & \Leftrightarrow n_2 & n_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

gegebenen Transformation invariant. Das heißt, es ergibt sich

$$(1.45) \quad \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{q})}{\partial \tilde{x}_1} + \frac{\partial \mathbf{f}_2(\mathbf{q})}{\partial \tilde{x}_2} = 0 ,$$

wobei der Zustandsvektor \mathbf{q} durch

$$(1.46) \quad \begin{aligned} \mathbf{q} := \mathcal{Q}\mathbf{u} &= (\varrho, \varrho \tilde{v}_1, \varrho \tilde{v}_2, e)^T , \\ \tilde{v}_1 &= n_1 v_1 + n_2 v_2 , \quad \tilde{v}_2 = n_1 v_2 \Leftrightarrow n_2 v_1 \end{aligned}$$

und die transformierten Koordinaten durch

$$(1.47) \quad \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ \Leftrightarrow n_2 & n_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

gegeben sind. Die Flüsse \mathbf{f}_1 und \mathbf{f}_2 sind die gleichen Flüsse wie im System (1.41).

Beweis. Für \mathcal{Q} gilt $\mathcal{Q}^{-1} = \mathcal{Q}^T$ und

$$(1.48) \quad \mathcal{Q}\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho(n_1v_1 + n_2v_2) \\ \varrho(\Leftrightarrow n_2v_1 + n_1v_2) \\ e \end{pmatrix},$$

woraus sich nach einigen Umformungen

$$(1.49) \quad \mathbf{F}_n(\mathbf{u}; \mathbf{n}) = \mathcal{Q}^{-1}\mathbf{f}_1(\mathcal{Q}\mathbf{u}) \quad \text{und} \quad \mathbf{F}_t(\mathbf{u}; \mathbf{n}) = \mathcal{Q}^{-1}\mathbf{f}_2(\mathcal{Q}\mathbf{u})$$

ergibt. Wendet man die Transformationsmatrix \mathcal{Q} auf die Gleichung (1.41) an, so ergibt sich mit den Gleichungen (1.46) bis (1.49) nacheinander

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\mathcal{Q}\mathbf{u})}{\partial t} + \mathcal{Q} \left(n_1 \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{u})}{\partial \tilde{x}_1} \Leftrightarrow n_2 \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{u})}{\partial \tilde{x}_2} + n_2 \frac{\partial \mathbf{f}_2(\mathbf{u})}{\partial \tilde{x}_1} + n_1 \frac{\partial \mathbf{f}_2(\mathbf{u})}{\partial \tilde{x}_2} \right) \\ &= \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathcal{Q} \left(\frac{\partial(n_1 \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + n_2 \mathbf{f}_2(\mathbf{u}))}{\partial \tilde{x}_1} + \frac{\partial(\Leftrightarrow n_2 \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + n_1 \mathbf{f}_2(\mathbf{u}))}{\partial \tilde{x}_2} \right) \\ &= \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathcal{Q} \frac{\partial \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{f}_1(\mathcal{Q}\mathbf{u})}{\partial \tilde{x}_1} + \mathcal{Q} \frac{\partial \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{f}_2(\mathcal{Q}\mathbf{u})}{\partial \tilde{x}_2}. \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich direkt, daß der Zustandsvektor \mathbf{q} das System (1.45) erfüllt. \square

Im transformierten System werden also dieselben Flußfunktionen für die transformierten Größen ausgewertet und nach den transformierten Variablen differenziert.

1.3 Das Riemannproblem

In numerischen Verfahren für hyperbolische Differentialgleichungssysteme werden häufig spezielle eindimensionale Cauchyprobleme, sogenannte Riemannprobleme, betrachtet, die im folgenden definiert werden.

Definition 1.7. Unter dem Lösen des Riemannproblems für ein hyperbolisches System

$$(1.50) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = 0 \quad , \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty)$$

versteht man das Auffinden einer schwachen Lösung, die die Anfangsbedingung

$$(1.51) \quad \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{g}(x) = \begin{cases} \mathbf{u}_l, & x < 0 \\ \mathbf{u}_r, & x > 0 \end{cases}$$

erfüllt, wobei \mathbf{u}_l , \mathbf{u}_r gegebene konstante Zustände sind.

Wir betrachten die Struktur der Lösungen des Riemannproblems (1.50), (1.51) für den allgemeinen Fall $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$. Da das System (1.50) hyperbolisch ist, besitzt die Funktionalmatrix $\mathcal{A}(\mathbf{u}) = \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{u}}$ reelle Eigenwerte $a_k(\mathbf{u})$ und einen vollständigen Satz von Rechtseigenvektoren $\mathbf{r}_k(\mathbf{u})$, $k = 1, \dots, m$. Die Schar der Charakteristiken zum Eigenwert a_k wird als k -tes charakteristisches Feld bezeichnet.

Definition 1.8. (aus [21]): *Das k -te charakteristische Feld des Systems von Erhaltungsgleichungen (1.50) heißt streng nichtlinear, falls*

$$(1.52) \quad (\mathbf{r}_k(\mathbf{u}), \text{grad}_{\mathbf{u}} a_k(\mathbf{u})) \neq 0 \quad \forall \mathbf{u}$$

gilt. Gilt demgegenüber

$$(1.53) \quad (\mathbf{r}_k(\mathbf{u}), \text{grad}_{\mathbf{u}} a_k(\mathbf{u})) = 0 \quad \forall \mathbf{u},$$

so heißt das k -te charakteristische Feld linear entartet.

Definition 1.9. (aus [23]): *Eine Unstetigkeit einer stückweise stetig differenzierbaren Lösung der Gleichung (1.50) heißt Stoßwelle, falls ein $k \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq k \leq m$ und ein $s \in \mathbb{R}$ existiert, so daß an jedem Punkt der Unstetigkeitskurve die Eigenwerte von $\mathcal{A}(\mathbf{u})$ den Ungleichungen*

$$(1.54a) \quad a_{k-1}(\mathbf{u}_l) < s < a_k(\mathbf{u}_l)$$

$$(1.54b) \quad a_k(\mathbf{u}_r) < s < a_{k+1}(\mathbf{u}_r)$$

genügen, wobei $a_0(\mathbf{u}_l) := \Leftrightarrow \infty$ und $a_{m+1}(\mathbf{u}_r) := \infty$ im Fall $k = 1$ bzw. $k = m$ gesetzt werden und die Eigenwerte a_1, \dots, a_m der Größe nach sortiert sind. Dann ist s die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Unstetigkeit. Fällt die Ausbreitungskurve mit einer Charakteristik zusammen,

$$(1.55) \quad s = a_k(\mathbf{u}_l) \quad \text{oder} \quad s = a_k(\mathbf{u}_r),$$

so heißt die Unstetigkeit Kontaktunstetigkeit.

Definition 1.10. *Eine Verdünnungswelle ist eine stetige Funktion $\mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}(\xi)$ mit $\xi = x/t$, die in einem Teilgebiet Lösung der Gleichung (1.50) ist und zu einem streng nichtlinearen charakteristischen Feld paßt, d.h. $\mathbf{u}(\xi = a_k(\mathbf{u}_l)) = \mathbf{u}_l$.*

Es existiert eine Lösung des Riemannproblems, falls die Zustände \mathbf{u}_l und \mathbf{u}_r genügend nah beieinander liegen und die Differentialgleichung (1.50) in allen charakteristischen Feldern streng nichtlinear oder linear entartet ist [21]. Die Lösung besteht dann aus $m+1$ konstanten Zuständen, welche durch Stoßwellen, Verdünnungswellen oder Kontaktunstetigkeiten getrennt werden. Eine Kontaktunstetigkeit tritt genau dann auf, wenn das zugehörige charakteristische Feld linear entartet ist.

Im Fall der eindimensionalen Eulergleichungen ($m = 3$) ist das zweite charakteristische Feld linear entartet. Die beiden anderen charakteristischen Felder sind streng nichtlinear [29]. Dies führt auf die in Abb. 1.1 dargestellte Struktur der Riemannlösung. Sie besteht aus vier konstanten Zuständen, getrennt durch zwei nichtlineare Wellen (Stoß- oder Verdünnungswellen) und eine Kontaktunstetigkeit in der Mitte. Das Auftreten von Stoß- oder Verdünnungswellen hängt von den Werten \mathbf{u}_l und \mathbf{u}_r ab. Es läßt sich zeigen, daß Geschwindigkeit und Druck über die Kontaktunstetigkeit konstant bleiben und die Dichte einen Sprung aufweist [25]. Im Fall der Eulergleichungen mit der Zustandsgleichung für ideale Gase läßt sich die exakte Lösung des Riemannproblems in Form einer Fixpunktgleichung angeben [7, 14].

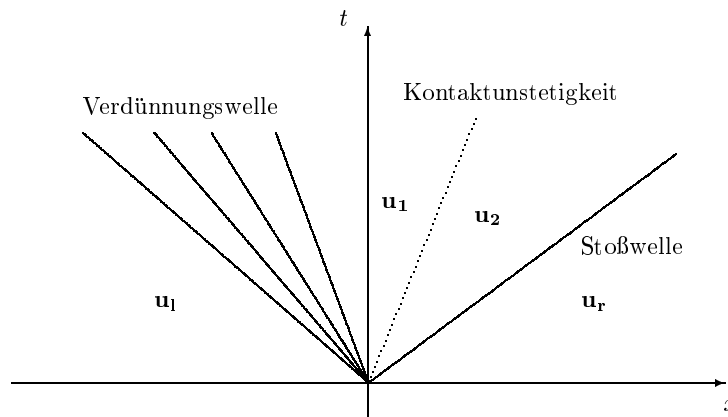


Abbildung 1.1: Die Lösungsstruktur des Riemannproblems für $m = 3$ in der x - t -Ebene.

Kapitel 2

Finite-Volumen-Verfahren

Finite-Volumen-Verfahren stellen eine Approximation der integralen Erhaltungsgleichungen dar. Dadurch haben sie gegenüber anderen Diskretisierungsansätzen, wie zum Beispiel Finite-Differenzen, den Vorteil, daß sie keine Voraussetzungen bzgl. der Stetigkeit der Lösungen machen. Daher eignen sie sich besonders für physikalische Phänomene, bei denen Unstetigkeiten, beispielsweise in Form von Materialgrenzen oder Stoßwellen, auftreten. Ein weiterer Vorteil der Finite-Volumen-Verfahren ist ihre Flexibilität in bezug auf komplexe Geometrien. Im folgenden werden zunächst eindimensionale Verfahren vorgestellt, auf denen anschließend zweidimensionale Verfahren aufgebaut werden.

2.1 Eindimensionale Verfahren

Eindimensionale Godunov-Typ-Verfahren stellen die Grundbausteine für die später verwendeten mehrdimensionalen Verfahren dar. Da in den mehrdimensionalen Finite-Volumen-Verfahren nur die Flußberechnung der eindimensionalen Verfahren benötigt wird, wird hier von einem äquidistanten Gitter im $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_0^+$ ausgegangen. Das heißt, wir betrachten die konstante Raumschrittweite Δx und die Zeitschrittweite Δt . Dann werden die üblichen Abkürzungen

$$(2.1) \quad x_i = i\Delta x \quad , \quad x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} \quad \text{und} \quad t_n = n\Delta t \quad \text{mit} \quad i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}_0$$

verwendet. Wie schon erwähnt, gehen die Godunov-Typ-Verfahren von der integralen Form der Erhaltungsgleichung aus, da sie in der Lage sein sollen, schwache oder verallgemeinerte Lösungen des Anfangswertproblems zu approximieren. Eine explizite Approximation der Integralgleichung (1.29) für eine Raumdimension führt auf die folgende Definition.

Definition 2.1. *Das Näherungsverfahren*

$$(2.2) \quad \mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{g}_{i+1/2}^n \Leftrightarrow \mathbf{g}_{i-1/2}^n)$$

mit dem sogenannten numerischen Fluß

$$(2.3) \quad \mathbf{g}_{i+1/2}^n = \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-k+1}^n, \mathbf{u}_{i-k+2}^n, \dots, \mathbf{u}_{i+k}^n), k \in \mathbb{N},$$

heißt explizites $(2k+1)$ -Punkt-Verfahren in Erhaltungssform, falls \mathbf{g} eine lipschitzstetige Funktion ist und der Konsistenzbedingung

$$(2.4) \quad \mathbf{g}(\underbrace{\mathbf{u}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}}_{2k\text{-mal}}) = \mathbf{f}(\mathbf{u})$$

genügt.

2.1.1 Das Godunov-Verfahren

Godunov [14] konstruierte ein Verfahren, indem er annahm, daß die Näherungslösung zu einem Zeitpunkt t_n konstant innerhalb eines jeden Gitterintervalls ist,

$$(2.5) \quad \mathbf{u}_\Delta(x, t_n) := \mathbf{u}_i^n, \quad x_{i-\frac{1}{2}} \leq x \leq x_{i+\frac{1}{2}}.$$

Dadurch sind an den Rändern der Gitterintervalle lokale Riemannprobleme zu lösen (siehe Kapitel 1.3). Gibt es keine Wechselwirkung zwischen den verschiedenen lokalen Riemannproblemen, so läßt sich die Lösung des Anfangswertproblems (1.50),(2.5) zum Zeitpunkt $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ aus den exakten Lösungen der Riemannprobleme zusammensetzen. Dies führt zu einer Einschränkung des Zeitschritts Δt , das heißt das Anfangswertproblem kann nur für kleine Zeitschritte exakt gelöst werden.

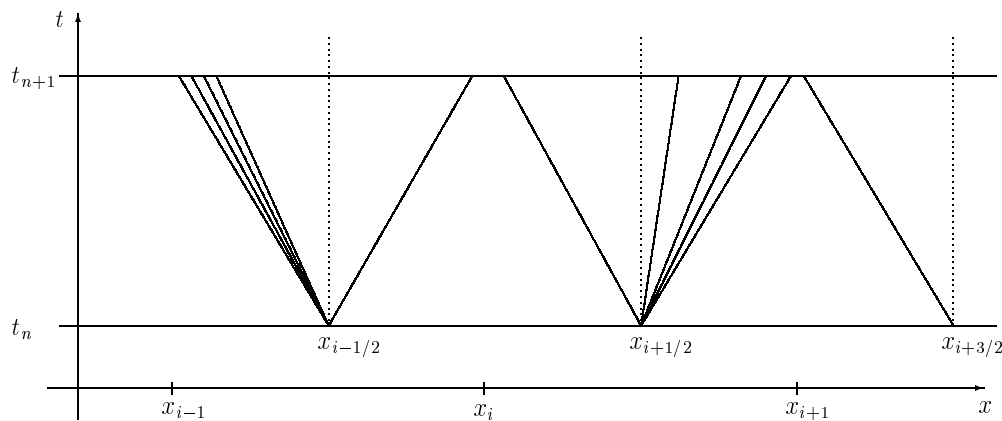


Abbildung 2.1: Lokale Riemannprobleme ohne Wechselwirkung

In der Abbildung 2.1 läßt sich die Bedingung an den Zeitschritt erkennen, sie lautet

$$(2.6) \quad |a_{max}| \leq \frac{\Delta x}{2\Delta t},$$

wobei $|a_{max}|$ die größte Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wellen des Riemannproblems ist. Bezeichnet \mathbf{v} die exakte Lösung des Riemannproblems, so erhält man

$$(2.7) \quad \mathbf{u}_\Delta(x, t) = \mathbf{v} \left(\frac{x \Leftrightarrow x_{i+\frac{1}{2}}}{t \Leftrightarrow t_n}; \mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n \right) \quad \text{für } x_i < x < x_{i+1}, t_n < t \leq t_{n+1}.$$

Damit ergibt sich zum Zeitpunkt t_{n+1} durch Mittelung eine stückweise konstante Näherungslösung zu

$$(2.8) \quad \begin{aligned} \mathbf{u}_i^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} \mathbf{v} \left(\frac{x \Leftrightarrow x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n \right) dx + \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{v} \left(\frac{x \Leftrightarrow x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t}; \mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n \right) dx \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \mathbf{v} \left(\frac{x}{\Delta t}; \mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n \right) dx + \frac{1}{\Delta x} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^0 \mathbf{v} \left(\frac{x}{\Delta t}; \mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n \right) dx. \end{aligned}$$

Dieses Verfahren wird Godunov-Verfahren genannt. Allerdings ist es bei Systemen von Erhaltungsgleichungen häufig nicht oder nur mit sehr großem Aufwand möglich, die exakte Lösung des Riemannproblems zu berechnen. Dieser Aufwand ist jedoch oft nicht gerechtfertigt, da durch die Integration über die exakte Lösung Information verloren geht. Daher versucht man, die exakte Riemannlösung durch eine Näherungslösung mit einfacher Struktur, die sogenannte approximative Riemannlösung, zu ersetzen.

2.1.2 Godunov-Typ-Verfahren

Die Godunov-Typ-Verfahren [17] basieren auf solchen approximativen Riemannlösungen, die im folgenden definiert werden.

Definition 2.2. *Eine Näherung $\mathbf{w} = \mathbf{w}(x/t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r)$ der exakten Lösung des Riemannproblems (1.50), (1.51) heißt approximative Riemannlösung, falls die folgenden Bedingungen erfüllt sind (a_l und a_r bezeichnen die minimale und maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit).*

1. *Konsistenz mit der Integralform der Erhaltungsgleichung, das heißt*

$$(2.9) \quad \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \mathbf{w}(x/\Delta t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) dx = \frac{\Delta x}{2} (\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_r) \Leftrightarrow \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{u}_r) + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{u}_l)$$

für alle $\Delta t < \Delta x / (2 \max(|a_l|, |a_r|))$.

2. Konsistenz mit der Integralform der Entropiebedingung, das heißt

$$(2.10) \quad \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} U \left(\mathbf{w} \left(\frac{x}{\Delta t}; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r \right) \right) dx \leq \frac{\Delta x}{2} (U(\mathbf{u}_l) + U(\mathbf{u}_r)) \Leftrightarrow \Delta t F(\mathbf{u}_r) + \Delta t F(\mathbf{u}_l)$$

für alle $\Delta t < \Delta x / (2 \max(|a_l|, |a_r|))$.

3. Es gilt

$$(2.11) \quad \begin{aligned} \mathbf{w} &= \mathbf{w}(x/t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \mathbf{u}_l \text{ für } x/t \leq a_l, \\ \mathbf{w} &= \mathbf{w}(x/t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \mathbf{u}_r \text{ für } x/t \geq a_r. \end{aligned}$$

Das zugehörige Näherungsverfahren wird Riemannlöser genannt.

In dieser Definition wird vorausgesetzt, daß eine Entropiefunktion U existiert. Dies bedeutet, daß die Existenz einer approximativen Riemannlösung die Existenz einer Entropiefunktion voraussetzt. Mit der approximativen Riemannlösung kann das Godunov-Typ-Verfahren definiert werden.

Definition 2.3. Ein Näherungsverfahren für die Erhaltungsgleichung (1.50) heißt Godunov-Typ-Verfahren, falls die Näherungslösung die Form

$$(2.12) \quad \mathbf{u}_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \mathbf{w} \left(\frac{x}{\Delta t}; \mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n \right) dx + \frac{1}{\Delta x} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^0 \mathbf{w} \left(\frac{x}{\Delta t}; \mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n \right) dx$$

besitzt, wobei \mathbf{w} eine approximative Riemannlösung ist.

Ein Godunov-Typ-Verfahren kann in Erhaltungsform (2.2) geschrieben werden. Der numerische Fluß ist dann durch

$$(2.13) \quad \begin{aligned} \mathbf{g}_{i+1/2} = \mathbf{g}(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_{i+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_i) &\Leftrightarrow \frac{1}{\Delta t} \int_{-\Delta x/2}^0 \mathbf{w}(x/\Delta t; \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_{i+1}) dx + \frac{\Delta x}{2\Delta t} \mathbf{u}_i \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1}) + \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta x/2} \mathbf{w}(x/\Delta t; \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_{i+1}) dx \Leftrightarrow \frac{\Delta x}{2\Delta t} \mathbf{u}_{i+1} \end{aligned}$$

gegeben [29]. Die Erhaltungsform (2.2) mit den Flüssen (2.13) ist gültig, solange Wellen vom Punkt $x_{i+\frac{1}{2}}$ solche von $x_{i-\frac{1}{2}}$ nicht erreichen. Verzichtet man also auf die Darstellungsformel (2.8), so kann die Bedingung (2.6) durch die übliche Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung oder kurz CFL-Bedingung

$$(2.14) \quad \frac{\Delta t}{\Delta x} |a_{\max}| \leq 1$$

ersetzt werden [29].

Im folgenden werden zwei Godunov-Typ-Verfahren vorgestellt. Das erste geht auf Roe [34, 35] zurück und wird daher als Roe-Verfahren bezeichnet. Er konstruierte einen speziellen approximativen Riemannlöser, indem er die exakte Riemannlösung durch die exakte Lösung des linearisierten Riemannproblems

$$(2.15) \quad \mathbf{u}_t + \mathcal{A}_{lr} \mathbf{u}_x = 0 \quad , \quad \mathbf{u}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{u}_l, & x < 0 \\ \mathbf{u}_r, & x > 0 \end{cases}$$

ersetzte. Die sogenannte Roe-Matrix $\mathcal{A}_{lr} = \mathcal{A}_{lr}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r)$ muß mit der Funktionalmatrix konsistent sein, d.h. $\mathcal{A}_{lr}(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \mathcal{A}(\mathbf{u})$. Sie muß reelle Eigenwerte mit einem vollständigen Satz linear unabhängiger Eigenvektoren besitzen und die Mittelwertseigenschaft

$$(2.16) \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}_l) \Leftrightarrow \mathbf{f}(\mathbf{u}_r) = \mathcal{A}_{lr}(\mathbf{u}_l \Leftrightarrow \mathbf{u}_r)$$

erfüllen. Harten, Lax und van Leer [17] haben gezeigt, daß jedes System von Erhaltungsgleichungen, das eine Entropiefunktion besitzt, eine Linearisierung mit den genannten Eigenschaften zuläßt.

Das Anfangswertproblem (2.15) läßt sich mit Hilfe der Charakteristikentheorie lösen [25]. Setzt man diese Lösung in die Gleichung für den numerischen Fluß (2.13) ein, so ergibt sich

$$(2.17) \quad \mathbf{g}_{\text{roe}}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \frac{1}{2} (\mathbf{f}(\mathbf{u}_l) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_r)) \Leftrightarrow \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N+2} |a_{\text{roe},i}| \beta_i \mathbf{r}_{\text{roe},i} .$$

Dabei ist $a_{\text{roe},i}$ der i -te Eigenwert der Roe-Matrix, $\mathbf{r}_{\text{roe},i}$ der zugehörige Rechtseigenvektor und β_i sind die Koeffizienten von

$$(2.18) \quad \mathbf{u}_r \Leftrightarrow \mathbf{u}_l = \sum_{i=1}^{N+2} \beta_i \mathbf{r}_{\text{roe},i} .$$

Für die eindimensionalen Eulergleichung (1.11) mit einer allgemeinen Zustandsgleichung $p = p(\varrho, \varepsilon)$ lautet die Jacobimatrix

$$(2.19) \quad \mathcal{A}(\mathbf{u}) = \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \Leftrightarrow v^2 + p_\varrho + \left(\frac{v^2}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{e}{\varrho^2}\right) p_\varepsilon & 2v \Leftrightarrow \frac{v}{\varrho} p_\varepsilon & \frac{1}{\varrho} p_\varepsilon \\ \Leftrightarrow v H + v p_\varrho + \left(\frac{v^3}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{v e}{\varrho^2}\right) p_\varepsilon & H \Leftrightarrow \frac{v^2}{\varrho} p_\varepsilon & v + \frac{v}{\varrho} p_\varepsilon \end{pmatrix}$$

mit der Enthalpie $H := \frac{e+p}{\varrho}$ und den thermodynamischen Ableitungen $p_\varrho := \frac{\partial p}{\partial \varrho}$ und $p_\varepsilon := \frac{\partial p}{\partial \varepsilon}$. Daraus lassen sich die Eigenwerte

$$(2.20) \quad a_{\text{roe},1} = v \Leftrightarrow c, \quad a_{\text{roe},2} = v \quad \text{und} \quad a_{\text{roe},3} = v + c \\ \text{mit} \quad c^2 = \frac{p p_\varepsilon}{\varrho^2} + p_\varrho$$

und die Eigenvektoren

$$(2.21) \quad \mathbf{r}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ v \Leftrightarrow c \\ H \Leftrightarrow vc \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ H \Leftrightarrow \frac{\varrho c^2}{p_\varepsilon} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ v + c \\ H + vc \end{pmatrix}$$

berechnen [34].

Mit dem Ansatz $\mathcal{A}_{lr} = \mathcal{A}(\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r))$ lassen sich die sogenannten Roe-Mittelwerte, das heißt die Komponenten von $\bar{\mathbf{u}}$ aus der Bedingung (2.16) berechnen. Durch diesen Ansatz ist gewährleistet, daß die Eigenwerte reell sind und ein vollständiger Satz linear unabhängiger Eigenvektoren existiert. Setzt man diese Mittelwerte in die Gleichungen (2.20) und (2.21) ein, so erhält man aus (2.18) die Koeffizienten β_i und damit den numerischen Fluß nach (2.17). Die Roe-Mittelwerte sind jedoch nicht eindeutig bestimmt. Insbesondere bei Verwendung einer allgemeinen Zustandsgleichung gibt es in der Literatur mehrere Vorschläge zur Berechnung der Mittelwerte der thermodynamischen Ableitungen [13, 26]. In der folgenden Bemerkung fassen wir die Ergebnisse von Roe [34] und von Liou, van Leer und Shuen [26] zusammen.

Bemerkung 2.1. *Für die Eulergleichungen existiert im Fall einer allgemeinen Zustandsgleichung der Form $p = p(\varrho, \varepsilon)$ eine Roe-Matrix, die durch die folgenden Mittelwerte bestimmt ist,*

$$(2.22) \quad \begin{aligned} \bar{\varrho} &= \sqrt{\varrho_l \varrho_r}, \quad \bar{v} = \frac{\sqrt{\varrho_l} v_l + \sqrt{\varrho_r} v_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}, \quad \bar{H} = \frac{\sqrt{\varrho_l} H_l + \sqrt{\varrho_r} H_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}, \\ \bar{\varepsilon} &= \frac{\sqrt{\varrho_l} \varepsilon_l + \sqrt{\varrho_r} \varepsilon_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}, \quad \bar{p} = \bar{\varrho} \left(\bar{H} \Leftrightarrow \bar{\varepsilon} \Leftrightarrow \frac{1}{2} \bar{v}^2 \right), \\ \bar{p}_\varrho &= \tilde{p}_\varrho + \omega \frac{\delta p}{\Delta \varrho}, \quad \bar{p}_\varepsilon = \tilde{p}_\varepsilon + (1 \Leftrightarrow \omega) \frac{\delta p}{\Delta \varepsilon} \quad \text{und} \quad \bar{c} = \sqrt{\frac{\bar{p} \bar{p}_\varepsilon}{\bar{\varrho}^2} + \bar{p}_\varrho} \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{p}_\varrho &:= p_\varrho(\bar{\varrho}, \bar{\varepsilon}), \quad \tilde{p}_\varepsilon := p_\varepsilon(\bar{\varrho}, \bar{\varepsilon}), \quad \delta p = \Delta p \Leftrightarrow \tilde{p}_\varrho \Delta \varrho \Leftrightarrow \tilde{p}_\varepsilon \Delta \varepsilon \\ \text{und} \quad \omega &= \frac{|\tilde{p}_\varrho \Delta \varrho|}{|\tilde{p}_\varrho \Delta \varrho| + |\tilde{p}_\varepsilon \Delta \varepsilon|}. \end{aligned}$$

Die Koeffizienten der Gleichung (2.18) lauten

$$(2.23) \quad \beta_1 = \frac{1}{2\bar{c}^2} (\Delta p \Leftrightarrow \bar{\varrho} \bar{c} \Delta v), \quad \beta_2 = \Delta \varrho \Leftrightarrow \frac{1}{\bar{c}^2} \Delta p \quad \text{und} \quad \beta_3 = \frac{1}{2\bar{c}^2} (\Delta p + \bar{\varrho} \bar{c} \Delta v).$$

Der Wert ω wurde so gewählt, daß die Grenzwerte

$$\lim_{\Delta \varrho \rightarrow 0} \frac{\omega}{\Delta \varrho} \quad \text{und} \quad \lim_{\Delta \varepsilon \rightarrow 0} \frac{1 \Leftrightarrow \omega}{\Delta \varepsilon}$$

existieren. Mit diesen Mittelwerten läßt sich dann der numerische Fluß nach Gleichung (2.17) berechnen.

Betrachtet man die eindimensionalen Eulergleichungen zusammen mit der Tait-Zustandsgleichung, die den Zusammenhang zwischen Dichte und Druck im Wasser beschreibt, so lassen sich die Massen- und Impulserhaltungsgleichung unabhängig von der Energiegleichung lösen, da der Druck nur von der Dichte abhängt und nicht von der inneren Energie. Die Tait-Zustandsgleichung lautet

$$(2.24) \quad p = p(\varrho) = B \left(\left(\frac{\varrho}{\varrho_0} \right)^N \Leftrightarrow 1 \right),$$

wobei B , ϱ_0 und N Konstanten sind. Man erhält also ein 2×2 -System mit $\mathbf{u} = (\varrho, \varrho v)^T$ und $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = (\varrho v, \varrho v^2 + p)^T$. Um das Roe-Verfahren (2.15) auf dieses System anzuwenden, benötigt man die Jacobi-Matrix

$$(2.25) \quad \mathcal{A}(\mathbf{u}) = \frac{d\mathbf{f}(\mathbf{u})}{d\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \Leftrightarrow v^2 + p_\varrho & 2v \end{pmatrix}.$$

Mit $c = \sqrt{p_\varrho}$ ergeben sich die Eigenwerte $a_1 = v \Leftrightarrow c$, $a_2 = v + c$ und die Matrix der Rechtseigenvektoren

$$(2.26) \quad \mathcal{R} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v \Leftrightarrow c & v + c \end{pmatrix}.$$

Aus der Mittelwertseigenschaft (2.16) mit $\mathcal{A}_{\mathbf{r}} = \mathcal{A}(\bar{\mathbf{u}})$ erhält man die Bedingungen

$$(2.27) \quad \bar{v} = \frac{\sqrt{\varrho_l} v_l \Leftrightarrow \sqrt{\varrho_r} v_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}$$

und

$$(2.28) \quad \bar{c}^2 (\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) = p_r \Leftrightarrow p_l.$$

Die Bedingung (2.28) ist für $\varrho_r = \varrho_l$ automatisch erfüllt, und für $\varrho_r \neq \varrho_l$ gilt

$$(2.29) \quad \bar{c}^2 = \frac{p_r \Leftrightarrow p_l}{\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l}.$$

Mit diesen beiden Mittelwerten ist die Roe-Matrix vollständig bestimmt und erfüllt die Mittelwertseigenschaft. Mit der Definition

$$(2.30) \quad \bar{c}^2 := \begin{cases} \frac{p_r - p_l}{\varrho_r - \varrho_l} & \text{für } \varrho_r \neq \varrho_l \\ p_\varrho(\varrho_r) & \text{für } \varrho_r = \varrho_l \end{cases}$$

erfüllt die Roe-Matrix auch die Konsistenzbedingung, denn mit $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_l =: \mathbf{u}^*$ gilt

$$(2.31) \quad \bar{v} = v^* \quad \text{und} \quad \bar{c} = \sqrt{p_\varrho(\varrho^*)} = c^* .$$

Außerdem gilt $\lim_{\varrho_r \rightarrow \varrho_l} \frac{p_r - p_l}{\varrho_r - \varrho_l} = p_\varrho(\varrho_l)$, das heißt \bar{c} ist stetig. Die Koeffizienten aus der Gleichung (2.18) berechnen sich zu

$$(2.32) \quad \beta_1 = \frac{(\bar{v} + \bar{c})(\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) \Leftrightarrow (\varrho_r v_r \Leftrightarrow \varrho_l v_l)}{2\bar{c}}, \quad \beta_2 = \frac{(\varrho_r v_r \Leftrightarrow \varrho_l v_l) \Leftrightarrow (\bar{v} \Leftrightarrow \bar{c})(\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l)}{2\bar{c}} .$$

Auch das Roe-Verfahren ist noch sehr aufwendig. Eine weitere Vereinfachung erhält man, wenn man alle mittleren Zustände in der Riemannlösung durch einen einzigen ersetzt. Das dadurch entstehende Godunov-Typ-Verfahren wurde von Harten, Lax und van Leer entwickelt [17]. Es basiert auf einer nur aus drei konstanten Zuständen bestehenden approximativen Riemannlösung der Form

$$(2.33) \quad \mathbf{w}(x/t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{für } x/t < a_l \\ \mathbf{u}_{lr} & \text{für } a_l < x/t < a_r \\ \mathbf{u}_r & \text{für } x/t > a_r \end{cases} .$$

Der mittlere Zustand \mathbf{u}_{lr} ergibt sich aus der Konsistenz mit der Integralform der Erhaltungsgleichung (2.9). Aus Gleichung (2.13) berechnet sich dann der numerische Fluß zu

$$(2.34) \quad \mathbf{g}_{\text{hll}}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \frac{a_r^+ \mathbf{f}(\mathbf{u}_l) \Leftrightarrow a_l^- \mathbf{f}(\mathbf{u}_r)}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} + \frac{a_r^+ a_l^-}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} (\mathbf{u}_r \Leftrightarrow \mathbf{u}_l)$$

mit

$$(2.35) \quad a_r^+ = \max(0, a_r) \quad , \quad a_l^- = \min(0, a_l) .$$

Hierbei müssen die Signalgeschwindigkeiten a_l, a_r geeignet gewählt werden. Eine Möglichkeit, die von Einfeldt [9] vorgeschlagen wurde, ist

$$(2.36) \quad a_l = \min\{a_{roe,1}, a_1(\mathbf{u}_l)\} \quad , \quad a_r = \max\{a_{roe,N+2}, a_{N+2}(\mathbf{u}_r)\} .$$

Die Annahme nur eines mittleren Zustands in der Riemannlösung führt zu zusätzlicher numerischer Dämpfung, besonders an Kontaktunstetigkeiten. Um eine bessere Auflösung der Kontaktunstetigkeiten zu erhalten, ersetzte Einfeldt [9] den konstanten mittleren Zustand in der Riemannlösung durch einen in x/t linearen Zustand. Dieses Verfahren wird HLLEM-Verfahren (Einfeldt-Modifikation des HLL-Verfahrens) genannt. Für $N = 1$ hat die so modifizierte Riemannlösung die Form

$$(2.37) \quad \mathbf{w}(x/t; \mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \begin{cases} \mathbf{u}_l & \text{für } x/t < a_l \\ \mathbf{u}_{lr} + b \left(\frac{x}{t} \Leftrightarrow d \right) \beta_2(\bar{\mathbf{u}}) \mathbf{r}_2(\bar{\mathbf{u}}) & \text{sonst} \\ \mathbf{u}_r & \text{für } x/t > a_r \end{cases} .$$

Dabei ist $\bar{\mathbf{u}}$ ein Mittelwert für die Erhaltungsgröße (z.B. der Roe-Mittelwert), \mathbf{r}_2 der zweite Rechtseigenvektor der Funktionalmatrix des Flusses und β_2 der Koeffizient, der sich aus der Gleichung (2.18) ergibt. Die Größen b und d ergeben sich aus der Konsistenzbedingung (2.9) und der Forderung, daß an einer Kontaktunstetigkeit

$$\mathbf{g}_{\text{hllem}} = \mathbf{g}_{\text{roe}} = \mathbf{f}_{\text{exakt}}$$

gilt. Sie lauten

$$(2.38) \quad d = \frac{a_r + a_l}{2} \quad \text{und} \quad b = \frac{2}{a_r \leftrightarrow a_l},$$

woraus sich der numerische Fluß zu

$$(2.39) \quad \mathbf{g}_{\text{hllem}}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) = \mathbf{g}_{\text{hl}}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) \leftrightarrow \frac{a_r a_l}{a_r \leftrightarrow a_l} \beta_2(\bar{\mathbf{u}}) \mathbf{r}_2(\bar{\mathbf{u}})$$

ergibt.

2.2 Diskretisierung in zwei Raumdimensionen

Nun werden die im letzten Abschnitt vorgestellten Verfahren auf zwei Raumdimensionen erweitert. Dabei beschränken wir uns auf strukturierte Vierecksgitter. Die Verfahren lassen sich jedoch ohne Probleme auf drei Raumdimensionen und andere Gittertypen, wie unstrukturierte Gitter, erweitern.

Wir betrachten die Finite-Volumen-Diskretisierung des Systems

$$(2.40) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{f}_2}{\partial y} = 0 \quad \text{in} \quad V \times (0, T)$$

mit $V \subset \mathbb{R}^2$, $0 < T < \infty$, \mathbf{u} und \mathbf{f}_i nach (1.42) und der Anfangsbedingung

$$(2.41) \quad \mathbf{u}(x, y, 0) = \mathbf{g}(x, y), \quad (x, y) \in V.$$

Sie basiert auf der verallgemeinerten Lösung dieses Systems, die in Definition 1.4 vereinbart ist. Zunächst wird beschrieben, was unter einem Finite-Volumen-Gitter zu verstehen ist und einige Bezeichnungen eingeführt. Bei strukturierten Vierecksgittern wird das gesamte Rechengebiet V in Viereckszellen V_{ij} , $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$, eingeteilt. Jede Zelle, die nicht am Rand liegt, hat als Nachbarn genau die Zellen $V_{i-1,j}$, $V_{i+1,j}$, $V_{i,j-1}$ und $V_{i,j+1}$ (siehe Abbildung 2.2).

Man kann diesen Zusammenhang auch etwas allgemeiner formulieren [11]. Mit V_h wird eine polygonale Approximation des Gebietes V bezeichnet. Dann wird das System $\mathcal{V}_h = \{V_{ij}\}_{i \in \{1, \dots, n\}, j \in \{1, \dots, m\}}$ als strukturiertes Vierecksgitter auf \bar{V}_h bezeichnet, wenn die V_{ij} abgeschlossene konvexe Vierecke mit den folgenden Eigenschaften sind:

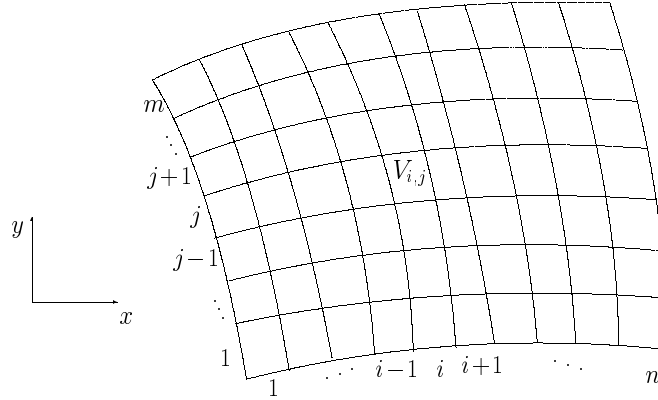


Abbildung 2.2: Strukturiertes Vierecksgitter

- $\bar{V}_h = \bigcup_{\substack{i \in \{1, \dots, n\} \\ j \in \{1, \dots, m\}}} V_{ij}$
- Aus $V_{ij}, V_{kl} \in \mathcal{V}_h, V_{ij} \neq V_{kl} (\Leftrightarrow i \neq k \wedge j \neq l)$
folgt $V_{ij} \cap V_{kl} = \emptyset$ oder
 $V_{ij} \cap V_{kl}$ ist eine gemeinsame Seite ($\Leftrightarrow (i = k \pm 1 \wedge j = l) \vee (i = k \wedge j = l \pm 1)$)
oder $V_{ij} \cap V_{kl}$ ist ein gemeinsamer Eckpunkt ($\Leftrightarrow i = k \pm 1 \wedge j = l \pm 1$).

Wenn V_{ij} und V_{kl} eine gemeinsame Seite besitzen, werden sie als Nachbarn bezeichnet. Die Elemente $V_{ij} \in \mathcal{V}_h$ heißen Finite-Volumen oder Gitterzellen. Die Gitterzelle V_{ij} wird durch die vier Eckpunkte

$$\begin{pmatrix} x_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \\ y_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \\ y_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ y_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ y_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

festgelegt.

Der Rand der Zelle kann durch die Seiten des Vierecks V_{ij} beschrieben werden,

$$\partial V_{ij} = S_{ij,1} \cup S_{ij,2} \cup S_{ij,3} \cup S_{ij,4}$$

mit

$$(2.42) \quad \begin{aligned} S_{ij,1} &:= \begin{pmatrix} x_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \\ y_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \\ y_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, & S_{ij,2} &:= \begin{pmatrix} x_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \\ y_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ y_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \\ S_{ij,3} &:= \begin{pmatrix} x_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ y_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ y_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, & S_{ij,4} &:= \begin{pmatrix} x_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \\ y_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ y_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

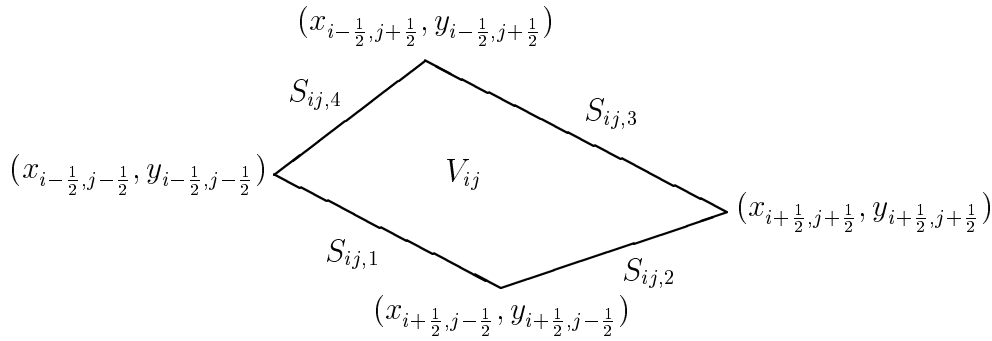


Abbildung 2.3: Gitterzelle eines allgemeinen strukturierten Vierecksgitters

Eine solche Zelle ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Für die gemeinsame Seite benachbarter Gitterzellen gilt somit (siehe Abbildung 2.4)

$$(2.43) \quad V_{ij} \cap V_{i,j+1} = S_{ij,3} = S_{i,j+1,1} \quad \text{bzw.} \quad V_{ij} \cap V_{i+1,j} = S_{ij,2} = S_{i+1,j,4} .$$

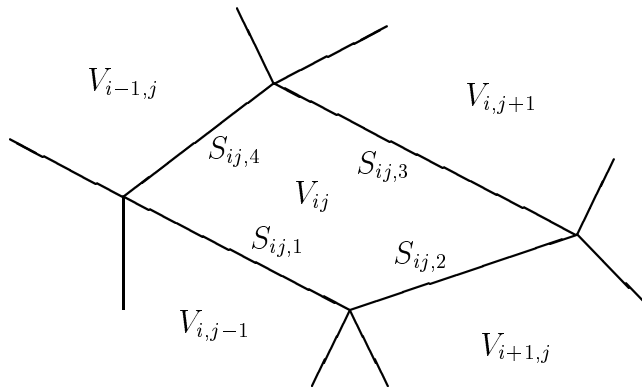


Abbildung 2.4: Gitterzelle mit ihren Nachbarn

Mit $\mathbf{n}_{ij,\alpha} = (n_{1,ij,\alpha}, n_{2,ij,\alpha})$, $\alpha = 1, \dots, 4$ wird die äußere Einheitsnormale von V_{ij} auf die Seite $S_{ij,\alpha}$ bezeichnet. Damit gilt auch

$$(2.44) \quad \mathbf{n}_{ij,3} = \Leftrightarrow \mathbf{n}_{i,j+1,1} \quad \text{und} \quad \mathbf{n}_{ij,2} = \Leftrightarrow \mathbf{n}_{i+1,j,4} .$$

Der Flächeninhalt von V_{ij} wird mit $|V_{ij}|$ bezeichnet und die Länge der Seite $S_{ij,\alpha}$ mit $l_{ij,\alpha} = |S_{ij,\alpha}|$. Desweiteren wird der betrachtete Zeitraum in Intervalle $[t_n, t_{n+1}]$ zerlegt.

Zur Diskretisierung greift man auf die Definition 1.4 der verallgemeinerten Lösung zurück. Man betrachtet also die Gleichung (1.29) mit $V := V_{ij}$, $t_1 := t_n$ und $t_2 := t_{n+1}$ und erhält

$$(2.45) \quad \int_{V_{ij}} \mathbf{u}(x, y, t_{n+1}) dx dy \Leftrightarrow \int_{V_{ij}} \mathbf{u}(x, y, t_n) dx dy \\ + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{k=1}^4 \int_{S_{ij,k}} [n_{1,ij,k} \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + n_{2,ij,k} \mathbf{f}_2(\mathbf{u})] dS dt = 0 .$$

In einem numerischen Verfahren müssen nun geeignete Approximationen für die Integrale in (2.45) gefunden werden. Wir wählen

$$(2.46) \quad \int_{V_{ij}} \mathbf{u}(x, y, t_n) dx dy \approx |V_{ij}| \mathbf{u}_{ij}^n$$

und

$$(2.47) \quad \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{S_{ij,k}} [n_{1,ij,k} \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) + n_{2,ij,k} \mathbf{f}_2(\mathbf{u})] dS dt \approx \Delta t \mathbf{h}_{ij,k}^n l_{ij,k} .$$

Dabei ist \mathbf{u}_{ij}^n eine Approximation des Mittelwerts der exakten Lösung \mathbf{u} in der Gitterzelle V_{ij} zur Zeit t_n . Der numerische Fluß $\mathbf{h}_{ij,k}$ ist eine vektorwertige Funktion, die von den Näherungswerten der Erhaltungsgröße \mathbf{u} in den benachbarten Gitterzellen abhängt. Der Zeitschritt Δt ist definiert durch $\Delta t := t_{n+1} - t_n$. Wir bezeichnen nun mit \mathbf{u} den Näherungswert in der Gitterzelle V_{ij} und mit \mathbf{v} denjenigen in der benachbarten Gitterzelle mit gemeinsamer Seite $S_{ij,k}$ und gehen davon aus, daß der Fluß nur von den Werten in den direkt benachbarten Gitterzellen abhängt. Dann werden an den numerischen Fluß $\mathbf{h}_{ij,k} = \mathbf{h}_{ij,k}(\mathbf{u}, \mathbf{v}; \mathbf{n})$ die folgenden Bedingungen gestellt:

a) $\mathbf{h}_{ij,k}(\mathbf{u}, \mathbf{v}; \mathbf{n})$ ist definiert und stetig auf $D \times D \times K_1$ mit D nach (1.12) für $N = 2$ und $K_1 = \{\mathbf{n} = (n_x, n_y); |\mathbf{n}| = 1\}$.

b) $\mathbf{h}_{ij,k}$ ist konsistent mit dem physikalischen Fluß, das heißt

$$(2.48) \quad \mathbf{h}_{ij,k}(\mathbf{u}, \mathbf{u}; \mathbf{n}) = \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_{xij,k} + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_{yij,k} , \quad \mathbf{u} \in D , \quad \mathbf{n} \in K_1 .$$

c) $\mathbf{h}_{ij,k}$ ist konservativ, das heißt

$$(2.49) \quad \mathbf{h}_{ij,k}(\mathbf{u}, \mathbf{v}; \mathbf{n}) = -\mathbf{h}_{ij,k}(\mathbf{u}, \mathbf{v}; -\mathbf{n}) , \quad \mathbf{u} \in D , \quad \mathbf{n} \in K_1 .$$

Die Konservativitätseigenschaft (2.49) garantiert die lokale Erhaltung. Dies bedeutet, daß die Menge einer Größe, die aus einer Zelle herausströmt in die benachbarte Zelle hineinströmen muß. Dies kann im numerischen Verfahren ausgenutzt werden, da dann die numerischen Flüsse benachbarter Gitterzellen durch die gemeinsame Seite nur einmal berechnet werden müssen.

Es gibt mehrere Methoden zur Bestimmung des numerischen Flusses, die jeweils auf eindimensionale Verfahren zurückgreifen. Ein Lösungsweg basiert auf der Aufspaltung in die einzelnen Dimensionen. Dabei betrachtet man Verfahren für die beiden Systeme

$$(2.50) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{u})}{\partial x_1} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_2(\mathbf{u})}{\partial x_2} = 0 .$$

Sind $\mathbf{h}_1(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ und $\mathbf{h}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ die numerischen Flüsse dieser Verfahren, dann lautet der numerische Fluß des Gesamtverfahrens

$$(2.51) \quad \mathbf{h}_{\mathbf{ij},\mathbf{k}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}; \mathbf{n}) = \mathbf{h}_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}) n_{1,\mathbf{ij},\mathbf{k}} + \mathbf{h}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) n_{2,\mathbf{ij},\mathbf{k}} .$$

Eine weitere Möglichkeit ist, auf die in Kapitel 2.1 vorgestellten eindimensionalen Godunov-Typ-Verfahren zurückzugreifen. Dabei geht man von der in Kapitel 1.2 beschriebenen Transformation aus und betrachtet von der tangentialen Richtung \tilde{x}_2 unabhängige Lösungen der Gleichung (1.45), das heißt Lösungen von

$$(2.52) \quad \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{q})}{\partial \tilde{x}_1} = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^1 \times (0, \infty) ,$$

die die Anfangsbedingungen

$$(2.53) \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}, 0) = \begin{cases} \mathbf{q}_l = \mathcal{Q}\mathbf{u}_l & \text{für } \tilde{x}_1 < 0 \\ \mathbf{q}_r = \mathcal{Q}\mathbf{u}_r & \text{für } \tilde{x}_1 > 0 \end{cases}$$

erfüllen.

Wie im eindimensionalen Fall wird an jedem Zellrand ein Riemannproblem der Form (2.52), (2.53) gelöst. Der nach einem der in Kapitel 2.1 angegebenen Verfahren aus den Riemannproblemen berechnete Fluß $\mathbf{f}_R(\mathbf{q}_l, \mathbf{q}_r)$ kann dann als Approximation der pro Zeiteinheit von einer Zelle in die Nachbarzelle entlang der Normalen transportierten Menge der Größe \mathbf{q} angesehen werden. Dann wird die Menge der Größe \mathbf{u} , die z.B. von V_{ij} nach $V_{i+1,j}$ durch die Seite $S_{ij,2}$ pro Zeiteinheit transportiert wird, durch $l_{ij,2} \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{f}_R(\mathcal{Q}\mathbf{u}_{ij}^n, \mathcal{Q}\mathbf{u}_{i+1,j}^n)$ approximiert, was auf den numerischen Fluß

$$(2.54) \quad \mathbf{h}_{\mathbf{ij},2}(\mathbf{u}_{ij}^n, \mathbf{u}_{i+1,j}^n; \mathbf{n}_{\mathbf{ij},2}) = \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{f}_R(\mathcal{Q}\mathbf{u}_{ij}^n, \mathcal{Q}\mathbf{u}_{i+1,j}^n)$$

führt oder allgemein auf den rücktransformierten Fluß

$$(2.55) \quad \mathbf{h}_{\mathbf{ij},\mathbf{k}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}; \mathbf{n}) = \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{f}_R(\mathcal{Q}\mathbf{u}, \mathcal{Q}\mathbf{v}) \quad , \quad \mathbf{u}, \mathbf{v} \in D \quad , \quad \mathbf{n} \in K_1 .$$

Im folgenden werden diese zweidimensionalen Godunov-Typ-Verfahren auf unterschiedlichen strukturierten Vierecksgittern vorgestellt. Dabei wird gezeigt, wie sich die Struktur des Gitters auf die Approximation auswirkt. In der vorliegenden Arbeit wird zwischen kartesischen Gittern, allgemeinen strukturierten Vierecksgittern und zeitlich veränderlichen, sogenannten „bewegten“ Gittern unterschieden.

2.2.1 Kartesische Gitter

Ein zweidimensionales kartesisches Gitter ist ein Rechteckgitter in der x - y -Ebene mit achsenparallelen Gitterlinien. Das gesamte Rechengebiet wird also in die Gitterzellen

$$(2.56) \quad V_{ij} = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$$

mit den Seitenlängen Δx_i und Δy_j geteilt, der Zeitschritt wird mit $\Delta t := t_{n+1} \Leftrightarrow t_n$ bezeichnet. Der integrale Mittelwert in einer solchen Gitterzelle wird definiert durch

$$(2.57) \quad \mathbf{u}_{ij}^n := \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{u}(x, y, t_n) dx dy.$$

Die Integralgleichung (1.29) mit einer solchen Gitterzelle als Integrationsgebiet und einem Zeitschritt Δt lautet

$$(2.58) \quad \begin{aligned} & \Delta x_i \Delta y_j (\mathbf{u}_{ij}^{n+1} \Leftrightarrow \mathbf{u}_{ij}^n) \\ & + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [\mathbf{f}_2(\mathbf{u}(x, y_{j+1/2}, t)) \Leftrightarrow \mathbf{f}_2(\mathbf{u}(x, y_{j-1/2}, t))] dx dt \\ & + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} [\mathbf{f}_1(\mathbf{u}(x_{i+1/2}, y, t)) \Leftrightarrow \mathbf{f}_1(\mathbf{u}(x_{i-1/2}, y, t))] dy dt = 0. \end{aligned}$$

Gesucht sind nun Näherungen für die obigen Integrale, das heißt Näherungen für die Mittelwerte der physikalischen Flüsse in x - bzw. y -Richtung über einen Zeitschritt und die entsprechende Seite einer Gitterzelle V_{ij} . Solche Näherungen werden numerische Flüsse genannt und hier mit \mathbf{g} und \mathbf{h} bezeichnet. Mit

$$(2.59) \quad \begin{aligned} \mathbf{g}_{i+1/2,j}^n & \approx \frac{1}{\Delta t \Delta y_j} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \mathbf{f}_1(\mathbf{u}(x_{i+1/2}, y, t)) dy dt, \\ \mathbf{h}_{i,j+1/2}^n & \approx \frac{1}{\Delta t \Delta x_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{f}_2(\mathbf{u}(x, y_{j+1/2}, t)) dx dt \end{aligned}$$

ergibt sich dann die Näherungslösung

$$(2.60) \quad \mathbf{u}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{u}_{i,j}^n \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (\mathbf{g}_{i+1/2,j}^n \Leftrightarrow \mathbf{g}_{i-1/2,j}^n) \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{\Delta y_j} (\mathbf{h}_{i,j+1/2}^n \Leftrightarrow \mathbf{h}_{i,j-1/2}^n) .$$

Genügen die numerischen Flüsse gewissen Konsistenzbedingungen, die sich analog zum eindimensionalen Fall formulieren lassen, so liegt ein Verfahren in Erhaltungsform vor.

Definition 2.4. *Das Verfahren (2.60) mit den numerischen Flüssen*

$$(2.61) \quad \begin{aligned} \mathbf{g}_{i+1/2,j} &= \mathbf{g}(\mathbf{u}_{i-k+1,j}, \dots, \mathbf{u}_{i+k,j}) \quad , \quad k \geq 1 \\ \mathbf{h}_{i,j+1/2} &= \mathbf{h}(\mathbf{u}_{i,j-k+1}, \dots, \mathbf{u}_{i,j+k}) \quad , \quad k \geq 1 \end{aligned}$$

heißt Verfahren in Erhaltungsform, wenn die numerischen Flüsse in allen Argumenten lipschitzstetig und konsistent mit den physikalischen Flüssen sind, das heißt

$$\mathbf{g}(\underbrace{\mathbf{u}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}}_{2k\text{-mal}}) = \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) \quad , \quad \mathbf{h}(\underbrace{\mathbf{u}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}}_{2k\text{-mal}}) = \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) .$$

Um das Cauchyproblem

$$(2.62) \quad \begin{aligned} \mathbf{u}_t + \mathbf{f}_{1x}(\mathbf{u}) + \mathbf{f}_{2y}(\mathbf{u}) &= 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+ \\ \mathbf{u}(x, y, 0) &= \mathbf{u}_0(x, y) \quad , \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2 \end{aligned}$$

durch die Gleichung (2.60) zu approximieren, werden als Anfangswerte für das Verfahren die Mittelwerte von \mathbf{u}_0 ,

$$(2.63) \quad \mathbf{u}_{ij}^0 := \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{u}_0(x, y) dx dy$$

vorgeschrieben. Somit stellt die Gleichung (2.60) zusammen mit den Anfangswerten (2.63) und geeigneten numerischen Flüssen, die sich aus den eindimensionalen Godunov-Typ-Verfahren ergeben, ein Verfahren für das Cauchyproblem auf zweidimensionalen kartesischen Gittern dar.

2.2.2 Allgemeine strukturierte Vierecksgitter

Betrachtet man ein allgemeines strukturiertes Vierecksgitter, so ist die Gitterzelle V_{ij} ein beliebiges Viereck (siehe Abbildung 2.3). Der Rand der Gitterzelle kann durch ihre vier Seiten beschrieben werden,

$$\partial V_{ij} := S_{ij,1} \cup S_{ij,2} \cup S_{ij,3} \cup S_{ij,4} .$$

Der Flächeninhalt der Gitterzelle V_{ij} wird mit $|V_{ij}|$ bezeichnet. Mit dem integralen Mittelwert der Erhaltungsgröße

$$(2.64) \quad \mathbf{u}_{ij}^n := \frac{1}{|V_{ij}|} \int_{V_{ij}} \mathbf{u}(x, y, t_n) dV$$

folgt aus der Integralgleichung (1.15) die Gleichung

$$(2.65) \quad |V_{ij}| (\mathbf{u}_{ij}^{n+1} \Leftrightarrow \mathbf{u}_{ij}^n) = \Leftrightarrow \sum_{\alpha=1}^4 \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{S_{ij,\alpha}} (\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_{1,ij,\alpha} + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_{2,ij,\alpha}) dS dt,$$

wobei $\mathbf{n}_{ij,\alpha} = (n_{1,ij,\alpha}, n_{2,ij,\alpha})$ die äußere Einheitsnormale der Seite $S_{ij,\alpha}$ ist. Der numerische Fluß $\mathbf{g}_{ij,\alpha}$ muß nun eine Approximation des Integrals über die mit α indizierte Seite der Gitterzelle sein, das heißt

$$\mathbf{g}_{ij,\alpha} \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{S_{ij,\alpha}} (\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_{1,ij,\alpha} + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_{2,ij,\alpha}) dS dt.$$

Damit ergibt sich das Finite-Volumen-Verfahren

$$(2.66) \quad \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = \mathbf{u}_{ij}^n \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{|V_{ij}|} \sum_{\alpha=1}^4 \mathbf{g}_{ij,\alpha},$$

falls die numerischen Flüsse lipschitzstetig in allen Argumenten und konsistent mit den physikalischen Flüssen sind, das heißt

$$\mathbf{g}_{ij,\alpha}(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}) = \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_{1,ij,\alpha} + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_{2,ij,\alpha}.$$

Betrachtet man für beliebige i, j den physikalischen Fluß in Normalenrichtung der Vierecksseiten $S_{ij,\alpha}$ und schreibt kurz

$$(2.67) \quad \mathbf{f}_\alpha(\mathbf{u}) = \mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_{1,\alpha} + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_{2,\alpha},$$

so ergibt sich für die Eulergleichungen mit den Flüssen nach (1.42) der transformierte Fluß

$$(2.68) \quad \mathbf{f}_\alpha(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \rho(v_1 n_{1,\alpha} + v_2 n_{2,\alpha}) \\ \rho v_1 (v_1 n_{1,\alpha} + v_2 n_{2,\alpha}) + p n_{1,\alpha} \\ \rho v_2 (v_1 n_{1,\alpha} + v_2 n_{2,\alpha}) + p n_{2,\alpha} \\ (e + p)(v_1 n_{1,\alpha} + v_2 n_{2,\alpha}) \end{pmatrix}.$$

Hier ist zu beachten, daß Nachbarzellen mit gemeinsamer Seite dieselbe Normale (und somit auch denselben Fluß) mit entgegengesetztem Vorzeichen besitzen. Dies entspricht der Konservativitätsbedingung (2.49).

2.2.3 Bewegte Gitter

Um zum Beispiel zeitlich veränderliche Materialgrenzen gut approximieren zu können, ist es von Vorteil, diese während der Rechnung mit der Strömung mitzubewegen. Die genaue Vorgehensweise wird im nächsten Kapitel beschrieben, während hier nur auf die Diskretisierung eingegangen wird.

Das gesamte Rechengebiet wird dabei in Teilgebiete unterteilt, die jeweils nur ein Material enthalten. Dies bedeutet, daß Materialgrenzen mit Teilgebietsrändern zusammenfallen. In einem ersten Schritt wird dann die Bewegung des gesamten Rechengitters bestimmt. Für die zu approximierende Integralgleichung (1.15) bedeutet dies, daß das Integrationsvolumen zeitabhängig ist und somit Zeitableitung und Integration nicht vertauscht werden können. Dies bedeutet auch, daß die Gleichung (1.29), die für eine verallgemeinerte Lösung bei zeitlich konstantem Integrationsgebiet gelten muß, für bewegte Gitter nicht mehr verwendet werden kann. Nach dem Transporttheorem (1.7) gilt jedoch

$$(2.69) \quad \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mathbf{u} dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dV + \int_{\partial V(t)} \mathbf{u} v_n dS ,$$

wobei v_n die Geschwindigkeit des Oberflächenelementes dS in Richtung der äußeren Normale ist. Damit erhält man aus der Integralgleichung (1.15) mit $t_1 := t_n$ und $t_2 := t_{n+1}$

$$(2.70) \quad \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mathbf{u} dV dt \Leftrightarrow \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial V(t)} \mathbf{u} v_n dS dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial V(t)} (\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_x + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_y) dS dt = 0 .$$

Mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned} \Omega &:= \{(\mathbf{x}, t) ; t \in [t_n, t_{n+1}], \mathbf{x} \in V(t)\} , \\ \partial\Omega' &:= \partial\Omega \setminus (V(t_{n+1}) \cup V(t_n)) , \quad d\omega := dS dt , \end{aligned}$$

ergibt sich

$$(2.71) \quad \int_{V(t_{n+1})} \mathbf{u} dV = \int_{V(t_n)} \mathbf{u} dV \Leftrightarrow \int_{\partial\Omega'} [\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_x + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_y \Leftrightarrow \mathbf{u} v_n] d\omega .$$

Der Fluß mit dem zusätzlichen Term wird nun nicht nur über die Seite einer zweidimensionalen Gitterzelle integriert, sondern über die Seitenfläche einer sogenannten Raum-Zeit-Gitterzelle. Eine solche Zelle ist in Abbildung 2.5 dargestellt.

Analog zum ortsfesten Gitter ergibt sich mit

$$(2.72) \quad \mathbf{u}_{ij}^n := \frac{1}{|V_{ij}^n|} \int_{V_{ij}^n} \mathbf{u}(x, y, t_n) dV ,$$

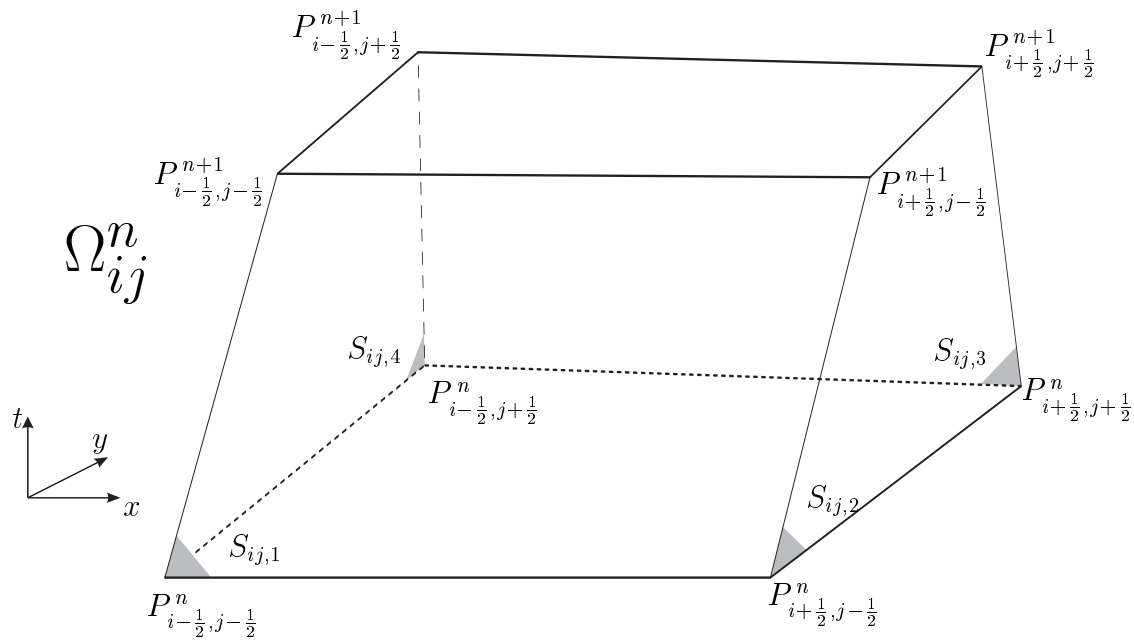


Abbildung 2.5: Raum-Zeit-Zelle bei bewegten Gittern

eine Evolutionsgleichung für die Zellmittelwerte,

$$(2.73) \quad |V_{ij}^{n+1}| \mathbf{u}_{ij}^{n+1} = |V_{ij}^n| \mathbf{u}_{ij}^n \Leftrightarrow \sum_{\alpha=1}^4 \int_{S_{ij,\alpha}} [(\mathbf{f}_1(\mathbf{u}) n_{1,ij,\alpha} + \mathbf{f}_2(\mathbf{u}) n_{2,ij,\alpha}) \Leftrightarrow \mathbf{u} v_n] d\omega,$$

wobei jetzt $S_{ij,\alpha}$ ($\alpha = 1, \dots, 4$) die Seitenflächen der dreidimensionalen Raum-Zeit-Gitterzellen Ω_{ij}^n sind (siehe Abbildung 2.5). Eine etwas andere Formulierung, die auf das gleiche Resultat führt, findet man in [12]. Im folgenden Kapitel werden Riemannlösungen hergeleitet, bei denen der zusätzliche Term $\mathbf{u} v_n$, der durch die Gitterbewegung entsteht, berücksichtigt wird.

Kapitel 3

Riemannlöser auf bewegten Gittern

In Abschnitt 2.2.3 wurde gezeigt, daß sich die zu approximierenden Gleichungen ändern, wenn von zeitlich veränderlichen Rechengittern ausgegangen wird. Damit ändern sich auch die Riemannprobleme, die entlang der Normalen der Seitenflächen gelöst werden müssen, um die numerischen Flüsse berechnen zu können.

Verglichen mit Finite-Volumen-Verfahren auf ortsfesten Gittern, müssen hier die folgenden zusätzlichen Aufgaben gelöst werden. Zunächst muß die Gitterbewegung bestimmt werden. Da davon ausgegangen wird, daß Materialgrenzen sowie andere zu verfolgende Wellen mit Teilgebietsrändern zusammenfallen, werden zunächst die Riemannprobleme über alle Zellränder, die auf Teilgebietsrändern liegen, gelöst. Aus der Lösung dieser Riemannprobleme werden die Ausbreitungsgeschwindigkeiten der zu verfolgenden Wellen und damit die Geschwindigkeiten der betreffenden Randsegmente bestimmt. Mit diesen Geschwindigkeiten können alle Teilgebietsränder bewegt und damit das Rechengitter zu einem neuen Zeitpunkt bestimmt werden. Außerdem führen diese Geschwindigkeiten zu einem zusätzlichen Term in dem zu approximierenden physikalischen Fluß (siehe Gleichung (2.73)), der bei der Berechnung des numerischen Flusses mitberücksichtigt werden muß. Für alle inneren Raum-Zeit-Gitterzellen werden dann die physikalischen Größen zu dem neuen Zeitpunkt aus den Riemannproblemen durch die Seitenflächen der dreidimensionalen Gitterzellen mit vorgegebener Gittergeschwindigkeit berechnet. Da die Riemannprobleme in Richtung der Normalen des Zellrandes gelöst werden müssen, wird das in Abschnitt 1.2 hergeleitete transformierte Riemannproblem

$$(3.1) \quad \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{q})}{\partial \tilde{x}_1} = 0 \quad , \quad \mathbf{q}(\tilde{x}_1, t_n) = \begin{cases} \mathbf{q}_l & \text{für } \frac{\tilde{x}_1 - \tilde{x}_0}{\Delta t} < 0 \\ \mathbf{q}_r & \text{für } \frac{\tilde{x}_1 - \tilde{x}_0}{\Delta t} > 0 \end{cases}$$

verwendet. Da der Fluß $\mathbf{f}_2(\mathbf{q})$ in tangentialer Richtung keine Änderung im Innern der Gitterzelle V_{ij} bewirkt, kann er unberücksichtigt bleiben. Es liegt somit ein eindimensionales Riemannproblem vor. Betrachten wir zum Beispiel den rechten Rand der Gitterzelle V_{ij}

mit der Einheitsnormalen $(n_1, n_2)^T$, so ist

$$\tilde{x}_0 := \frac{1}{2}n_1(x_{i+1/2,j-1/2} + x_{i+1/2,j+1/2}) + \frac{1}{2}n_2(y_{i+1/2,j-1/2} + y_{i+1/2,j+1/2}).$$

Im ersten Schritt, in dem die Gittergeschwindigkeit berechnet wird, ist \mathbf{f}_1 also genau der in Normalenrichtung transformierte physikalische Fluß. Bei den Riemannproblemen für alle inneren Gitterzellen enthält \mathbf{f}_1 noch den Zusatzterm $\mathbf{u}v_n$. Im folgenden werden die im 2. Kapitel vorgestellten Godunov-Typ-Verfahren auf den Fall eines mitbewegten Rechengitters erweitert. Dabei wird nur auf die Berechnung der Gittergeschwindigkeit und der numerischen Flüsse eingegangen, da die Diskretisierung, wie in Kapitel 2.2.3 beschrieben, in allen Fällen identisch ist.

3.1 Exakter Riemannlöser

Beim exakten Riemannlöser werden die mittleren Werte durch Fixpunktiteration bestimmt [14]. Die Struktur der Lösung ist in Abbildung 3.1 skizziert.

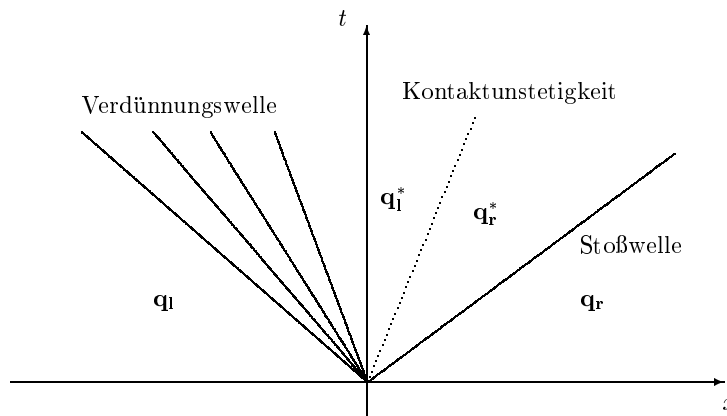


Abbildung 3.1: Die Struktur der Lösung des Riemannproblems in der x - t -Ebene.

Aus diesen Werten erhält man direkt die Gittergeschwindigkeit v_g , das heißt die Geschwindigkeit des betrachteten Randsegmentes in Normalenrichtung. Bei Verfolgung der Kontaktunstetigkeit (zum Beispiel einer Materialgrenze) erhält man

$$v_g = \tilde{v}_{1l}^* = \tilde{v}_{1r}^* =: \tilde{v}_1^*.$$

Bei Verfolgung einer zum Beispiel nach rechts laufenden Stoßwelle ist v_g gleich der Stoßwellengeschwindigkeit

$$s = \frac{\varrho_r \tilde{v}_{1,r} \Leftrightarrow \varrho_r^* \tilde{v}_1^*}{\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_r^*}.$$

Der numerische Fluß ergibt sich dann, indem die exakte Lösung an der Stelle $\frac{\tilde{x}_1 - \tilde{x}_0}{\Delta t} = v_g$ in den physikalischen Fluß eingesetzt wird. Ist die ermittelte Lösung \mathbf{q}^* an dieser Stelle

$$(3.2) \quad \mathbf{q}^* = (\varrho^*, \varrho^* \tilde{v}_1^*, \varrho^* \tilde{v}_2^*, e^*)^T,$$

so ergibt sich der Fluß in Normalenrichtung zu

$$(3.3) \quad \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}^*) = \begin{pmatrix} \varrho^* (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) \\ \varrho^* \tilde{v}_1^* (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) + p^* \\ \varrho^* \tilde{v}_2^* (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) \\ e^* (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) + \tilde{v}_1^* p^* \end{pmatrix}.$$

Dabei ist die Tangentialgeschwindigkeit \tilde{v}_2^* gleich dem linken oder rechten Anfangswert, je nachdem ob die Gittergeschwindigkeit kleiner oder größer ist als die mittlere Geschwindigkeit in Normalenrichtung. Ist die Gittergeschwindigkeit gleich der Geschwindigkeit von Kontaktunstetigkeit oder Stoßwelle, so ist nicht eindeutig festgelegt, ob die Lösung auf der rechten oder linken Seite der Unstetigkeit in den Fluß eingesetzt werden soll. Durch Nachrechnen läßt sich jedoch zeigen, daß sich in diesen Fällen für die Lösungen auf beiden Seiten der Unstetigkeit derselbe Fluß ergibt. Das heißt

$$(3.4) \quad \begin{aligned} \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}_l^*) &= \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}_r^*) && \text{im Fall } v_g = \tilde{v}_1^*, \\ \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}_r^*) &= \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}_r) && \text{im Fall } v_g = s_r, \\ \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}_l^*) &= \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}_l) && \text{im Fall } v_g = s_l. \end{aligned}$$

Direkt an einer Materialgrenze ($v_g = \tilde{v}_1^*$) ist also nach (3.3)

$$(3.5) \quad \mathbf{g}_{\text{god}} = (0, p^*, 0, \tilde{v}_1^* p^*)^T.$$

Dies bedeutet, daß eine einzelne Kontaktunstetigkeit wie beim Verfahren in Lagrangekoordinaten [29] exakt aufgelöst wird. Analog bestimmt man die exakte Riemannlösung für die inneren Gitterzellen an der Stelle $\tilde{x}_1 = \tilde{x}_0 + \Delta t v_g$, wobei sich die Gittergeschwindigkeit v_g hier direkt aus der durch die Bewegung der Ränder bestimmten Änderung des Rechengitters im Zeitschritt Δt ergibt. Die Rücktransformation des Flusses (3.3) führt auf den Fluß

$$(3.6) \quad \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{u}) = \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{g}_{\text{god}}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \varrho^* (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) \\ \varrho^* (n_1 \tilde{v}_1^* \Leftrightarrow n_2 \tilde{v}_2^*) (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) + n_1 p^* \\ \varrho^* (n_2 \tilde{v}_1^* + n_1 \tilde{v}_2^*) (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) + n_2 p^* \\ e^* (\tilde{v}_1^* \Leftrightarrow v_g) + \tilde{v}_1^* p^* \end{pmatrix}.$$

Verwendet man das Godunov-Verfahren, muß dieser Fluß nun als Approximation des Integrals über die entsprechende Seitenfläche in die Gleichung (2.73) eingesetzt werden.

3.2 Das Roe-Verfahren

In den folgenden Herleitungen wird nur die Normalkomponente der Impulsgleichung berücksichtigt, da die Tangentialkomponente keinen Einfluß auf die Änderung der Größen innerhalb der Gitterzelle hat. Die Normalkomponente der Geschwindigkeit wird mit v bezeichnet. Der Fluß des in Kapitel 2.1.2 vorgestellten Roe-Verfahrens enthält im Fall bewegter Gitter einen zusätzlichen Term. Er lautet dann

$$(3.7) \quad \mathbf{f}_b = \mathbf{f} \Leftrightarrow v_g \mathbf{u}$$

und führt auf die Jacobi-Matrix

$$(3.8) \quad \mathcal{A}_b = \frac{\partial \mathbf{f}_b}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \Leftrightarrow v_g \mathcal{I} = \mathcal{A} \Leftrightarrow v_g \mathcal{I} .$$

Damit reduziert sich die Mittelwertseigenschaft

$$(3.9) \quad \mathbf{f}_b(\mathbf{u}_l) \Leftrightarrow \mathbf{f}_b(\mathbf{u}_r) = \mathcal{A}_b(\mathbf{u}_l \Leftrightarrow \mathbf{u}_r)$$

auf die Mittelwertseigenschaft im nicht bewegten Fall (2.16), wodurch auch die Mittelwerte identisch sind. Für die Eigenwerte $a_{b,i}$ gilt

$$(3.10) \quad (\mathcal{A} \Leftrightarrow v_g \mathcal{I}) \mathbf{u} = a_{b,i} \mathbf{u}$$

und damit

$$(3.11) \quad a_{b,i} = a_{roe,i} \Leftrightarrow v_g : a_{b,1} = \bar{v} \Leftrightarrow \bar{c} \Leftrightarrow v_g , a_{b,2} = \bar{v} \Leftrightarrow v_g , a_{b,3} = \bar{v} + \bar{c} \Leftrightarrow v_g .$$

Auch die Eigenvektoren \mathbf{r}_i und die Koeffizienten β_i haben die gleichen Werte wie im nicht bewegten Fall. Damit erhält man den numerischen Fluß für das Roe-Verfahren mit Gitterbewegung

$$(3.12) \quad \mathbf{g}_b = \frac{1}{2} (\mathbf{f}(\mathbf{u}_l) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_r) \Leftrightarrow v_g (\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_r)) \Leftrightarrow \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 |a_{roe,i} \Leftrightarrow v_g| \beta_i \mathbf{r}_i .$$

Satz 3.1. *Im Roe-Verfahren wird bei der Bewegung mit der Kontaktunstetigkeit eine einzelne Kontaktunstetigkeit exakt wiedergegeben.*

Beweis. *Eine einzelne Kontaktunstetigkeit wird genau dann exakt wiedergegeben, wenn der numerische Fluß des Verfahrens gleich dem numerischen Fluß des Godunov-Verfahrens ist, bei dem die exakte Riemannlösung verwendet wird. Betrachtet man eine einzelne Kontaktunstetigkeit, so lauten die Anfangswerte*

$$(3.13) \quad v_l = v_r =: v_0 \quad , \quad p_l = p_r =: p_0 \quad , \quad \varrho_l \quad \text{und} \quad \varrho_r .$$

Da das Gitter mit der Kontaktunstetigkeit mitbewegt wird, ist die Gittergeschwindigkeit $v_g = v_0$. Aus dem exakten Riemannlöser ergibt sich dann nach Gleichung (3.3)

$$(3.14) \quad \mathbf{g}_{\text{god}} = (0, p_0, v_0 p_0)^T .$$

Für das Roe-Verfahren ergibt sich aus den Gleichungen (2.22), (2.23) und (3.11)

$$(3.15) \quad \bar{v} = v_0, a_{b,2} = v_0 \Leftrightarrow v_0 = 0, \beta_1 = 0 \quad \text{und} \quad \beta_3 = 0 .$$

Setzt man diese Werte in die Gleichung (3.12) für den numerischen Fluß ein, so ergibt sich

$$(3.16) \quad \mathbf{g}_{\mathbf{b}} = \frac{1}{2} (\mathbf{f}(\mathbf{u}_l) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_r) \Leftrightarrow v_0 (\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_r)) = (0, p_0, v_0 p_0)^T .$$

Also kann das Roe-Verfahren für bewegte Gitter eine Kontaktunstetigkeit exakt wiedergeben. \square

Dagegen ist das Roe-Verfahren auf ortsfesten Gittern nicht in der Lage, eine einzelne Kontaktunstetigkeit exakt wiederzugeben [29].

3.3 Das HLL-Verfahren

Beim HLL-Verfahren mit Gitterbewegung lautet der numerische Fluß nach Gleichung (2.34)

$$(3.17) \quad \begin{aligned} \mathbf{g}_{\mathbf{b}}(\mathbf{u}_l, \mathbf{u}_r) &= \frac{a_r^+ (\mathbf{f}(\mathbf{u}_l) \Leftrightarrow v_g \mathbf{u}_l) \Leftrightarrow a_l^- (\mathbf{f}(\mathbf{u}_r) \Leftrightarrow v_g \mathbf{u}_r)}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} + \frac{a_r^+ a_l^-}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} (\mathbf{u}_r \Leftrightarrow \mathbf{u}_l) \\ &= \frac{a_r^+ \mathbf{f}(\mathbf{u}_l) \Leftrightarrow a_l^- \mathbf{f}(\mathbf{u}_r)}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} + \frac{a_r^+ a_l^-}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} (\mathbf{u}_r \Leftrightarrow \mathbf{u}_l) \Leftrightarrow v_g \frac{a_r^+ \mathbf{u}_l \Leftrightarrow a_l^- \mathbf{u}_r}{a_r^+ \Leftrightarrow a_l^-} \end{aligned}$$

mit den Signalgeschwindigkeiten

$$(3.18) \quad \begin{aligned} a_l^- &= \min(0, a_l) \quad , \quad a_r^+ = \max(0, a_r) \\ a_l &= \min\{a_{roe,1} \Leftrightarrow v_g, a_1(u_l) \Leftrightarrow v_g\} \quad , \quad a_r = \max\{a_{roe,3} \Leftrightarrow v_g, a_3(u_r) \Leftrightarrow v_g\} . \end{aligned}$$

Bei Verfolgung einer einzelnen Kontaktunstetigkeit gilt wie im Roe-Verfahren, $v_g = v_0$. Mit den Eigenwerten (3.11) ergeben sich die Signalgeschwindigkeiten $a_r^+ = \bar{c}$, $a_l^- = \Leftrightarrow \bar{c}$ und der numerische Fluß

$$(3.19) \quad \begin{aligned} \mathbf{g}_{\mathbf{b}} &= \frac{1}{2} (\mathbf{f}(\mathbf{u}_l) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_r)) \Leftrightarrow \frac{1}{2} \bar{c} (\mathbf{u}_r \Leftrightarrow \mathbf{u}_l) \Leftrightarrow \frac{1}{2} v_0 (\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_r) \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ p_0 \\ v_0 p_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{1}{2} \bar{c} \begin{pmatrix} \varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l \\ v_0 (\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) \\ e_r \Leftrightarrow e_l \end{pmatrix} , \end{aligned}$$

der damit nicht mit dem Fluß des Godunov-Verfahrens übereinstimmt. Das HLL-Verfahren ist also nicht in der Lage, eine einzelne Kontaktunstetigkeit exakt aufzulösen.

Der Fluß des HLLEM-Verfahrens lautet nach Gleichung (2.39)

$$(3.20) \quad \mathbf{g}_{\text{hllem}} = \mathbf{g}_{\text{hll}} \Leftrightarrow \frac{a_r a_l}{a_r \Leftrightarrow a_l} \beta_2 (\bar{\mathbf{u}}) \mathbf{r}_{\text{roe},2} (\bar{\mathbf{u}})$$

für bewegte ebenso wie für nicht bewegte Gitter.

Satz 3.2. *Die Einfeldt-Modifikation des HLL-Verfahrens führt im Fall bewegter Rechengitter dazu, daß eine einzelne Kontaktunstetigkeit exakt aufgelöst wird.*

Beweis. *Für eine einzelne Kontaktunstetigkeit gilt nach Gleichung (2.23)*

$$(3.21) \quad \beta_2 = \Delta \varrho \Leftrightarrow \frac{1}{\bar{c}^2} \Delta p = \varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l$$

und nach Gleichung (2.21)

$$(3.22) \quad \mathbf{r}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ v_0 \\ \bar{H} \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{c}^2}{\bar{p}_\varepsilon} \end{pmatrix}.$$

Damit ist der numerische Fluß

$$(3.23) \quad \mathbf{g}_b = \begin{pmatrix} 0 \\ p_0 \\ p_0 v_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{1}{2} \bar{c} \begin{pmatrix} \varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l \\ v_0 (\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) \\ e_r \Leftrightarrow e_l \end{pmatrix} + \frac{\bar{c}}{2} (\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) \begin{pmatrix} 1 \\ v_0 \\ \bar{H} \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{c}^2}{\bar{p}_\varepsilon} \end{pmatrix}.$$

Eine einzelne Kontaktunstetigkeit wird genau dann exakt aufgelöst, wenn

$$(3.24) \quad \mathbf{g}_b = \begin{pmatrix} 0 \\ p_0 \\ p_0 v_0 \end{pmatrix}$$

gilt. Für die ersten beiden Komponenten ist dies direkt zu sehen. Es bleibt also zu zeigen, daß

$$(3.25) \quad (\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) \left(\bar{H} \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{c}^2}{\bar{p}_\varepsilon} \right) \Leftrightarrow (e_r \Leftrightarrow e_l) = 0$$

gilt. Für die Roe-Mittelwerte muß die Bedingung

$$(3.26) \quad \Delta \mathbf{u} = \sum_{k=1}^3 \bar{\beta}_k \bar{\mathbf{r}}_k$$

erfüllt sein. Die dritte Komponente von (3.26) lautet mit $\beta_1 = 0$, $\beta_2 = \varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l$ und $\beta_3 = 0$,

$$(3.27) \quad e_r \Leftrightarrow e_l = (\varrho_r \Leftrightarrow \varrho_l) \left(\bar{H} \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{c}^2}{\bar{p}_\varepsilon} \right),$$

womit die Bedingung (3.25) erfüllt ist. □

Kapitel 4

Approximative Riemannlöser für Materialgrenzen

Betrachtet man das Riemannproblem direkt an einer Materialgrenze genauer, so bedeutet der Wechsel der Zustandsgleichung im allgemeinen eine Unstetigkeit in der Flußfunktion. Da die Flußberechnung in den betrachteten numerischen Verfahren auf der Jacobimatrix der Flußfunktion basiert, ist nicht sichergestellt, daß diese Verfahren auch für unstetige Flußfunktionen ihre Gültigkeit behalten. Um dieses Problem zu behandeln, werden eine Hilfsvariable und eine Erhaltungsgleichung für diese Hilfsvariable eingeführt, die für einen glatten Übergang zwischen den beiden unterschiedlichen Flußfunktionen sorgt. Dadurch ist die Ableitung des Flusses auch an der ursprünglichen Unstetigkeit definiert, so daß das System linearisiert werden kann und die auf dieser Linearisierung aufbauenden Approximationsverfahren angewandt werden können. Wählt man passende Anfangswerte für die Hilfsvariable so, daß das Umschalten zwischen den Flußfunktionen exakt an der Materialgrenze lokalisiert bleibt, so erhält man eine natürliche Methode, um den Übergang von einem Material zu einem anderen zu behandeln.

4.1 Das erweiterte System

Zur Bestimmung dieser zusätzlichen Erhaltungsgleichung ist es von Vorteil, eine Transformation in Lagrangekoordinaten durchzuführen, da in diesem mit der Strömung mitbewegten System die Materialgrenze zeitlich konstant bleibt. Da die Betrachtung in Lagrangekoordinaten nur zur Bestimmung der zusätzlichen Erhaltungsgleichung benötigt wird, werden im folgenden alle Größen, die sich auf die Lagrangedarstellung beziehen, mit einer Tilde $\tilde{}$ versehen.

Bei der Betrachtung in Lagrange-Koordinaten wird anstelle der Raumvariablen x die Massenkoordinate $m = \rho x$ verwendet. Die Transformation des Systems von Erhaltungsglei-

chungen in Eulerkoordinaten führt dann auf das System in Lagrangekoordinaten

$$(4.1) \quad \tilde{\mathbf{u}}(m, t)_t + \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{u}}(m, t))_m = 0$$

mit

$$(4.2) \quad \tilde{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} V \\ v \\ E \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{u}}) = \begin{pmatrix} \Leftrightarrow v \\ p \\ v p \end{pmatrix},$$

wobei das spezifische Volumen durch $V := 1/\rho$ und die spezifische Gesamtenergie durch $E := e/\rho$ definiert sind [42]. Es wird angenommen, daß die Flußfunktion $\tilde{\mathbf{f}}$ zweimal stetig differenzierbar ist, außer im Punkt $m = m_0$, wo sie eine Unstetigkeit besitzt. Das heißt, für alle Zeiten t gilt die sogenannte Umschaltbedingung für den Fluß

$$(4.3) \quad \tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{u}}) = \begin{cases} \tilde{\mathbf{f}}_l(\tilde{\mathbf{u}}) & \text{für } m < m_0 \\ \tilde{\mathbf{f}}_r(\tilde{\mathbf{u}}) & \text{für } m > m_0 \end{cases}$$

mit $\tilde{\mathbf{f}}_l, \tilde{\mathbf{f}}_r \in C^2$ und zeitunabhängigem m_0 . Um in diesem Fall das Riemannproblem exakt behandeln zu können, wird die Unstetigkeit durch Einführen einer zusätzlichen Variablen \tilde{q} , die den Übergang zwischen den verschiedenen Flußfunktionen kontrolliert, regularisiert. Man definiert die Funktion

$$(4.4) \quad \tilde{\mathbf{g}}(\tilde{q}, \tilde{\mathbf{u}}) := (1 \Leftrightarrow \tilde{q}) \tilde{\mathbf{f}}_l(\tilde{\mathbf{u}}) + \tilde{q} \tilde{\mathbf{f}}_r(\tilde{\mathbf{u}}).$$

Da $\tilde{\mathbf{g}}$ an der Stelle $m = m_0$ von $\tilde{\mathbf{f}}_l$ nach $\tilde{\mathbf{f}}_r$ wechseln soll, werden die Anfangswerte

$$(4.5) \quad \tilde{q}(m, 0) = \begin{cases} 0 & \text{für } m < m_0 \\ 1 & \text{für } m > m_0 \end{cases}$$

vorgeschrieben. Damit diese Eigenschaft für alle Zeiten erhalten bleibt, wird für \tilde{q} die Erhaltungsgleichung

$$(4.6) \quad \tilde{q}_t + \tilde{k}(\tilde{q})_m = 0$$

gewählt. Dabei muß \tilde{k} solche Eigenschaften besitzen, daß man als Lösung des Riemannproblems (4.6) mit den Anfangswerten (4.5) an der Stelle $m = m_0$ einen stationären Stoß erhält. Die Forderungen an die Funktion \tilde{k} sind:

- zweimal stetige Differenzierbarkeit,
- \tilde{k} konkav in $(0, 1)$,
- $\tilde{k}(0) = \tilde{k}(1) > 0$,
- Symmetrie bzgl. $\tilde{q} = \frac{1}{2}$,
- $0 < \tilde{k}'(0) = \Leftrightarrow \tilde{k}'(1) < \infty$.

Die Erhaltungsgleichung (4.6) muß nun von Lagrangekoordinaten in Eulerkoordinaten transformiert werden. Der Ort $x(m, t)$ eines Teilchens zum Zeitpunkt t , welches sich zur Zeit $t = 0$ am Ort $x(m, 0)$ befindet, ergibt sich aus der Gleichung

$$(4.7) \quad x(m, t) = x(m, 0) + \int_0^t v(s) ds .$$

Für die Zusatzvariable \tilde{q} gilt

$$(4.8) \quad \tilde{q}(m, t) = q(x(m, t), t)$$

und damit auch

$$(4.9) \quad \tilde{k}(\tilde{q}) = k(q) .$$

Mit den beiden Gleichungen (4.7) und (4.8) können die Anfangsbedingung (4.5), sowie die Umschaltbedingung für den Fluß (4.3) transformiert werden. Mit $x_0 := x(m_0, 0)$ gilt

$$(4.10) \quad q(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < x_0 \\ 1 & \text{für } x > x_0 \end{cases} \quad \text{und} \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}(x, t)) = \begin{cases} \mathbf{f}_l(\mathbf{u}) & \text{für } x < x_0 + \int_0^t v(s) ds \\ \mathbf{f}_r(\mathbf{u}) & \text{für } x > x_0 + \int_0^t v(s) ds \end{cases} .$$

Die Zeitableitung einer beliebigen Funktion \tilde{f} in Lagrangekoordinaten ergibt sich zu

$$(4.11) \quad \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} .$$

Damit geht (4.6) über in

$$q_t + vq_x + \frac{1}{m_x} k(q)_x = 0 .$$

Mit $m_x = \varrho$ und der Massenerhaltungsgleichung ergibt sich

$$\varrho q_t + \varrho v q_x + k(q)_x + q(\varrho_t + (\varrho v)_x) = 0 .$$

Dies führt auf die Erhaltungsgleichung

$$(4.12) \quad (\varrho q)_t + (\varrho v q + k(q))_x = 0 .$$

Mit den Gleichungen (4.4) und (4.12) erhält man nach Transformation der physikalischen Erhaltungsgleichungen von Lagrange- in Eulerkoordinaten das erweiterte System von Erhaltungsgleichungen

$$(4.13) \quad \mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = 0 \quad \text{mit}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \varrho q \\ \varrho \\ \varrho v \\ e \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \varrho v q + k(q) \\ \varrho v \\ \varrho v^2 + P \\ v(e + P) \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$P(q, \mathbf{u}) := (1 \Leftrightarrow q)p_l(\mathbf{u}) + qp_r(\mathbf{u}) .$$

Da sich die beiden Flußfunktionen \mathbf{f}_l und \mathbf{f}_r nur durch ihre Zustandsgleichungen unterscheiden, wirkt sich die Gleichung (4.4) nur auf den Druck aus. Die Anfangswerte lauten

$$(4.14) \quad \mathbf{U}_0(x) := \mathbf{U}(x, 0) = \begin{cases} (0, \mathbf{u}_l^T)^T & \text{für } x < x_0 \\ (\varrho_r, \mathbf{u}_r^T)^T & \text{für } x > x_0 \end{cases},$$

wobei \mathbf{u}_l und \mathbf{u}_r die Anfangswerte des Systems ohne Zusatzgleichung sind.

4.2 Jacobimatrix, Eigenwerte und Eigenvektoren

Zur Anwendung des Roe-Verfahrens wird die Jacobimatrix $\partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{U}$ benötigt. Führt man den Impuls $m := \varrho v$ und die Variable $\hat{q} := \varrho q$ ein, so gilt

$$(4.15) \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \hat{q} \\ \varrho \\ m \\ e \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \frac{m}{\varrho} \hat{q} + k\left(\frac{\hat{q}}{\varrho}\right) \\ m \\ \frac{m^2}{\varrho} + P \\ \frac{m}{\varrho}(e + P) \end{pmatrix}.$$

Wird der Druck in der Form $P = P(q, \varrho, \varepsilon)$ angesetzt, so gilt für seine Ableitungen

$$(4.16) \quad \begin{aligned} \frac{dP}{d\hat{q}} &= \frac{1}{\varrho} P_q, & \frac{dP}{d\varrho} &= P_\varrho \Leftrightarrow \frac{q}{\varrho} P_q + \left(\frac{v^2}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{e}{\varrho^2}\right) P_\varepsilon, \\ \frac{dP}{dm} &= \Leftrightarrow \frac{v}{\varrho} P_\varepsilon, & \frac{dP}{de} &= \frac{1}{\varrho} P_\varepsilon. \end{aligned}$$

Dann erhält man die Jacobimatrix

$$(4.17) \quad D_{\mathbf{u}}\mathbf{F} = \begin{pmatrix} v + \frac{k'}{\varrho} & \Leftrightarrow vq \Leftrightarrow \frac{q}{\varrho} k' & q & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\varrho} P_q & \Leftrightarrow v^2 + P_\varrho \Leftrightarrow \frac{q}{\varrho} P_q + \left(\frac{v^2}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{e}{\varrho^2}\right) P_\varepsilon & 2v \Leftrightarrow \frac{v}{\varrho} P_\varepsilon & \frac{1}{\varrho} P_\varepsilon \\ \frac{v}{\varrho} P_q & \Leftrightarrow \frac{v(e+P)}{\varrho} + vP_\varrho \Leftrightarrow \frac{qv}{\varrho} P_q + \left(\frac{v^3}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{v\varepsilon}{\varrho^2}\right) P_\varepsilon & \frac{(e+P)}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{v^2}{\varrho} P_\varepsilon & v + \frac{v}{\varrho} P_\varepsilon \end{pmatrix}.$$

Sie hat die Eigenwerte

$$(4.18) \quad a_0 = v + \frac{k'}{\varrho}, \quad a_1 = v \Leftrightarrow c, \quad a_2 = v \quad \text{und} \quad a_3 = v + c$$

mit

$$(4.19) \quad c^2 = \frac{PP_\varepsilon}{\varrho^2} + P_\varrho$$

und die Eigenvektoren

$$(4.20) \quad r_0 = \begin{pmatrix} q + \frac{k'^2 - \varrho^2 c^2}{\varrho P_q} \\ 1 \\ v + \frac{k'}{\varrho} \\ H + v \frac{k'}{\varrho} \end{pmatrix}, \quad r_1 = \begin{pmatrix} q \\ 1 \\ v \Leftrightarrow c \\ H \Leftrightarrow vc \end{pmatrix}, \quad r_2 = \begin{pmatrix} q \\ 1 \\ v \\ H \Leftrightarrow \frac{\varrho c^2}{P_\varepsilon} \end{pmatrix}, \quad r_3 = \begin{pmatrix} q \\ 1 \\ v + c \\ H + vc \end{pmatrix}$$

mit

$$(4.21) \quad H = \frac{e + P}{\varrho}.$$

4.3 Herleitung der Roe-Mittelwerte

Die Herleitung der Roe-Mittelwerte orientiert sich an der in [13] angegebenen Herleitung für das System ohne Zusatzgleichung. Zunächst werden zwei Zustände \mathbf{U}_1 , \mathbf{U}_r in der Nähe eines Mittelwertes $\bar{\mathbf{U}}$ betrachtet. Mit $\Delta \mathbf{U}$ wird die Differenz dieser Zustände bezeichnet,

$$(4.22) \quad \Delta \mathbf{U} := \mathbf{U}_r \Leftrightarrow \mathbf{U}_1.$$

Dann werden die Konstanten β_0, \dots, β_3 gesucht, so daß

$$(4.23) \quad \Delta \mathbf{U} = \sum_{k=0}^3 \beta_k \mathbf{r}_k$$

in der Konsistenzordnung $O(\Delta^2)$ gilt. Ausgeschrieben lautet (4.23)

$$(4.24a) \quad \Delta(\varrho q) = \frac{k'^2 \Leftrightarrow \varrho^2 c^2}{\varrho P_q} \beta_0 + q (\beta_0 + \beta_1 + \beta_2 + \beta_3)$$

$$(4.24b) \quad \Delta \varrho = \beta_0 + \beta_1 + \beta_2 + \beta_3$$

$$(4.24c) \quad \Delta(\varrho v) = \beta_0 \left(v + \frac{k'}{\varrho} \right) + \beta_1 (v \Leftrightarrow c) + \beta_2 v + \beta_3 (v + c)$$

$$(4.24d) \quad \Delta e = \beta_0 \left(H + \frac{v k'}{\varrho} \right) + \beta_1 (H \Leftrightarrow vc) + \beta_2 \left(H \Leftrightarrow \frac{\varrho c^2}{P_\varepsilon} \right) + \beta_3 (H + vc).$$

Aus den Gleichungen (4.24b) und (4.24c) erhält man

$$(4.25) \quad \Delta(\varrho v) \Leftrightarrow v \Delta \varrho = \frac{k'}{\varrho} \beta_0 + c (\beta_3 \Leftrightarrow \beta_1)$$

und aus den Gleichungen (4.24b) und (4.24d) unter Beachtung der Definitionen von e , H und c in (1.2), (4.21) und (4.19),

$$\begin{aligned} \Delta(\varrho \varepsilon) \Leftrightarrow \varepsilon \Delta \varrho + \Delta \left(\frac{\varrho v^2}{2} \right) \Leftrightarrow \frac{1}{2} v^2 \Delta \varrho = \\ \left(\frac{P}{\varrho} + v \frac{k'}{\varrho} \right) \beta_0 + \frac{P}{\varrho} (\beta_3 + \beta_1) + vc (\beta_3 \Leftrightarrow \beta_1) \Leftrightarrow \frac{\varrho P_\varrho}{P_\varepsilon} \beta_2. \end{aligned}$$

Ersetzt man $\beta_3 + \beta_1$ nach Gleichung (4.24b) durch

$$(4.26) \quad \beta_3 + \beta_1 = \Delta \varrho \Leftrightarrow \beta_2 \Leftrightarrow \beta_0$$

und $\beta_3 \Leftrightarrow \beta_1$ nach (4.25) durch

$$(4.27) \quad \beta_3 \Leftrightarrow \beta_1 = \frac{\Delta(\varrho v) \Leftrightarrow v \Delta \varrho}{c} \Leftrightarrow \frac{k'}{\varrho c} \beta_0,$$

so ergibt sich

$$(4.28) \quad \frac{\varrho c^2}{P_\varepsilon} \beta_2 = \varepsilon \Delta \varrho \Leftrightarrow \Delta(\varrho \varepsilon) + \left(\frac{P}{\varrho} \Leftrightarrow \frac{v^2}{2} \right) \Delta \varrho \Leftrightarrow \Delta \left(\frac{\varrho v^2}{2} \right) + v \Delta(\varrho v).$$

Es wurde die Annahme gemacht, daß \mathbf{U}_1 , \mathbf{U}_r bis auf Fehler zweiter Ordnung in der Nähe eines Mittelwertes $\bar{\mathbf{U}}$ liegen. Damit gelten in derselben Ordnung die Identitäten

$$(4.29a) \quad \Delta(\varrho q) = \varrho \Delta q + q \Delta \varrho,$$

$$(4.29b) \quad \Delta(\varrho \varepsilon) = \varrho \Delta \varepsilon + \varepsilon \Delta \varrho,$$

$$(4.29c) \quad \Delta(\varrho v) = \varrho \Delta v + v \Delta \varrho,$$

$$(4.29d) \quad \Delta(\varrho v^2) = v^2 \Delta \varrho + 2 \varrho v \Delta v$$

und

$$(4.29e) \quad \Delta P = P_q \Delta q + P_\varrho \Delta \varrho + P_\varepsilon \Delta \varepsilon,$$

Verwendet man diese Gleichungen in (4.28), so erhält man

$$(4.30) \quad \beta_2 = \Delta \varrho \Leftrightarrow \frac{1}{c^2} \Delta P + \frac{P_q}{c^2} \Delta q.$$

Mit dieser Gleichung und (4.29c) gehen die Gleichungen (4.26) und (4.27) über in

$$(4.31a) \quad \beta_3 + \beta_1 = \frac{\Delta P}{c^2} \Leftrightarrow \frac{P_q \Delta q}{c^2} \Leftrightarrow \beta_0$$

und

$$(4.31b) \quad \beta_3 \Leftrightarrow \beta_1 = \frac{\varrho \Delta v}{c} \Leftrightarrow \frac{k'}{\varrho c} \beta_0.$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (4.29a), (4.30) und (4.31a) in die Gleichung (4.24a) erhält man

$$(4.32) \quad \beta_0 = \frac{\varrho^2 P_q}{k'^2 \Leftrightarrow \varrho^2 c^2} \Delta q.$$

Daraus ergeben sich auch die letzten beiden Koeffizienten zu

$$(4.33) \quad \beta_1 = \frac{1}{2c^2} \left(\Delta P \Leftrightarrow \varrho c \Delta v \Leftrightarrow \frac{k' P_q}{k' + \varrho c} \Delta q \right)$$

und

$$(4.34) \quad \beta_3 = \frac{1}{2c^2} \left(\Delta P + \varrho c \Delta v \Leftrightarrow \frac{k' P_q}{k' \Leftrightarrow \varrho c} \Delta q \right).$$

Nachrechnen zeigt, daß mit den Werten β_0 bis β_3 auch

$$(4.35) \quad \Delta \mathbf{F} = \sum_{k=0}^3 a_k \beta_k \mathbf{r}_k + O(\Delta^2)$$

mit $\Delta \mathbf{F} := \mathbf{F}_r \Leftrightarrow \mathbf{F}_1$ erfüllt ist.

Im folgenden wird nun das algebraische Problem betrachtet, Mittelwerte zu finden, so daß die Relationen (4.23) und (4.35) für beliebige Zustände \mathbf{U}_1 und \mathbf{U}_r gelten, die nicht unbedingt dicht beieinander liegen müssen. Genauer gesagt werden Mittelwerte

$$\bar{\varrho}, \quad \bar{v}, \quad \bar{q}, \quad \bar{P}, \quad \bar{\varepsilon}, \quad \bar{k}', \quad \bar{H}, \quad \bar{P}_q, \quad \bar{P}_\varrho \quad \text{und} \quad \bar{P}_\varepsilon$$

gesucht, so daß die Gleichungen

$$(4.36) \quad \Delta \mathbf{U} = \sum_{k=0}^3 \bar{\beta}_k \bar{\mathbf{r}}_k$$

und

$$(4.37) \quad \Delta \mathbf{F} = \sum_{k=0}^3 \bar{a}_k \bar{\beta}_k \bar{\mathbf{r}}_k$$

mit

$$(4.38) \quad \bar{a}_{0,1,2,3} = \quad \bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}}, \quad \bar{v} \Leftrightarrow \bar{c}, \quad \bar{v}, \quad \bar{v} + \bar{c},$$

$$(4.39) \quad \bar{\mathbf{r}}_{0,1,2,3} = \begin{pmatrix} \bar{q} + \frac{\bar{k}'^2 - \bar{\varrho}^2 \bar{c}^2}{\bar{\varrho} \bar{P}_q} \\ 1 \\ \bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \\ \bar{H} + \bar{v} \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \bar{q} \\ 1 \\ \bar{v} \Leftrightarrow \bar{c} \\ \bar{H} \Leftrightarrow \bar{v} \bar{c} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \bar{q} \\ 1 \\ \bar{v} \\ \bar{H} \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{c}^2}{\bar{P}_\varepsilon} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \bar{q} \\ 1 \\ \bar{v} + \bar{c} \\ \bar{H} + \bar{v} \bar{c} \end{pmatrix},$$

$$(4.40) \quad \begin{aligned} \bar{\beta}_0 &= \frac{\bar{\varrho}^2 \bar{P}_q}{\bar{k}'^2 \Leftrightarrow \bar{\varrho}^2 \bar{c}^2} \Delta q, \\ \bar{\beta}_1 &= \frac{1}{2\bar{c}^2} \left(\Delta P \Leftrightarrow \bar{\varrho} \bar{c} \Delta v \Leftrightarrow \frac{\bar{k}' \bar{P}_q}{\bar{k}' + \bar{\varrho} \bar{c}} \Delta q \right), \\ \bar{\beta}_2 &= \Delta \varrho \Leftrightarrow \frac{\Delta P}{\bar{c}^2} + \frac{\bar{P}_q \Delta q}{\bar{c}^2}, \\ \bar{\beta}_3 &= \frac{1}{2\bar{c}^2} \left(\Delta P + \bar{\varrho} \bar{c} \Delta v \Leftrightarrow \frac{\bar{k}' \bar{P}_q}{\bar{k}' \Leftrightarrow \bar{\varrho} \bar{c}} \Delta q \right) \end{aligned}$$

und

$$(4.41) \quad \bar{c}^2 = \frac{\bar{P}\bar{P}_\varepsilon}{\bar{\varrho}^2} + \bar{P}_\varrho$$

gelten. Das Problem, die oben genannten Mittelwerte zu suchen, so daß (4.36) bis (4.41) gelten, ist äquivalent zu dem von Roe in [34] für ideale Gase betrachteten Problem, eine Approximation der Jacobimatrix zu suchen, die die Mittelwertseigenschaft (2.16) erfüllt. Der erste Schritt bei der Lösung dieses Problems ist, die Gleichungen (4.36) und (4.37) explizit auszuschreiben. Dies ergibt

$$(4.42a) \quad \Delta(\varrho q) = \bar{q} (\bar{\beta}_0 + \bar{\beta}_1 + \bar{\beta}_2 + \bar{\beta}_3) + \bar{\beta}_0 \frac{\bar{k}'^2 \Leftrightarrow \bar{\varrho}^2 \bar{c}^2}{\bar{\varrho} \bar{P}_q},$$

$$(4.42b) \quad \Delta \varrho = \bar{\beta}_0 + \bar{\beta}_1 + \bar{\beta}_2 + \bar{\beta}_3,$$

$$(4.42c) \quad \Delta(\varrho v) = \bar{\beta}_0 \left(\bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right) + \bar{\beta}_1 (\bar{v} \Leftrightarrow \bar{c}) + \bar{\beta}_2 \bar{v} + \bar{\beta}_3 (\bar{v} + \bar{c}),$$

$$(4.42d) \quad \Delta(\varrho \varepsilon) + \Delta\left(\frac{\varrho v^2}{2}\right) = \bar{\beta}_0 \left(\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 + \frac{\bar{v} \bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right) + \bar{\beta}_1 \left(\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 \Leftrightarrow \bar{v} \bar{c} \right) \\ + \bar{\beta}_2 \left(\bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{P}_\varrho}{\bar{P}_\varepsilon} \right) + \bar{\beta}_3 \left(\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 + \bar{v} \bar{c} \right),$$

$$(4.42e) \quad \Delta(\varrho v q) + \Delta k = \bar{\beta}_0 \left(\bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right) \left(\bar{q} + \frac{\bar{k}'^2 \Leftrightarrow \bar{\varrho}^2 \bar{c}^2}{\bar{\varrho} \bar{P}_q} \right) \\ + \bar{\beta}_1 \bar{q} (\bar{v} \Leftrightarrow \bar{c}) + \bar{\beta}_2 \bar{q} \bar{v} + \bar{\beta}_3 \bar{q} (\bar{v} + \bar{c}),$$

$$(4.42f) \quad \Delta(\varrho v) = \bar{\beta}_0 \left(\bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right) + \bar{\beta}_1 (\bar{v} \Leftrightarrow \bar{c}) + \bar{\beta}_2 \bar{v} + \bar{\beta}_3 (\bar{v} + \bar{c}),$$

$$(4.42g) \quad \Delta P + \Delta(\varrho v^2) = \bar{\beta}_0 \left(\bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right)^2 + \bar{\beta}_1 (\bar{v} \Leftrightarrow \bar{c})^2 + \bar{\beta}_2 \bar{v}^2 + \bar{\beta}_3 (\bar{v} + \bar{c})^2,$$

$$(4.42h) \quad \Delta(\varrho v \varepsilon) + \Delta\left(\frac{\varrho v^3}{2}\right) + \Delta(v P) \\ = \bar{\beta}_0 \left(\bar{v} + \frac{\bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right) \left(\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 + \frac{\bar{v} \bar{k}'}{\bar{\varrho}} \right) \\ + \bar{\beta}_1 (\bar{v} \Leftrightarrow \bar{c}) \left(\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 \Leftrightarrow \bar{v} \bar{c} \right) \\ + \bar{\beta}_2 \bar{v} \left(\bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 \Leftrightarrow \frac{\bar{\varrho} \bar{P}_\varrho}{\bar{P}_\varepsilon} \right) + \bar{\beta}_3 (\bar{v} + \bar{c}) \left(\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 + \bar{v} \bar{c} \right).$$

Die Gleichung (4.42b) ist für beliebige Mittelwerte erfüllt und die Gleichungen (4.42c) und (4.42f) sind identisch. Die Gleichung (4.42e) geht mit der Gleichung (4.42b) über in

$$(4.43) \quad \Delta(\varrho v q) + \Delta k = \bar{q} \bar{v} \Delta \varrho + \bar{q} \bar{\varrho} \Delta v + \bar{\varrho} \bar{v} \Delta q + \bar{k}' \Delta q.$$

Jetzt ist es naheliegend anzunehmen, daß

$$(4.44) \quad \Delta(\varrho v q) = \bar{q}\bar{v}\Delta\varrho + \bar{q}\bar{\varrho}\Delta v + \bar{\varrho}\bar{v}\Delta q$$

gilt, und damit gilt auch

$$(4.45) \quad \Delta k = \bar{k}'\Delta q .$$

Für $q_l = 0$ und $q_r = 1$ gilt $\Delta q \neq 0$ und aus $k(0) = k(1)$ folgt $\Delta k = 0$ und damit $\bar{k}' = 0$. Für $q_l = q_r$ ist die Gleichung (4.45) für beliebige \bar{k}' erfüllt, so daß

$$(4.46) \quad \boxed{\bar{k}' = 0}$$

gesetzt werden kann. Aus der Gleichung (4.42g) ergibt sich dann

$$(4.47) \quad \Delta(\varrho v^2) = \bar{v}^2\Delta\varrho + 2\bar{v}\bar{\varrho}\Delta v ,$$

und aus den Gleichungen (4.42c) und (4.46) folgt

$$(4.48) \quad \bar{\varrho}\Delta v = \Delta(\varrho v) \Leftrightarrow \bar{v}\Delta\varrho .$$

Eingesetzt in das Zwischenergebnis (4.47) erhält man den Mittelwert für die Geschwindigkeit

$$(4.49) \quad \boxed{\bar{v} = \frac{\sqrt{\varrho_l}v_l + \sqrt{\varrho_r}v_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}}$$

und damit auch den für die Dichte

$$(4.50) \quad \boxed{\bar{\varrho} = \sqrt{\varrho_l\varrho_r}} .$$

Aus den Gleichungen (4.42a), (4.42b) und (4.32) erhält man

$$(4.51) \quad \Delta(\varrho q) = \bar{\varrho}\Delta q + \bar{q}\Delta\varrho$$

und daraus mit dem Mittelwert der Dichte (4.50) den Mittelwert der Zusatzvariablen

$$(4.52) \quad \boxed{\bar{q} = \frac{\sqrt{\varrho_l}q_l + \sqrt{\varrho_r}q_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}} .$$

Mit den drei zuletzt hergeleiteten Roe-Mittelwerten ist auch die Gleichung (4.44) erfüllt und man kann zeigen, daß die Gleichungen

$$(4.53) \quad \Delta\left(\frac{\varrho v^3}{2}\right) \Leftrightarrow \frac{\bar{v}^3}{2}\Delta\varrho \Leftrightarrow 3\frac{\bar{\varrho}\bar{v}^2}{2}\Delta v = \frac{(\Delta v)^3\bar{\varrho}^2}{2(\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r})^2} ,$$

$$(4.54) \quad \Delta(vP) \Leftrightarrow \bar{v} \Delta P = \bar{\rho} \Delta v \frac{\sqrt{\bar{\rho}_l} \frac{P_l}{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r} \frac{P_r}{\bar{\rho}_r}}{\sqrt{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r}},$$

$$(4.55) \quad \frac{\sqrt{\bar{\rho}_l} v_l^2 + \sqrt{\bar{\rho}_r} v_r^2}{\sqrt{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r}} \Leftrightarrow \bar{v}^2 = \frac{\bar{\rho} (\Delta v)^2}{(\sqrt{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r})^2}$$

und

$$(4.56) \quad \Delta(\rho v \varepsilon) \Leftrightarrow \bar{v} \Delta(\rho \varepsilon) = \bar{\rho} \Delta v \frac{\sqrt{\bar{\rho}_l} \varepsilon_l + \sqrt{\bar{\rho}_r} \varepsilon_r}{\sqrt{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r}}$$

gelten, die später benötigt werden.

Es bleiben nun die Gleichungen (4.42d) und (4.42h), die nach einigen Umformungen unter Verwendung der Gleichungen (4.42b) und (4.47) in die Form

$$(4.57) \quad \Delta(\rho \varepsilon) \Leftrightarrow \bar{\varepsilon} \Delta \rho \Leftrightarrow \frac{\bar{P} \Delta P}{\bar{\rho} \bar{c}^2} + \bar{\beta}_2 \bar{\rho} \frac{\bar{P}_\rho}{\bar{P}_\varepsilon} + \frac{\bar{P} \bar{P}_q \Delta q}{\bar{\rho} \bar{c}^2} = 0$$

und

$$(4.58) \quad \begin{aligned} \Delta(\rho v \varepsilon) \Leftrightarrow \bar{v} \bar{\varepsilon} \Delta \rho \Leftrightarrow \bar{\rho} \bar{\varepsilon} \Delta v + \Delta(vP) \Leftrightarrow \bar{v} \Delta P \Leftrightarrow \bar{P} \Delta v \Leftrightarrow \frac{\bar{v} \bar{P} \Delta P}{\bar{\rho} \bar{c}^2} \\ + \Delta\left(\frac{\rho v^3}{2}\right) \Leftrightarrow \frac{\bar{v}^3}{2} \Delta \rho \Leftrightarrow \frac{3}{2} \bar{\rho} \bar{v}^2 \Delta v + \bar{\beta}_2 \bar{\rho} \bar{v} \frac{\bar{P}_\rho}{\bar{P}_\varepsilon} + \frac{\bar{v} \bar{P} \bar{P}_q \Delta q}{\bar{\rho} \bar{c}^2} = 0 \end{aligned}$$

gebracht werden können. Subtrahiert man die Gleichung (4.57) multipliziert mit \bar{v} von der Gleichung (4.58) und verwendet die Gleichungen (4.53) bis (4.56), so erhält man nach Division durch $\bar{\rho} \Delta v$

$$(4.59) \quad \frac{\bar{P}}{\bar{\rho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2 = \frac{\sqrt{\bar{\rho}_l} \left(\frac{P_l}{\bar{\rho}_l} + \varepsilon_l + \frac{1}{2} v_l^2 \right) + \sqrt{\bar{\rho}_r} \left(\frac{P_r}{\bar{\rho}_r} + \varepsilon_r + \frac{1}{2} v_r^2 \right)}{\sqrt{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r}}.$$

Definiert man den Mittelwert der Enthalpie durch

$$(4.60) \quad \bar{H} := \frac{\bar{P}}{\bar{\rho}} + \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \bar{v}^2,$$

so ergibt sich aus der Gleichung (4.59) der Mittelwert

$$(4.61) \quad \boxed{\bar{H} = \frac{\sqrt{\bar{\rho}_l} H_l + \sqrt{\bar{\rho}_r} H_r}{\sqrt{\bar{\rho}_l} + \sqrt{\bar{\rho}_r}}}.$$

Bekannt sind jetzt die Mittelwerte \bar{q} , $\bar{\varrho}$, \bar{v} , \bar{k}' und $\frac{\bar{P}}{\bar{\varrho}} + \bar{\varepsilon}$. Um auch die Werte \bar{P}_q , \bar{P}_ϱ , \bar{P}_ε und $\bar{\varepsilon}$ (und damit auch \bar{P}) zu erhalten, wird die Gleichung (4.57) genauer betrachtet. Das Einsetzen von $\bar{\beta}_2$ nach (4.40) führt nach einigen Umformungen auf die Gleichung

$$(4.62) \quad \Delta(\varrho\varepsilon) \Leftrightarrow \bar{\varepsilon}\Delta\varrho \Leftrightarrow \bar{\varrho}\Delta\varepsilon + \frac{\bar{\varrho}}{\bar{P}_\varepsilon} (\bar{P}_\varepsilon\Delta\varepsilon + \bar{P}_\varrho\Delta\varrho \Leftrightarrow \Delta P + \bar{P}_q\Delta q) = 0 .$$

Der einfachste Weg ist hier getrennt

$$(4.63) \quad \Delta(\varrho\varepsilon) \Leftrightarrow \bar{\varepsilon}\Delta\varrho \Leftrightarrow \bar{\varrho}\Delta\varepsilon = 0$$

und

$$(4.64) \quad \bar{P}_\varepsilon\Delta\varepsilon + \bar{P}_\varrho\Delta\varrho \Leftrightarrow \Delta P + \bar{P}_q\Delta q = 0$$

zu fordern, woraus sich direkt

$$(4.65) \quad \boxed{\bar{\varepsilon} = \frac{\sqrt{\varrho_l}\varepsilon_l + \sqrt{\varrho_r}\varepsilon_r}{\sqrt{\varrho_l} + \sqrt{\varrho_r}}}$$

und

$$(4.66) \quad \Delta P = \bar{P}_\varepsilon\Delta\varepsilon + \bar{P}_\varrho\Delta\varrho + \bar{P}_q\Delta q$$

ergibt. Bei der Wahl der Werte \bar{P}_q , \bar{P}_ϱ und \bar{P}_ε , die die obige Gleichung erfüllen, hat man mehrere Möglichkeiten. Im folgenden wird die Idee von Liou, van Leer und Shuen [26] auf das erweiterte System übertragen.

Zunächst werden die Bezeichnungen

$$(4.67) \quad \tilde{P}_\varrho := P_\varrho(\bar{q}, \bar{\varrho}, \bar{\varepsilon}) , \quad \tilde{P}_\varepsilon := P_\varepsilon(\bar{q}, \bar{\varrho}, \bar{\varepsilon}) , \quad \tilde{P}_q := P_q(\bar{q}, \bar{\varrho}, \bar{\varepsilon})$$

eingeführt. Diese Mittelwerte erfüllen im allgemeinen nicht die Bedingung (4.66), das heißt man erhält einen Fehler δP mit

$$(4.68) \quad \delta P = \Delta P \Leftrightarrow \tilde{P}_\varrho\Delta\varrho \Leftrightarrow \tilde{P}_\varepsilon\Delta\varepsilon \Leftrightarrow \tilde{P}_q\Delta q .$$

Mittelwerte \bar{P}_q , \bar{P}_ϱ und \bar{P}_ε , die der Bedingung (4.66) genügen, können in der Form

$$(4.69) \quad \boxed{\bar{P}_\varrho = \tilde{P}_\varrho + \omega \frac{\delta P}{\Delta\varrho}} ,$$

$$(4.70) \quad \boxed{\bar{P}_\varepsilon = \tilde{P}_\varepsilon + \nu \frac{\delta P}{\Delta\varepsilon}} ,$$

$$(4.71) \quad \boxed{\bar{P}_q = \tilde{P}_q + (1 \Leftrightarrow \omega \Leftrightarrow \nu) \frac{\delta P}{\Delta q}}$$

geschrieben werden. Setzt man diese Ausdrücke in die Gleichung (4.66) ein, so sieht man, daß sie erfüllt ist. Die Parameter ω und ν legen fest, wie das Residuum auf die Mittelwerte für die verschiedenen Druckableitungen verteilt wird. Dabei sollten sie so gewählt werden, daß die Grenzwerte

$$\lim_{\Delta \varrho \rightarrow 0} \frac{\omega}{\Delta \varrho} \quad , \quad \lim_{\Delta \varepsilon \rightarrow 0} \frac{\nu}{\Delta \varepsilon} \quad \text{und} \quad \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{1 \Leftrightarrow \omega \Leftrightarrow \nu}{\Delta q}$$

existieren. Eine geeignete Wahl ist somit

$$(4.72) \quad \omega = \frac{|\tilde{P}_\varrho \Delta \varrho|}{|\tilde{P}_\varrho \Delta \varrho| + |\tilde{P}_\varepsilon \Delta \varepsilon| + |\tilde{P}_q \Delta q|} \quad \text{und} \quad \nu = \frac{|\tilde{P}_\varepsilon \Delta \varepsilon|}{|\tilde{P}_\varrho \Delta \varrho| + |\tilde{P}_\varepsilon \Delta \varepsilon| + |\tilde{P}_q \Delta q|}$$

oder

$$(4.73) \quad \omega = \frac{(\tilde{P}_\varrho \Delta \varrho)^2}{(\tilde{P}_\varrho \Delta \varrho)^2 + (\tilde{P}_\varepsilon \Delta \varepsilon)^2 + (\tilde{P}_q \Delta q)^2} \quad \text{und} \quad \nu = \frac{(\tilde{P}_\varepsilon \Delta \varepsilon)^2}{(\tilde{P}_\varrho \Delta \varrho)^2 + (\tilde{P}_\varepsilon \Delta \varepsilon)^2 + (\tilde{P}_q \Delta q)^2} .$$

Streben die Differenzen $\Delta \varrho$, $\Delta \varepsilon$ und Δq gleichzeitig gegen Null, so strebt das Residuum (4.68) ebenfalls gegen Null und es gilt $\bar{P}_\varrho = \tilde{P}_\varrho$, $\bar{P}_\varepsilon = \tilde{P}_\varepsilon$ und $\bar{P}_q = \tilde{P}_q$.

Die Mittelwerte für die Schallgeschwindigkeit und den Druck lassen sich dann aus den übrigen Mittelwerten nach den Gleichungen (4.41) und (4.60) zu

$$(4.74) \quad \boxed{\bar{P} = \bar{\varrho} \left(\bar{H} \Leftrightarrow \bar{\varepsilon} \Leftrightarrow \frac{1}{2} \bar{v}^2 \right)} \quad \text{und} \quad \boxed{\bar{c} = \sqrt{\frac{\bar{P} \bar{P}_\varepsilon}{\bar{\varrho}^2} + \bar{P}_\varrho}}$$

berechnen. Jetzt stehen alle Mittelwerte zur Verfügung (sämtliche eingerahmte Formeln), um den numerischen Fluß nach Roe

$$(4.75) \quad \mathbf{G}_{\text{roe}}(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_r) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}(\mathbf{U}_l) + \mathbf{F}(\mathbf{U}_r)) \Leftrightarrow \frac{1}{2} \sum_{i=0}^3 |\bar{a}_i| \bar{\beta}_i \bar{\mathbf{r}}_i$$

mit den Gleichungen (4.38) - (4.40) zu berechnen. Im numerischen Verfahren wird die erste Komponente des Flusses nicht verwendet, da die zusätzliche Erhaltungsgleichung nur zur Bestimmung der Roe-Mittelwerte benötigt wird. Da dieses Verfahren in Kombination mit einem bewegten Rengitter angewendet wird, wird die Zusatzgleichung auch nicht zur Verfolgung der Materialgrenze benötigt.

Der Fluß des HLL-Verfahrens ergibt sich nach Formel (2.34) mit den Signalgeschwindigkeiten nach (4.38) und die Einfeldt-Modifikation (2.39) mit den oben hergeleiteten Werten für β_2 und \mathbf{r}_2 .

Kapitel 5

Verfahren höherer Ordnung

Die im zweiten Kapitel vorgestellten Godunov-Typ-Verfahren sind Verfahren erster Ordnung in Raum und Zeit. Um genauere Approximationen zu erhalten, müssen Verfahren zweiter Ordnung in Raum und Zeit verwendet werden. Solche Verfahren werden in diesem Kapitel betrachtet, wobei speziell der Einfluß der Gitterbewegung auf die Ordnung des Verfahrens untersucht wird.

Van Leer [40] schlug einen Zweischnitt-Algorithmus zweiter Ordnung vor, welchen er MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws)-Verfahren nannte. Verfahren, die auf diesem Ansatz aufbauen, werden daher MUSCL-Typ-Verfahren genannt. Die zentrale Idee von van Leer ist, Godunovs Annahme einer stückweise konstanten Näherungslösung durch die Annahme einer innerhalb der Gitterzelle linearen Näherungslösung zu ersetzen (vergleiche Abbildung 5.1).

Ist \mathbf{u}_i^n der Wert von \mathbf{u} im Zellmittelpunkt der i -ten Zelle zur Zeit t_n , so wird die Lösung beim Godunov-Verfahren erster Ordnung durch

$$(5.1) \quad \mathbf{u}(x, t_n) = \mathbf{u}_i^n \quad , \quad x \in I_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$$

approximiert. Beim MUSCL-Typ-Verfahren wird die lineare Näherung

$$(5.2) \quad \mathbf{u}(x, t_n) = \mathbf{u}_i^n + (x \ominus x_i) \mathbf{s}_i^n \quad , \quad x \in I_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$$

angesetzt, wobei \mathbf{s}_i^n die Steigung im i -ten Gitterintervall bezeichnet. Damit sind die Randwerte an den Gitterzellen rechts (+) und links (-) durch

$$(5.3) \quad \mathbf{u}_{i\pm}^n = \mathbf{u}_i^n \pm \frac{\Delta x_i^n}{2} \mathbf{s}_i^n$$

gegeben. Die Steigungsberechnung ist verantwortlich für die zweite Ordnung im Raum und muß geeignet gewählt werden [28, 31, 40]. Am Ende dieses Abschnittes wird noch etwas

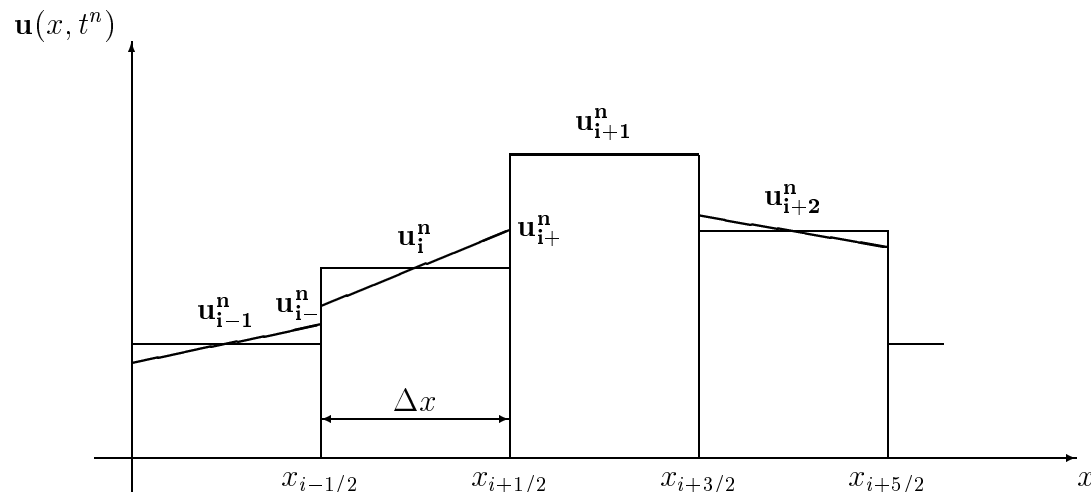


Abbildung 5.1: Stückweise lineare Approximation

genauer auf die Art der Steigungsberechnung eingegangen. Man erhält eine genauere Approximation der Flüsse zwischen den einzelnen Gitterzellen, wenn man die Randwerte (5.3) in den numerischen Fluß einsetzt. Um auch zeitlich eine bessere Approximation zu erzielen, wird zunächst einen halben Zeitschritt vorausgerechnet. Dabei werden die Änderungen innerhalb einer Gitterzelle, d.h. die Änderungen der Randwerte rechts und links, betrachtet. Da die Näherungslösung innerhalb einer Gitterzelle stetig ist, kann die Änderung in einem halben Zeitschritt durch eine Taylorentwicklung approximiert werden.

5.1 Taylorentwicklung für zeitlich veränderliche Gitter

Auch bei der Taylorentwicklung zur Spezifikation der Ordnung muß berücksichtigt werden, daß das Rechengitter zeitabhängig ist. Das heißt, es muß die Taylorentwicklung der Funktion $\mathbf{u}(x(t), t)$ um t und die Taylorentwicklung von $x(t)$ betrachtet werden. Die Taylorentwicklungen bzgl. eines Vektors sind komponentenweise zu verstehen. Zunächst werden die benötigten Taylorentwicklungen für eine allgemeine Funktion $\mathbf{u}(t)$, die nur von der Zeit abhängt, angegeben. Die Taylorentwicklung bis zur Ordnung eins lautet

$$(5.4) \quad \mathbf{u}(t + \Delta t/2) = \mathbf{u}(t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}_t(t) + O(\Delta t^2) .$$

Für die Taylorentwicklungen bis zur zweiten Ordnung gelten die beiden Gleichungen

$$(5.5) \quad \mathbf{u}(t + \Delta t/2) = \mathbf{u}(t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}_t(t) + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{u}_{tt}(t) + O(\Delta t^3)$$

und

$$(5.6) \quad \mathbf{u}(t + \Delta t/2) = \mathbf{u}(t + \Delta t) \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}_t(t + \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{u}_{tt}(t + \Delta t) + O(\Delta t^3) .$$

Setzt man für $\mathbf{u}_{tt}(t + \Delta t)$ die Taylorentwicklung

$$\mathbf{u}_{tt}(t + \Delta t) = \mathbf{u}_{tt}(t) + \Delta t \mathbf{u}_{ttt}(t) + O(\Delta t^2)$$

an, so erhält man aus (5.6) die Gleichung

$$(5.7) \quad \mathbf{u}(t + \Delta t/2) = \mathbf{u}(t + \Delta t) \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}_t(t + \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{4} \mathbf{u}_{tt}(t) + O(\Delta t^3)$$

Subtrahiert man die Gleichung (5.7) von der Gleichung (5.5), so ergibt sich

$$(5.8) \quad \mathbf{u}(t + \Delta t) = \mathbf{u}(t) + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u}_t(t) + \mathbf{u}_t(t + \Delta t)) + O(\Delta t^3) .$$

Für die Zeitableitung der Funktion \mathbf{u} gelten die Taylorentwicklungen

$$\mathbf{u}_t(t) = \mathbf{u}_t(t + \Delta t/2) \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}_{tt}(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^2)$$

und

$$\mathbf{u}_t(t + \Delta t) = \mathbf{u}_t(t + \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}_{tt}(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^2) .$$

Setzt man die letzten beiden Gleichungen in die Gleichung (5.8) ein, so ergibt sich

$$(5.9) \quad \mathbf{u}(t + \Delta t) = \mathbf{u}(t) + \Delta t \mathbf{u}_t(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^3) .$$

Für die Ortsvariable $x = x(t)$ ist die Ableitung $\frac{dx}{dt}(t)$ gleich der Gittergeschwindigkeit $v_g(t)$. Damit lauten die Gleichungen (5.4) und (5.9) für die Ortsvariable

$$(5.10) \quad x(t + \Delta t/2) = x(t) + \frac{\Delta t}{2} v_g(t) + O(\Delta t^2)$$

und

$$(5.11) \quad x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t v_g(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^3) .$$

Für die Funktion $\mathbf{u}(x(t), t)$ mit zeitabhängiger Ortsvariable ergeben sich dann unter Berücksichtigung der inneren Ableitung die Gleichungen

$$(5.12) \quad \begin{aligned} \mathbf{u}(x(t + \Delta t/2), t + \Delta t/2) &= \mathbf{u}(x(t), t) + \frac{\Delta t}{2} (v_g(t) \mathbf{u}_x(x(t), t) \\ &\quad + \mathbf{u}_t(x(t), t)) + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

und

$$(5.13) \quad \begin{aligned} \mathbf{u}(x(t + \Delta t), t + \Delta t) &= \mathbf{u}(x(t), t) + \Delta t (v_g(t + \Delta t/2)) \cdot \\ \mathbf{u}_x(x(t + \Delta t/2), t + \Delta t/2) &+ \mathbf{u}_t(x(t + \Delta t/2), t + \Delta t/2)) + O(\Delta t^3) . \end{aligned}$$

Die Zeitableitungen in den Gleichungen (5.12) und (5.13) lassen sich jetzt mit

$$(5.14) \quad \mathbf{u}_t(x, t) + \mathbf{f}_x(x, t) = 0$$

durch Raumableitungen ersetzen, und man erhält

$$(5.15) \quad \begin{aligned} \mathbf{u}(x(t + \Delta t/2), t + \Delta t/2) &= \mathbf{u}(x(t), t) + \frac{\Delta t}{2} (v_g(t) \mathbf{u}_x(x(t), t) \\ &\Leftrightarrow \mathbf{f}_x(\mathbf{u}(x(t), t))) + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

und

$$(5.16) \quad \begin{aligned} \mathbf{u}(x(t + \Delta t), t + \Delta t) &= \mathbf{u}(x(t), t) \\ &+ \Delta t (v_g(t + \Delta t/2) \mathbf{u}_x(x(t + \Delta t/2), t + \Delta t/2) \\ &\Leftrightarrow \mathbf{f}_x(\mathbf{u}(x(t + \Delta t/2), t + \Delta t/2))) + O(\Delta t^3) . \end{aligned}$$

Da im MUSCL-Typ-Verfahren zunächst einen halben Zeitschritt vorausgerechnet wird, kann es als ein Zweischritt-Verfahren angesehen werden. Der erste Schritt besteht dabei aus der Berechnung der Werte am Zellrand zum Zeitpunkt t_n nach Gleichung (5.3) und der Änderung während eines halben Zeitschritts, die sich aus der Taylorentwicklung (5.15) zu

$$(5.17) \quad \mathbf{u}_{i\pm}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{u}_{i\pm}^n \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{2\Delta x_i^n} (\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+}^n) \Leftrightarrow \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i-}^n) \Leftrightarrow v_{g,i}^n (\mathbf{u}_{i+}^n \Leftrightarrow \mathbf{u}_{i-}^n))$$

ergibt. Außerdem wird noch die Änderung der Gitterpunkte

$$(5.18) \quad x_i^{n+\frac{1}{2}} = x_i^n + \frac{\Delta t}{2} v_{g,i}^n$$

benötigt, die sich aus der Taylorentwicklung (5.10) ergibt. Im zweiten Schritt wird dann der Wert zum Zeitpunkt t_{n+1} entsprechend der Taylorentwicklung (5.16) zu

$$(5.19) \quad \mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n \Leftrightarrow \frac{\Delta t}{2\Delta x_i^{n+\frac{1}{2}}} (\mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \Leftrightarrow \mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})$$

berechnet. Dabei bezeichnet \mathbf{h} den numerischen Fluß, der hier eine Näherung für $\mathbf{f}(\mathbf{u}) \Leftrightarrow v_g \mathbf{u}$ ist. Als Argumente verwendet man die im ersten Schritt berechneten Werte, das heißt

$$(5.20) \quad \begin{aligned} \mathbf{h}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{h} \left(\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_{(i+1)-}^{n+\frac{1}{2}}; v_{g,i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) , \\ \mathbf{h}_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{h} \left(\mathbf{u}_{(i-1)+}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_{i-}^{n+\frac{1}{2}}; v_{g,i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) . \end{aligned}$$

5.2 Die Steigungsberechnung

Wie bereits erwähnt, entsteht durch geeignete Steigungsberechnungen die zweite Ordnung im Raum. Im skalaren Fall ist

$$(5.21) \quad s_i^n = \frac{1}{\Delta x} \text{minmod}(u_{i+1} \Leftrightarrow u_i, u_i \Leftrightarrow u_{i-1})$$

eine geeignete Steigungsberechnung, wobei die minmod-Funktion durch

$$(5.22) \quad \text{minmod}(a, b) := \begin{cases} a & \text{für } |a| < |b|, ab > 0 \\ b & \text{für } |a| \geq |b|, ab > 0 \\ 0 & \text{für } ab \leq 0 \end{cases}$$

definiert ist. Es wird also derjenige Wert der Steigungen nach rechts oder links verwendet, welcher den kleineren Betrag besitzt und Null, falls ein Extremum vorliegt. Durch diese Wahl der Steigungsberechnung wird sichergestellt, daß in der stückweise linearen Approximation keine neuen lokalen Extrema entstehen oder bestehende anwachsen. Diese skalaren Steigungsberechnungen müssen geeignet auf Systeme übertragen werden.

Der einfachste Weg ist, die Steigungen in den Erhaltungsgrößen oder in den primitiven Variablen zu berechnen. Eine bessere Übertragung der skalaren Theorie auf Systeme erhält man jedoch durch die Verwendung von charakteristischen Variablen, da man hierbei die Richtungen der sich ausbreitenden Wellen besser erfaßt. Dazu führt man eine lokale Linearisierung des nichtlinearen Systems durch, die es ermöglicht, ein lokales System von charakteristischen Variablen zu definieren. Diese Transformation liefert eine Entkopplung der einzelnen Gleichungen, und die skalaren Methoden lassen sich dann in jedem charakteristischen Feld anwenden. Dazu wird in jedem Gitterintervall ein lokaler Mittelwert $\bar{\mathbf{u}}_i$, zum Beispiel durch

$$(5.23) \quad \bar{\mathbf{u}}_i := \frac{1}{4} (\mathbf{u}_{i+1} + 2\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_{i-1})$$

definiert. Dann berechnet man die Eigenvektoren der Matrix $\mathcal{A}(\bar{\mathbf{u}}_i)$ und stellt die links- und rechtsseitigen Differenzenquotienten in der Basis dieser Rechtseigenvektoren dar,

$$(5.24) \quad \frac{1}{\Delta x} (\mathbf{u}_{i+1} \Leftrightarrow \mathbf{u}_i) = \sum_{k=1}^3 \alpha_i^k \mathbf{r}_i^k$$

und

$$(5.25) \quad \frac{1}{\Delta x} (\mathbf{u}_i \Leftrightarrow \mathbf{u}_{i-1}) = \sum_{k=1}^3 \beta_i^k \mathbf{r}_i^k.$$

Die α_i^k , β_i^k sind die Koeffizienten der Differenzenquotienten bzgl. des k-ten charakteristischen Feldes und ein Maß für die Änderung der Erhaltungsgrößen in Richtung des k-ten

Eigenvektors. Man erhält dann einen Steigungsvektor \mathbf{S}_i , indem man auf diese Komponenten jeweils eine skalare Steigungsberechnung anwendet. Verwendet man zum Beispiel die oben erwähnte minmod-Funktion, so erhält man

$$(5.26) \quad \mathbf{S}_i = \sum_{k=1}^3 S_i^k \mathbf{r}_i^k \quad \text{mit} \quad S_i^k = \text{minmod}(\alpha_i^k, \beta_i^k) .$$

Dabei ist es auch möglich, in den verschiedenen charakteristischen Feldern unterschiedliche Steigungsberechnungen anzuwenden.

Kapitel 6

Eindimensionale Rechnungen

Um die Ergebnisse der Kapitel 3 bis 5 darzustellen, wurden zunächst einige eindimensionale Testrechnungen durchgeführt. Das häufig in der Literatur verwendete Sodproblem [37] wurde als erstes Beispiel ausgewählt. Die Resultate zeigen die Verbesserung der numerischen Ergebnisse durch Verwendung bewegter Rechengitter. Die Wechselwirkung einer Stoßwelle mit einer Kontaktunstetigkeit dient als Beispiel dafür, daß Teilgebiete verschwinden können und durch die Erzeugung neuer Teilgebiete die Resultate verbessert werden können. Um echte Materialgrenzen zu simulieren, werden Beispiele mit unterschiedlichen idealen Gasen betrachtet. Durch den Wechsel des Adiabatenexponenten existiert dann ein Sprung in der Zustandsgleichung im betrachteten Rechenggebiet.

Das zu berechnende Gebiet, das hier ein eindimensionales Intervall ist, muß schon bei der Eingabe so in Teilintervalle unterteilt werden, daß jedes Teilintervall nur ein Material enthält und zu verfolgende Wellen auf Randpunkten solcher eindimensionaler Teilgebiete liegen. Für jedes Teilgebiet müssen dann die Anfangswerte von Dichte, Druck und Geschwindigkeit, die zu verwendende Zustandsgleichung und die Methode der Bewegung der Ränder vorgegeben werden.

Für die Bewegung des Randes sind die folgenden Möglichkeiten vorgesehen:

- als freier Rand
- mit der Kontaktunstetigkeit
- mit der Stoßwelle
- mit Schallgeschwindigkeit
- keine Bewegung

Dabei bestehen die Einschränkungen, daß nur innere Ränder mit der Kontaktunstetigkeit oder der Stoßwelle mitbewegt werden können und ein freier Rand nur an einem äußeren Rand vorkommen kann. Mit dieser Vorgabe kann dann in jedem Zeitschritt aus den physikalischen Größen auf beiden Seiten des Randpunktes durch Lösen des Riemannproblems

die Geschwindigkeit des Punktes berechnet werden. Die Randgeschwindigkeit ist im Fall eines freien Randes gleich der Geschwindigkeit in der Randgitterzelle. Bei Bewegung mit der Kontaktunstetigkeit ist sie gleich der mittleren Geschwindigkeit im Riemannlöser und bei Bewegung mit der Stoßwelle gleich der Stoßwellengeschwindigkeit (siehe Kapitel 3). Hat man für alle Randpunkte die Geschwindigkeit berechnet, so werden sie mit dieser Geschwindigkeit bewegt, und in jedem Teilgebiet wird ein neues äquidistantes Rechengitter erzeugt (siehe Abbildung 6.1).

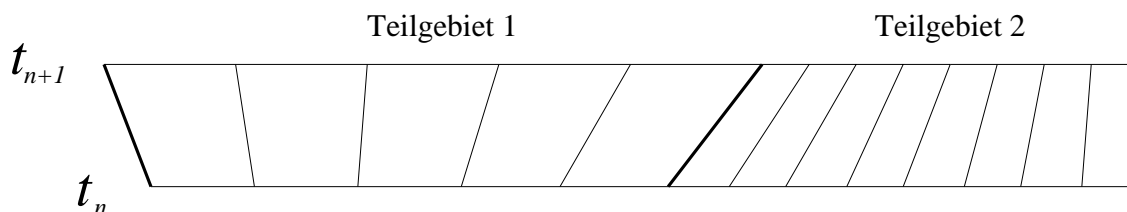


Abbildung 6.1: Ein Beispiel für die Änderung eines Gitters in einem Zeitschritt: Die dicken Linien markieren die Ränder der Teilgebiete, deren Bewegung aus den Riemannproblemen berechnet wird. Die inneren Punkte zum neuen Zeitpunkt werden dann äquidistant zwischen die Ränder gesetzt.

Man erhält so ein Raum-Zeit-Gitter, auf dem die Eulergleichungen mit der sich aus dem Gitter ergebenden Geschwindigkeit jedes inneren Gitterpunktes mit einem der in den Kapiteln 3 und 4 beschriebenen Verfahren gelöst werden. Wie auch in Abbildung 6.1 zu erkennen ist, spielen bei diesen Verfahren Gitterverfeinerung und Gittervergrößerung eine wesentliche Rolle. Da Teilgebiete recht schnell wachsen oder schrumpfen können, würde eine konstante Punktezahl pro Teilgebiet bei kleiner werdenden Gitterintervallen zu immer kleiner werdenden Zeitschritten aufgrund der CFL-Bedingung und damit zu höheren Rechenzeiten führen und auf der anderen Seite zu ungenauer Rechnung bei größer werdenden Gitterintervallen.

Desweiteren werden die Ergebnisse der Simulation verbessert, wenn Teilgebiete hinzugefügt und gelöscht werden können, was im folgenden am zweiten Beispiel, der Wechselwirkung einer Kontaktunstetigkeit mit einer Stoßwelle, verdeutlicht wird. Bewegen sich beide Ränder eines Teilgebiets aufeinander zu, so muß das betreffende Gebiet bei Zusammentreffen der Ränder gelöscht werden und je nach Lösungsstruktur der Rand neu beschrieben und eventuell ein neues Teilgebiet eingeführt werden.

6.1 Das Sodproblem

Als erstes Testbeispiel wird das Sodproblem [37] betrachtet, ein Stoßwellenrohrproblem, das häufig zum Vergleich eines Verfahrens mit anderen verwendet wird. Ein Stoßrohr ist

ein mit Gas gefülltes Rohr, das anfangs durch eine Membran in zwei Bereiche geteilt ist. Dabei ist das Gas in Ruhe und hat in einem Bereich einen höheren Druck und eine höhere Dichte als in dem anderen. Durch Entfernen der Membran beginnt das Gas zu strömen. Dabei entsteht eine Stoßwelle, die sich in den Bereich niedrigeren Drucks ausbreitet. In die entgegengesetzte Richtung läuft eine Verdünnungswelle und dazwischen bildet sich eine Kontaktunstetigkeit. Das Sodproblem ist also ein Riemannproblem mit den Anfangswerten

$$(6.1) \quad (\varrho, v, p) = \begin{cases} (1.0, 0.0, 1.0) & \text{für } x < 0 \\ (0.125, 0.0, 0.1) & \text{für } x > 0 \end{cases} .$$

In diesem Beispiel wird von der Gültigkeit der idealen Gasgleichung (1.3) mit dem Adiabatenexponenten $\gamma = 1.4$ ausgegangen. Die Rechnungen werden auf dem Intervall $[-1, 1]$ und bis zur Zeit $t = 0.5$ durchgeführt. Da dimensionslos gerechnet wird, werden sämtliche Größen ohne Einheiten angegeben. Das Rechenggebiet wird in zwei Teilgebiete links und rechts der Anfangsunstetigkeit zerlegt, die zu Beginn der Rechnungen aus jeweils 100 Gitterintervallen bestehen. Dadurch kann der Rand sowohl mit der Kontaktunstetigkeit als auch mit der Stoßwelle mitbewegt werden. In den folgenden Abbildungen werden die numerischen Ergebnisse für die verschiedenen im 2. und 3. Kapitel vorgestellten Riemannlöser auf nicht bewegtem Gitter, bei Bewegung mit der Kontaktunstetigkeit und mit der Stoßwelle verglichen. Links ist jeweils das Verfahren erster Ordnung, rechts das zweiter Ordnung dargestellt.

In der Abbildung 6.2 ist die Dichte zum Zeitpunkt $t = 0.5$, berechnet mit dem Godunov-Verfahren, über dem Ort aufgetragen. Beim Verfahren erster Ordnung, sowie auch bei Verwendung der zweiten Ordnung werden Kontaktunstetigkeit und Stoß über mehrere Gitterpunkte verschmiert, solange ohne Gitterbewegung gerechnet wird. Bei Verfolgung der Kontaktunstetigkeit treten keine Punkte innerhalb der Unstetigkeit auf, die Werte direkt links und rechts der Kontaktunstetigkeit werden jedoch leicht unterschätzt. Dies liegt jedoch an dem Auffächern der Unstetigkeit in die einzelnen Wellen, eine einzelne Kontaktunstetigkeit wird exakt aufgelöst. Bewegt man den Rand mit der Stoßwelle, so wird diese schon vom Verfahren erster Ordnung exakt aufgelöst, wie im Bild der Dichte (Abbildung 6.2) sowie des Drucks (Abbildung 6.3) zu erkennen ist. Roe- und HLL-Verfahren (Abbildungen 6.4 bis 6.7) liefern bei Verfolgung des Stoßes die gleiche Auflösung, wie aufgrund ihrer Konstruktion zu erwarten ist (siehe Kapitel 3.2 und 3.3).

Beim Roe-Verfahren und der Gitterbewegung mit der Kontaktunstetigkeit wird diese nicht genauso gut aufgelöst wie beim Godunov-Verfahren, aber immer noch wesentlich besser als ohne Gitterbewegung (Abbildung 6.4). Beim HLL-Verfahren und Verfolgung der Kontaktunstetigkeit läßt sich keine Verbesserung gegenüber dem Verfahren ohne Gitterbewegung erzielen. Dies ist jedoch auch zu erwarten, da schon eine einzelne Kontaktunstetigkeit aufgrund der Annahme nur eines mittleren Zustands in der Riemannlösung nicht exakt wiedergegeben werden kann (siehe Kapitel 3.3). Die Kontaktunstetigkeit wird sogar noch etwas stärker gedämpft als durch das Godunov-Verfahren. Da die Ergebnisse des HLLEM-Verfahrens keine wesentlichen Unterschiede zu denen des Roe-Verfahrens zeigen, wird auf ihre Darstellung verzichtet.

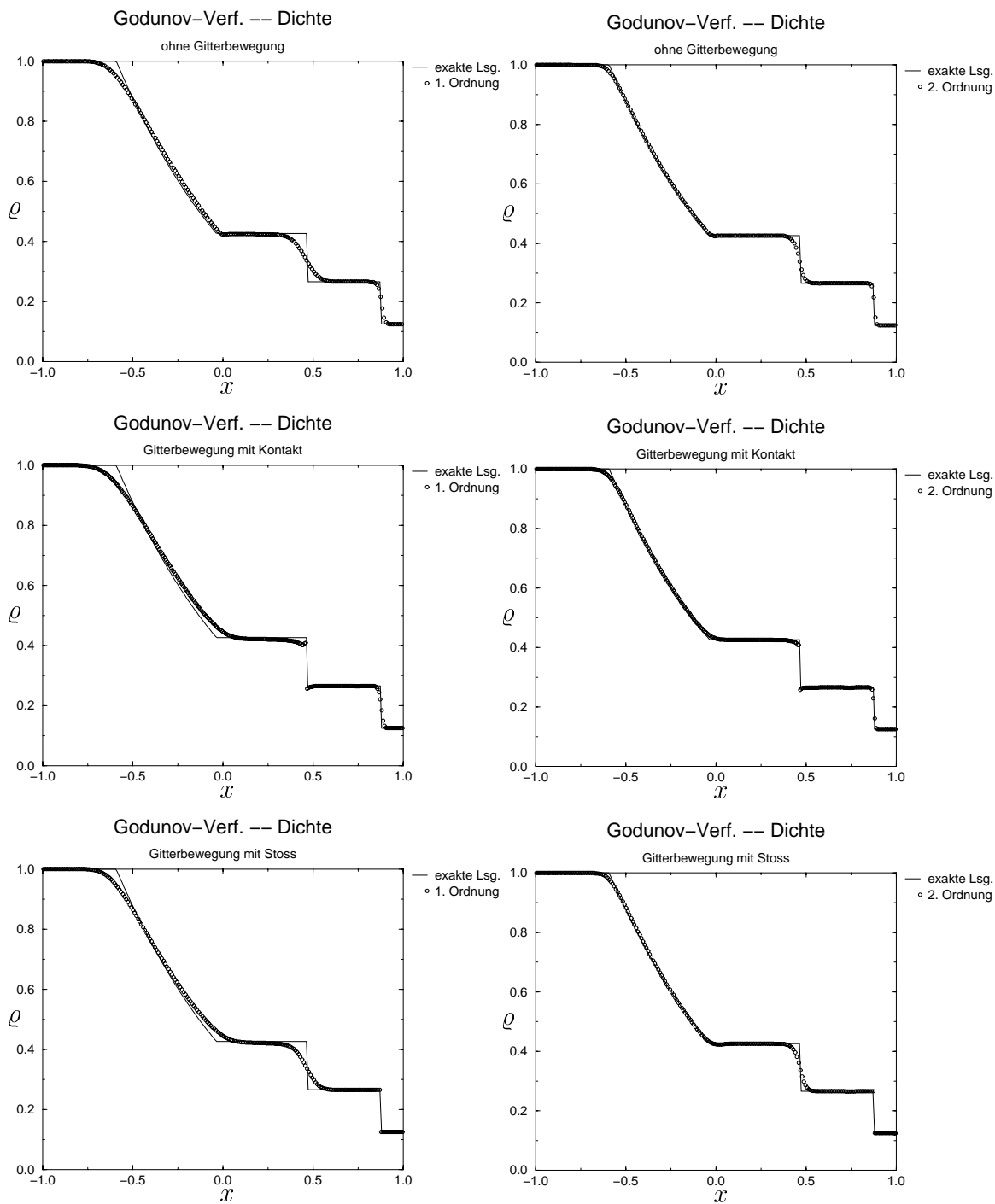


Abbildung 6.2: Vergleich der Dichte bei numerischen Rechnungen mit verschiedenen Gitterbewegungsarten beim Godunov-Verfahren erster (links) und zweiter (rechts) Ordnung

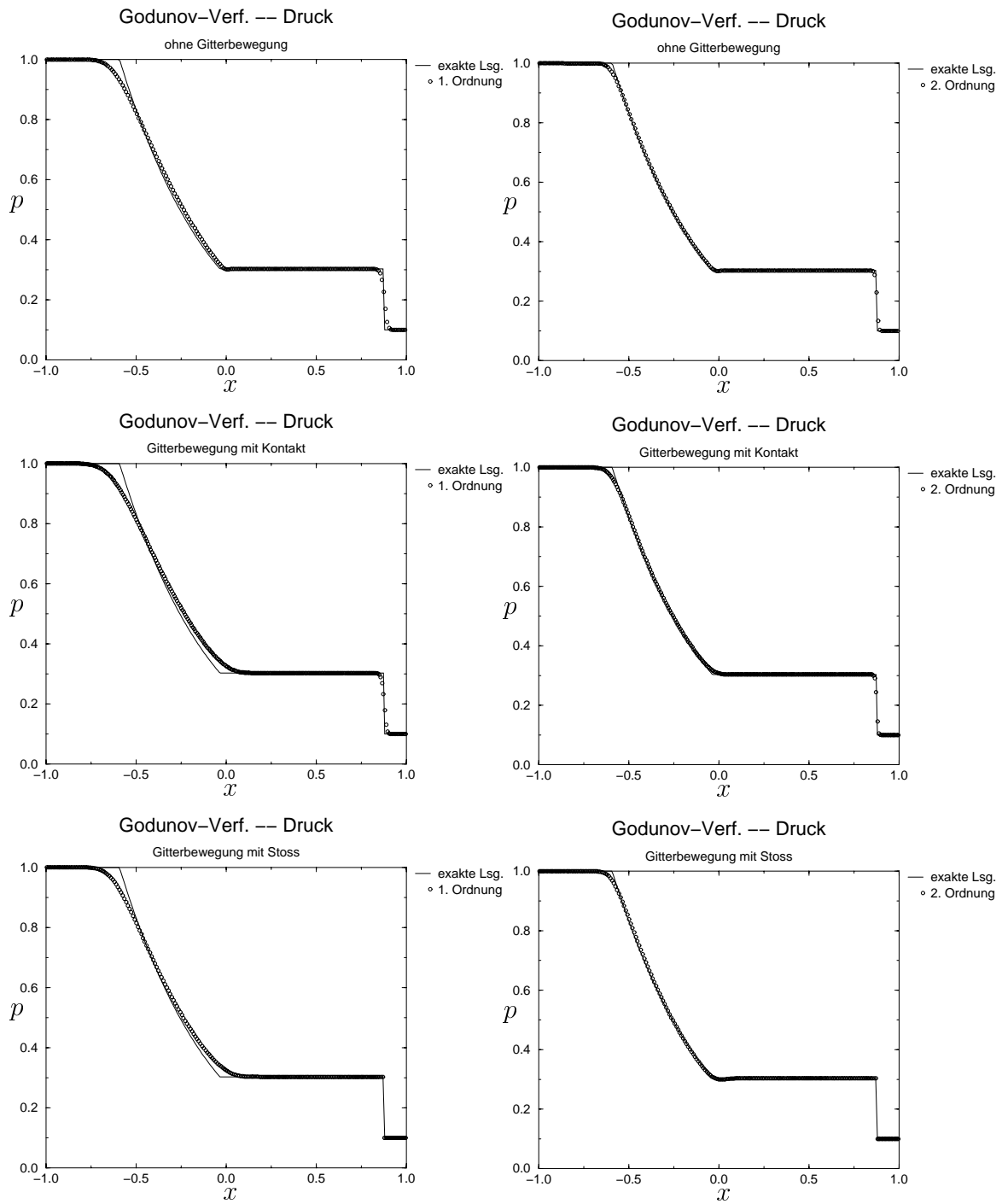


Abbildung 6.3: Vergleich des Drucks bei numerischen Rechnungen mit verschiedenen Gitterbewegungsarten beim Godunov-Verfahren erster (links) und zweiter (rechts) Ordnung

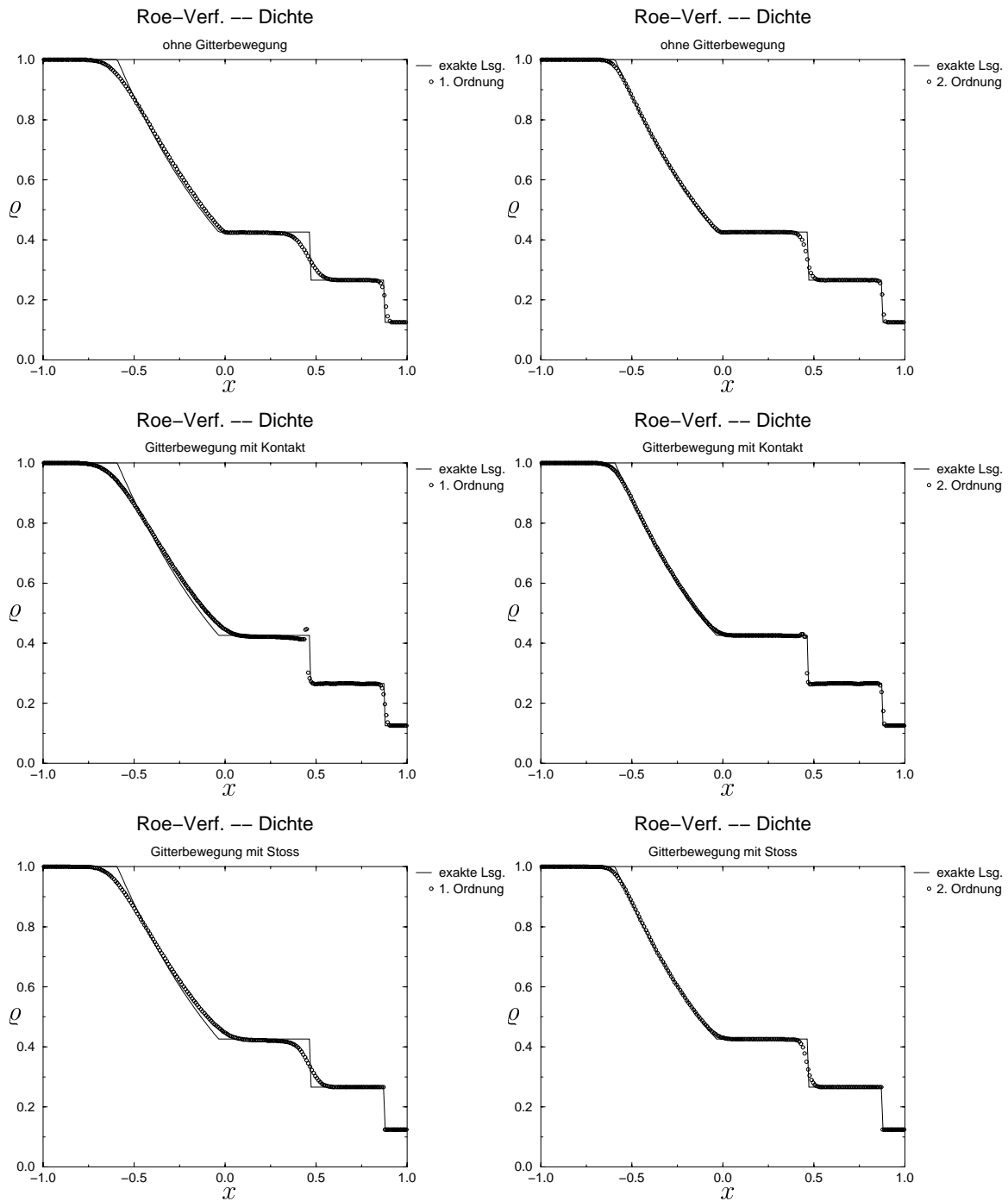


Abbildung 6.4: Vergleich der Dichte bei numerischen Rechnungen mit verschiedenen Gitterbewegungsarten beim Roe-Verfahren erster (links) und zweiter (rechts) Ordnung

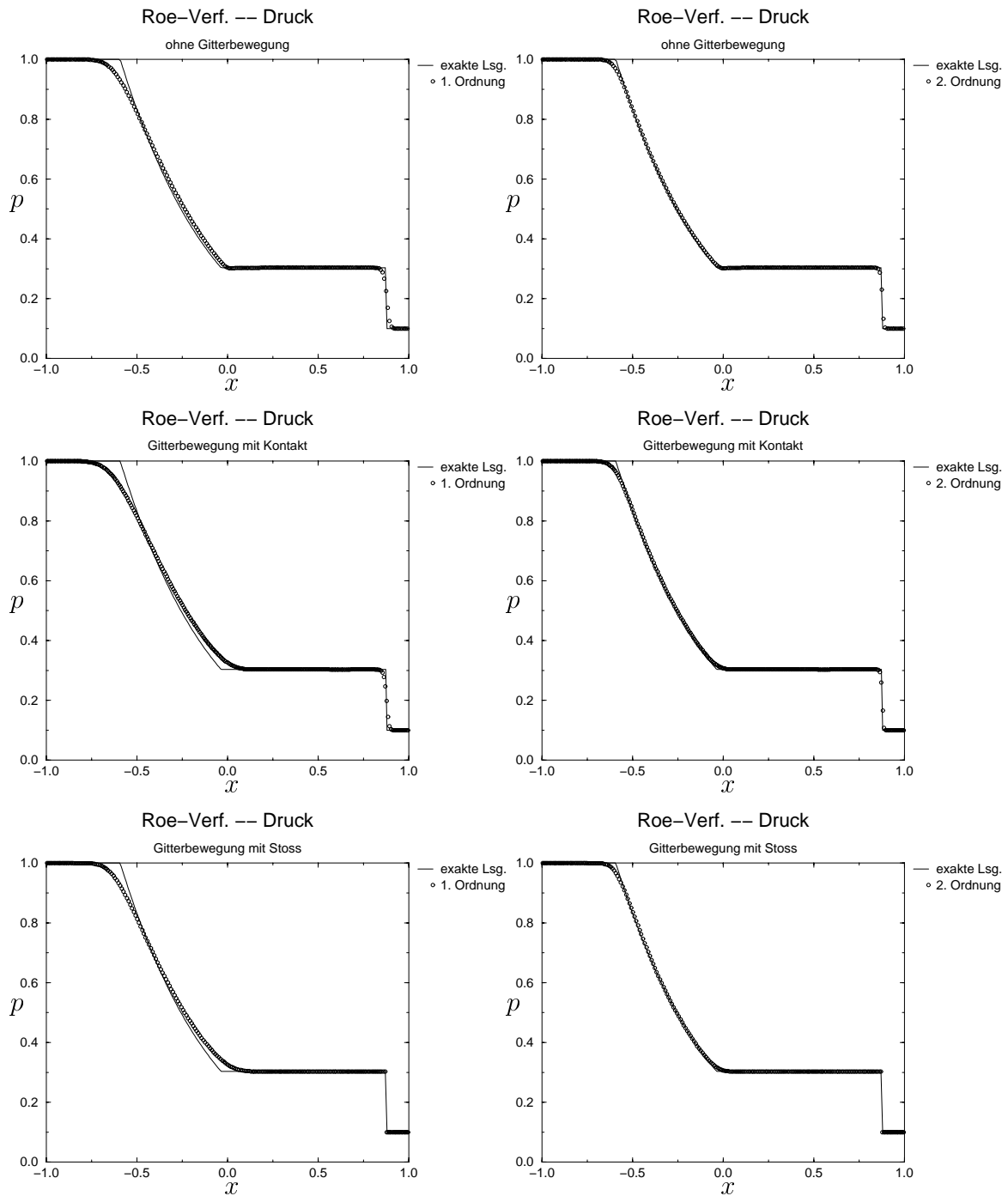


Abbildung 6.5: Vergleich des Drucks bei numerischen Rechnungen mit verschiedenen Gitterbewegungsarten beim Roe-Verfahren erster (links) und zweiter (rechts) Ordnung

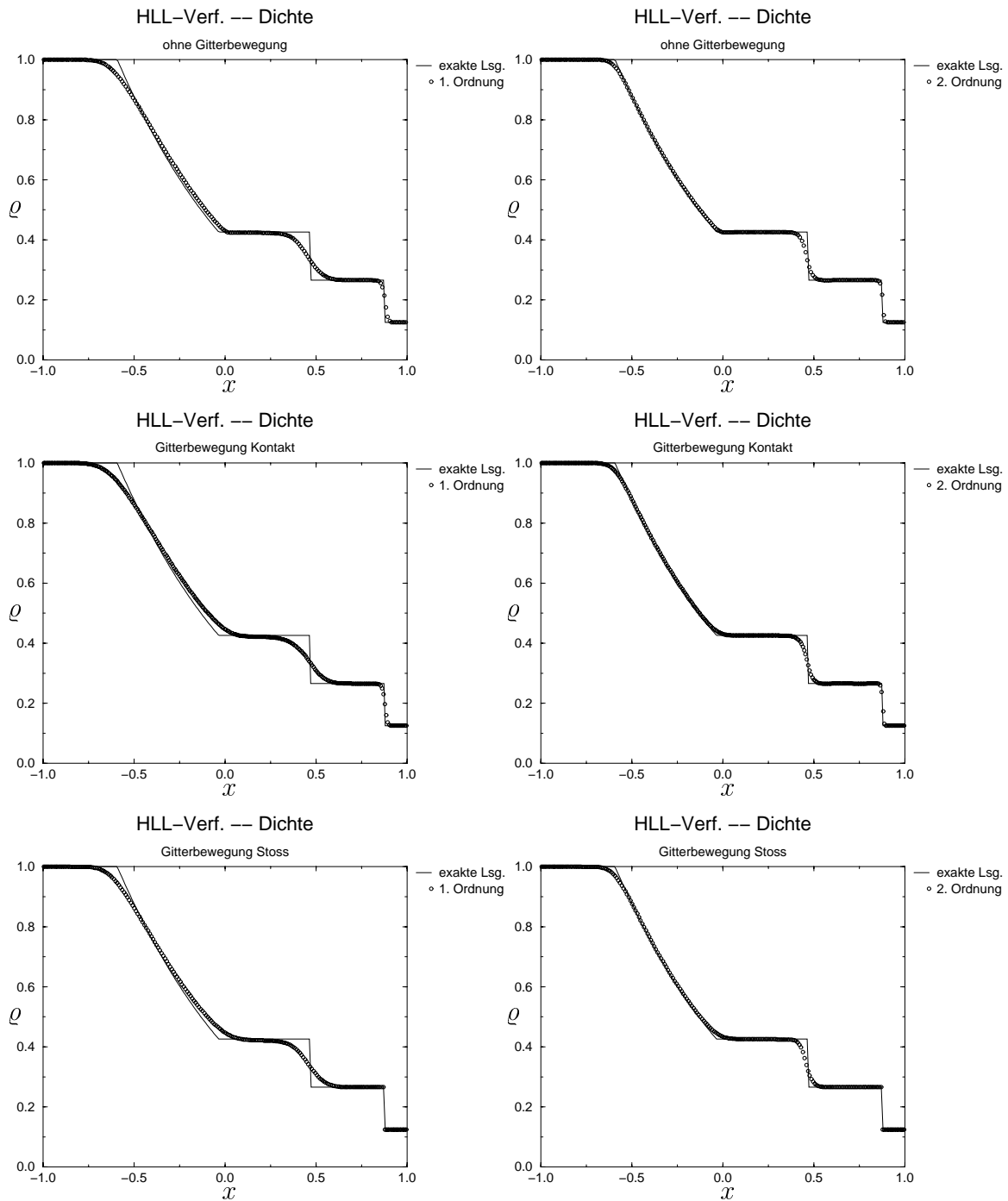


Abbildung 6.6: Vergleich der Dichte bei numerischen Rechnungen mit verschiedenen Gitterbewegungsarten beim HLL-Verfahren erster (links) und zweiter (rechts) Ordnung

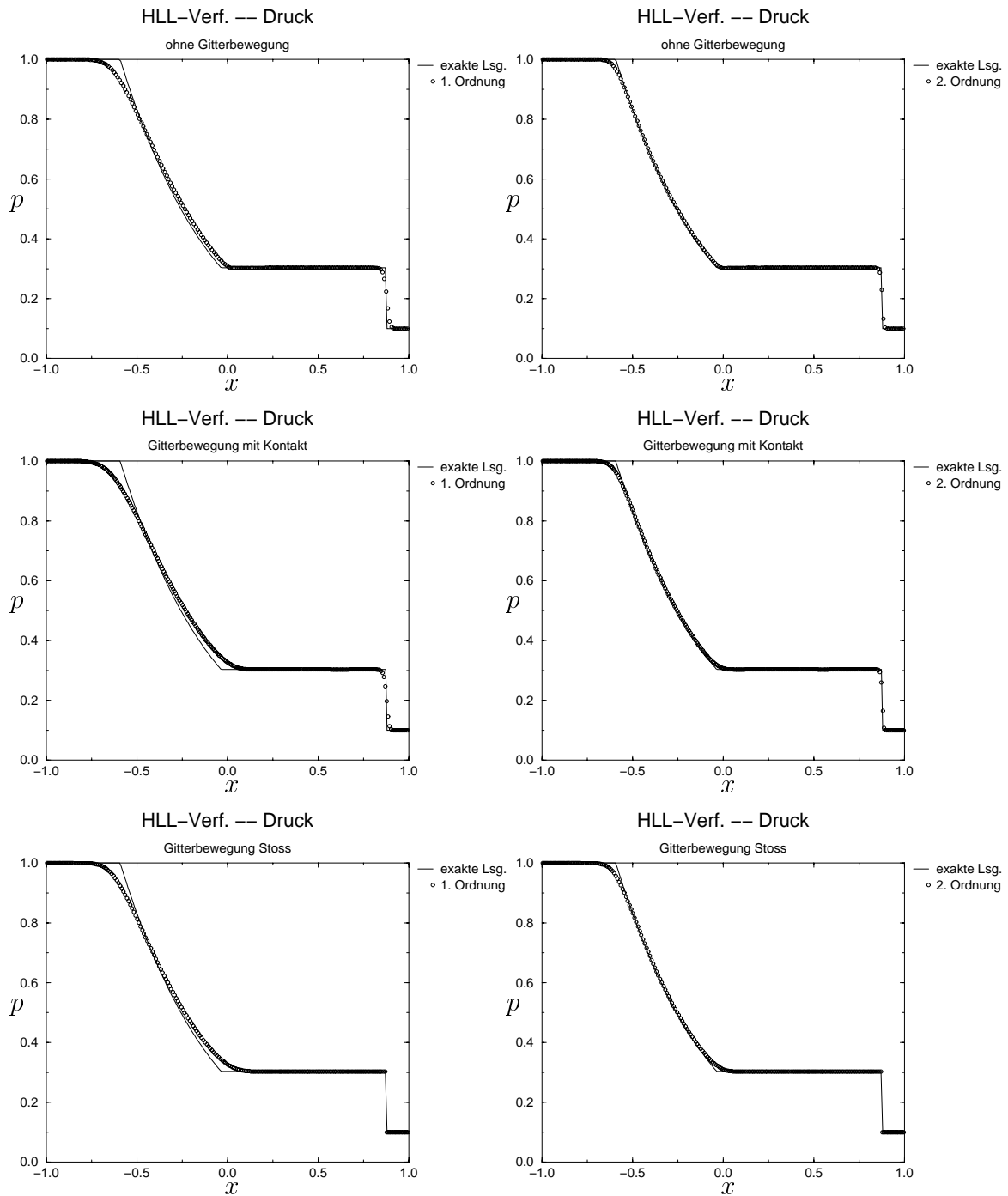


Abbildung 6.7: Vergleich des Drucks bei numerischen Rechnungen mit verschiedenen Gitterbewegungsarten beim HLL-Verfahren erster (links) und zweiter (rechts) Ordnung

Im 5. Kapitel wurde gezeigt, daß die Gitterbewegung auch bei der Steigungsberechnung zum Erhalt der zweiten Ordnung berücksichtigt werden muß. Die Auswirkungen auf das numerische Verfahren sind in der Abbildung 6.8 für das Godunov- und das Roe-Verfahren anhand der Dichtekurven dargestellt. Die Abbildungen zeigen Detailausschnitte. Auf den oberen Bildern sieht man den linken Rand der Verdünnungswelle und auf den unteren den Bereich um die Kontaktunstetigkeit. Die exakte Lösung ist als durchgezogene Linie, die Verfahren ohne Berücksichtigung der Gitterbewegung als gepunktete und die Verfahren mit ihrer Berücksichtigung als gestrichelte Linie dargestellt. Besonders deutlich wird die Notwendigkeit der Berücksichtigung der Gitterbewegung an den unteren Bildern. Die Kurve ohne Berücksichtigung überschätzt die Werte der exakten Lösung links der Kontaktunstetigkeit, das heißt die Erhaltung der lokalen Maxima und Minima ist nicht gewährleistet.

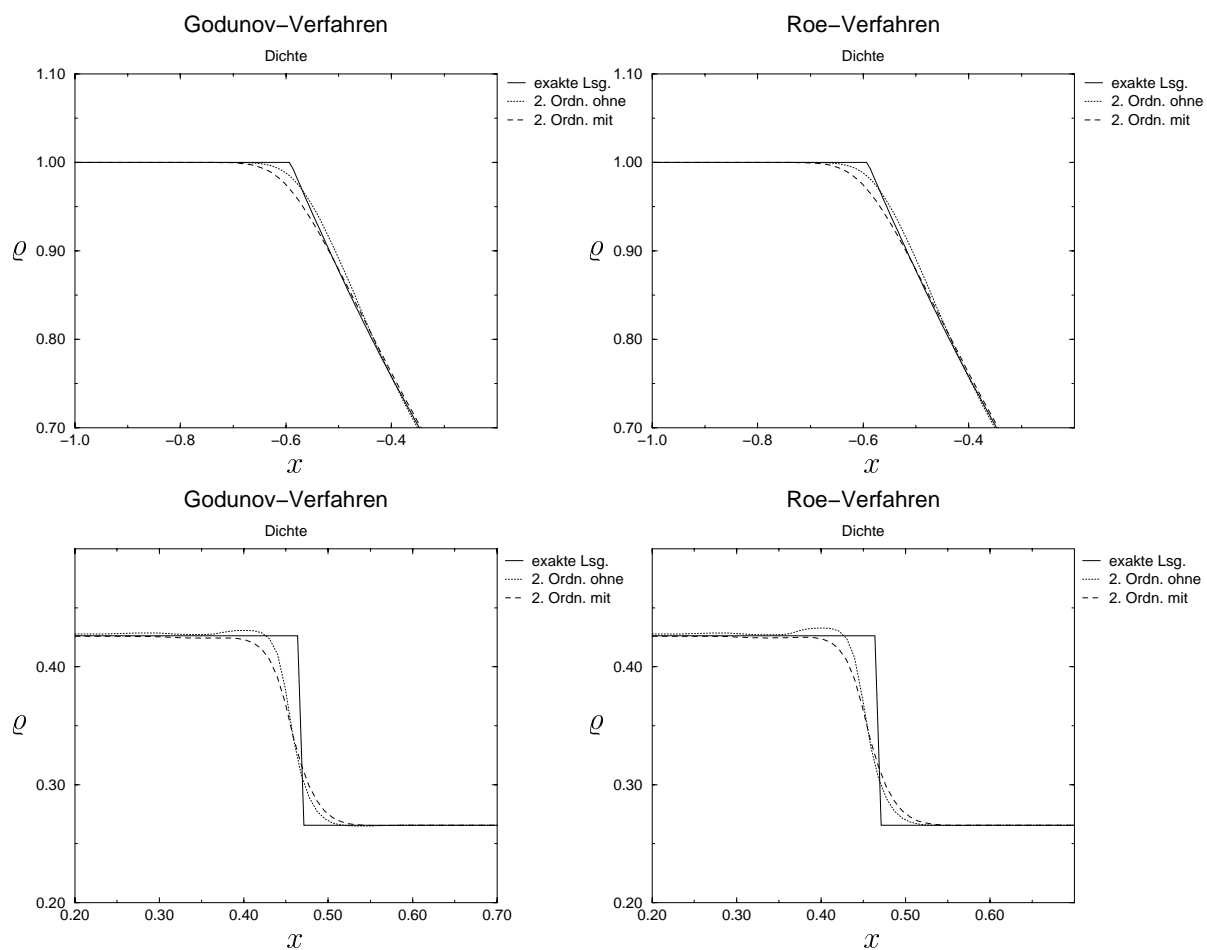


Abbildung 6.8: Vergleich der Steigungsberechnungen für die zweite Ordnung anhand der Dichtekurven mit und ohne Berücksichtigung der Gitterbewegung bei den Verfahren von Godunov (links) und Roe (rechts)

6.2 Kontakt-Stoß-Wechselwirkung

Ein komplizierteres Beispiel ist die Wechselwirkung eines nach rechts laufenden Stoßes mit einer nach links laufenden Kontaktunstetigkeit. Das Zusammentreffen der beiden Wellen erzeugt zwei Stoßwellen und eine Kontaktunstetigkeit. Solch ein Problem kann durch die Anfangswerte

$$(6.2) \quad (\varrho, v, p) = \begin{cases} (\varrho_l, v_l, 10.0) & \text{für } x < \Leftarrow 0.3 \\ (1.0, \Leftarrow 1.0, 0.1) & \text{für } \Leftarrow 0.3 < x < 0.3 \\ (10.0, \Leftarrow 1.0, 0.1) & \text{für } x > 0.3 \end{cases}$$

mit $\varrho_l = 601/106$ und $v_l = \sqrt{9801/1202} \Leftarrow 1$ erzeugt werden [27]. In der Abbildung 6.9 ist die Struktur der Lösung dargestellt. Das Intervall $[\Leftarrow 0.5, 0.5]$ wird zu Beginn in 200 Gitterintervalle unterteilt.

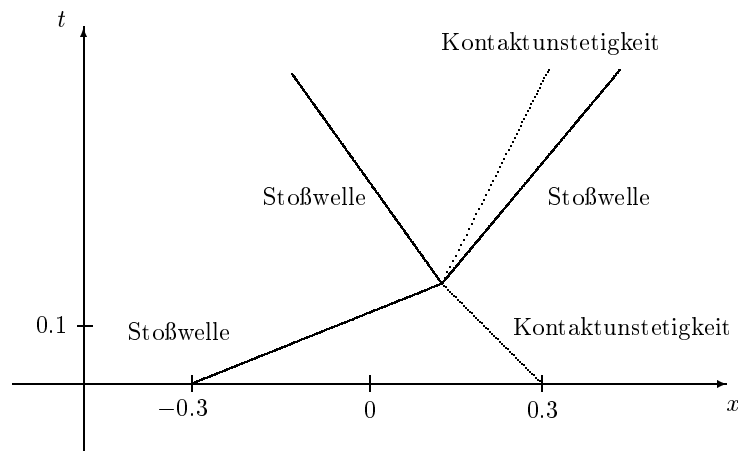


Abbildung 6.9: Die Lösungsstruktur der Stoß-Kontakt-Wechselwirkung

Auch hier läßt sich die exakte Lösung durch Fixpunktiteration gewinnen. Dieses Beispiel ist insbesondere dazu geeignet, Gitterverfeinerung sowie das Eliminieren und Hinzufügen von Teilgebieten zu testen. Zu Beginn werden drei Teilgebiete mit den oben angegebenen, jeweils konstanten Anfangswerten erzeugt. Wird der linke Rand des mittleren Teilgebiets mit der Stoßwelle und der rechte mit der Kontaktunstetigkeit bewegt, so wird dieses Teilgebiet immer kleiner und verschwindet, sobald die beiden Wellen aufeinandertreffen. Dabei muß das Gitter mehrmals vergrößert werden.

Im Programm wird dies folgendermaßen realisiert. Die Ränder, die sich aufeinanderzubewegen, bewirken kleiner werdende Gitterzellen. Werden die Gitterzellen zu klein, so werden mehrere Gitterzellen zu einer zusammengefaßt. Besteht dann ein Teilgebiet nur noch aus

einer Gitterzelle, so wird in jedem Zeitschritt getestet, ob die Ränder dieses Teilgebiets innerhalb dieses Zeitschritts zusammentreffen. Ist dies der Fall, so wird der Zeitschritt soweit verkleinert, daß die Ränder genau am Ende des Zeitschritts aufeinandertreffen. Dann kann das Teilgebiet eliminiert werden. Im nächsten Schritt muß dann für den aus diesen beiden Rändern neu entstandenen Rand eine Bedingung für seine Bewegung festgelegt werden. Dabei kann bei Bedarf auch wieder ein neues Teilgebiet erzeugt werden.

Als erstes wird das Godunov-Verfahren betrachtet. Die Abbildungen 6.10 bis 6.15 zeigen Dichte, Druck und Geschwindigkeit zu den Zeiten $t = 0.15$, $t = 0.3$ und $t = 0.4$. In jeweils vier aufeinanderfolgenden Spalten sind die numerischen Ergebnisse ohne Gitterbewegung, mit Gitterbewegung mit der Kontaktunstetigkeit, mit Gitterbewegung mit der Stoßwelle und mit Gitterbewegung mit Stoß und Kontaktunstetigkeit dargestellt. Alle Rechnungen sind zweiter Ordnung. Stoßwelle und Kontaktunstetigkeit treffen etwa zur Zeit $t = 0.173$ zusammen. Das heißt, die oberen Bilder zeigen die Situation vor der Wechselwirkung dieser beiden Wellen miteinander. In den Abbildungen ohne Gitterbewegung (1. Spalte der Abbildungen 6.10, 6.12 und 6.14) ist wie beim vorangegangenen Beispiel zu erkennen, daß die Wellen über mehrere Gitterzellen verschmiert werden. Am Bild des Drucks (Abbildung 6.12) und der Geschwindigkeit (Abbildung 6.14) sieht man leichte Oszillationen auf der linken Seite des Stoßes. Der Effekt der Gitterbewegung mit der Kontaktunstetigkeit wird natürlich nur am Dichtebild (Abbildung 6.10) deutlich. Jetzt wird nur noch ein Gitterpunkt in die Kontaktunstetigkeit hineingezogen.

Bei Bewegung mit dem Stoß (die linken Spalten der Abbildungen 6.11 für die Dichte, 6.13 für den Druck und 6.15 für die Geschwindigkeit) wird kein Gitterpunkt mehr in den Stoß hineingezogen. Außerdem verschwinden die Oszillationen links des Stoßes bei Druck und Geschwindigkeit, was keinem Verfahren ohne Gitterbewegung gelingt (siehe [27]). In den rechten Spalten der Abbildungen 6.11, 6.13 und 6.15, bei Bewegung mit Stoßwelle und Kontaktunstetigkeit, sind kaum noch Abweichungen von der exakten Lösung zu erkennen. Die Verschmierung des linken Stoßes bei $t = 0.3$ und $t = 0.4$ könnte auch noch vermieden werden, wenn nach dem Zusammentreffen von Stoßwelle und Kontaktunstetigkeit noch ein weiteres Teilgebiet eingeführt wird, so daß die linke Stoßwelle auch auf einem Teilgebietsrand liegt. Auch hier sind keine Oszillationen mehr erkennbar.

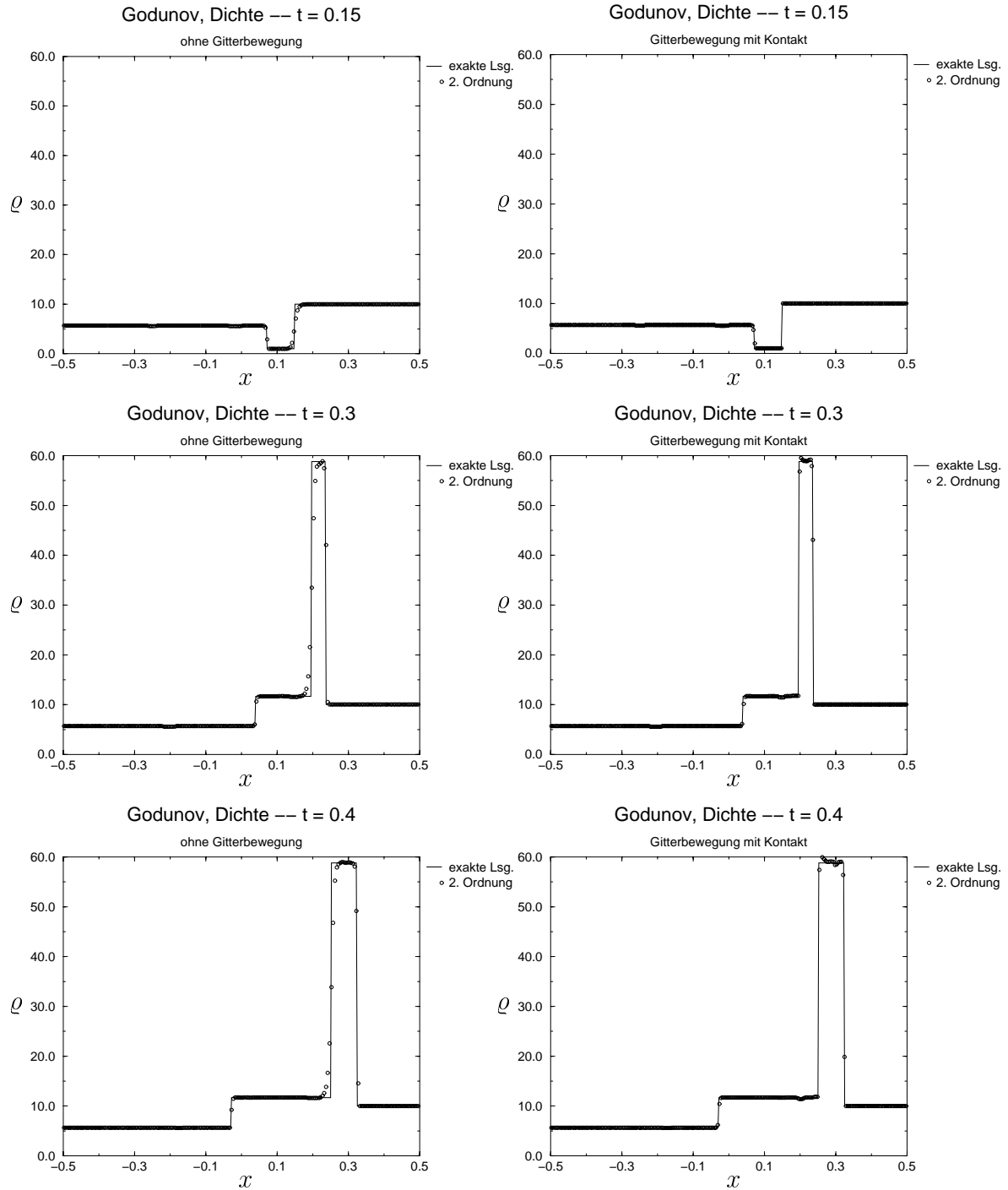


Abbildung 6.10: Die Dichte bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren ohne Gitterbewegung (links) und mit Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (rechts) zu den Zeiten 0.15, 0.3 und 0.4

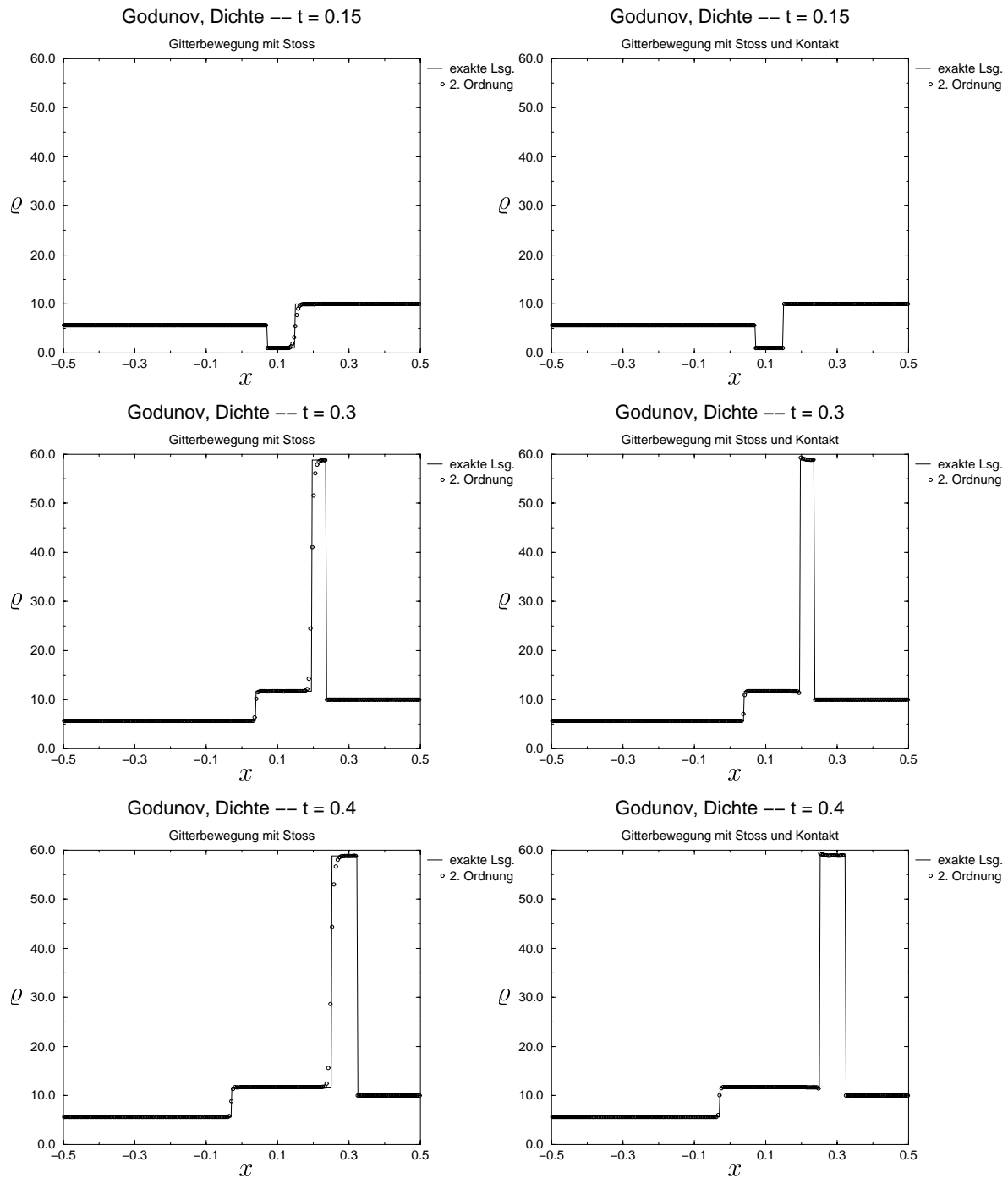


Abbildung 6.11: Die Dichte bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren mit Bewegung des Gitters mit dem Stoß (links) und mit Bewegung des Gitters mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts) zu den Zeiten 0.15, 0.3 und 0.4

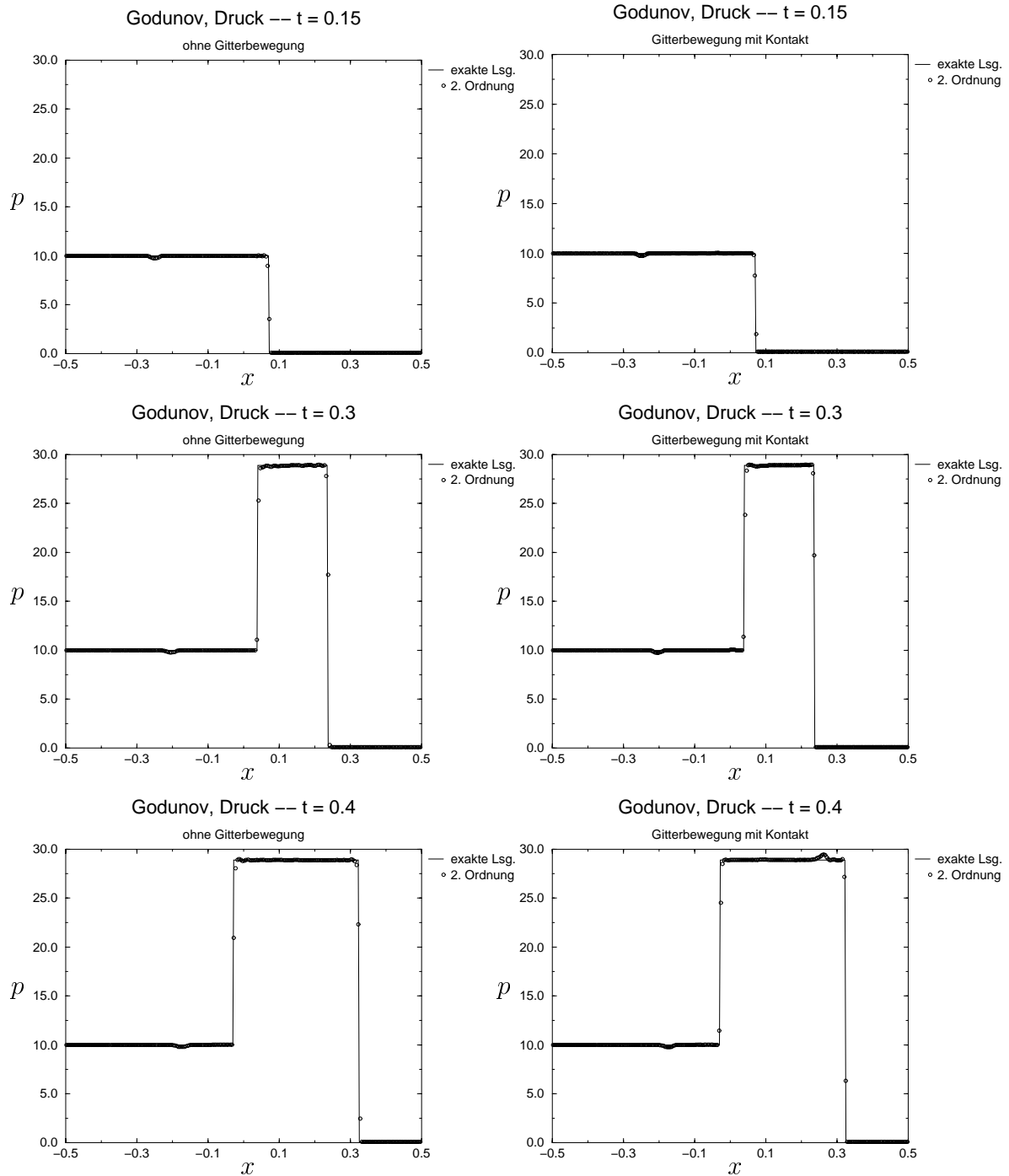


Abbildung 6.12: Der Druck bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren ohne Gitterbewegung (links) und mit Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (rechts) zu den Zeiten 0.15, 0.3 und 0.4

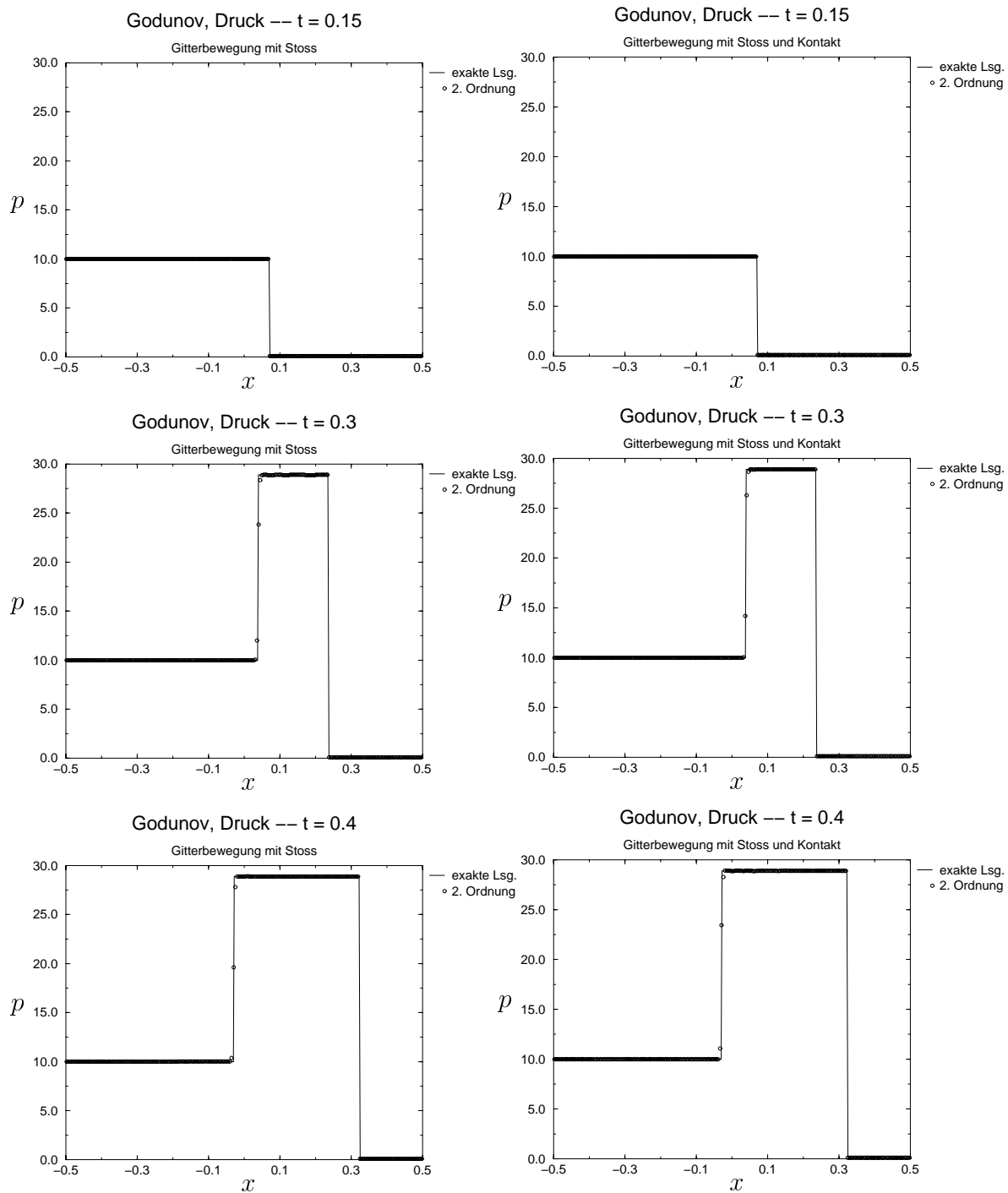


Abbildung 6.13: Der Druck bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren mit Bewegung des Gitters mit dem Stoß (links) und mit Bewegung des Gitters mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts) zu den Zeiten 0.15, 0.3 und 0.4

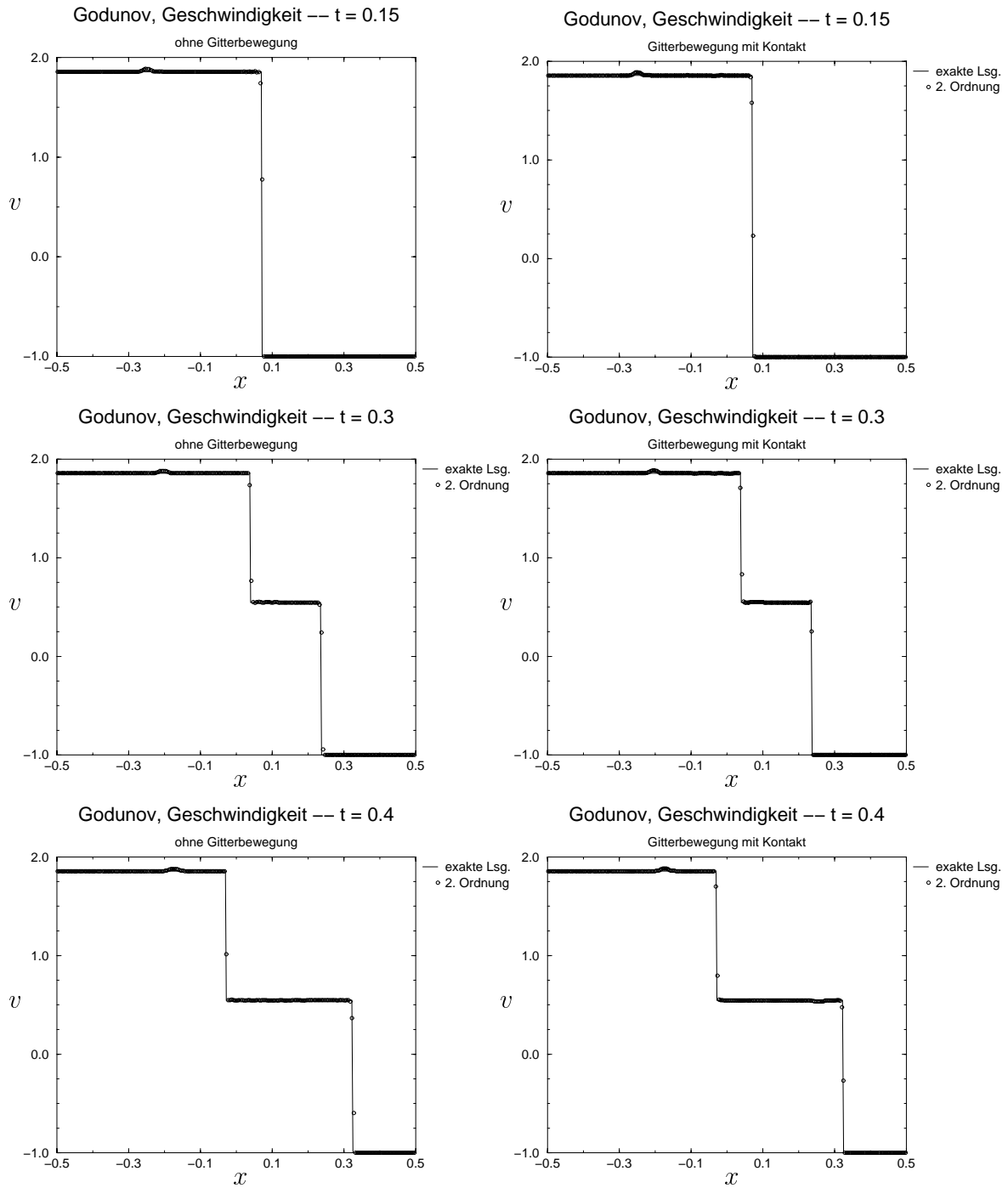


Abbildung 6.14: Die Geschwindigkeit bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren ohne Gitterbewegung (links) und mit Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (rechts) zu den Zeiten 0.15, 0.3 und 0.4

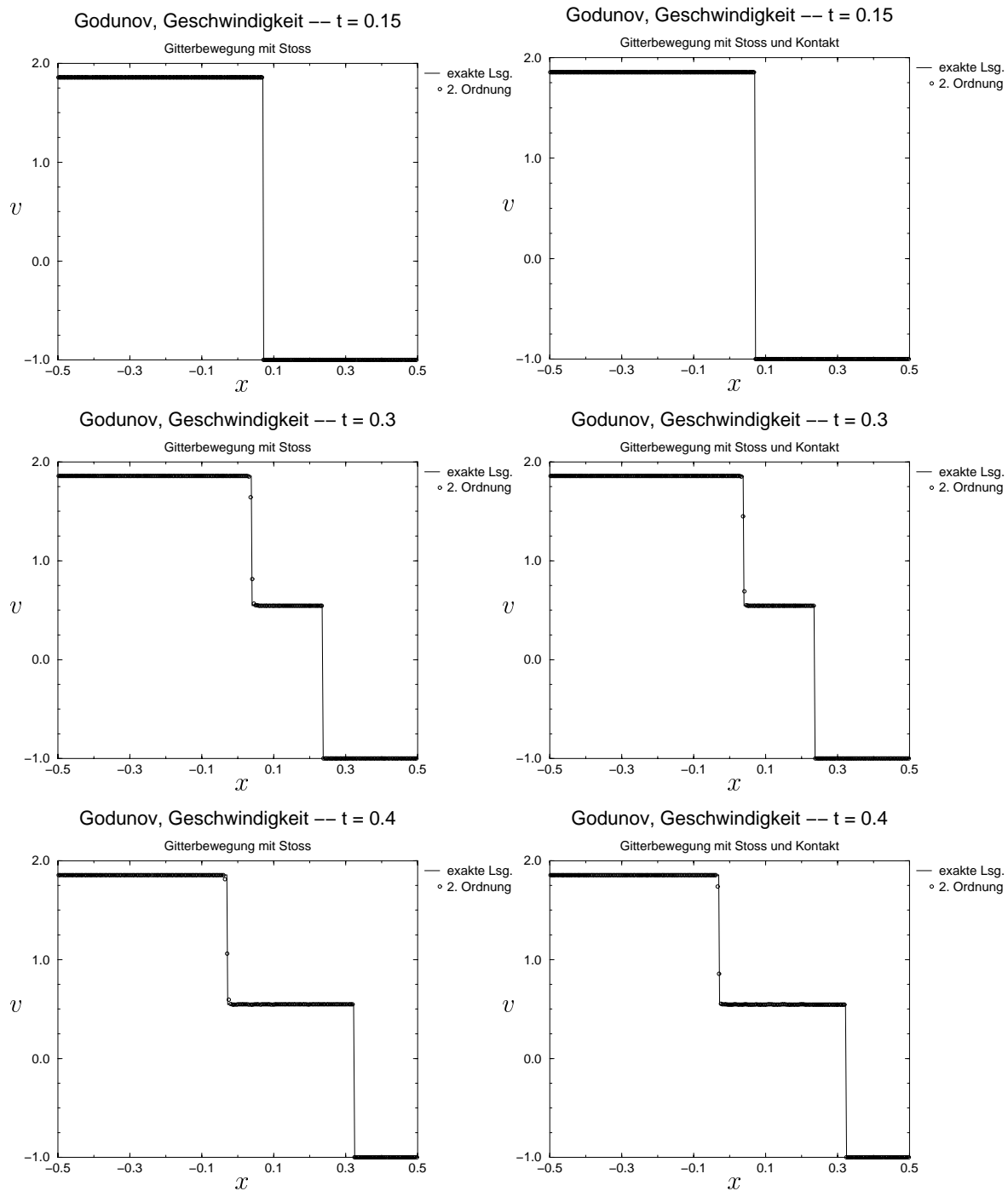


Abbildung 6.15: Die Geschwindigkeit bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren mit Bewegung des Gitters mit dem Stoß (links) und mit Bewegung des Gitters mit Stoß und Kontaktstetigkeit (rechts) zu den Zeiten 0.15, 0.3 und 0.4

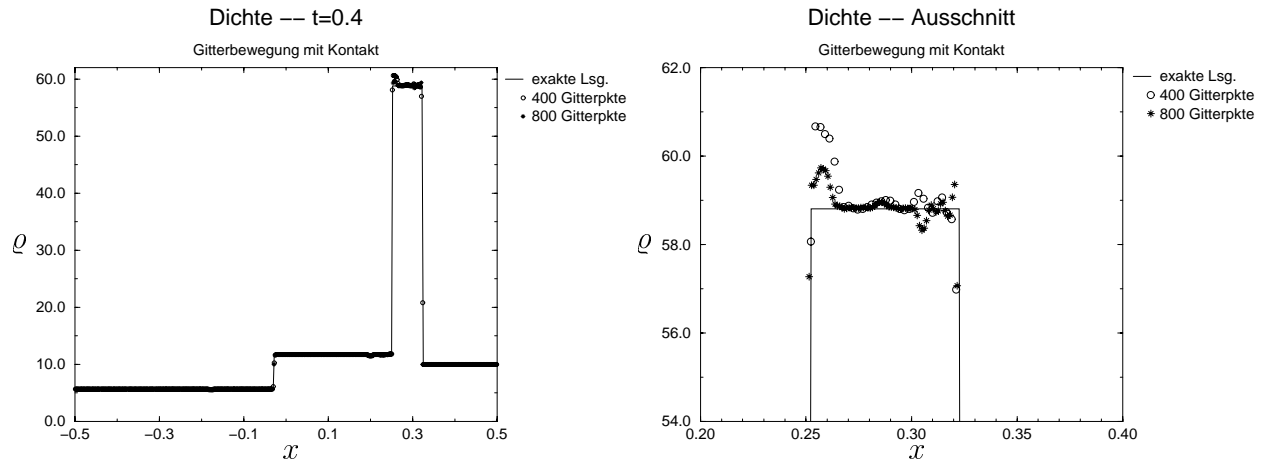


Abbildung 6.16: Vergleich der Dichte bei numerischen Rechnungen mit dem Godunov-Verfahren bei Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit bei Verwendung von 400 bzw. 800 Gitterpunkten zur Zeit 0.4; rechts: Ausschnittsvergrößerung

Die Abbildung 6.16 zeigt, daß sich die Stärke der Oszillationen zwischen Kontaktunstetigkeit und Stoßwelle durch Erhöhung der Zahl der Gitterpunkte verringern lassen.

Die nächsten beiden Abbildungen zeigen die Ergebnisse des Roe-Verfahrens zur Zeit $t = 0.4$. Dabei sind zeilenweise Dichte, Druck und Geschwindigkeit, spaltenweise die unterschiedlichen Gitterbewegungsarten dargestellt. Verglichen mit dem Godunov-Verfahren sind die Oszillationen zwischen Kontaktunstetigkeit und Stoßwelle bei Bewegung mit der Kontaktunstetigkeit stärker. Dies zeigt sich bei Dichte, Druck und Geschwindigkeit. Dagegen kann man in Abbildung 6.18 bei Bewegung mit dem Stoß oder mit Stoß und Kontaktunstetigkeit keine Unterschiede zum Godunov-Verfahren erkennen. Auch hier verschwinden die Oszillationen in Druck und Geschwindigkeit vollständig.

Beim HLL-Verfahren (Abbildungen 6.19 und 6.20) können die Oszillationen auf der linken Seite der linken Stoßwelle nur bei Gitterbewegung mit dem Stoß eliminiert werden. Die Verfolgung von Stoß und Kontaktunstetigkeit führt wieder zu einer Verschlechterung der Ergebnisse, was auch hier an dem Vorhandensein nur eines mittleren Zustands in der Riemannlösung liegt.

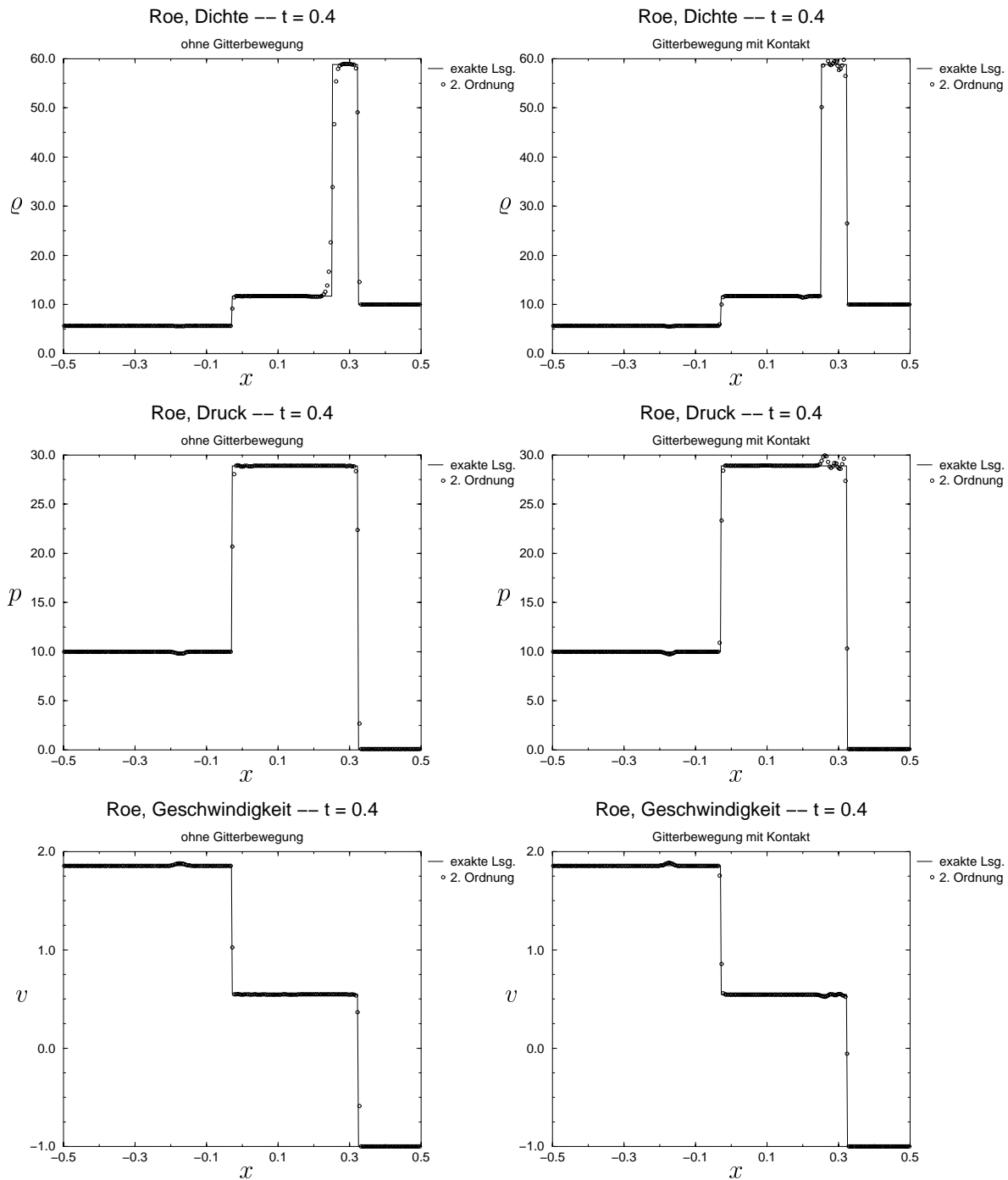


Abbildung 6.17: Vergleich von Dichte, Druck und Geschwindigkeit bei numerischen Rechnungen mit dem Roe-Verfahren ohne Gitterbewegung (links) und mit Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (rechts) zur Zeit 0.4

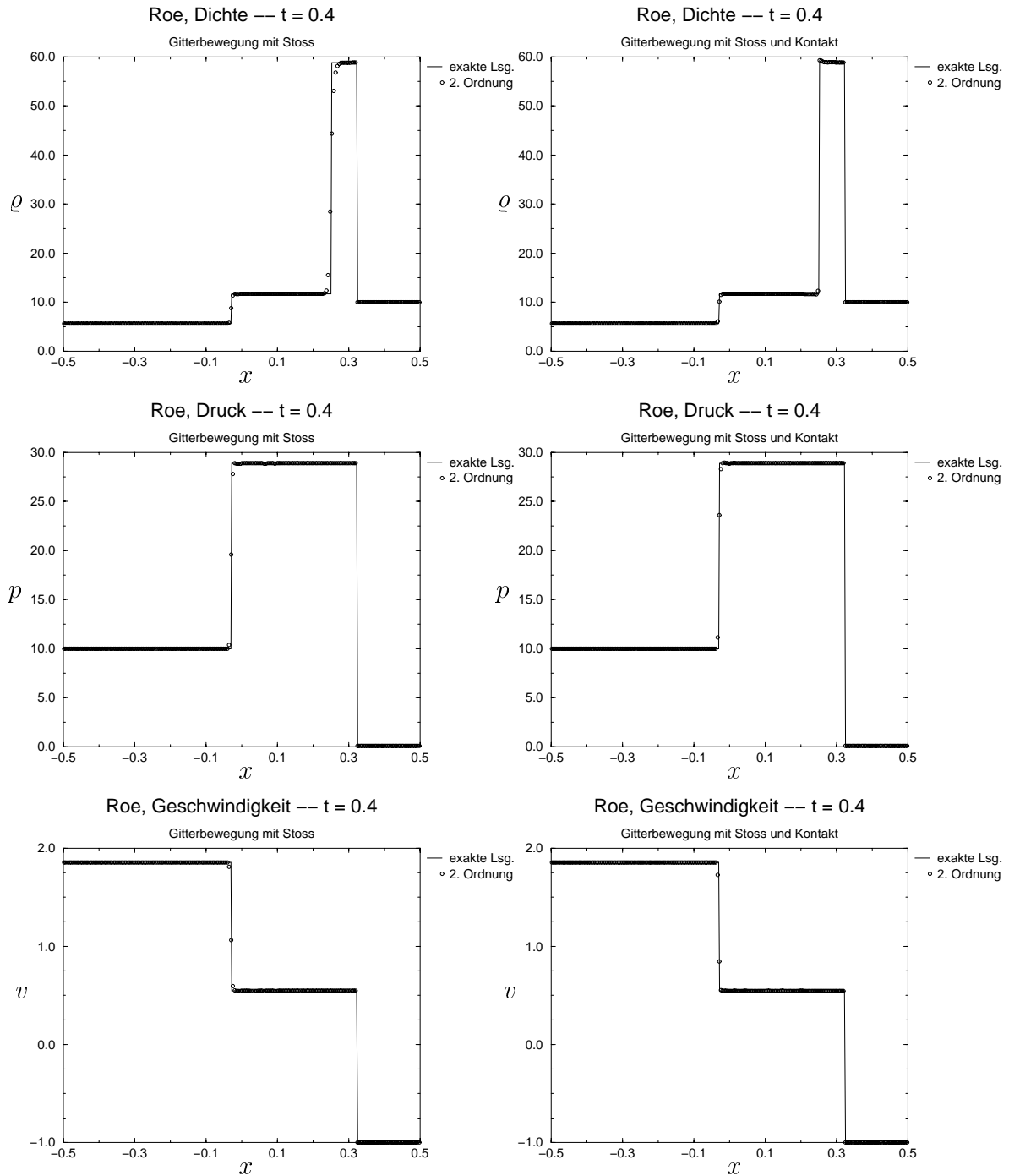


Abbildung 6.18: Vergleich von Dichte, Druck und Geschwindigkeit bei numerischen Rechnungen mit dem Roe-Verfahren bei Bewegung des Gitters mit dem Stoß (links) und bei Bewegung des Gitters mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts) zur Zeit 0.4

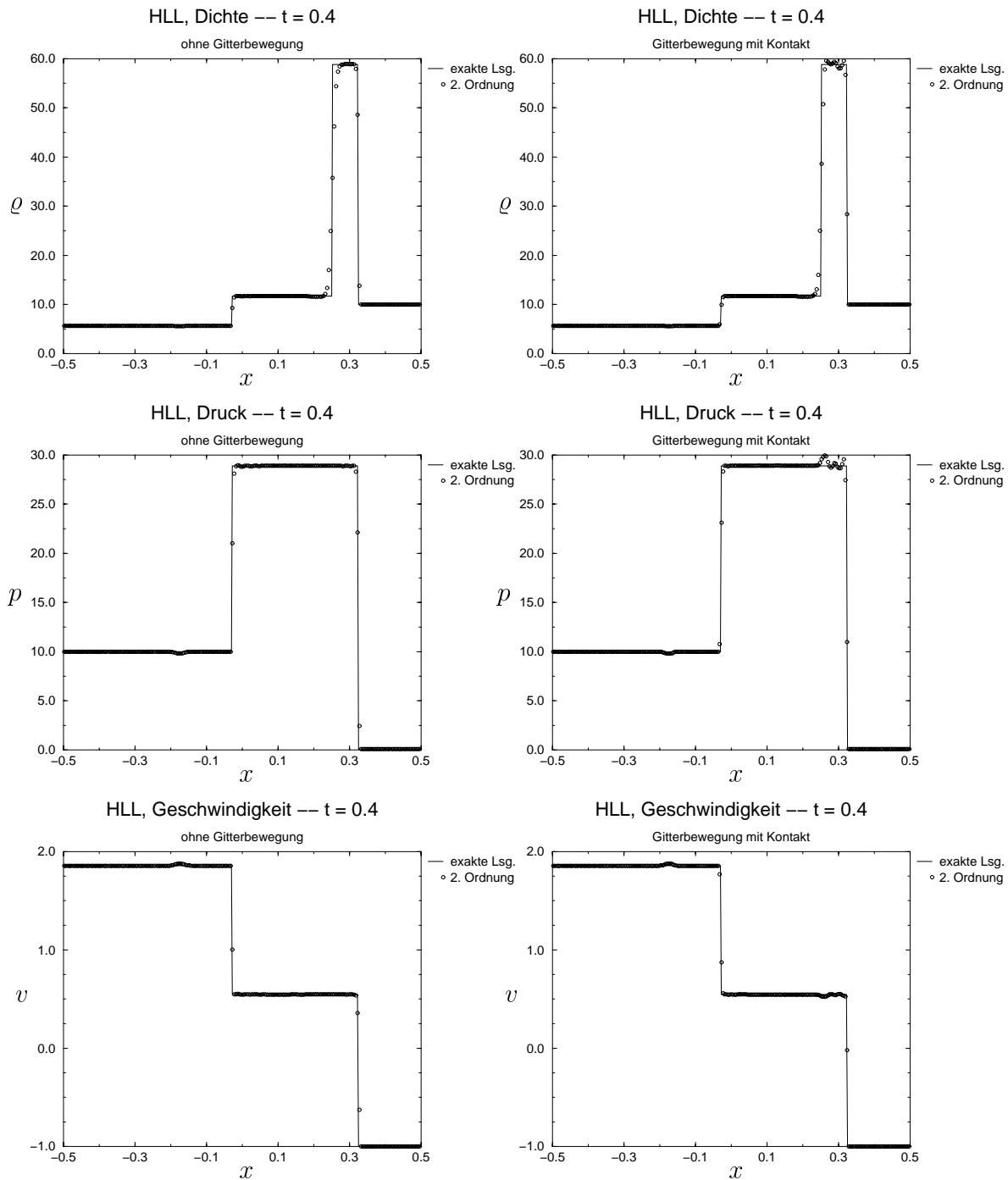


Abbildung 6.19: Vergleich von Dichte, Druck und Geschwindigkeit bei numerischen Rechnungen mit dem HLL-Verfahren ohne Gitterbewegung (links) und mit Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (rechts) zur Zeit 0.4

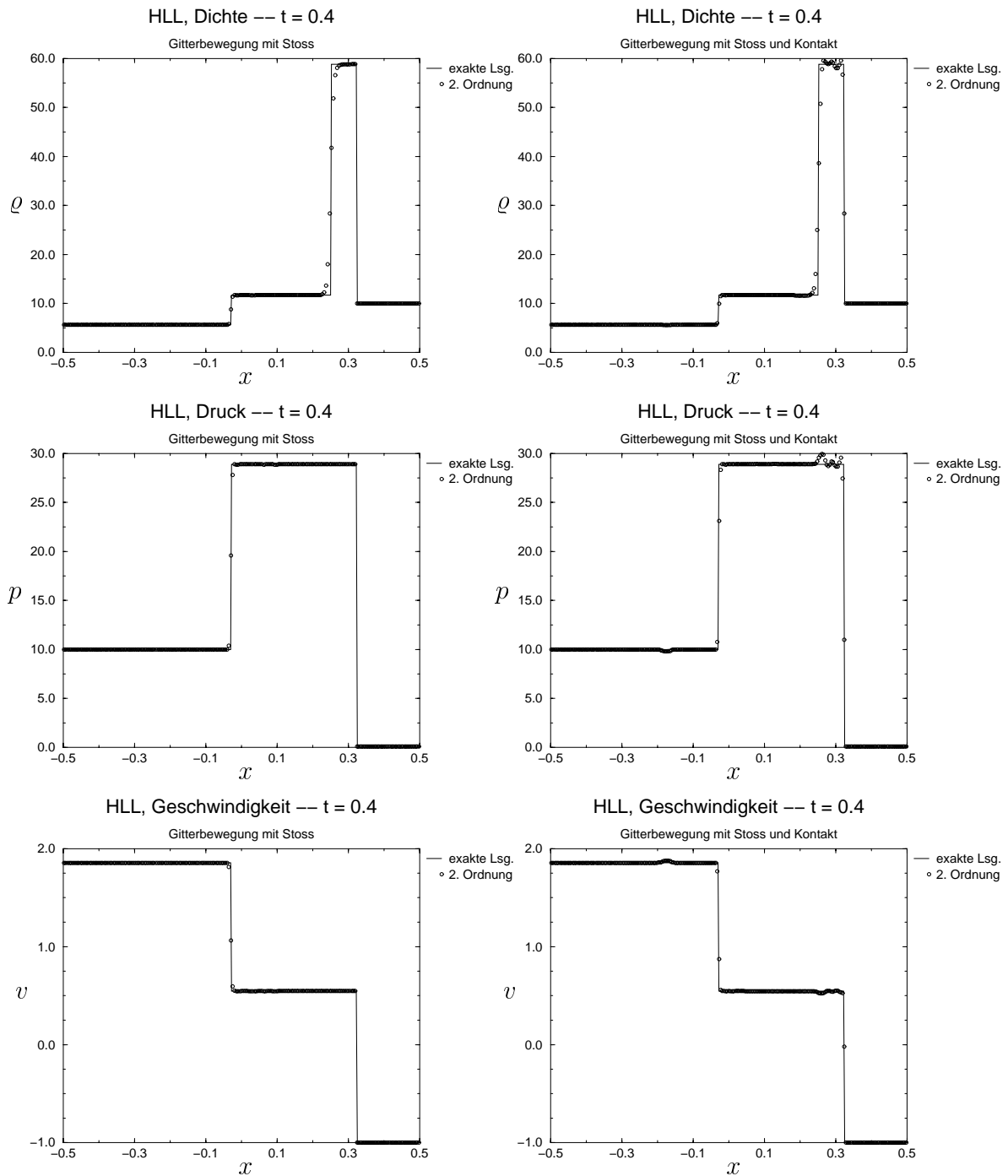


Abbildung 6.20: Vergleich von Dichte, Druck und Geschwindigkeit bei numerischen Rechnungen mit dem HLL-Verfahren bei Bewegung des Gitters mit dem Stoß (links) und bei Bewegung des Gitters mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts) zur Zeit 0.4

6.3 Echte Materialgrenzen

Um die Eignung des Verfahrens zur Simulation bewegter Materialgrenzen zu untersuchen, werden drei Testprobleme betrachtet, bei denen die Materialgrenze zwei verschiedene ideale Gase trennt. Das erste ist ein reines Konvektionsproblem, also der reine Transport einer Materialgrenze. Als zweites wird das in Kapitel 6.1 vorgestellte Sodproblem mit unterschiedlichen Zustandsgleichungen auf beiden Seiten der Anfangsunstetigkeit betrachtet, und das dritte Beispiel ist die Wechselwirkung einer Stoßwelle mit einer Luft-Helium-Grenze.

6.3.1 Ein Konvektionsproblem

In diesem Beispiel wird eine Kontaktunstetigkeit, die eine Materialgrenze darstellt, in einem Rohr transportiert. Das Gas hat anfangs konstante Dichte, Druck und Geschwindigkeit. Es gelte die ideale Gasgleichung mit $\gamma = 1.4$ auf der linken und $\gamma = 1.2$ auf der rechten Seite. Das betrachtete Intervall $[0, 0.09]$ wird durch 200 Gitterzellen diskretisiert. Die Materialgrenze liegt zu Beginn bei $x = 0.045$. In Kapitel 4 wurde ein approximativer Riemannlöser speziell für Materialgrenzen vorgestellt. Dazu wurde das betrachtete System von Erhaltungsgleichungen um eine Gleichung erweitert. Anhand dieses Konvektionsproblems wird gezeigt, daß diese Zusatzgleichung notwendig ist, um bewegte Materialgrenzen gut approximieren zu können.

In der ersten Abbildung sind Druck und Geschwindigkeit nach einem, zwei und drei Zeitschritten bei Verwendung des Roe-Verfahrens ohne die Zusatzgleichung dargestellt. Nach einem Zeitschritt ist die Geschwindigkeit noch konstant, der Druck zeigt allerdings schon eine Abweichung von der exakten Lösung direkt an der Kontaktunstetigkeit. Dies führt dann auch zu einer leichten Oszillation der Geschwindigkeit im zweiten Zeitschritt. Diese Fehler wachsen mit der Zeit und führen zu stärkeren Oszillationen.

Durch das Einführen der Zusatzgleichung werden die Ergebnisse wesentlich verbessert, wie in Abbildung 6.22 zu erkennen ist. Die Kurven von Druck und Geschwindigkeit nach 1, 100 und 200 Zeitschritten zeigen nicht die geringsten Oszillationen.

Abbildung 6.23 zeigt das HLL-Verfahren mit Zusatzgleichung nach 100 und 200 Zeitschritten. Da dieses Verfahren nicht in der Lage ist, eine einzelne Kontaktunstetigkeit exakt aufzulösen, eignet es sich trotz der zusätzlichen Gleichung nicht für dieses Problem. Man erhält starke Abweichungen von der exakten Lösung in Dichte, Druck und Geschwindigkeit.

Beim Godunov-Verfahren treten, wie beim Roe-Verfahren mit Zusatzgleichung, keinerlei Oszillationen auf.

Die Ergebnisse zeigen, daß man um Materialgrenzen gut aufzulösen, sowohl die Zusatzgleichung als auch die Fähigkeit Kontaktunstetigkeiten exakt wiederzugeben, benötigt.

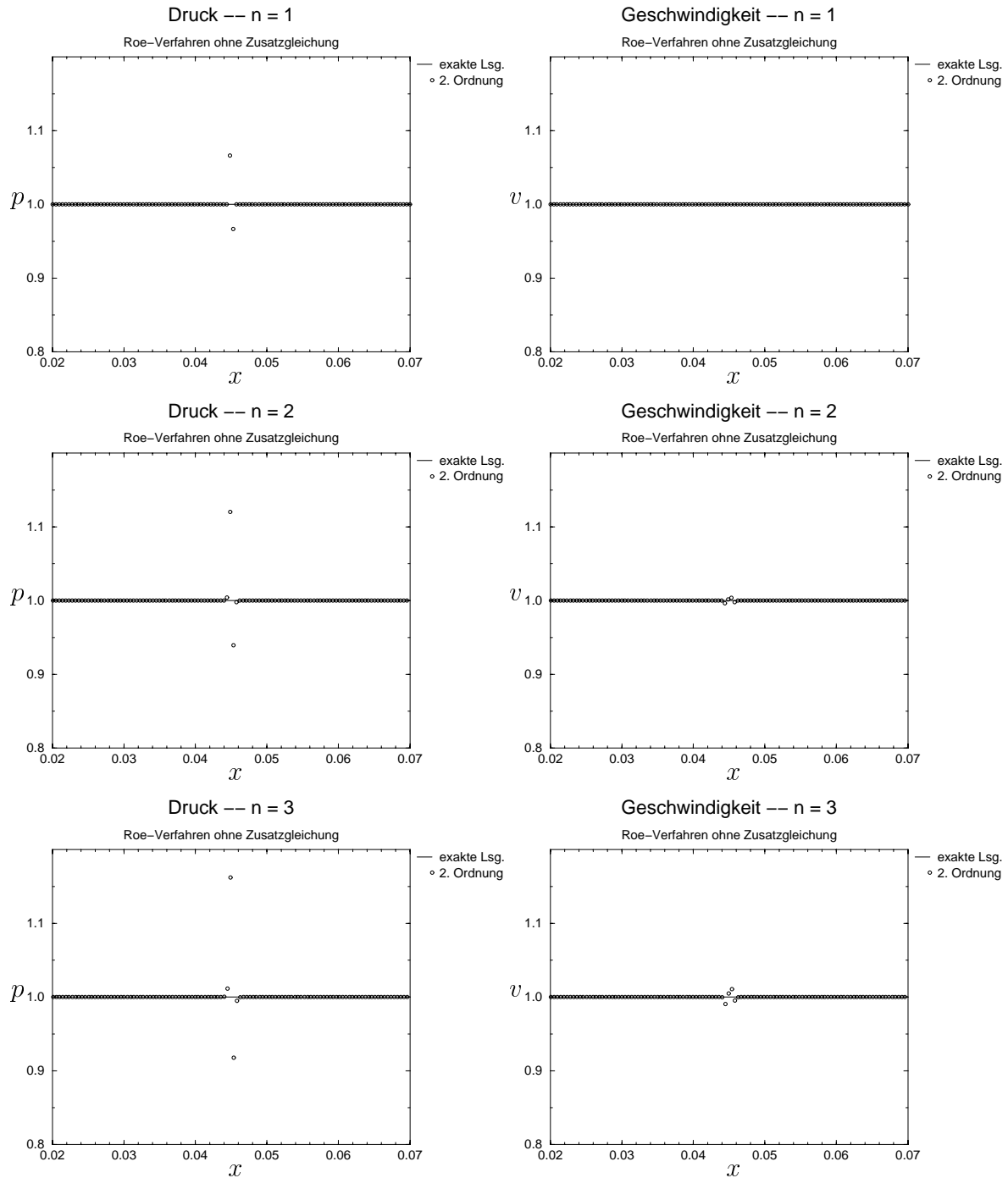


Abbildung 6.21: Konvektionsproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Druck (links) und Geschwindigkeit (rechts) beim Roe-Verfahren ohne Zusatzgleichung nach 1, 2 und 3 Zeitschritten

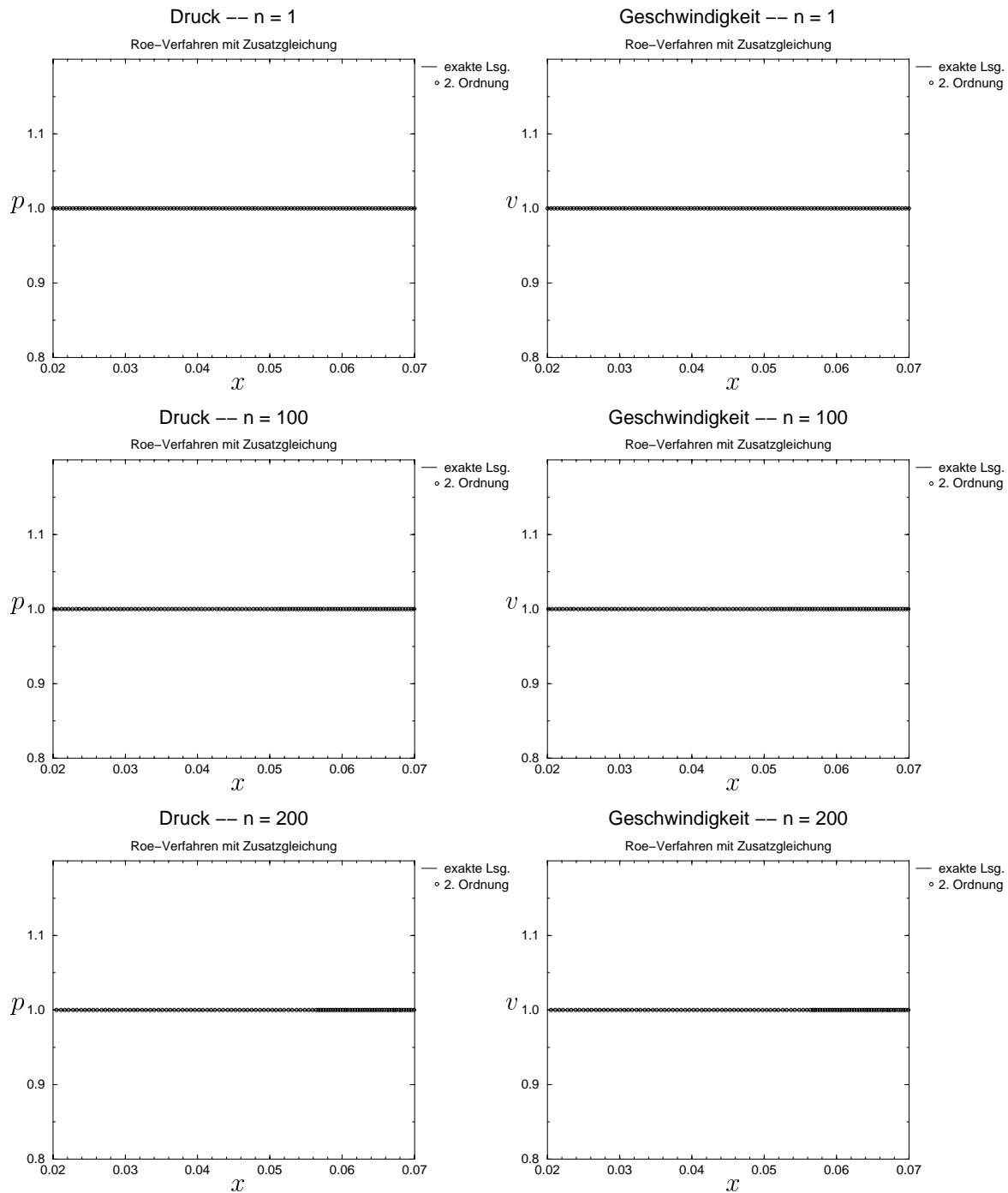


Abbildung 6.22: Konvektionsproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Druck (links) und Geschwindigkeit (rechts) beim Roe-Verfahren mit Zusatzgleichung nach 1, 100 und 200 Zeitschritten

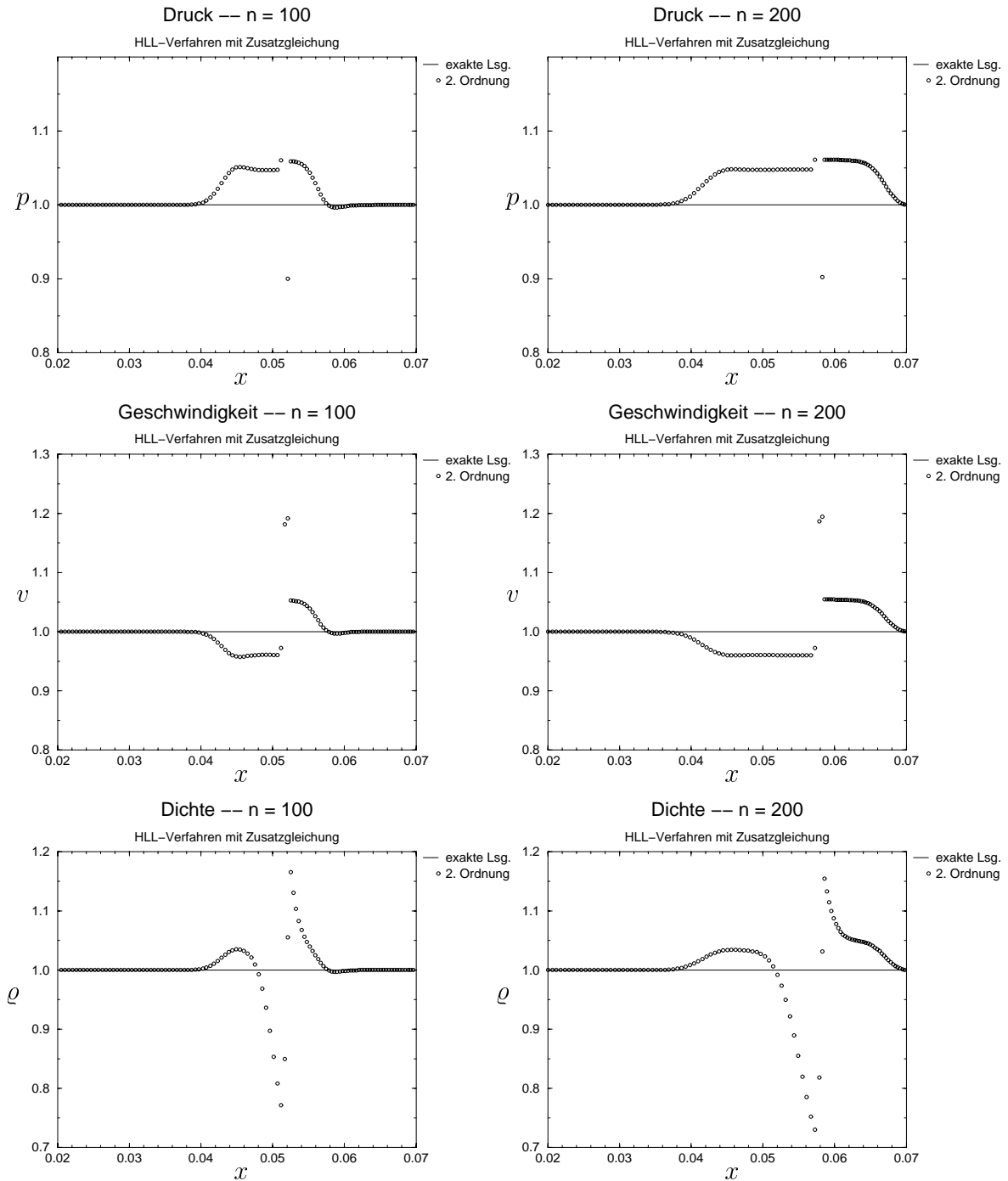


Abbildung 6.23: Konvektionsproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Druck, Geschwindigkeit und Dichte beim HLL-Verfahren mit Zusatzgleichung nach 100 (links) und 200 (rechts) Zeitschritten

6.3.2 Das Sodproblem mit Materialgrenze

Jetzt wird das Sodproblem aus Abschnitt 6.1 mit einer Unstetigkeit in der Zustandsgleichung betrachtet. Es wird wieder die ideale Gasgleichung, im Gegensatz zu dem Problem in Kapitel 6.1 aber mit $\gamma_l = 1.4$ und $\gamma_r = 1.2$, gewählt.

Die Abbildungen 6.24 und 6.25 zeigen die Ergebnisse zur Zeit 0.5 beim Godunov-Verfahren erster und zweiter Ordnung. Links sind jeweils die Kurven von Dichte, Druck und Geschwindigkeit bei Verwendung von 200 Gitterpunkten und rechts bei Verwendung von 400 Gitterpunkten aufgetragen. Die Qualität der Ergebnisse ist vergleichbar mit den Ergebnissen für das Sodproblem, bei dem links und rechts das gleiche ideale Gas vorliegt (vergleiche Kapitel 6.1).

Die Abbildungen 6.26 bis 6.29 zeigen den Vergleich des Roe-Verfahrens mit und ohne Zusatzgleichung. Beim Verfahren ohne Zusatzgleichung (Abbildungen 6.26 und 6.27) werden Dichte und Druck links und rechts der Kontaktunstetigkeit überschätzt. Direkt an der Kontaktunstetigkeit hingegen kommt es zu einer starken Abweichung der Dichte nach unten. Dies läßt sich auch durch Gitterverfeinerung und Verwendung höherer Ordnung nicht verbessern, man erhält lediglich steilere Gradienten bei höherer Ordnung. Die Geschwindigkeit wird vor der Kontaktunstetigkeit unterschätzt, dann kommt es zu einem starken Überschwingen direkt an der Materialgrenze und danach zu einer Überschätzung der Geschwindigkeit. Auch hier kann durch Gitterverfeinerung und höhere Ordnung keine wesentliche Verbesserung erzielt werden, die Oszillationen nehmen eher noch zu. Verwendet man jedoch die Zusatzgleichung (Abbildungen 6.28 und 6.29), so tritt nur noch ein Sprung in der Dichte direkt an der Kontaktunstetigkeit als etwas stärkere Abweichung von der exakten Lösung auf. Diese Abweichung erstreckt sich über zwei Gitterpunkte, auch wenn das Gitter verfeinert wird. Beim Verfahren zweiter Ordnung ist die Höhe dieses Sprungs wesentlich geringer. Druck und Geschwindigkeit werden sehr gut approximiert.

Die numerischen Ergebnisse zeigen deutlich, daß die Zusatzgleichung bei der Approximation bewegter Materialgrenzen wesentlich zur Verbesserung der Ergebnisse beiträgt.

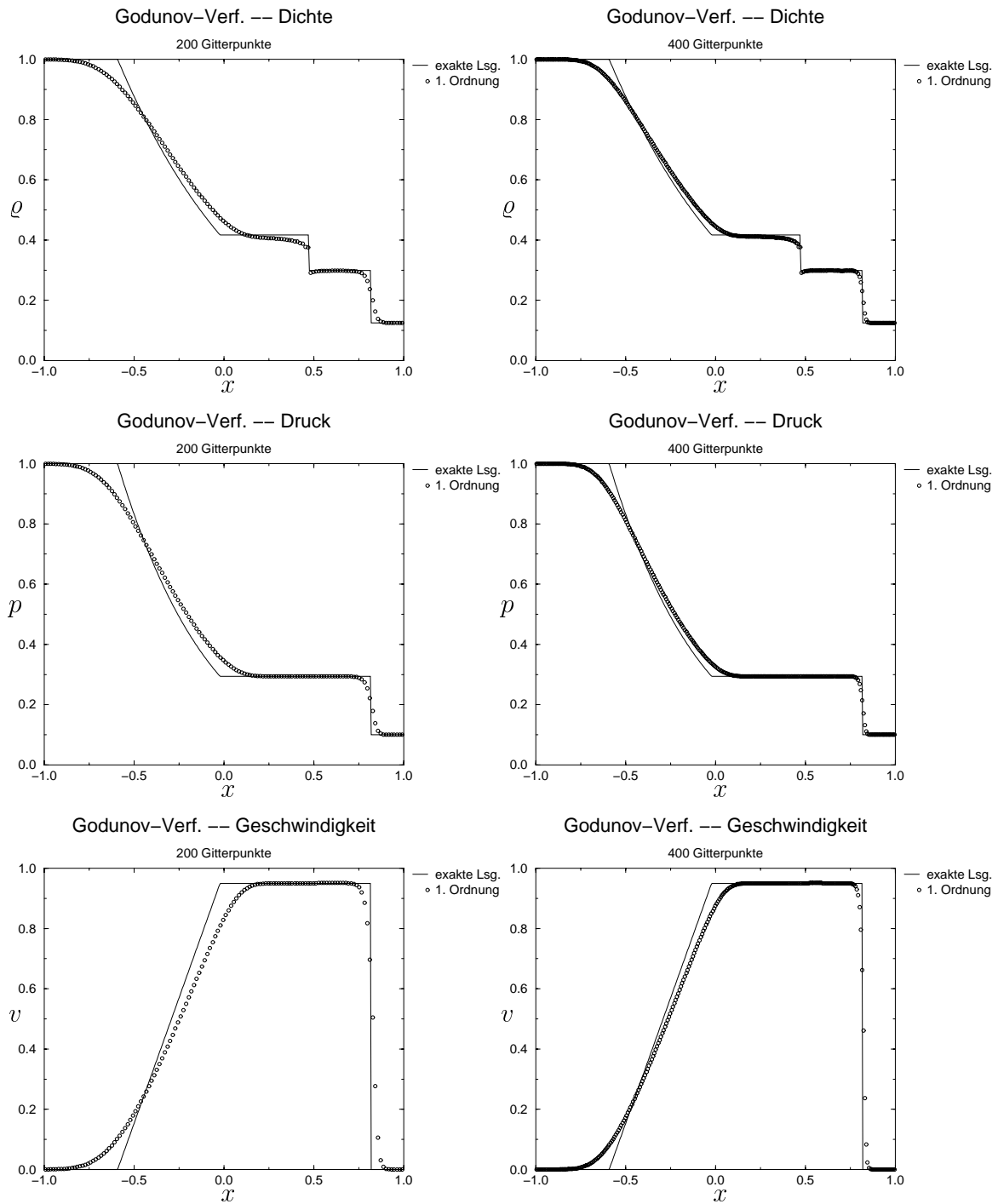


Abbildung 6.24: Sodproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Godunov-Verfahren 1. Ordnung bei Verwendung von 200 (links) und 400 (rechts) Gitterpunkten

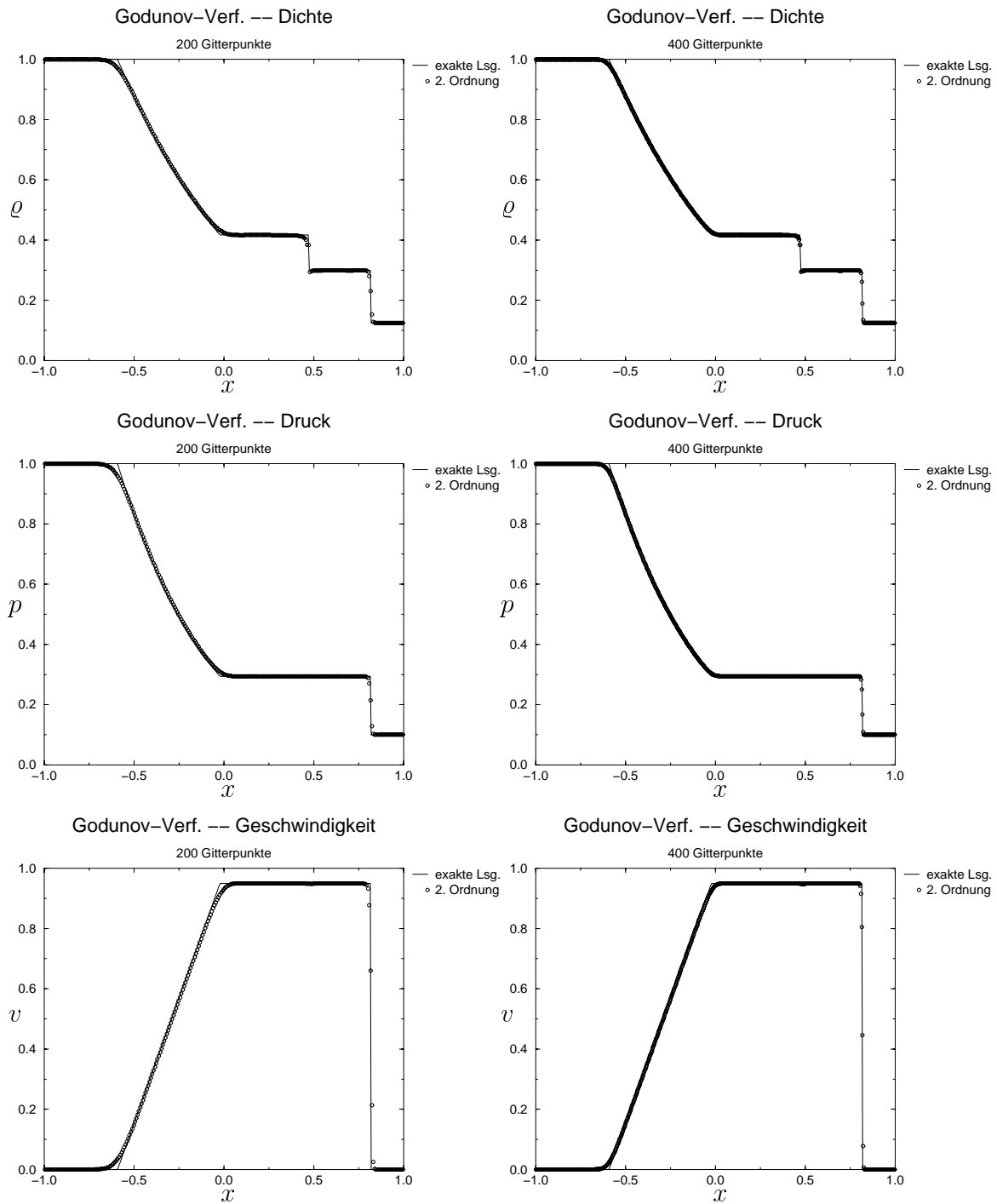


Abbildung 6.25: Sodproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Godunov-Verfahren 2. Ordnung bei Verwendung von 200 (links) und 400 (rechts) Gitterpunkten

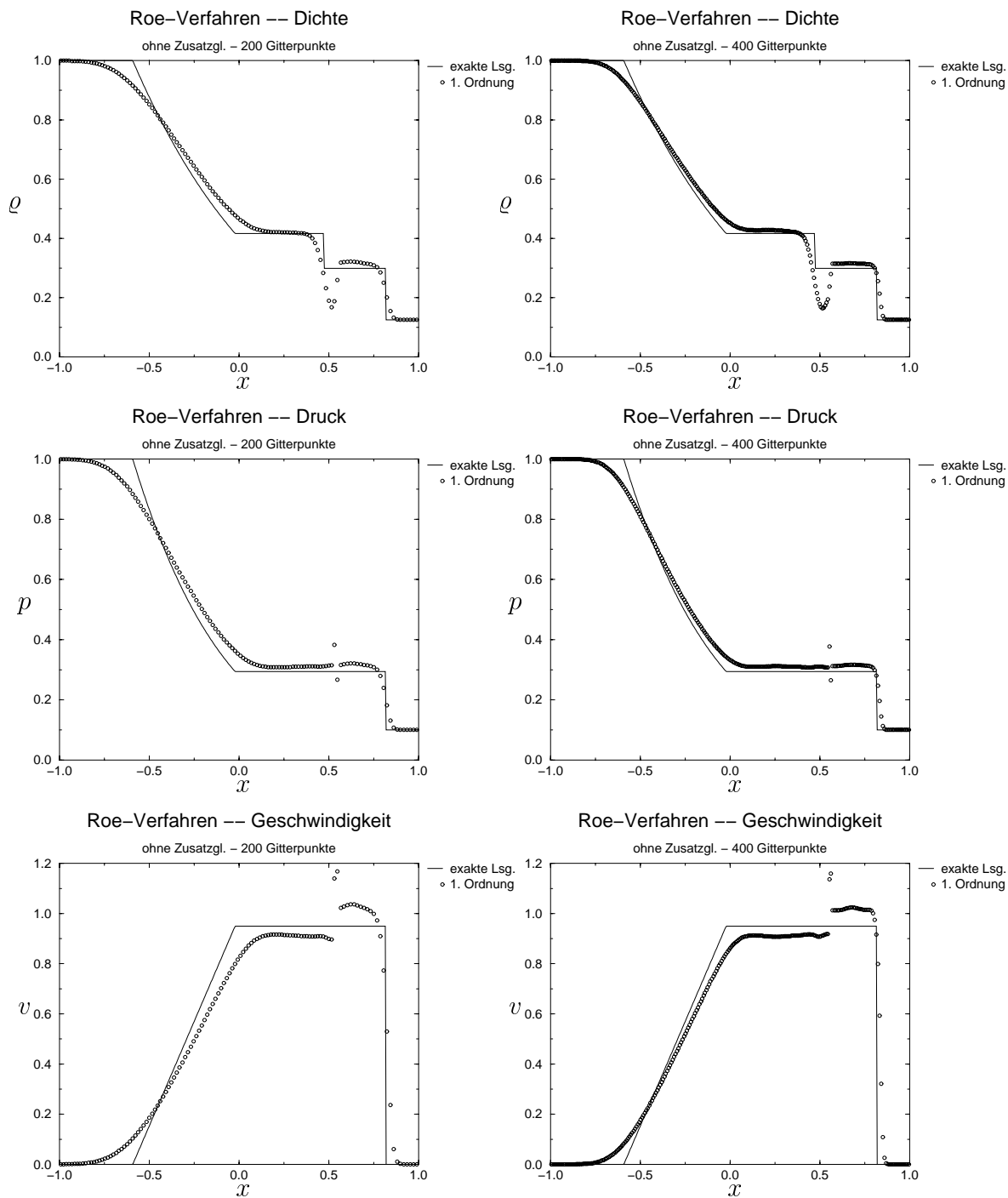


Abbildung 6.26: Sodproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Roe-Verfahren 1. Ordnung ohne Zusatzgleichung bei Verwendung von 200 (links) und 400 (rechts) Gitterpunkten

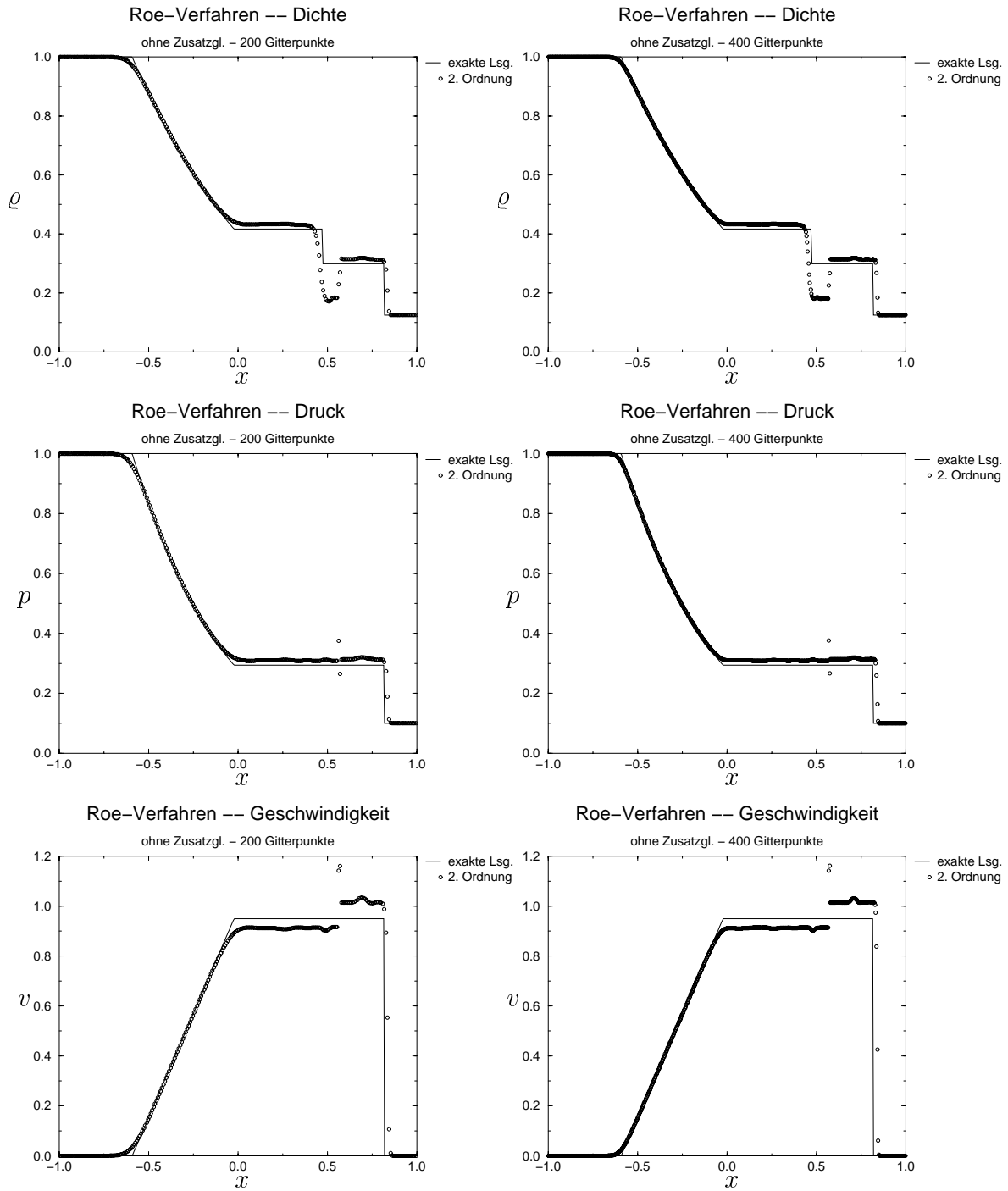


Abbildung 6.27: Sodproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Roe-Verfahren 2. Ordnung ohne Zusatzgleichung bei Verwendung von 200 (links) und 400 (rechts) Gitterpunkten

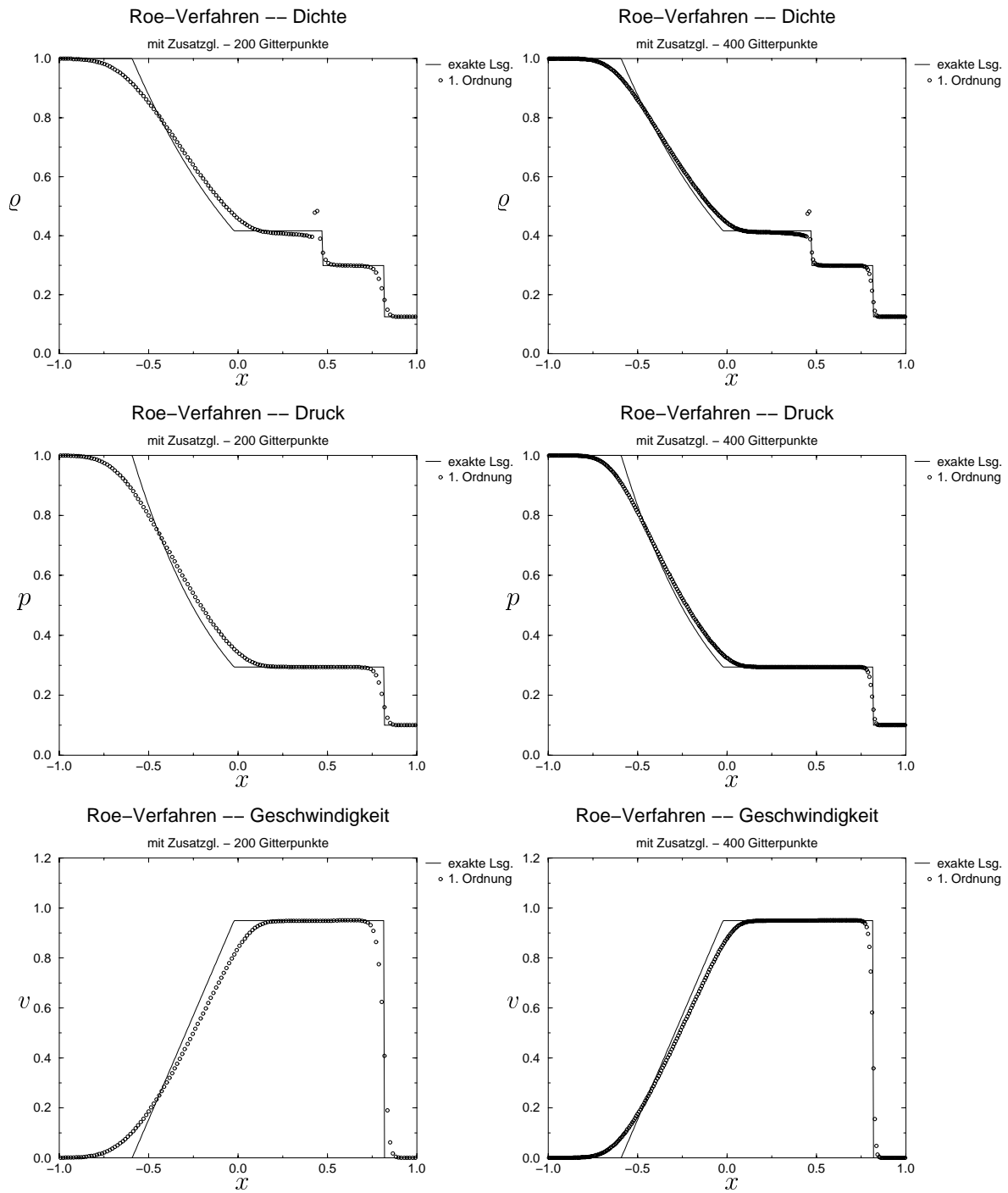


Abbildung 6.28: Sodproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Roe-Verfahren 1. Ordnung mit Zusatzgleichung bei Verwendung von 200 (links) und 400 (rechts) Gitterpunkten

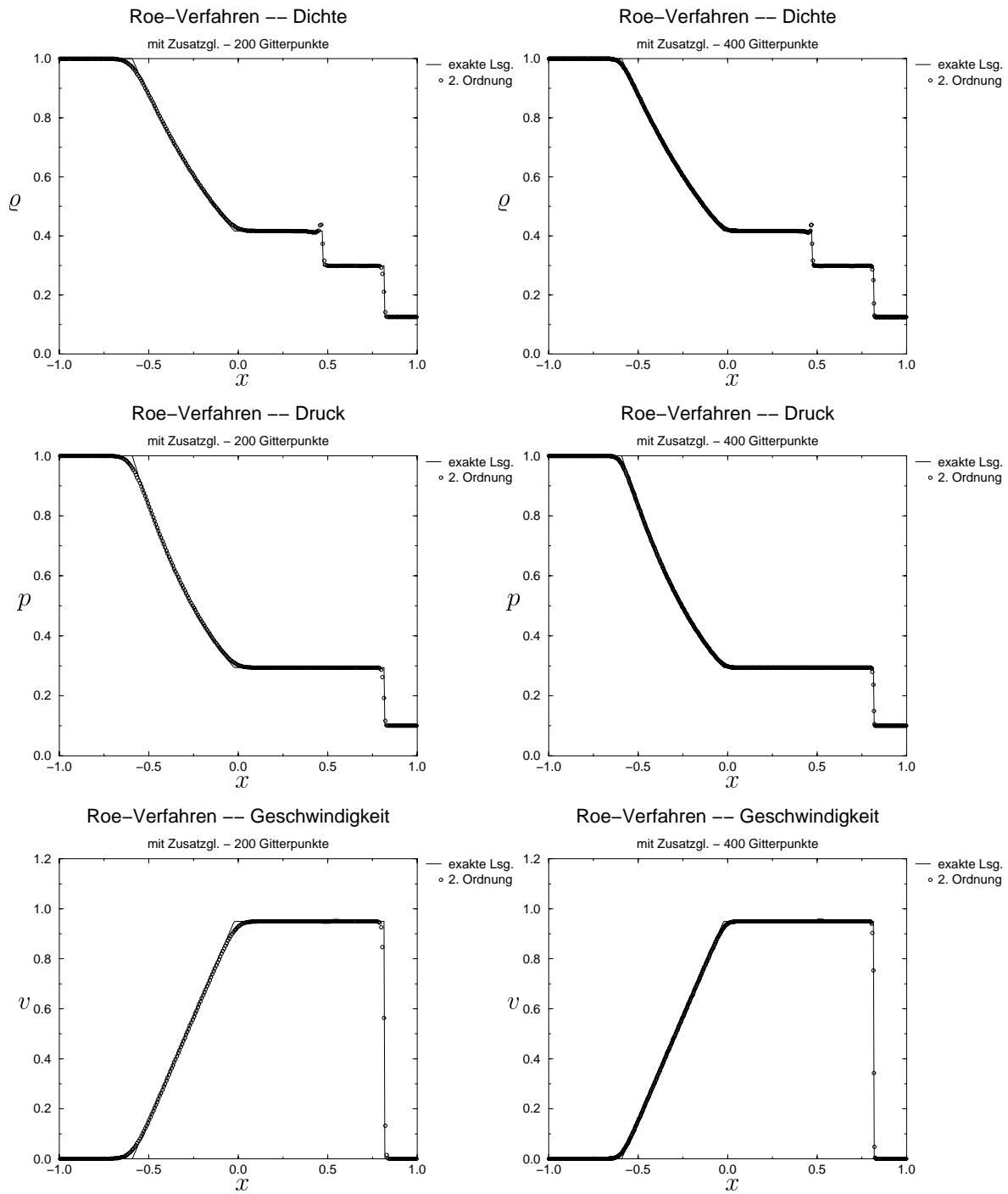


Abbildung 6.29: Sodproblem mit unterschiedlichen idealen Gasen; Roe-Verfahren 2. Ordnung mit Zusatzgleichung bei Verwendung von 200 (links) und 400 (rechts) Gitterpunkten

6.3.3 Wechselwirkung eines Stoßes mit einer Luft-Helium-Grenze

Im dritten Beispiel einer Materialgrenze wird die Wechselwirkung einer Stoßwelle mit einer Kontaktunstetigkeit in Gestalt einer Materialgrenze betrachtet. Ein Stoß, der mit einer Stoß-Machzahl von 1.65563 in Luft von links nach rechts läuft, trifft auf eine Luft-Helium-Grenze. Die Anfangswerte für dieses Problem sind in der Abbildung 6.30 angegeben.

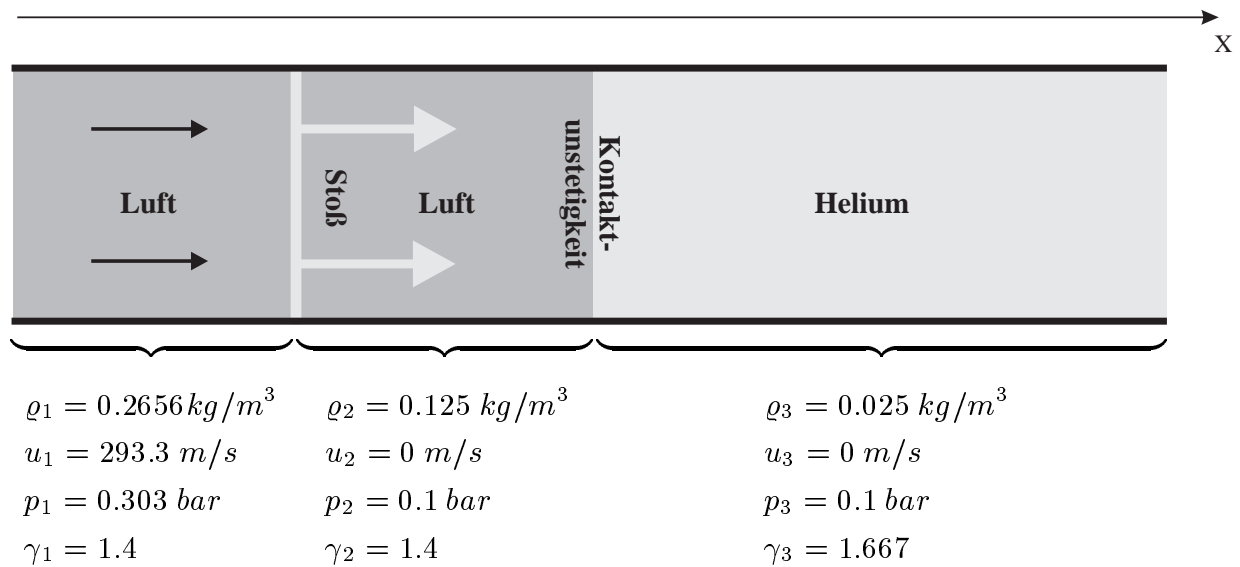


Abbildung 6.30: Die Anfangssituation bei der Wechselwirkung einer Stoßwelle mit einer Luft-Helium-Grenze

Dieses Beispiel wurde von Jenny, Müller und Thomann in [20] angegeben. Sie untersuchten zunächst die Ursache der Fehler an Kontaktunstetigkeiten, wenn bewegte Materialgrenzen mit den üblichen konservativen Verfahren simuliert werden. Auf der Grundlage dieser Fehleranalyse entwickelten sie einen Korrekturalgorithmus für konservative Verfahren. Dieses Beispiel wählten sie, um zu zeigen, daß ihre Korrektur auch bei der Wechselwirkung einer Stoßwelle mit einer Kontaktunstetigkeit eine Verbesserung der numerischen Ergebnisse liefert.

In der Abbildung 6.31 sind Dichte, Druck und Geschwindigkeit für das Godunov-Verfahren zweiter Ordnung zur Zeit $t = 1.725 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ dargestellt. Die linke Spalte zeigt jeweils die Ergebnisse bei Gitterbewegung nur mit der Kontaktunstetigkeit. Bei den Rechnungen, die den Kurven in der rechten Spalte zugrundeliegen, wurde ein Teilgebietsrand mit dem Stoß und einer mit der Kontaktunstetigkeit mitbewegt. Wie bei dem Beispiel aus Kapitel 6.2

können durch die Verfolgung der Stoßwelle Oszillationen des Druckes auf der linken Seite des Stoßes vermieden werden. Das Godunov-Verfahren zeigt eine sehr gute Auflösung der Unstetigkeiten, insbesondere wenn das Gitter mit beiden Wellen mitbewegt wird.

Anhand der Abbildungen 6.32 bis 6.34 kann man das Roe-Verfahren ohne Zusatzgleichung mit demjenigen mit Zusatzgleichung vergleichen. Wie in den vorangegangenen Abbildungen, sind spaltenweise die beiden Gitterbewegungsarten und zeilenweise die Größen Dichte, Druck und Geschwindigkeit dargestellt. In der ersten dieser Abbildungen kann man wieder erkennen, daß die Kontaktunstetigkeit ohne Verwendung einer Zusatzgleichung sehr schlecht aufgelöst wird. Hier bringt die Verfolgung des Stoßes sogar noch eine Verschlechterung der Ergebnisse. Die Lage des Stoßes wird nicht richtig approximiert und links der Verdünnungswelle weicht die Näherungslösung sehr stark von der exakten Lösung ab. Bei Verwendung der Zusatzgleichung (Abbildung 6.33) kann man durch zusätzliche Verfolgung der Stoßwelle die schon sehr guten Ergebnisse bei Bewegung des Gitters nur mit der Kontaktunstetigkeit noch weiter verbessern. Die letzte Abbildung gibt einen direkten Vergleich der beiden Verfahren, wobei der Bereich direkt um die Kontaktunstetigkeit vergrößert dargestellt ist. Die Bilder verdeutlichen, daß die Einführung der zusätzlichen Gleichung eine deutliche Verbesserung liefert. Verglichen mit dem Korrekturverfahren aus [20], treten bei dem hier vorgestellten Verfahren fast keine Oszillationen auf.

Zusammenfassend zeigen die Ergebnisse, daß sowohl das Godunov-Verfahren als auch das Roe-Verfahren mit Zusatzgleichung auch bei der Wechselwirkung einer Stoßwelle mit einer Materialgrenze gute Ergebnisse liefert.

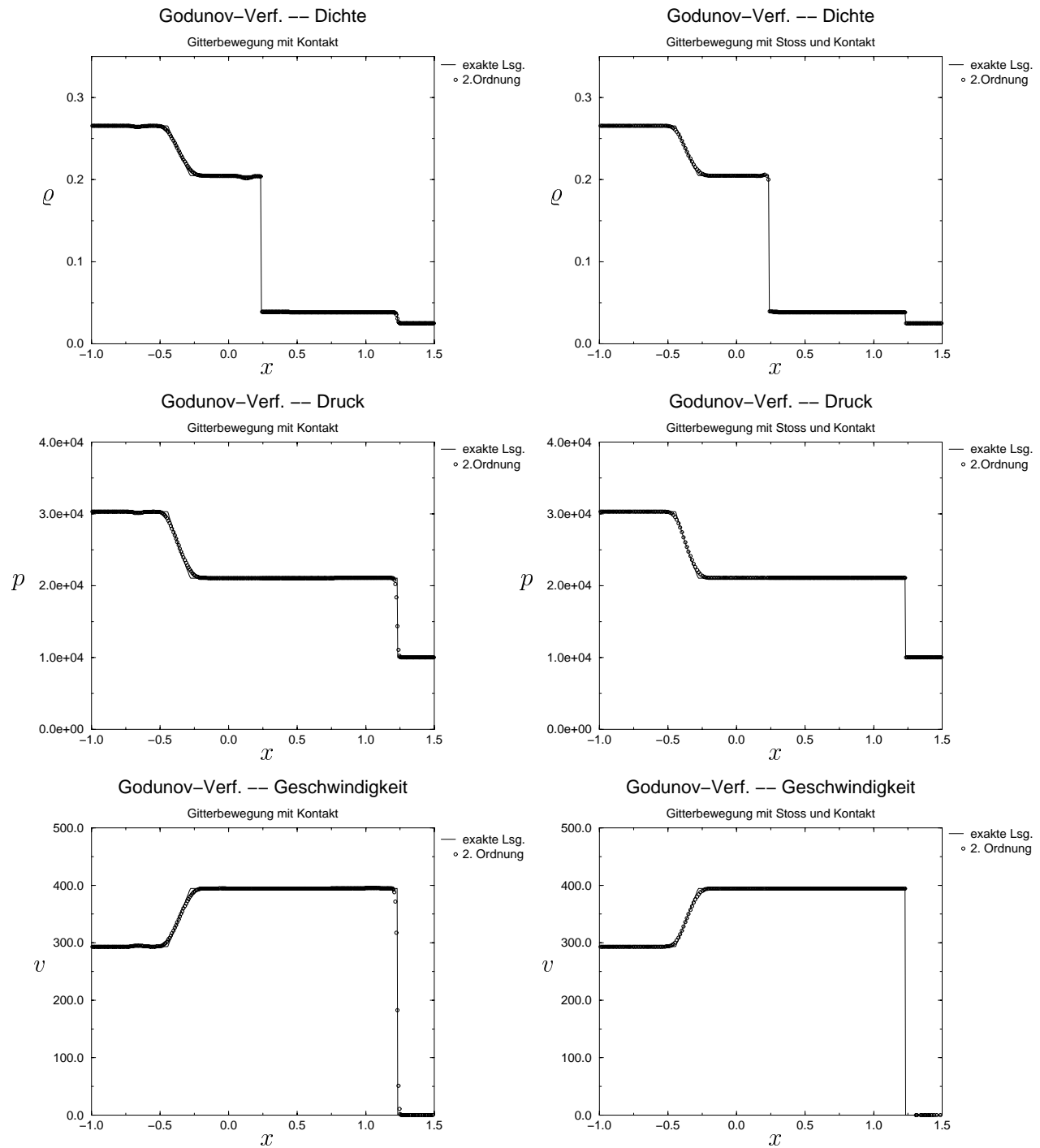


Abbildung 6.31: Luft-Helium-Grenze; Godunov-Verfahren 2. Ordnung bei Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (links) und mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts)

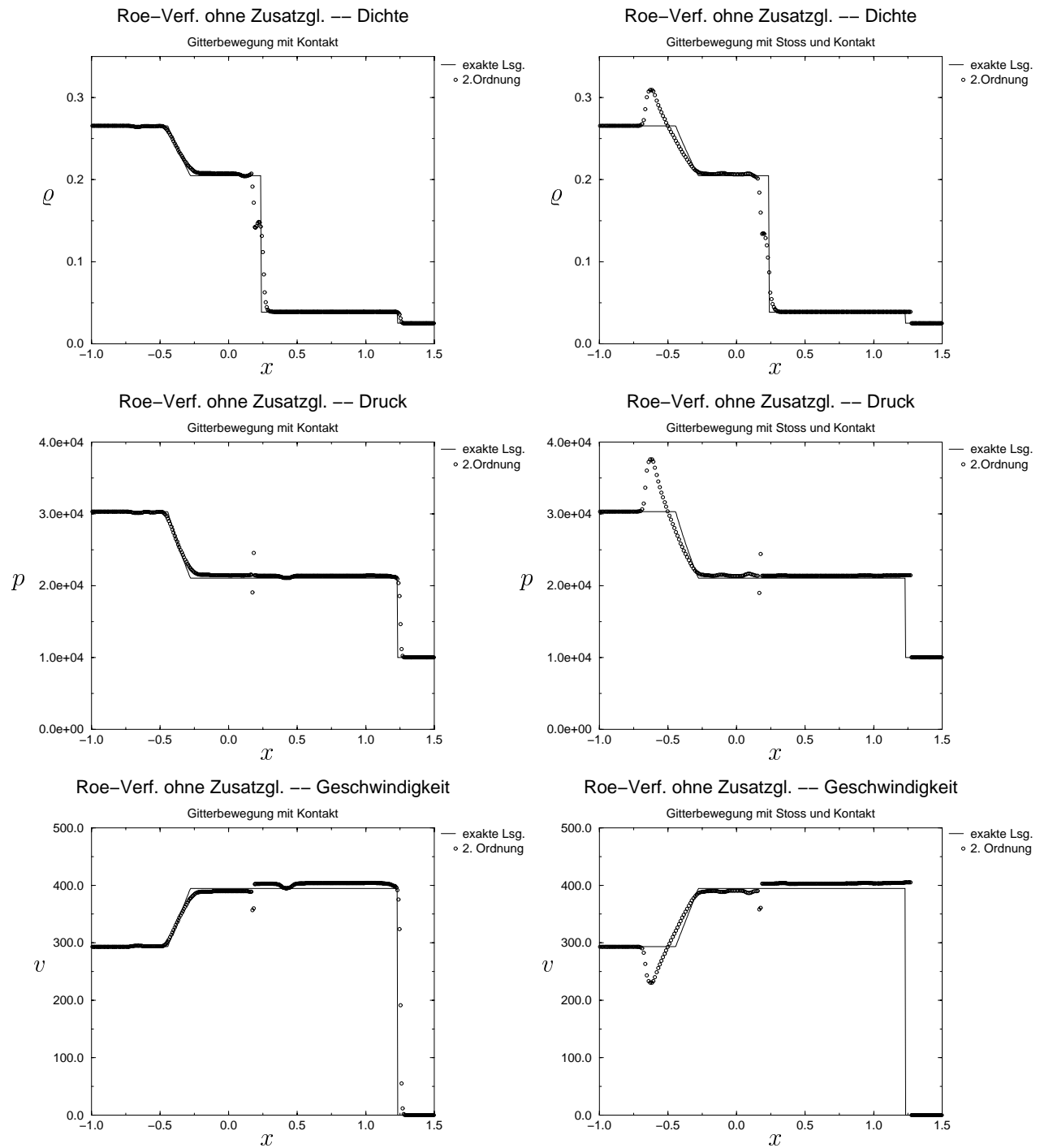


Abbildung 6.32: Luft-Helium-Grenze; Roe-Verfahren 2. Ordnung ohne Zusatzgleichung bei Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (links) und mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts)

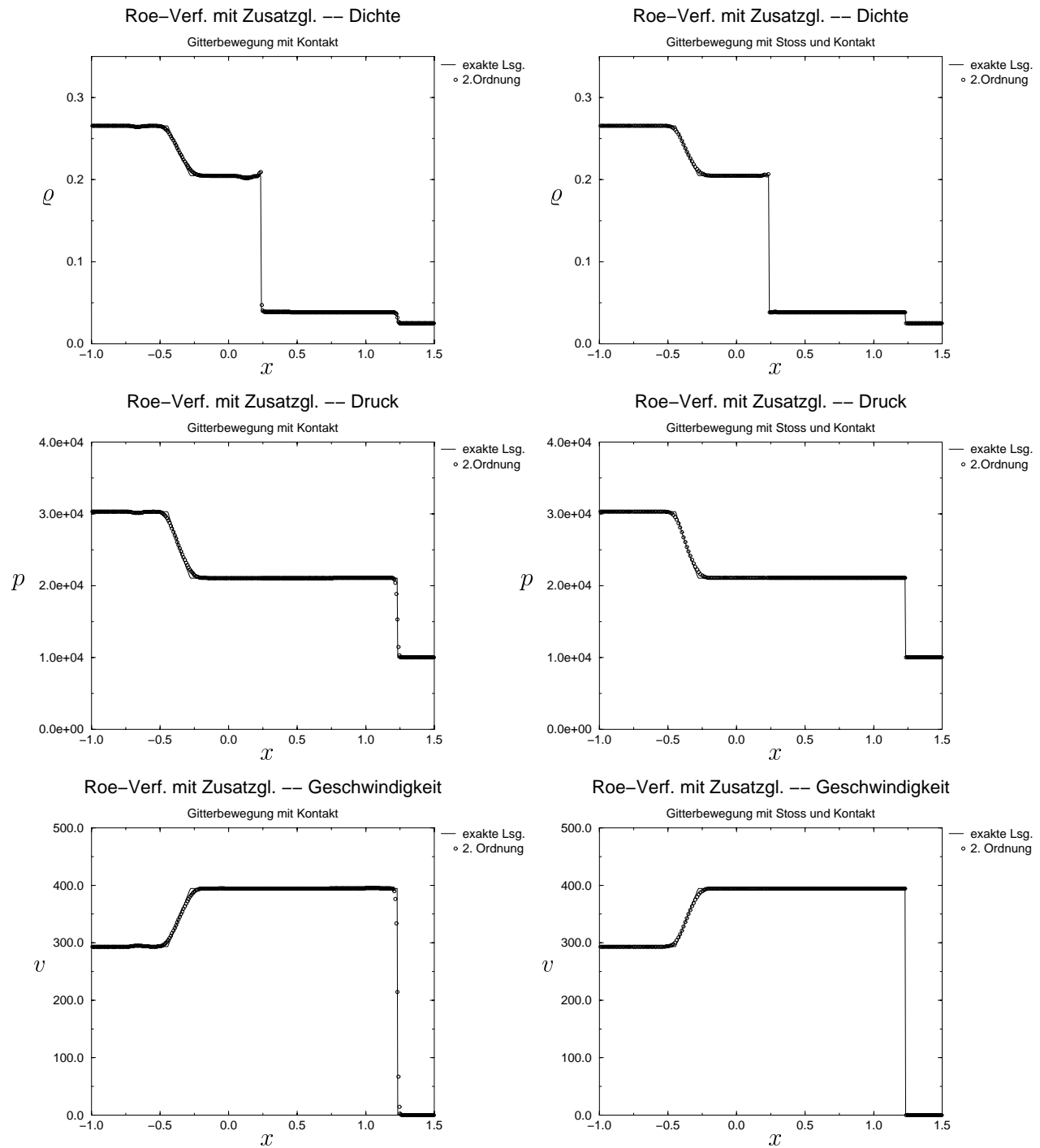


Abbildung 6.33: Luft-Helium-Grenze; Roe-Verfahren 2. Ordnung mit Zusatzgleichung bei Bewegung des Gitters mit der Kontaktunstetigkeit (links) und mit Stoß und Kontaktunstetigkeit (rechts)

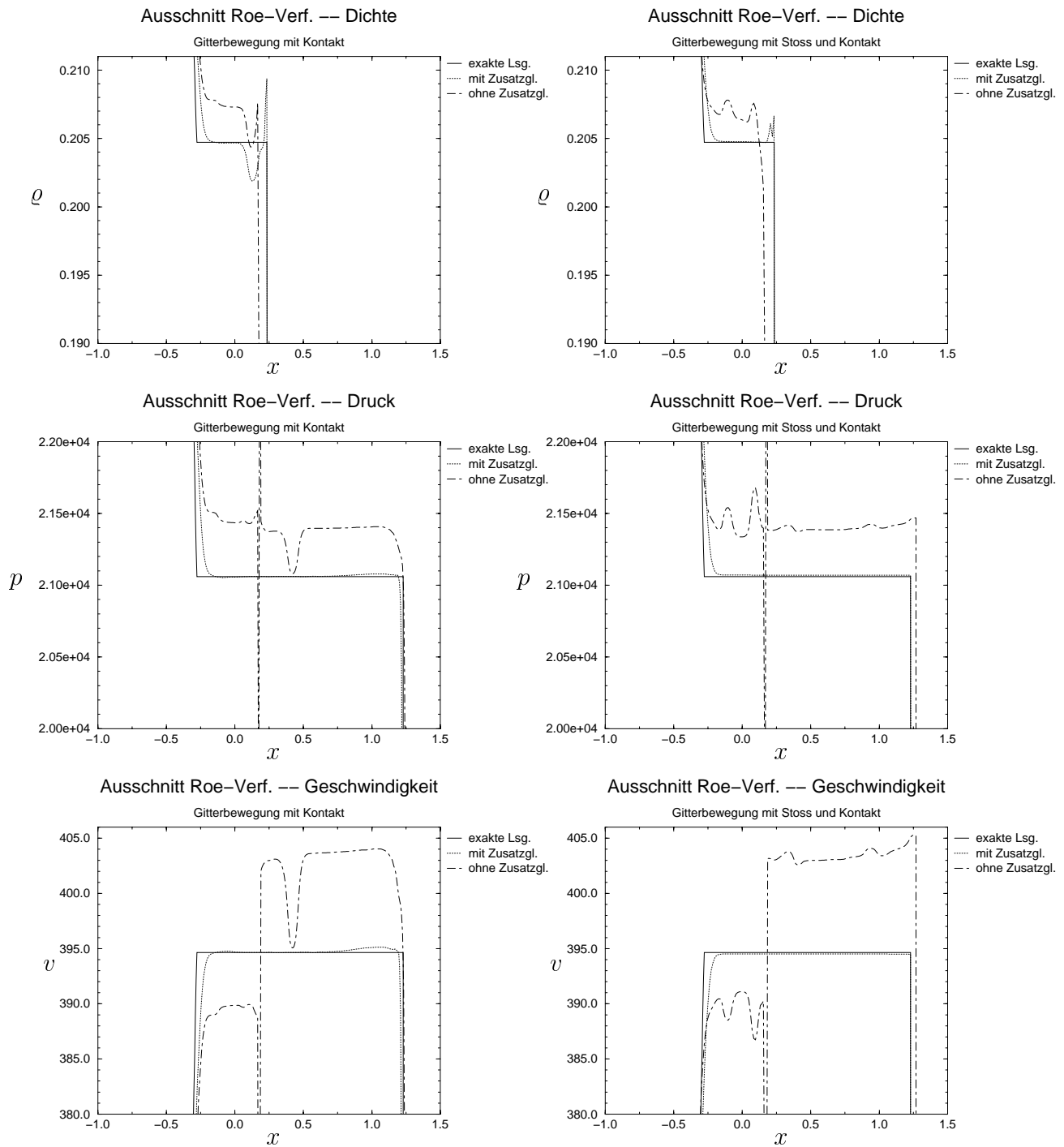


Abbildung 6.34: Luft-Helium-Grenze; Roe-Verfahren 2. Ordnung; Vergleich mit und ohne Zusatzgleichung; Ausschnitte

Kapitel 7

Simulation von Stoßwellenexperimenten

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse numerischer Simulationen von an der Karlsruher Light Ion Facility KALIF durchgeführten Stoßwellenexperimenten vorgestellt. Zunächst werden die Experimente und die Struktur des verwendeten zweidimensionalen Programmcodes beschrieben. Das erste Beispiel ist das einer ebenen Aluminiumfolie. Dabei können die numerischen Ergebnisse sowohl mit den Experimenten als auch mit den Ergebnissen eindimensionaler Rechnungen verglichen werden. Um die dynamischen Vorgänge in einem Target, dessen Oberfläche mit einer Struktur versehen ist, besser verstehen zu können, wird bei diesen Beispielen auf die Theorie der auftretenden Instabilitäten eingegangen, bevor die erzielten Ergebnisse vorgestellt werden.

7.1 Stoßwellenexperimente an der KALIF-Anlage

Die Karlsruher Light Ion Facility KALIF ist ein Hochstrom-Impulsgenerator zur Erzeugung von intensiven Ionenstrahlen, an dem Strahl-Target-Wechselwirkungsexperimente durchgeführt werden. Die folgende Darstellung der dynamischen Vorgänge in dem Target ist im wesentlichen [4] entnommen. Die genaue Funktionsweise der KALIF sowie die Erzeugung der Ionenstrahlen werden in [36] und [1] erklärt. An der KALIF werden Targetschichten aus Festkörpermaterie mit einem hochintensiven Strahl leichter Ionen, also Ionen mit niedrigem Atomgewicht bzw. niedriger Ordnungszahl, beschossen [3]. Die verfügbaren Ionendioden sind die selbstmagnetisch isolierte B_θ -Diode und eine fremdmagnetisch isolierte Diode, die Strahlleistungsdichten von bis zu 0.15 TW/cm^2 bzw. 1 TW/cm^2 erzeugen [1, 19]. Der erzeugte Ionenstrahlimpuls hat abhängig von der Diode einige 10 kJ Energieinhalt, eine Pulsdauer der Energieeinstrahlung am Target von ca. 40 ns Halbwertsbreite und einen Fokus-Durchmesser von ca. 0.8 cm. Er wird in der Targetmaterie in einer sehr dünnen

und der Protonenstrahl als gleichförmig angenommen wird, gibt es nur Änderungen in eine Raumrichtung. Dieses Beispiel kann also eindimensional simuliert werden. Im Unterschied zur Wirklichkeit ist vereinfachend angenommen, daß in der nach links abströmenden heißen Ablationsmaterie während der gesamten dargestellten Zeitspanne quasistationär der Druck p_{abl} herrscht. Im Zeitpunkt t_0 erreicht der Ionenstrahlpuls die Targetoberfläche x_1 und wird in der bis zum Ort x_2 reichenden Depositionszone A abgebremst. Dabei stellt sich in der Grenzzone beiderseits x_2 der Ablationsdruck p_{abl} ein, der sich mit Schallgeschwindigkeit nach rechts in die bis dahin drucklose Targetmaterie B ausbreitet und diese beschleunigt. Erreicht die Druckfront die Targetrückseite x_3 , so entspannt sich die komprimierte Targetmaterie C dort ins Vakuum hinein. Dabei beschleunigt die Targetoberfläche sprunghaft. Gleichzeitig erzeugt der auf der Rückseite herrschende Druck $p_D = 0$ eine Verdünnungswelle, die sich nach links durch die komprimierte Materie ausbreitet, die vordere Grenzfläche x_2 erreicht und den dort herrschenden Druck (vom Wert in C auf einen niedrigeren Wert in E) reduziert. Dieses dynamische Geschehen wiederholt sich solange, bis die nacheinander nach links laufenden Verdünnungswellen den an der Targetvorderseite herrschenden Druckzustand stufenweise von p_{abl} bis auf 0 abgebaut haben. Die Geschwindigkeit der Vorderseite des Targets nimmt dabei stufenweise zu. Im drucklosen Endzustand hat das Target schließlich seine Maximalgeschwindigkeit erreicht.

In den an der KALIF durchgeführten Ablationsexperimenten ist der Druck in der Ablationsmaterie nicht konstant, da der Ionenstrahl der abströmenden Ablationsmaterie laufend Energie zuführt, wobei diese Leistungszufuhr räumlich und zeitlich nicht gleichförmig ist.

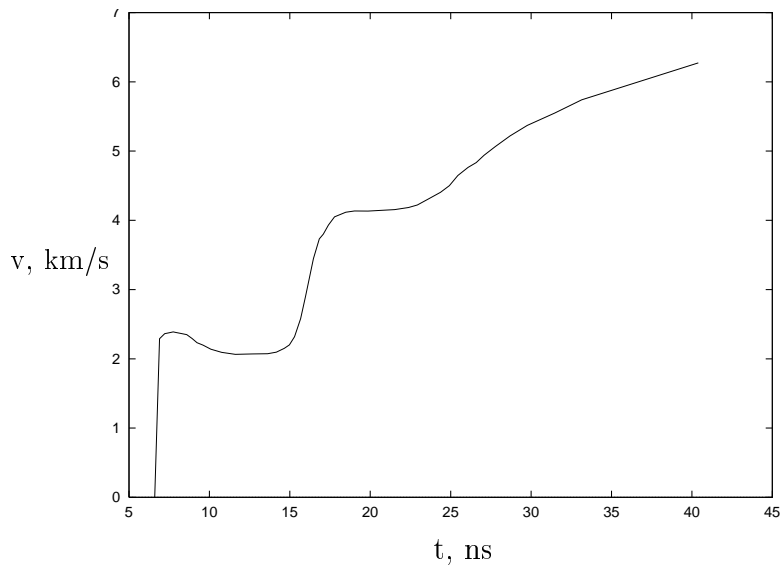


Abbildung 7.2: Gemessene Geschwindigkeitskurve an der Rückseite einer mit einem Ionenstrahl beschossenen $50 \mu\text{m}$ dünnen Aluminiumfolie [3]

In der Abbildung 7.2 ist die in einem KALIF-Experiment an der Rückseite einer $50\mu\text{m}$ dünnen Aluminiumfolie gemessene Geschwindigkeit aufgetragen. Die stufenweise Geschwindigkeitszunahme ist deutlich zu erkennen. Die Experimente wurden mit der B_θ -Diode durchgeführt. Sie wurden mit dem in Abschnitt 7.2 beschriebenen Programm nach zweidimensionalen Effekten untersucht. Die Ergebnisse sind in Kapitel 7.3 dargestellt.

7.2 Struktur des zweidimensionalen Programmcodes

In diesem Abschnitt wird kurz auf die Struktur des zweidimensionalen Rechenprogramms, das zur Simulation der an der KALIF durchgeführten Stoßwellenexperimente verwendet wird, eingegangen. Es basiert auf einem Godunov-Typ-Verfahren, das zweiter Ordnung im Raum und erster Ordnung in der Zeit ist. Liegen die Größen in den benachbarten Gitterzellen sehr dicht beieinander, so wird der zeitaufwendige Riemannlöser durch die akustische Näherung ersetzt. Das Programm enthält auch die Energieeinlagerung des Ionenstrahls in das Target, die nach einem aus den Experimenten ermittelten, zeitlich veränderlichen Strahlprofil berechnet wird. Der Wärmetransport ist in diesem Programm nicht berücksichtigt. Das gesamte Rechengebiet wird wie im eindimensionalen Programm (siehe Kapitel 6) in Teilgebiete unterteilt. Dabei werden instationäre Fronten und Materialgrenzen als Ränder von Teilgebieten betrachtet, die sich mit der Zeit bewegen können. Das numerische Verfahren verwendet den im 2.Kapitel beschriebenen Finite-Volumen-Ansatz auf bewegten Gittern, und die Gittergeschwindigkeit wird über die Lösung von Riemannproblemen bestimmt. In jedem Teilgebiet wird in jedem Zeitschritt unter Verwendung von randangepassten Koordinaten ein neues Gitter erzeugt. An den Seitenflächen der so erzeugten Raum-Zeit-Gitterzellen werden dann die entstandenen Riemannprobleme gelöst. Dies geschieht entweder durch die akustische Näherung oder einen Riemannlöser.

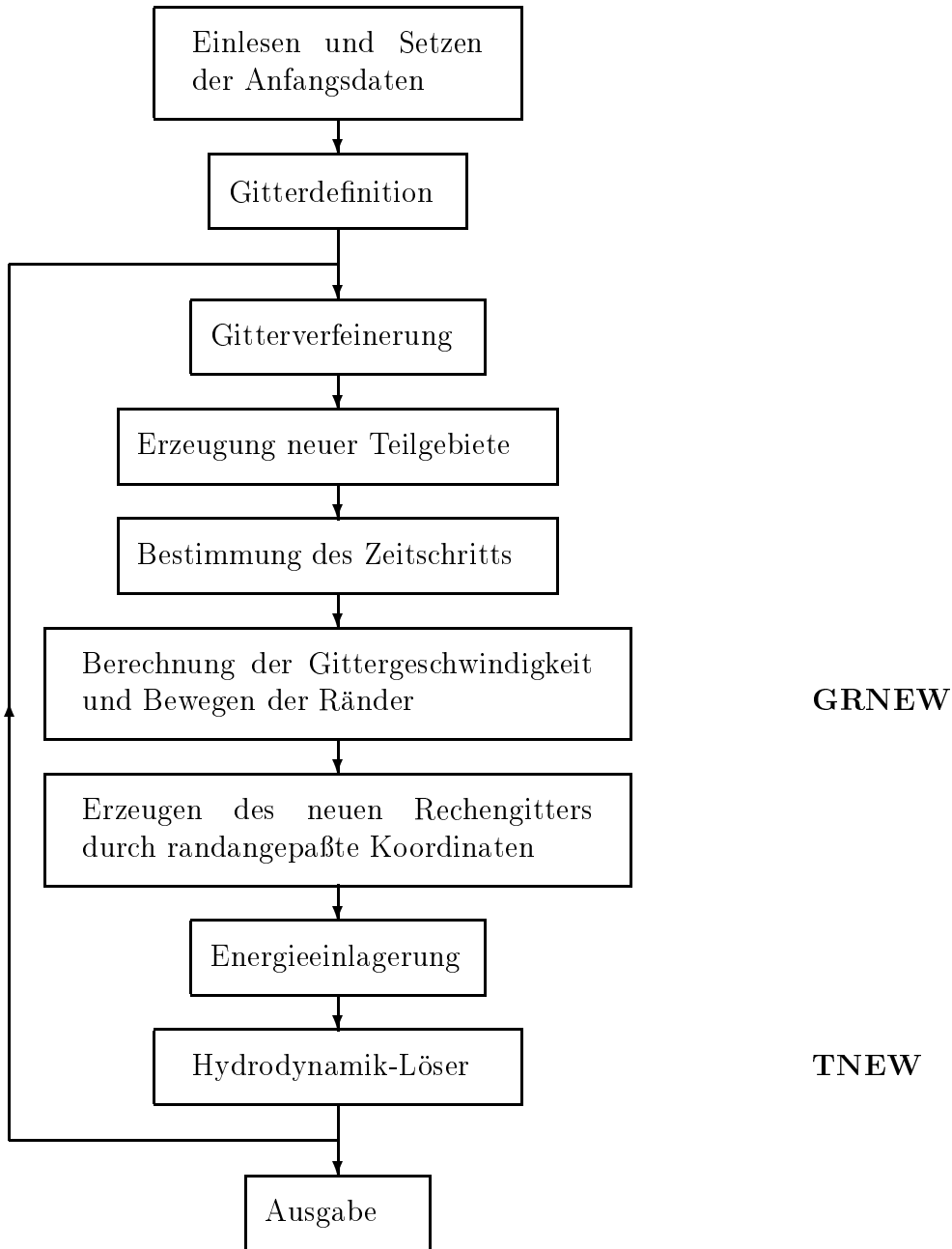
Anhand von Flußdiagrammen wird in diesem Abschnitt die Programmstruktur vorgestellt. Einen kurzen Einblick in die Berechnungsstrategie zusammen mit einigen Beispielen findet man auch in [12].

Im Hauptprogramm werden zunächst die Anfangsdaten eingelesen bzw. gesetzt. Dann wird das Anfangsgitter erzeugt. Desweiteren muß die benötigte Zustandsgleichung generiert und initialisiert und das Strahlprofil eingelesen werden, bevor mit der Zeitschleife begonnen werden kann. Genaueres über verschiedene Zustandsgleichungen für Aluminium findet man in [15].

Aufgrund der Bewegung des Gitters ändern die Teilgebiete und damit auch die einzelnen Gitterzellen ihre Größe. Daher ist es erforderlich das Gitter zu verfeinern bzw. zu vergrößern. Wird ein Teilgebiet mit der Zeit kleiner, so führt eine konstante Anzahl von Gitterzellen zu kleiner werdenden Gitterzellen und damit zu steigenden Rechenzeiten. Wächst dagegen ein Teilgebiet, so führen größer werdende Gitterzellen zu ungenaueren Ergebnissen. Im folgenden soll der Begriff „Gitterverfeinerung“ auch die Vergrößerung einschließen. Im vorliegenden Programm kann diese Verfeinerung in jedem Teilgebiet unabhängig von

den anderen Teilgebieten erfolgen. Desweiteren gibt es auch die Möglichkeit, Teilgebiete zu zerlegen. Dies geschieht interaktiv, so daß der Benutzer selbst entscheiden kann, ob und an welcher Stelle ein Teilgebiet zerlegt werden soll. Diese Möglichkeit ist besonders dort sinnvoll, wo es zu starker Verzerrung des Gitters kommt.

Unterprogramme

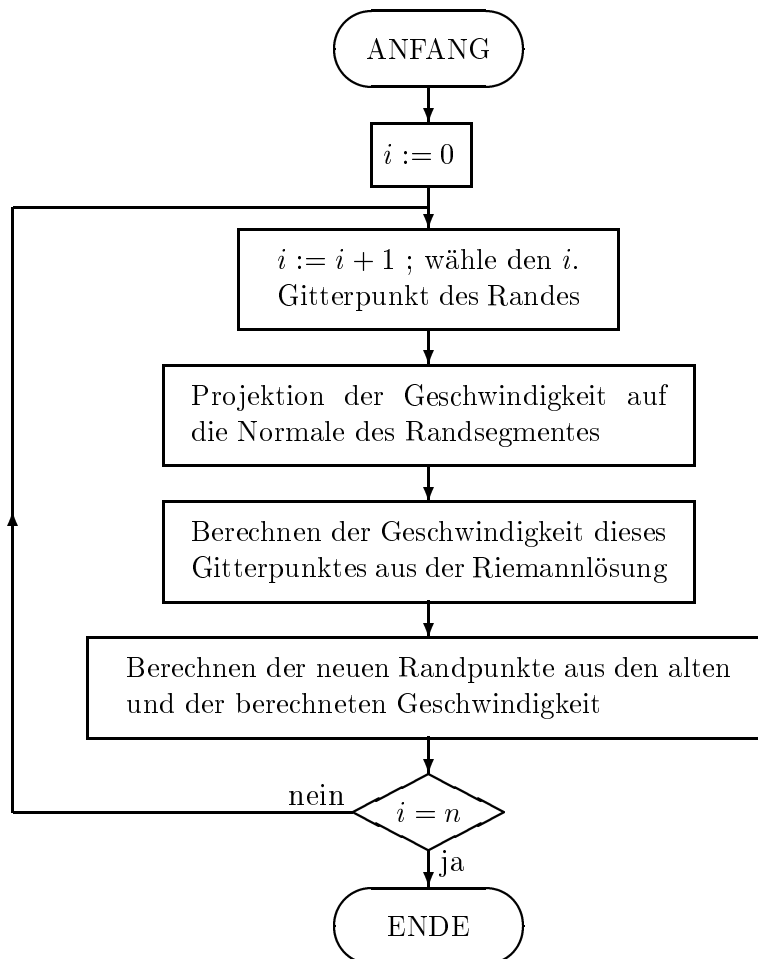


In jedem Zeitschritt wird daher zunächst getestet, ob Verfeinerung, Vergrößerung oder

Zerlegung eines Teilgebiets notwendig sind. Dann wird der Zeitschritt unter Berücksichtigung der CFL-Bedingung bestimmt. Nach der Berechnung der Gittergeschwindigkeit für alle Randsegmente aller Teilgebiete kann in jedem Teilgebiet durch randangepaßte Koordinaten [38] ein neues Rechengitter erzeugt werden. Der Hydrodynamiklöser berechnet die Flüsse durch alle Seitenflächen der Raum-Zeit-Gitterzellen und daraus die Werte der physikalischen Größen zum neuen Zeitpunkt. Bevor dieser aufgerufen werden kann, muß die Energieeinlagerung berechnet werden. Damit ist dann die Zeitschleife beendet, die bis zum Erreichen der erforderlichen Endzeit wiederholt wird.

7.2.1 Bewegung der Ränder

Im Unterprogramm **GRNEW** zur Berechnung der Bewegung der Teilgebietsränder wird jeder Teilgebietsrand mit einer geeigneten Geschwindigkeit bewegt. Dies ist zum Beispiel die lokale Strömungsgeschwindigkeit, wenn der Rand eine Materialgrenze darstellt.



Zunächst wird mit Hilfe von Riemannlösern die Bewegung all jener Ränder berechnet, die sich frei bewegen können. Die übrigen Ränder bleiben entweder ortsfest oder sie liegen zwi-

schen zwei sich bewegenden Rändern, ihre neue Lage ergibt sich dann durch die Eckpunkte der Nachbarränder. Die Geschwindigkeit des jeweiligen Randsegmentes ist die Geschwindigkeit der sich bildenden Kontaktunstetigkeit oder Stoßwelle. In diesem Unterprogramm werden auch die numerischen Flüsse durch die Randsegmente berechnet, die später im Hydrodynamik-Löser **TNEW** benötigt werden.

Das hier dargestellte Flußdiagramm beschreibt das Vorgehen für die Ränder, für die die Geschwindigkeit berechnet werden muß. Es bezeichne n die Anzahl der Randsegmente, in die der betrachtete Rand zerlegt ist. Bei dieser Vorgehensweise müssen die unterschiedlichen Arten der Gitterbewegung berücksichtigt werden. Dies gilt insbesondere für die Gitterpunkte, die zu zwei benachbarten Randsegmenten gehören. Besteht zum Beispiel ein Teilgebietsrand aus zwei sich gegenüberliegenden festen Wänden, einem freien Rand und einer Kontaktfläche zum benachbarten Teilgebiet, so muß berücksichtigt werden, daß die Gitterpunkte auf den festen Wänden nur entlang der Wände bewegt werden können. Das heißt, daß jegliche Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Wand nicht erlaubt ist.

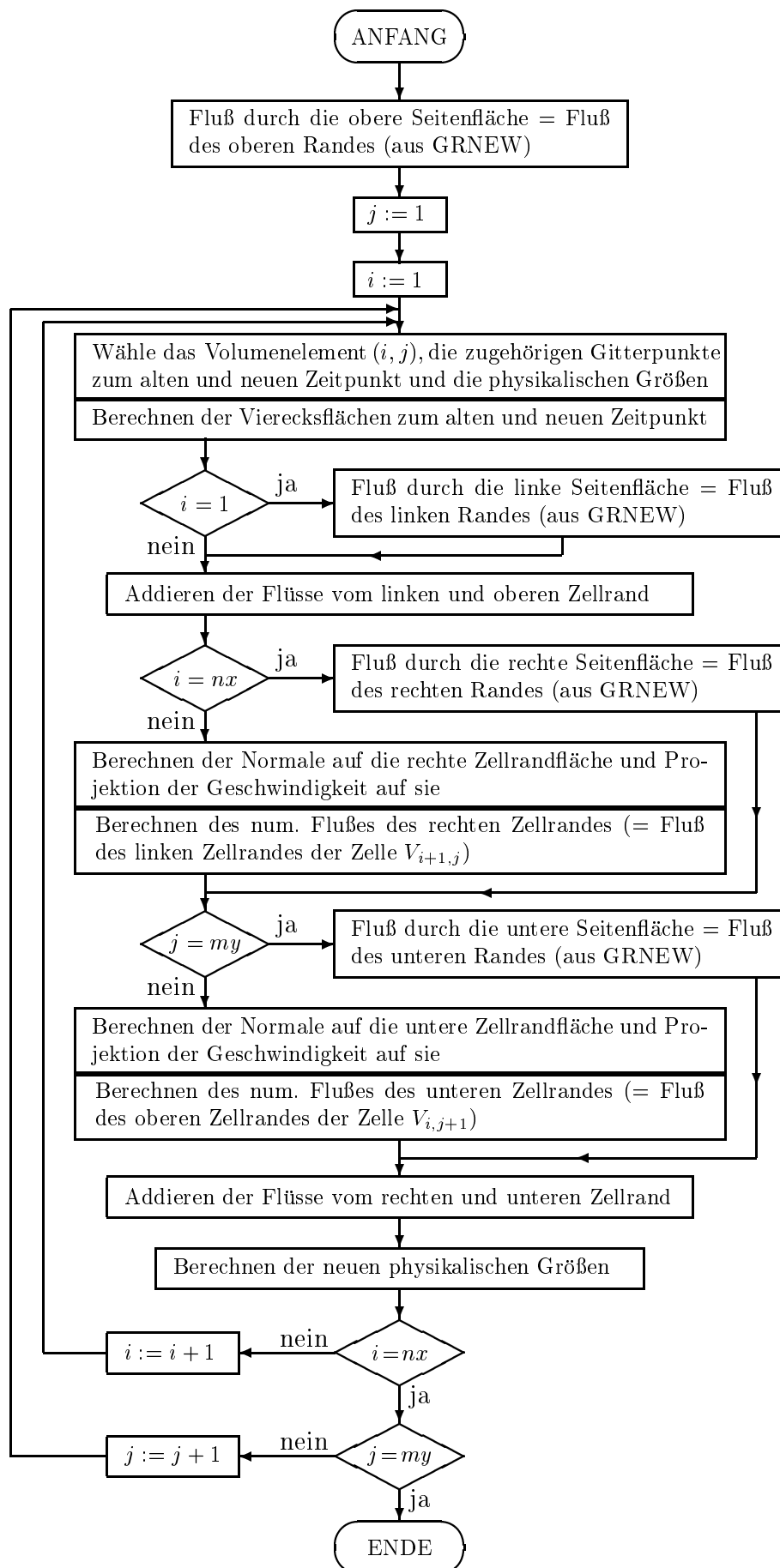
7.2.2 Gittererzeugung

Die Grundidee der Gittererzeugung durch randangepaßte Koordinaten, wie sie im verwendeten Programm durchgeführt wird, ist die Transformation des physikalischen Gebiets auf ein rechteckiges, logisches Gebiet. Der Rand des physikalischen Gebiets in der (x, y) -Ebene wird auf den Rand eines Rechtecks in der (ξ, η) -Ebene transformiert. Dann wird in diesem Rechteck ein äquidistantes Gitter definiert und in das physikalische Gebiet zurücktransformiert. Zur genauen Beschreibung siehe [38, 39].

7.2.3 Hydrodynamik-Löser

Das Unterprogramm **TNEW** löst die integralen Erhaltungsgleichungen (2.70) approximativ. Dazu wird durch jede Seitenfläche der aus den alten und neuen Gitterpunkten gebildeten Volumenelemente (siehe Abbildung 2.5) ein Riemannproblem gelöst. Daraus ergeben sich die numerischen Flüsse.

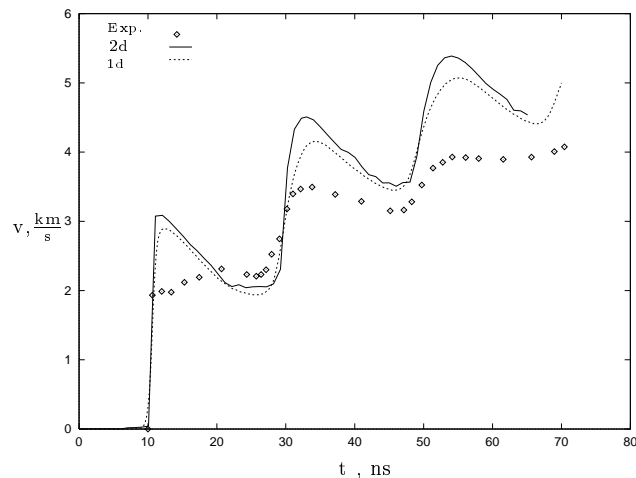
Die Näherungswerte zum neuen Zeitpunkt erhält man aus der Gleichung (2.73), wenn die Integrale auf der rechten Seite durch die numerischen Flüsse ersetzt werden. Im folgenden Flußdiagramm wird die Vorgehensweise für ein Teilgebiet beschrieben. Hier bezeichnet n die Anzahl der Gitterzellen in x -Richtung und m die Anzahl der Gitterzellen in y -Richtung.



7.3 Ebene Targets

Als erstes Beispiel wird das in Kapitel 7.1 beschriebene Experiment, bei dem eine dünne ebene Aluminiumfolie mit einem Ionenstrahl beschossen wird, mit dem zweidimensionalen Code simuliert. Dabei wurde die in [15] vorgestellte, halbempirische Zustandsgleichung für Aluminium verwendet. Die Ergebnisse können auch mit den Ergebnissen eines eindimensionalen Codes verglichen werden. In den Experimenten wurden Aluminiumfolien der Dicke $33\ \mu\text{m}$, $50\ \mu\text{m}$ und $75\ \mu\text{m}$ gewählt [3]. Gemessen wurde die Geschwindigkeit an der Rückseite des Targets, deren zeitliche Entwicklung in den Abbildungen 7.5, 7.6 und 7.3 im Vergleich mit den Ergebnissen der ein- und zweidimensionalen Rechnungen dargestellt ist. Da in den aus den Experimenten entnommenen Eingabegrößen für die numerischen Berechnungen einige Unsicherheiten enthalten sind und nicht alle physikalischen Effekte bei den Rechnungen berücksichtigt werden, kann man nicht erwarten, die Meßergebnisse sehr genau durch die Rechnungen wiedergeben zu können. Die Unsicherheiten liegen zum Beispiel in der Zustandsgleichung, die für das entstehende Plasma teils aus physikalischen Überlegungen, teils aber auch aus Messungen gewonnen wurde. Ein weiteres Beispiel ist die Energie des Ionenstrahls, die nicht bei jedem Experiment exakt den gleichen zeitlichen Verlauf hat. Daher wurden die Leistung und die Spannung der Strahlprofile in mehreren Experimenten gemessen. Da die Profile von Experiment zu Experiment variieren, wurden in den Simulationen über mehrere repräsentative Experimente gemittelte Strahlprofile verwendet. Dies kann auch einige Unterschiede zwischen den gerechneten und den gemessenen Geschwindigkeitskurven erklären. Unberücksichtigt bleibt in den Rechnungen der Wärmetransport.

Abbildung 7.3: Geschwindigkeitskurven an der Rückseite eines $75\ \mu\text{m}$ dicken Aluminiumtargets; Vergleich zwischen Experimenten [3], eindimensionalen und zweidimensionalen Rechnungen



Zu Beginn ist der Druck nahezu Null, die Geschwindigkeit ist Null und die Dichte ist gleich der Festkörperdichte von Aluminium, $\rho_0 = 2.71\ \text{g}/\text{cm}^3$. Da es sich bei diesem Beispiel um einen eindimensionalen Vorgang handelt, spielt die Dicke des Targets keine Rolle. Zur Einsparung von Rechenzeit wurde die Dicke des Targets so gewählt, daß zur Diskretisierung nur zwei Gitterzellen verwendet werden müssen. Dabei wurde berücksichtigt, daß

das Verhältnis von Breite zu Länge der Gitterzellen im Mittel von der Ordnung Eins sein sollte in x -Richtung ausreichend Gitterzellen vorhanden sind, um eine gute Auflösung zu erzielen. Als günstig hat sich eine Dicke von $2\ \mu\text{m}$ erwiesen.

In der Abbildung 7.4a ist der Anfangszustand der Dichte des $75\ \mu\text{m}$ dicken Targets dargestellt. Der Ionenstrahl kommt von rechts, so daß sich das entstehende Aluminiumplasma mit der Zeit nach rechts ausdehnt. Als Randbedingungen sind bei $y = 0\ \mu\text{m}$ und $y = 2\ \mu\text{m}$ Symmetrieachsen und bei $x = 0\ \mu\text{m}$ und $x = 75\ \mu\text{m}$ freie Ränder vorgegeben. An den freien Rändern kann sich das Gebiet mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit ausbreiten. Die Ablationszone, also der Bereich, in dem die Energie des Protonenstrahls eingelagert wird, ist zu Beginn $20\ \mu\text{m}$ dick. In ihr wird gleich zu Beginn die Materie durch die Energie des Protonenstrahls so stark erhitzt, daß Plasma entsteht. Dieses breitet sich sehr schnell nach rechts aus. In der Abbildung 7.4 ist die zeitliche Entwicklung der Dichte des $75\ \mu\text{m}$ dicken Targets während der ersten $25\ \text{ns}$ dargestellt. Danach wiederholt sich der Vorgang periodisch (siehe Kapitel 7.1). Die Bilder sind nur bis zur Stelle $x = 220\ \mu\text{m}$ dargestellt, da sich die interessanten Vorgänge im festen Teil des Targets abspielen und sich das Plasma sehr schnell nach rechts ausbreitet. Nach $25\ \text{ns}$ hat es bereits eine Ausdehnung von $850\ \mu\text{m}$ erreicht. Hier zeigt sich ein weiterer Vorteil der Verfahren auf bewegten Gittern. Dadurch, daß man den freien Rand mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit des Plasmas mitbewegen kann, wird zu jedem Zeitpunkt nur in dem Gebiet gerechnet, in dem sich auch Materie befindet. Bei Verfahren auf ortsfesten Gittern muß von Beginn an in dem gesamten Bereich gerechnet werden, in das sich das Plasma ausbreitet. Nach $25\ \text{ns}$ reicht das Rechengebiet bis $x = 850\ \mu\text{m}$, das heißt zu Beginn wäre das Rechengebiet bei der Wahl eines ortsfesten Gitters mehr als zehn mal so groß wie der Bereich, in dem sich Materie befindet.

Durch die Einlagerung der Strahlenergie kommt es zu einem sprunghaften Anstieg des Drucks. Diese Unstetigkeit wandert in Form einer Stoßwelle durch den festen Teil des Targets (Abbildungen 7.4b bis 7.4d). Nach etwa $10\ \text{ns}$ erreicht die Stoßwelle den linken Rand des Targets und führt dort zu einer Beschleunigung der Targetoberfläche. Wie in Abbildung 7.3 zu erkennen ist, steigt die Geschwindigkeit sprunghaft auf etwa $3\ \text{km/s}$ an. Als Folge davon läuft eine Verdünnungswelle durch den festen Teil des Targets zurück, bis sie die Grenzfläche zum Plasma erreicht (Abbildungen 7.4e bis 7.4g). Dort entsteht erneut eine Stoßwelle (Abbildung 7.4h). Dieser Vorgang wiederholt sich periodisch. Die berechneten Geschwindigkeiten an der Targetrückseite überschätzen zwar die gemessenen erheblich, die Stellen der Beschleunigung werden jedoch sehr gut wiedergegeben und die Ergebnisse der zweidimensionalen Rechnungen zeigen sehr ähnliche Kurvenverläufe, wie die der eindimensionalen Rechnungen. Beim Vergleich der Experimente mit den Rechnungen tritt als weiteres Problem die Festlegung des Startzeitpunkts auf. Der Nullpunkt bei den Messungen entspricht dem Moment, in dem erstmals eine Geschwindigkeit an der Targetrückseite registriert wird. Die Rechnungen beginnen jedoch zu dem Zeitpunkt, zu dem der Ionenstrahl das Target erreicht, so daß Verschiebungen der beiden Kurven gegeneinander auftreten dürfen. In den Abbildungen 7.5 und 7.6 sind die Geschwindigkeiten an der Targetrückseite für ein $33\ \mu\text{m}$ und ein $50\ \mu\text{m}$ dickes Target dargestellt. Auch hier sieht man, daß die Ergebnisse qualitativ gut mit den Experimenten übereinstimmen.

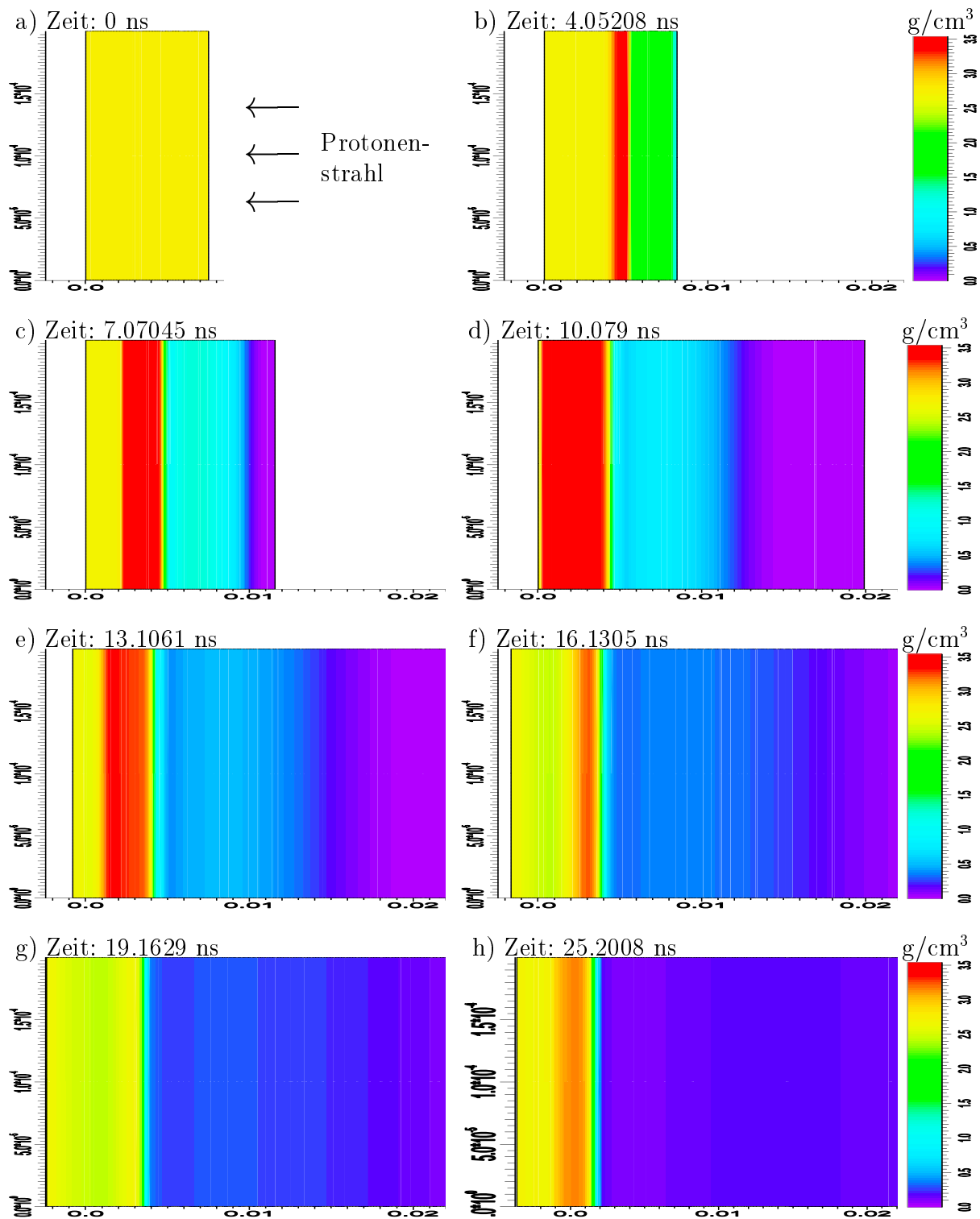


Abbildung 7.4: Zeitliche Entwicklung der Dichte eines ebenen $75\ \mu\text{m}$ dicken Aluminiumtargets

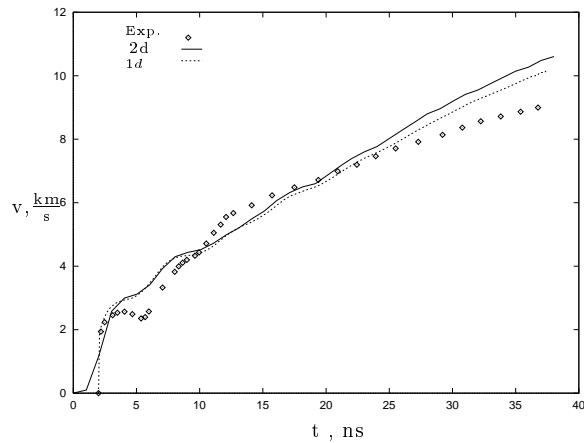


Abbildung 7.5: Geschwindigkeitskurve an der Rückseite eines $33 \mu\text{m}$ dicken Aluminiumtargets

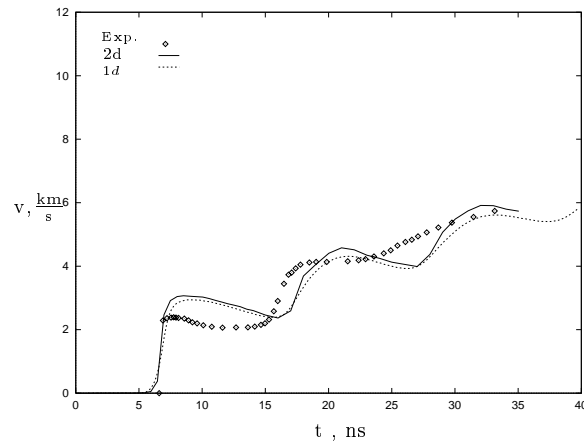


Abbildung 7.6: Geschwindigkeitskurve an der Rückseite eines $50 \mu\text{m}$ dicken Aluminiumtargets

7.4 Strukturierte Targets

Sind die in den in Kapitel 7.1 beschriebenen Targetexperimenten verwendeten Aluminiumfolien nicht ganz eben, so kann es aufgrund der Struktur der Targetoberfläche zu Instabilitäten kommen. Es kann sich hierbei um Rayleigh-Taylor-Instabilitäten handeln [2]. Diese Instabilitäten spielen bei dem Design eines Trägheitsfusionstargets eine wichtige Rolle.

Gase und Flüssigkeiten sind anfällig für eine Vielzahl von Instabilitäten. Der Begriff der Stabilität eines Systems ist definiert über die Reaktion des Systems auf kleine Störungen. Ist das System gestört und verschwindet die Störung allmählich, so ist das System stabil in Bezug auf diese Störung. Wächst die Störung jedoch in ihrer Amplitude, so daß sich das System nach und nach von seinem Ausgangszustand entfernt und nicht wieder zu ihm zurückkehrt, so wird das System als instabil bezüglich dieser Störung bezeichnet. Allgemein heißt ein System instabil, wenn nur eine Art von Störung existiert, bezüglich der es instabil ist. Auf der anderen Seite ist ein System nur dann stabil, wenn es stabil bezüglich jeder möglichen Störung ist, die auftreten kann. Hier werden die Rayleigh-Taylor-Instabilitäten und die Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten beschrieben. Dabei soll ein Kriterium für das Auftreten solcher Instabilitäten und eine Beschreibung derselben gegeben werden. Das heißt, es wird untersucht für welche Ausgangssituationen ein System instabil ist und wie schnell die Instabilitäten wachsen. Dabei werden zwei unterschiedliche Ansätze betrachtet. Bei der Energiemethode wird bestimmt, ob die potentielle Energie eines Gleichgewichtszustands ein Maximum (instabil) oder ein Minimum (stabil) ist. Bei der Modalanalyse [6] werden die physikalischen Größen in verschiedene Moden entwickelt, die genaue Vorgehensweise wird im Anhang B beschrieben.

7.4.1 Theorie der Rayleigh-Taylor-Instabilität

Eine Rayleigh-Taylor-Instabilität entsteht, wenn eine schwere Flüssigkeit oder ein Gas in Richtung eines leichteren Mediums beschleunigt wird. Das einfachste Beispiel hierfür ist, wenn sich in einem Gravitationsfeld eine schwere Flüssigkeit oberhalb einer leichteren befindet. Dies ist ganz klar energetisch ungünstig. Können diese beiden Flüssigkeiten ihren Platz tauschen, so wird das System eine niedrigere potentielle Energie haben. Genau dies geschieht bei einer Rayleigh-Taylor-Instabilität, jede kleinste Störung der Grenzfläche zwischen beiden Flüssigkeiten erlaubt die Erzeugung von „Fingern“, in denen die eine Flüssigkeit in die andere eindringt. Hier wird in der theoretischen Untersuchung dieser Fall einer Grenzfläche zwischen verschiedenen Flüssigkeiten oder Gasen in einem Gravitationsfeld betrachtet. Jedoch führt jeder Dichtegradient, der in Gegenrichtung der Gravitation vorhanden ist, zu einem solchen Ergebnis. Außerdem muß die Beschleunigung nicht durch Gravitation entstehen, eine Verzögerung eines leichten Gases in ein schwereres, wie bei einer Explosion in einer dichten Atmosphäre, führt ebenso zu solchen Instabilitäten.

Für die Rayleigh-Taylor-Instabilität sind die zugrundeliegenden Gleichungen die Massenerhaltungsgleichung, die Inkompressibilität und die Impulsgleichung. Diese werden im Anhang B unter der Annahme kleiner Störungen linearisiert. Dann werden nur die Terme, die erster Ordnung in den Störungen sind, betrachtet. Das Ziel dabei ist, die zeitliche Entwicklung dieser Störungen zu finden. Wenn sie mit der Zeit wachsen, so liegt eine Instabilität vor, oszillieren sie nur, so handelt es sich um Wellenlösungen, aber keine Instabilitäten. Für alle gestörten Größen wird eine Fourierentwicklung in ebene Wellen durchgeführt. Ist die Wellenfrequenz reell, so ist das System stabil. Hat sie jedoch einen imaginären Anteil, dann ist das System instabil, die Störung wächst exponentiell mit der Zeit. Im Anhang wird gezeigt, daß die Wellenzahl reell ist, wenn der Dichtegradient überall negativ ist und einen imaginären Anteil besitzt, wenn der Dichtegradient irgendwo in der Strömung positiv ist.

Der nächste Schritt ist dann, die Wachstumsraten der Instabilitäten zu bestimmen. Dazu wird das System auf den Fall zweier gleichförmiger Flüssigkeiten, die durch eine horizontale Grenzfläche an der Stelle $z = 0$ voneinander getrennt sind, vereinfacht. Die Herleitungen im Anhang B führen auf die Gleichung

$$(7.1) \quad \omega^2 = \pm gk \left(\frac{\rho_2 \mp \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} \right),$$

in der ω die Wellenfrequenz, g die als konstant angenommene Beschleunigung, k die Wellenzahl, ρ_2 den oberen und ρ_1 den unteren Dichtewert bezeichnen. Man sieht an der Gleichung (7.1) auch, daß die Wachstumsrate proportional zur Wurzel der Wellenzahl ist,

$$(7.2) \quad |\omega| \sim \sqrt{k}.$$

Dieses letzte Ergebnis gilt für kleine Störungen. Wächst die Instabilität, dann dominieren Störungen höherer Ordnung, die hier nicht berücksichtigt werden.

Desweiteren wird im Anhang B noch eine Differentialgleichung für die Amplitude $a = a(t)$ einer kleinen sinusartigen Störung der Grenzfläche, die die Bedingung

$$(7.3) \quad k a \ll 1$$

erfüllt, hergeleitet. Sie lautet

$$(7.4) \quad \frac{d^2 a(t)}{dt^2} = k g(t) a(t) \frac{\varrho_2 \Leftrightarrow \varrho_1}{\varrho_2 + \varrho_1},$$

wobei hier die Beschleunigung g als zeitlich veränderlich zugelassen wird. Können Viskosität, Oberflächenspannung und Kompressibilität vernachlässigt werden, so gilt die Gleichung (7.4) unter der Bedingung (7.3). Für konstante Beschleunigung g ergibt sich aus der Gleichung (7.4) ein exponentielles Wachstum der Amplitude a . Es ist aber auch bekannt, daß das Wachstum von a schwächer wird, wenn ka einen Wert um Eins erreicht. In diesem Fall wächst die Amplitude nur noch linear, und die Form der Oberfläche ist nicht länger sinusförmig. Daher wird allgemein angenommen, daß die Gleichung (7.4) sehr gut das Wachstum langwelliger Störungen mit kleinen Amplituden beschreibt. Inwieweit die Gleichung auch noch gültig bleibt, wenn die Kompressibilität nicht vernachlässigt werden kann, wie beim Auftreten von Stoßwellen, wird in Kapitel 7.4.3 beschrieben.

7.4.2 Beispiel einer Rayleigh-Taylor-Instabilität

Später werden die Ergebnisse der Simulationen von Experimenten mit strukturierten Targets, bei denen Instabilitäten gemessen wurden, vorgestellt. Zuvor wird anhand eines Testbeispiels gezeigt, daß das Programm in der Lage ist, Rayleigh-Taylor-Instabilitäten aufzulösen. Dazu wird ein Aluminiumtarget betrachtet, dessen Oberfläche nicht ganz eben ist. Die Form des Targets und die Anfangswerte wurden möglichst nah an den Werten der KALIF-Experimente gewählt. Der Unterschied ist im wesentlichen, daß zu Beginn ein vorgegebener Dichtegradient die Einlagerung der Strahlenergie nachbildet. Zusätzlich wird zur Beschleunigung in einem Teilgebiet ein positiver Druck gewählt.

Das Target wird in zwei Bereiche mit unterschiedlicher Dichte und unterschiedlichem Druck zerlegt. Die Form des Targets ist mit seinen Abmessungen in Abbildung 7.7 dargestellt. Die Struktur der Oberfläche entspricht der Struktur der in den Experimenten verwendeten Targets, bei denen ein Winkel von 150° vorgegeben wurde. Der Druck beträgt zu Beginn im rechten Teilgebiet 30 GPa . Um Instabilitäten zu erzeugen, muß der Dichtegradient in Gegenrichtung der Beschleunigung verlaufen, das heißt im linken Teilgebiet muß die Dichte höher sein als im rechten. Je höher die Druckdifferenz ist, umso schneller breiten sich die Instabilitäten aus. Um einen Bezug zu den Experimenten zu erhalten, werden im linken Teilgebiet als Anfangswerte Dichte und Druck von Aluminium unter Normalbedingungen gewählt. Das heißt, es herrscht zu Beginn links eine Dichte von 2.71 g/cm^3 und ein Druck von $7.6 \cdot 10^{-5} \text{ GPa}$. Die Materie ist zunächst überall in Ruhe. Für die Dichte im rechten

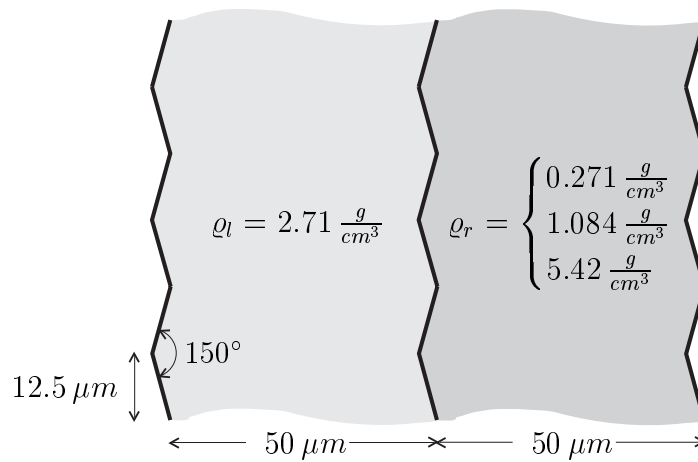


Abbildung 7.7: Form des Targets

Teilgebiet wurden in den drei gerechneten Beispielen die Werte $0.271 g/cm^3 (= 0.1 \cdot \rho_l)$, $1.084 g/cm^3 (= 0.4 \cdot \rho_l)$ und $5.42 g/cm^3 (= 2 \cdot \rho_l)$ gewählt. Das letzte Beispiel zeigt den stabilen Fall, da die Dichte in dem Gebiet mit höherem Druck größer ist.

In den Abbildungen 7.8 bis 7.10 ist der zeitliche Verlauf der Geschwindigkeit an der Grenzfläche zwischen den beiden Bereichen für die drei Beispiele dargestellt. Es wurden 9 Punkte äquidistant entlang der Grenzfläche ausgewählt. Da sich die Grenzfläche nach links bewegt, sind die Geschwindigkeiten negativ. In den folgenden Beschreibungen wird mit Wellenberg die Stelle bezeichnet, an der das dichtere Medium am weitesten in das dünnere hineinragt und entsprechend mit Wellental die Stelle, an der das dünnere Medium am weitesten in das dichtere hineinragt. Die durchgezogene Kurve liegt in den Abbildungen 7.8 und 7.9 am nächsten zum Wellental. Die Geschwindigkeitskurven laufen in diesen Beispielen auseinander und die Wellentäler bewegen sich mit einer größeren Geschwindigkeit nach links als die Wellenberge, was zu einer Verstärkung der Störung führt. Es treten Instabilitäten auf. Die in Kapitel 7.4.1 hergeleiteten Formeln für die Wachstumsrate der Störung können hier nicht uneingeschränkt angewendet werden, da die Bedingung der Inkompressibilität verletzt ist und der Druck auf der rechten Seite und damit auch die Beschleunigung nicht konstant gehalten werden können. Aus der linearen Theorie für den inkompressiblen Fall können jedoch einige qualitative Aussagen gewonnen werden. In Übereinstimmung mit der Theorie ist der Vorgang instabil, wenn der Dichtegradient in Gegenrichtung der Beschleunigung verläuft. Die Gleichung (7.1) besagt, daß bei gleicher Wellenzahl und gleicher Beschleunigung die Wachstumsrate der Instabilität umso größer ist, je größer die Dichtedifferenz ist. An den Geschwindigkeitskurven erkennt man deutlich, daß im Fall $\rho_l = 0.271 g/cm^3$ (Abbildung 7.8) die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Wellenberg und Wellental, die ein Maß für die Wachstumsrate der Instabilität ist, größer ist als im Fall $\rho_l = 1.084 g/cm^3$ (Abbildung 7.9).

Im Gegensatz dazu zeigt die Abbildung 7.10 die Geschwindigkeitsverläufe im stabilen Fall. Die Dichte ist jetzt in dem Gebiet mit höherem Druck höher. Die Bewegung erfolgt nun

in Richtung des dünneren Mediums, so daß die sich schneller bewegenden Wellentäler zu einer Stabilisierung des Zustands führen.

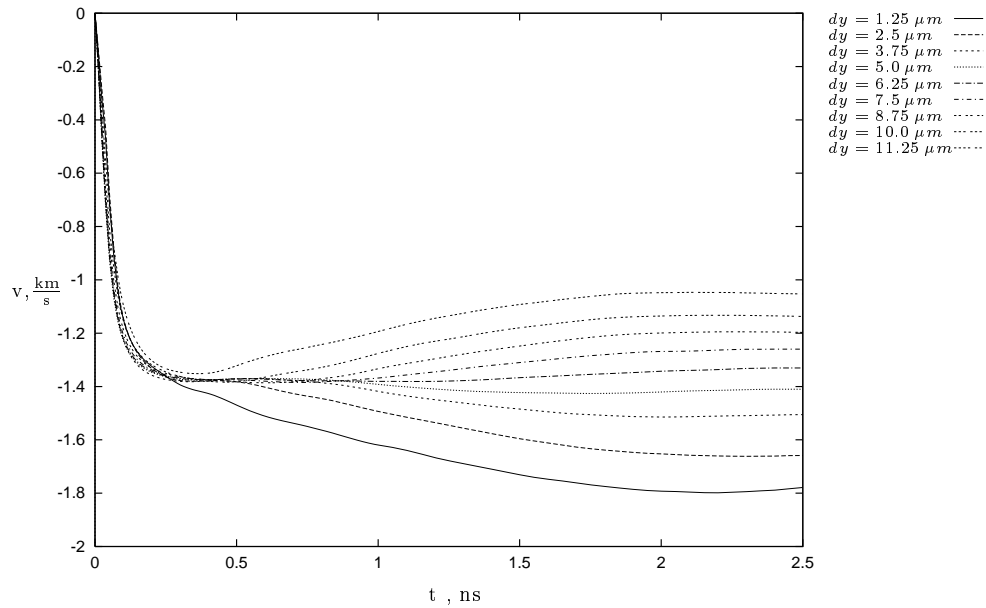


Abbildung 7.8: Geschwindigkeit an der Grenzfläche für $\rho_r = 0.271 \text{ g/cm}^3$

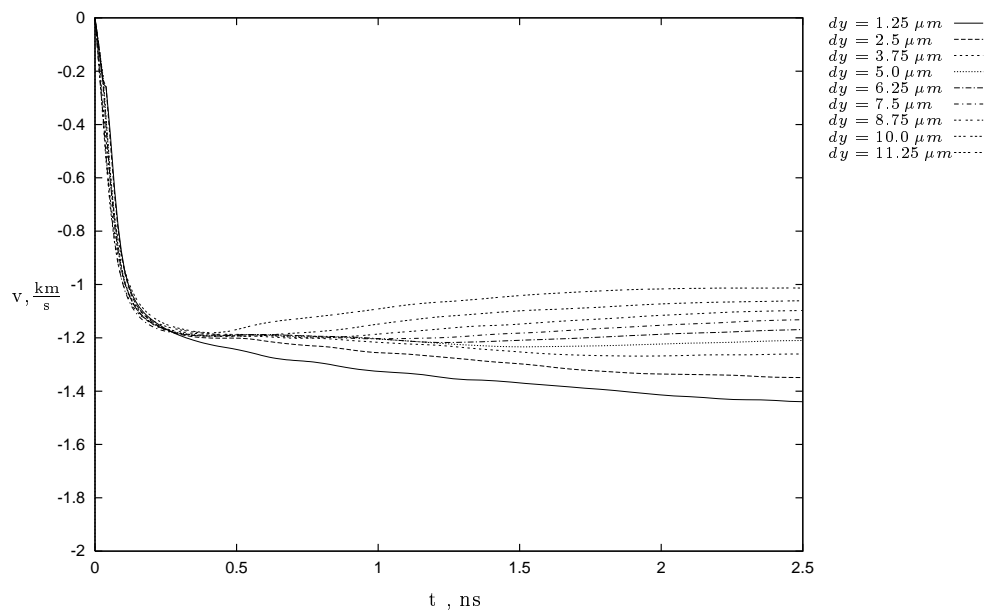


Abbildung 7.9: Geschwindigkeit an der Grenzfläche für $\rho_r = 1.084 \text{ g/cm}^3$

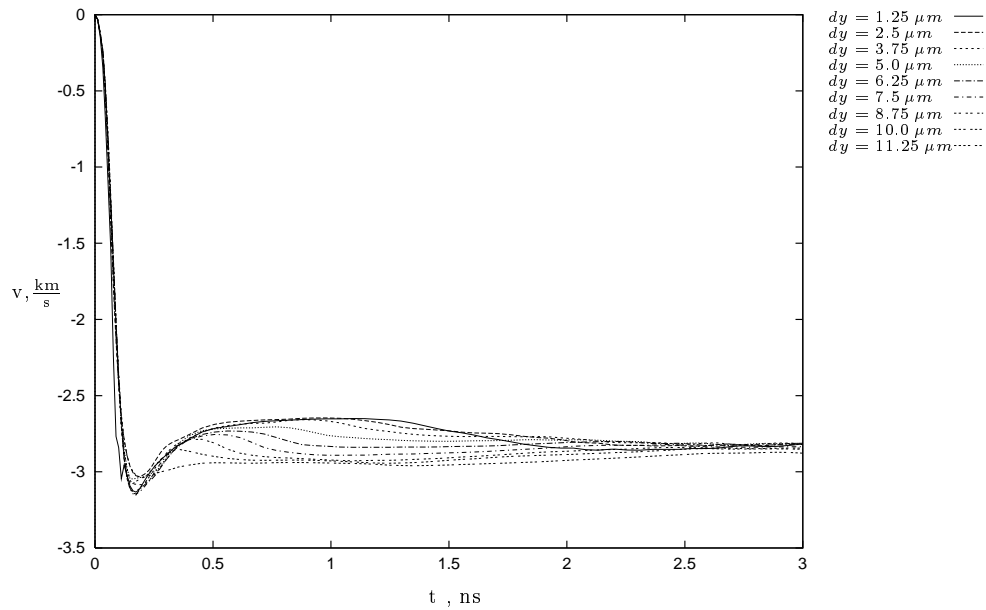
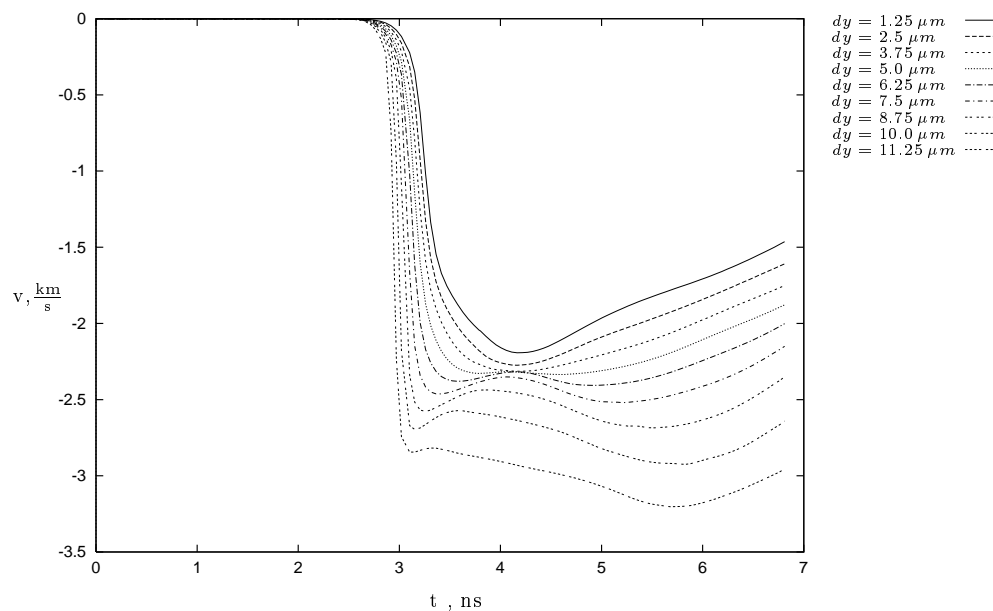
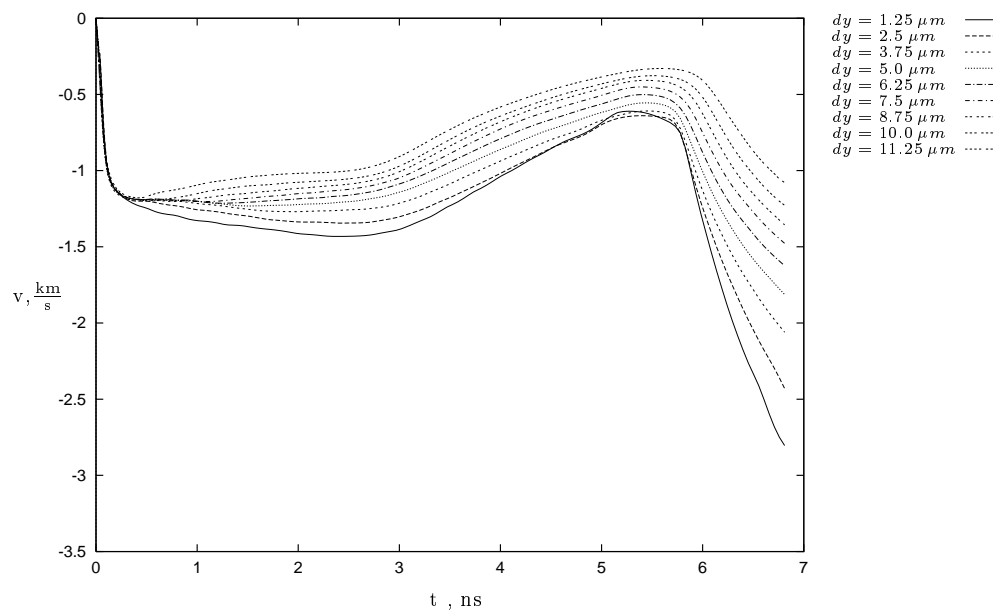
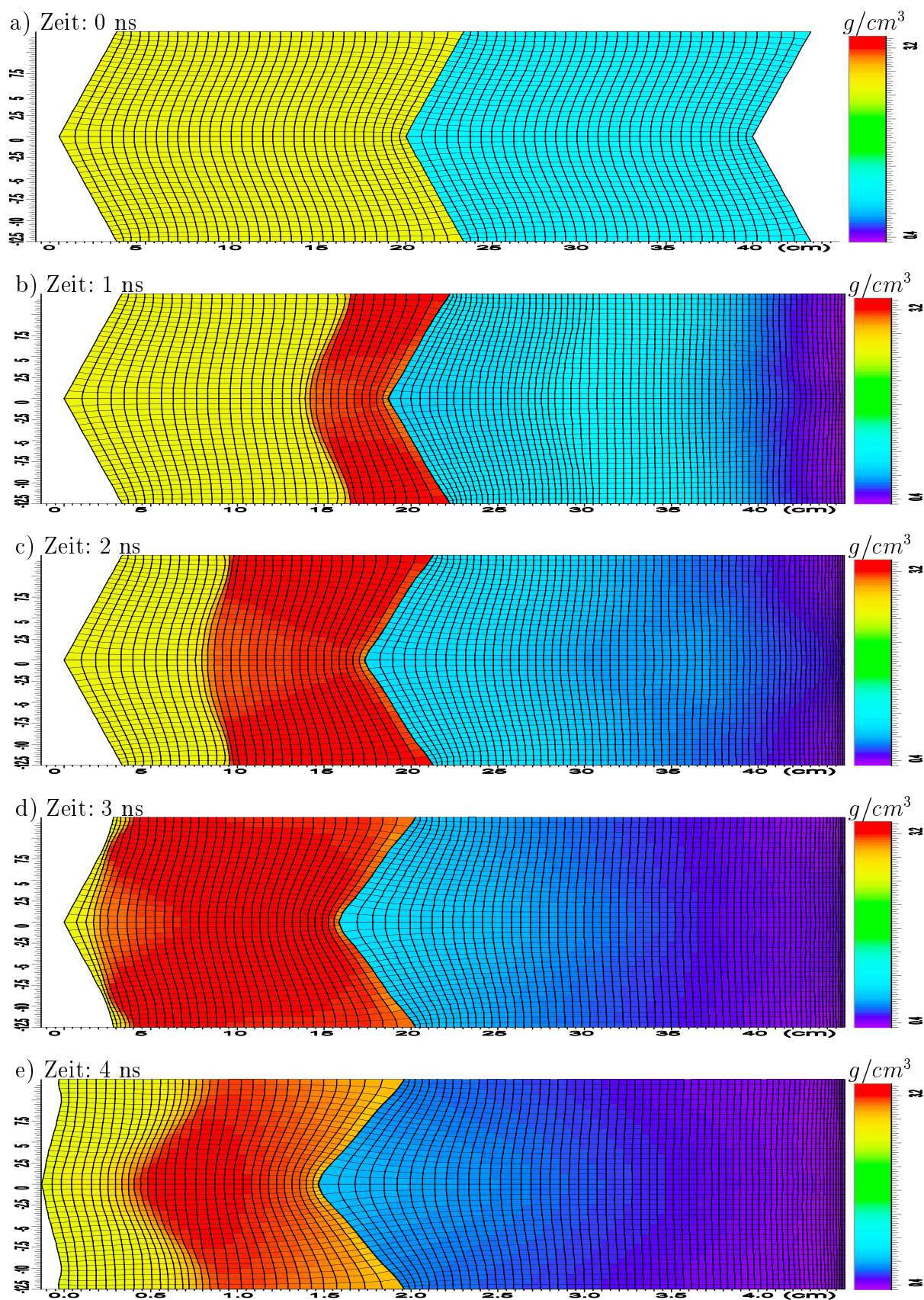


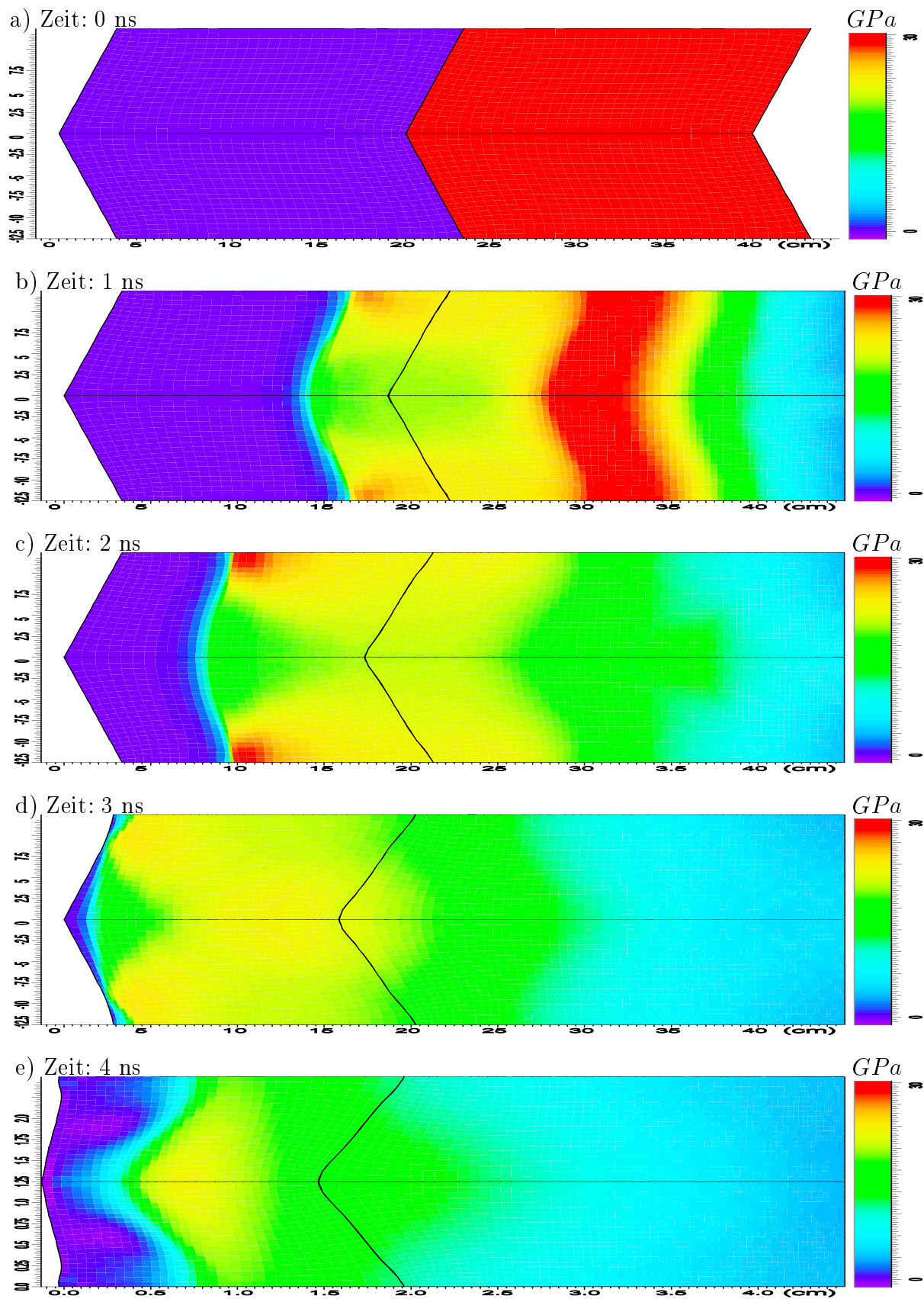
Abbildung 7.10: Geschwindigkeit an der Grenzfläche für $\rho_r = 5.42 \text{ g/cm}^3$

In den Experimenten kann die Geschwindigkeit nur an der Rückseite des Targets gemessen werden, nicht jedoch an der Grenzfläche zwischen dem festen Teil des Targets und dem Plasma, wo die Instabilitäten auftreten. Daher ist es interessant, auch in diesem Beispiel die Geschwindigkeit an der Rückseite des Targets zu betrachten. Die Rückseite des Targets beginnt sich erst in dem Moment zu bewegen, in dem der zu Beginn erzeugte Dichtesprung die Rückseite erreicht. Im echt inkompressiblen Fall, auf den die Theorie der Rayleigh-Taylor-Instabilitäten vollständig zutrifft, tritt dieser Effekt daher nicht auf. Es wurde hier das Beispiel, in dem rechts die Anfangsdichte $\rho_r = 1.084 \text{ g/cm}^3$ herrscht, betrachtet. Dabei wurde ein Target der Dicke $40 \mu\text{m}$ statt $100 \mu\text{m}$ gewählt. Dadurch erreicht der Dichtesprung schon nach etwa 3 ns die Rückseite des Targets. Für dieses Beispiel sind in der Abbildung 7.11 die Geschwindigkeitskurven für 9 äquidistante Punkte entlang der Rückseite des Targets bis zur Zeit $t = 6.8 \text{ ns}$ aufgetragen. An den Kurven ist zu erkennen, daß sich die Täler schneller als die Berge bewegen, wobei die Geschwindigkeit mit der Zeit abnimmt. Die Ursache hierfür ist ein erhöhter Druck im Bereich der Täler. In dem Augenblick, in dem die Rückseite des Targets anfängt sich zu bewegen, fängt die Geschwindigkeit an der Grenzfläche an kleiner zu werden. In der Abbildung 7.12 sind diese Geschwindigkeiten bis zur Zeit $t = 6.8 \text{ ns}$ dargestellt. Druck und Dichte im linken Teilgebiet nehmen mit der Zeit ab. Nach etwa 6 ns nimmt die Geschwindigkeit an der Grenzfläche wieder zu.

Abbildung 7.11: Geschwindigkeit an der Rückseite für $\rho_r = 1.084 \text{ g/cm}^3$ Abbildung 7.12: Geschwindigkeit an der Grenzfläche für $\rho_r = 1.084 \text{ g/cm}^3$

In der Abbildung 7.13 ist der zeitliche Verlauf der Dichte für das $40 \mu\text{m}$ dicke Target mit der Anfangsdichte im rechten Teilgebiet von 1.084 g/cm^3 dargestellt.

Abbildung 7.13: Zeitliche Entwicklung der Dichte; $\rho_r = 1.084g/cm^3$

Abbildung 7.14: Zeitliche Entwicklung des Drucks; $\rho_r = 1.084g/cm^3$

Gerechnet wurde nur die obere Hälfte des dargestellten Bereichs. Bei $x = 0 \mu m$ und $x = 12 \mu m$ wurden Symmetrieachsen als Randbedingungen gesetzt. Da nur die Vorgänge an der Grenzfläche von Interesse sind, wurde bei $y = 50 \mu m$ ein Rand mit Ausflußbedingung festgelegt. In den Abbildungen ist zu erkennen, daß die Dichte an der Grenzfläche im linken Teilgebiet auf einen Wert, der größer ist als der Anfangswert in diesem Teilgebiet, ansteigt. Dies erfolgt aufgrund der Kompressibilität. Im inkompressiblen Fall hätte man in beiden Teilgebieten während der gesamten Rechenzeit eine konstante Dichte. Außerdem ist in den Abbildungen das Wachstum der Instabilitäten an dem mit der Zeit kleiner werdenden Winkel an der Grenzfläche zu erkennen.

Man findet also qualitativ eine gute Übereinstimmung mit der Theorie und damit ist gezeigt, daß der Code in der Lage ist Rayleigh-Taylor-Instabilitäten aufzulösen.

In der Abbildung der Dichte ist auch das Gitter dargestellt, während in der Abbildung 7.14, in der die zeitliche Entwicklung des Drucks gezeigt wird, nur die Ränder der Teilgebiet zu sehen sind. Bei neuem Hinsehen erkennt man in den Dichtebildern, daß die Dichte an den oberen und unteren Rändern stärker anwächst, als in der Mitte. Das bedeutet, daß sich die Materie im linken Teilgebiet in Richtung der Täler bewegt. Deutlicher erkennt man die daraus resultierende Druckerhöhung (besonders in Abbildung 7.14c). Diese erhöhten Werte in Dichte und Druck sind die Ursache dafür, daß sich an der Targetrückseite die Täler schneller bewegen als die Berge (jeweils die unteren beiden Bilder in den Abbildungen 7.13 und 7.14).

7.4.3 Theorie der Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten

Die Richtmyer-Meshkov-Instabilität ist der Rayleigh-Taylor-Instabilität sehr ähnlich. Auch sie entsteht durch die Beschleunigung eines dichteren Mediums in Richtung eines dünneren. Während die Grenzfläche bei der Rayleigh-Taylor-Instabilität allmählich beschleunigt wird, wird sie bei einer Richtmyer-Meshkov-Instabilität plötzlich beschleunigt, zum Beispiel durch das Laufen einer Stoßwelle von einem Medium in das andere. Die Richtmyer-Meshkov-Instabilität wächst sehr viel langsamer als die Rayleigh-Taylor-Instabilität und zeigt ein eher lineares als exponentielles zeitliches Verhalten. Ist der Stoß, der die Richtmyer-Meshkov-Instabilität erzeugt, relativ schwach, so ist die Bewegung hinter dem Stoß langsam und im wesentlichen inkompressibel und kann mit der Theorie der Rayleigh-Taylor-Instabilität behandelt werden. Dagegen ist der Prozeß bei starken Stößen durch die kompressiblen Phänomene charakterisiert.

Es stellt sich nun die Frage, inwieweit Gleichung (7.4) ihre Gültigkeit verliert, wenn eine impulsive Beschleunigung betrachtet wird. Dann ist die Beschleunigung $g(t)$ während eines sehr kurzen Zeitintervalls sehr groß, und Null oder sehr klein außerhalb dieses Intervalls. Sei nun v die durch diese Beschleunigung erreichte Geschwindigkeit $v(t) = \int g(t) dt$. Wenn die Amplitude und ihre Zeitableitung vor der Beschleunigung die Werte

$$(7.5) \quad a = a_0, \quad \frac{da}{dt} = 0$$

haben, so gilt direkt nach der Beschleunigung

$$(7.6) \quad a = a_0, \quad \frac{da}{dt} = kva_0 \frac{\rho_2 \leftrightarrow \rho_1}{\rho_2 + \rho_1}.$$

Dies ergibt sich durch Integration der Gleichung (7.4). Das heißt, daß die Amplitude plötzlich zu wachsen anfängt und dann, abgesehen von weiteren Störungen, mit konstanter Geschwindigkeit weiterwächst. Der Grenzfall einer impulsiven Beschleunigung ist die Beschleunigung durch eine Stoßwelle. In diesem Fall muß die Kompressibilität berücksichtigt werden, so daß Gleichung (7.4) nicht verwendet werden kann. Die Frage ist nun, wie sich die Störungen verhalten, wenn ein Stoß über eine gewellte Oberfläche von einem dünneren in Richtung eines dichteren Mediums hinwegstreicht. In Abbildung 7.15 ist schematisch die Situation vor und kurz nach Erreichen der Grenzfläche dargestellt.

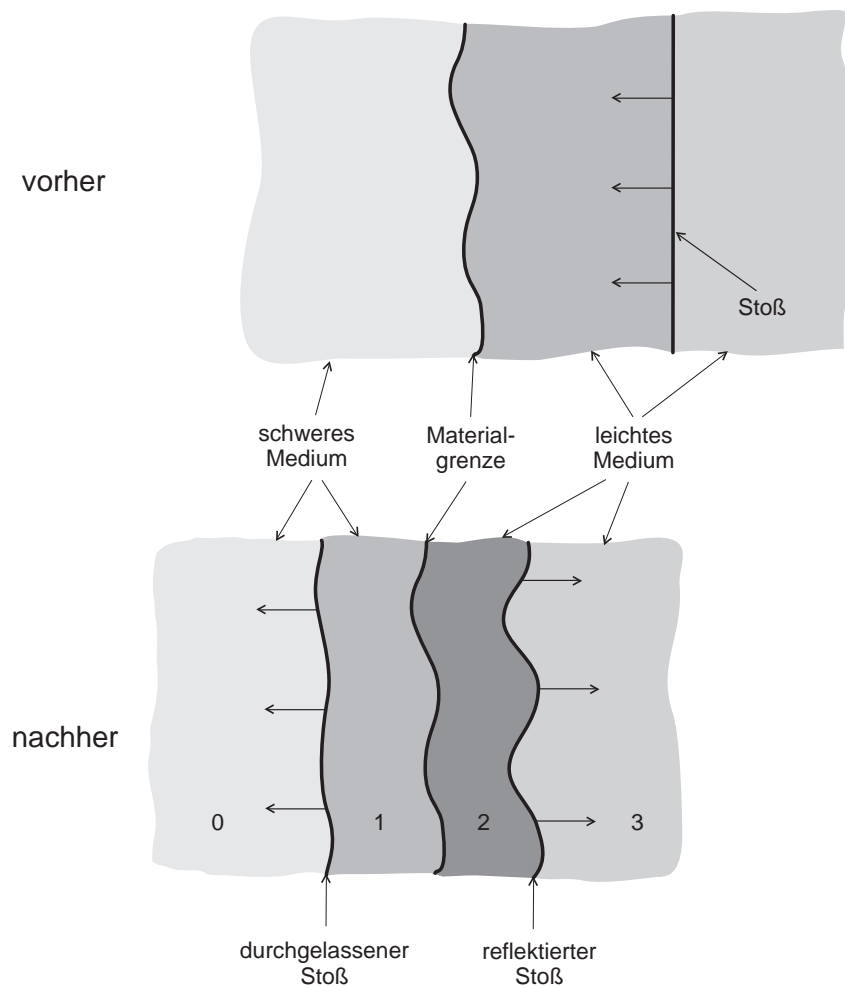


Abbildung 7.15: Vorgang bei der Entstehung einer Richtmyer-Meshkov-Instabilität

Die einlaufende Stoßwelle wird als eben vorausgesetzt, die Grenzfläche zwischen den beiden Medien unterschiedlicher Dichte als sinusförmig gestört. Vor dem Auftreten des Stoßes

sind die Medien, in Übereinstimmung mit der Anfangsbedingung (7.5), in Ruhe. Der Druck hinter dem Stoß wird als konstant vorausgesetzt. Direkt nach dem Durchgang des Stoßes herrschen nicht die in (7.6) angegebenen Bedingungen. Stattdessen ist die Amplitude a aufgrund der Kompression kleiner als a_0 . Außerdem ist $\frac{da}{dt}$ zunächst Null, da die vom Stoß an den Wellenberg übertragene Geschwindigkeit dieselbe wie die an das Wellental übertragene ist. Bis Zeit zur Kommunikation über Entfernungen vergleichbar mit $\frac{1}{k}$ verstrichen ist, kann es keinen Unterschied im Verhalten zwischen Wellenbergen und -tälern geben. Mit der Zeit allerdings fängt die Amplitude der Grenzflächenstörung zu wachsen an, da in der Nähe der Berge, wo das schwere Medium am weitesten in das leichte hineinragt, die durchgelaufene Stoßwelle schwach konvergiert, während die reflektierte Stoßwelle schwach divergiert. Dies führt zu einem geringen Drucküberfluß im schweren Medium und einem Druckmangel im leichten Medium. In den Wellentälern dagegen liegt die umgekehrte Situation vor. Diese Druckstörungen verlaufen so, daß sie die Berge zurückhalten, die Täler jedoch in das schwere Medium hinein beschleunigen. In [33] werden von Richtmyer diese Druckstörungen berechnet, und aus ihnen die Bewegung der Grenzfläche. Nach einigen theoretischen und numerischen Untersuchungen kommt er zu dem Ergebnis, daß bei Berücksichtigung der Anfangskompression die höchste Wachstumsrate der Störungen mit der durch die inkompressible Theorie gegebenen bis auf eine Abweichung von 5 bis 10% übereinstimmt.

7.4.4 Beispiel eines strukturierten Targets unter Einwirkung eines Ionenstrahls

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Simulation der Experimente mit strukturierten Targets vorgeführt. Die verwendeten Aluminiumfolien haben eine ähnliche Form, wie die Targets, die für die in Kapitel 7.4.2 vorgestellten Testrechnungen verwendet wurden (siehe Abbildung 7.7). Der Winkel beträgt auch 150° und die Wellenlänge der Störung der Oberfläche beträgt hier $60 \mu\text{m}$. In den beiden durchgeführten Rechnungen wurde die Dicke des Targets auf $25 \mu\text{m}$ bzw. $35 \mu\text{m}$ gesetzt. Bei den Experimenten wurde ein Filter zwischen die Ionenstrahlquelle und das Target gesetzt, der bei den numerischen Simulationen nicht berücksichtigt wurde.

Da durch die Energieeinlagerung ein Stoß erzeugt wird, sind Instabilitäten vom Richtmyer-Meshkov-Typ zu erwarten. Die Depositionszone beträgt, wie bei den ebenen Targets $20 \mu\text{m}$. In der Abbildung 7.16 sind die im Experiment gemessenen Geschwindigkeitskurven an der Rückseite des Targets dargestellt [2]. Die Geschwindigkeiten wurden in den Wellenbergen und in den Wellentälern gemessen.

In den Abbildungen 7.17 und 7.18 sind die in den Rechnungen ermittelten Geschwindigkeitskurven dargestellt. Es wurden neun äquidistante Punkte entlang der Targetrückseite ausgewählt. Dargestellt ist der zeitliche Verlauf der Geschwindigkeit in diesen Punkten. Die Bewegung erfolgt auch hier in Richtung der negativen x -Achse. Um jedoch den direkten Vergleich mit den Messungen darstellen zu können, sind in den Abbildungen die Geschwindigkeitsbeträge über der Zeit aufgetragen.

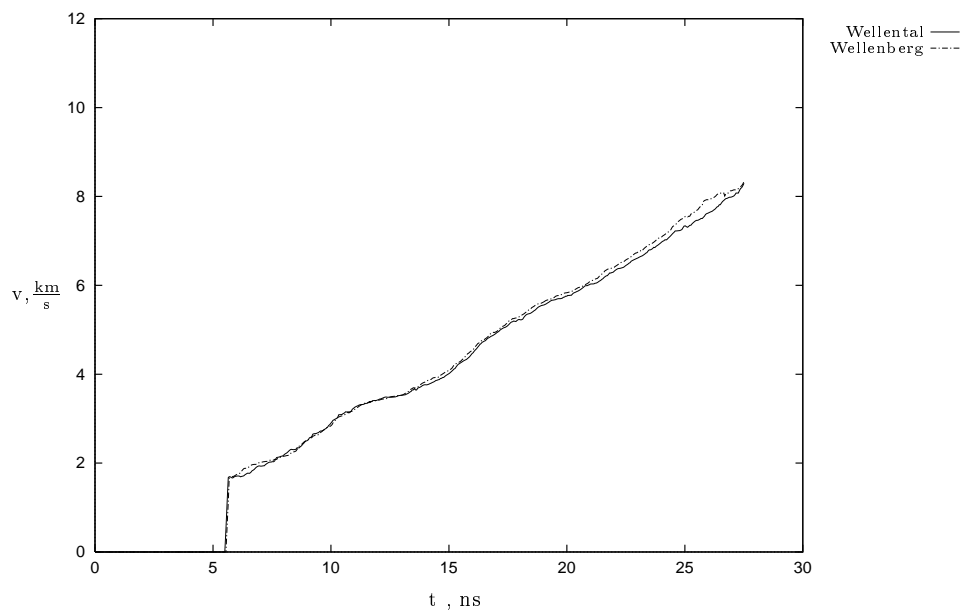


Abbildung 7.16: Gemessene Geschwindigkeitkurven an der Targetrückseite in den Wellenbergen und den Wellentälern

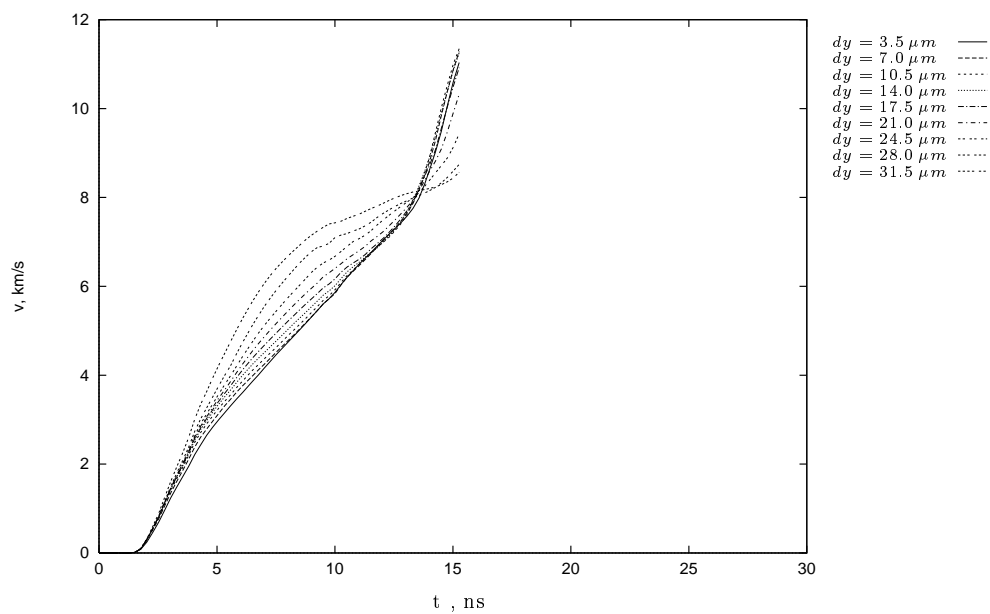


Abbildung 7.17: Geschwindigkeit an der Targetrückseite des $25\mu\text{m}$ dicken Targets

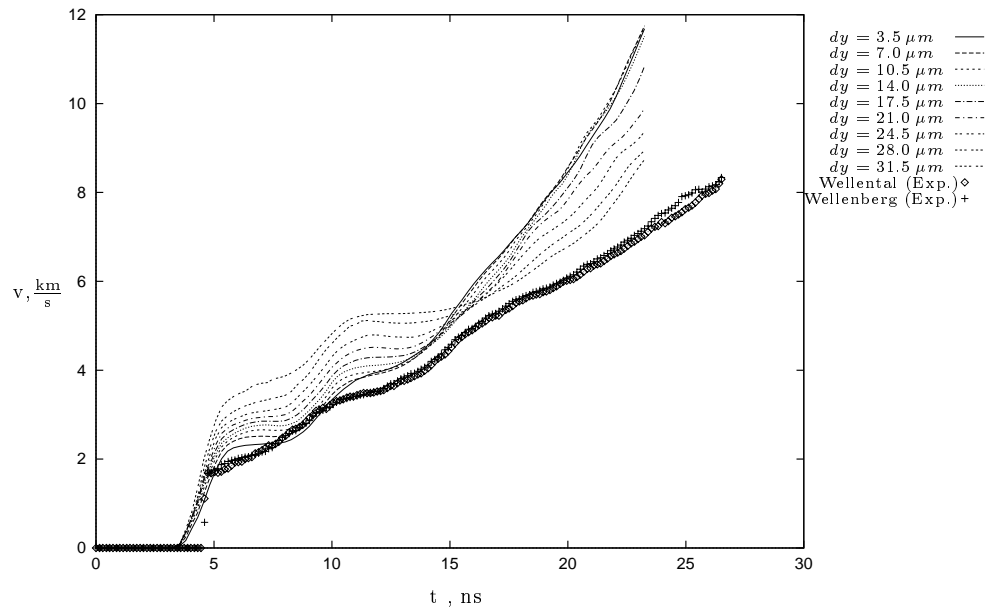
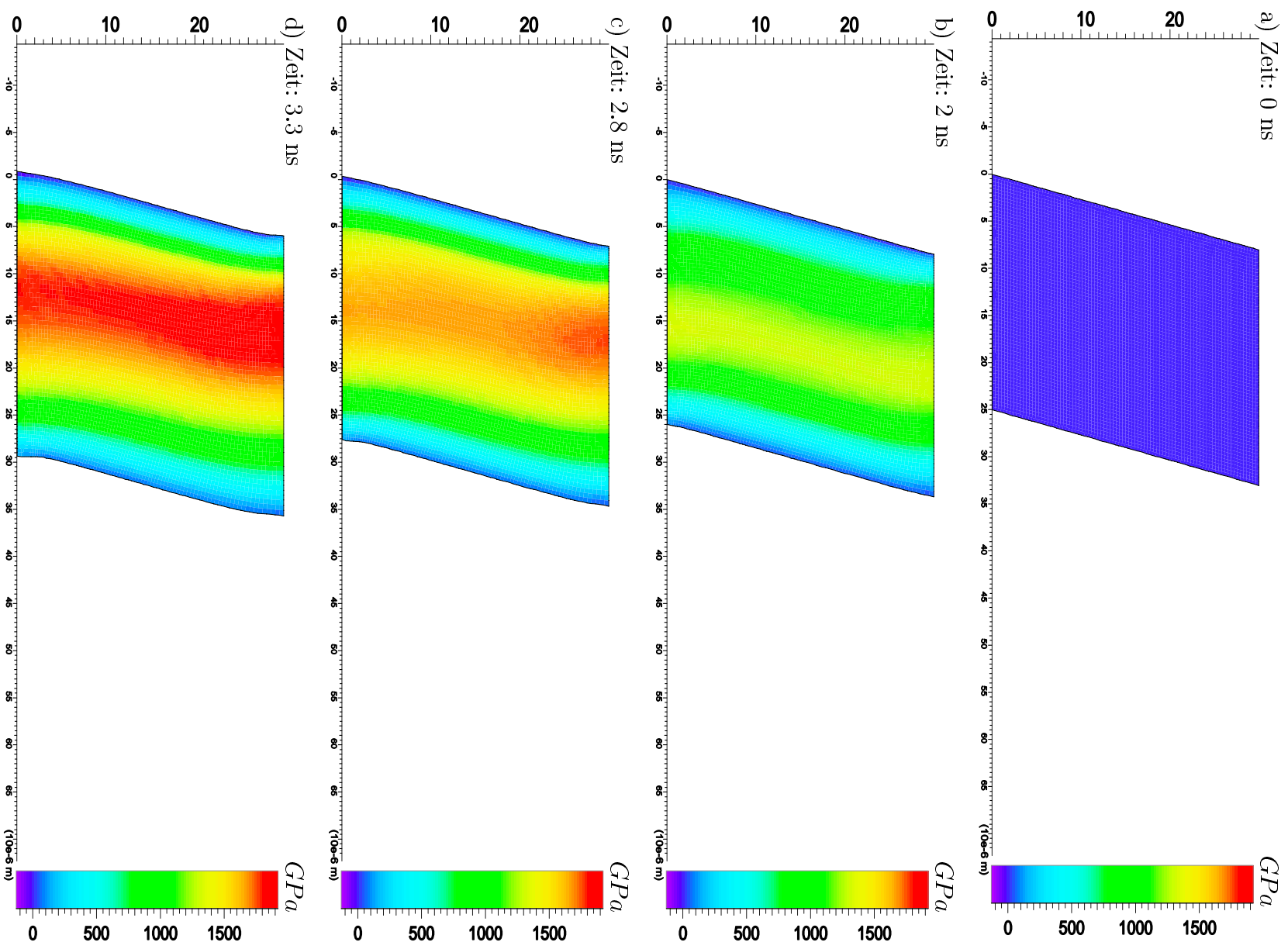


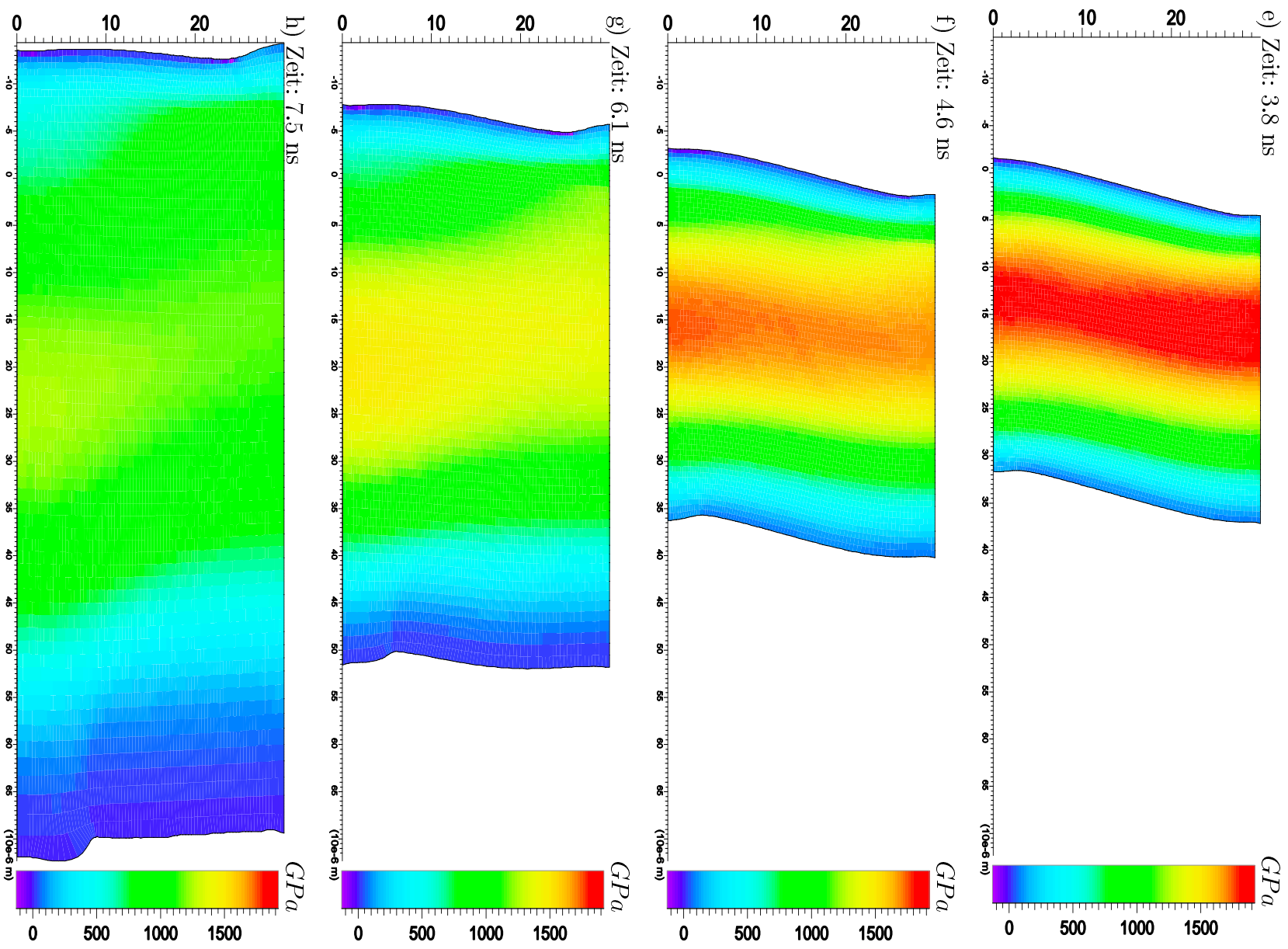
Abbildung 7.18: Geschwindigkeit an der Targetrückseite des $35\mu\text{m}$ dicken Targets im Vergleich mit den Experimenten

Besonders in Abbildung 7.18 ist wie bei den ebenen Targets der stufenweise Geschwindigkeitsanstieg zu erkennen. In dieser Abbildung sind auch die in den Experimenten gemessenen Werte eingetragen. Dabei wurden die Messkurven in x -Richtung verschoben, da wie schon in Kapitel 7.3 erwähnt wurde, die Startzeit in den Experimenten und in den Rechnungen nicht übereinstimmen. Die Geschwindigkeitsunterschiede zwischen Wellenberg und Wellental sind in den Experimenten wesentlich geringer als in den Rechnungen. Es ist zu vermuten, daß dies an dem verwendeten Filter liegt. Der Geschwindigkeitsverlauf der Rechnungen ist jedoch dem der Experimente sehr ähnlich. Allerdings ist der Geschwindigkeitsanstieg zu Zeiten $> 15 ns$ in den Rechnungen steiler als in den Experimenten. Dies ist wiederum eine Folge des nicht berücksichtigten Filters.

In der Abbildung 7.19 ist die zeitliche Entwicklung des Drucks innerhalb der ersten $7.5 ns$ und die Verformung des $25 \mu m$ dicken Aluminiumtargets dargestellt. Bei $y = 0 \mu m$ und $y = 30 \mu m$ sind wieder Symmetrieränder gesetzt. Die anderen beiden Ränder des Targets sind freie Ränder. Die zuvor beschriebene lineare Theorie kann hier nicht angewendet werden. Aufgrund der hohen Energien und Drücke spielt die Kompressibilität eine wesentliche Rolle. Der Druck ist räumlich und zeitlich nicht konstant und die Materie kann sich in alle Richtungen ausbreiten. Dadurch, daß der Abstand zwischen Wellenberg und Wellental etwa der Dicke des Targets entspricht, kann in derselben Zeit, in der eine Stoßwelle durch das Target läuft, Materie vom Wellenberg ins Wellental laufen. Dadurch bewegen sich die Täler schneller als die Berge. Es liegt also eine Richtmyer-Meshkov-Instabilität vor (siehe Kapitel 7.4.3).

Nachdem die Täler die Berge überholt haben kehrt sich der Vorgang um, die Materie bewegt sich mehr in Richtung der ursprünglichen Berge. Dies ist sehr gut an den Geschwindigkeitskurven zu erkennen. In der Abbildung 7.17 bei etwa $13 ns$ und in der Abbildung 7.18 bei etwa $15 ns$ schneiden sich die Kurven und danach bewegen sich die Berge schneller als die Täler. In den Abbildungen stellt die durchgezogene Kurve bei $y = 3.5 \mu m$ die Geschwindigkeitskurve an dem Punkt, der dem Wellenberg am nächsten liegt, dar. Nachdem die Stoßwelle die Rückseite des Targets erreicht hat, entsteht dort eine Verdünnungswelle, die durch den festen Teil des Targets zurückläuft, bis sie die Depositionszone erreicht und erneut eine Stoßwelle entsteht. Auch dieser Vorgang ist in der linearen Theorie der Rayleigh-Taylor-Instabilitäten nicht berücksichtigt.



Abbildung 7.19: Zeitliche Entwicklung des Drucks des 25 μm dicken Targets

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Finite-Volumen-Verfahren auf bewegten Rechengittern entwickelt. Durch das Mitbewegen des Gitters gelingt es, die Ausbreitung von Materialgrenzen oder auch von Grenzflächen zwischen Bereichen mit unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften sehr genau numerisch zu simulieren. An einer Materialgrenze tritt ein Sprung in der Zustandsgleichung auf, der zu einer Unstetigkeit in der Flußfunktion führt. Da die in Finite-Volumen-Verfahren häufig verwendeten Godunov-Typ-Verfahren die Funktionalmatrix der Flußfunktion benötigen, ist nicht sichergestellt, daß diese Verfahren auch an einer Materialgrenze ihre Gültigkeit behalten. Hier konnte gezeigt werden, daß dieses Problem durch Einführen einer zusätzlichen Erhaltungsgröße, die für einen glatten Übergang der Flußfunktion an der Materialgrenze sorgt, gelöst werden kann.

Anhand einiger Beispiele wurde gezeigt, daß die so entwickelten Finite-Volumen-Verfahren auf bewegten Rechengittern die numerischen Ergebnisse wesentlich verbessern. Sowohl Kontaktunstetigkeiten als auch Stoßwellen werden, wenn das Gitter mit ihrer Ausbreitungsgeschwindigkeit bewegt wird, kaum noch numerisch gedämpft. Meist erhält man mit Verfahren erster Ordnung auf bewegten Gittern bessere Ergebnisse als mit Verfahren zweiter Ordnung auf ortsfesten Rechengittern. Materialgrenzen können mit Verfahren auf ortsfesten Rechengittern nicht besonders gut wiedergegeben werden. Es muß ein Tracking-Algorithmus eingesetzt und eine künstliche Zustandsgleichung für die Mischung der betrachteten Materialien eingeführt werden.

Die vorgestellten Verfahren eignen sich auch sehr gut für Probleme, bei denen sich die Materie sehr schnell ausbreitet. Da sich der Rand des Rechengebiets mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Materie bewegen kann, wird Rechenzeit eingespart. Bei Verfahren auf ortsfesten Gittern muß von Beginn an, auf dem Gebiet gerechnet werden, das am Ende von der Materie ausgefüllt wird. Daher eignen sich die Verfahren auf bewegten Gittern besonders gut für die an der KALIF durchgeführten Strahl-Target-Wechselwirkungs-Experimente. Anhand der durchgeführten Rechnungen können die physikalischen Vorgänge in dem bei den Experimenten entstehenden Plasma interpretiert werden. Damit kann die numerische Simulation zur Unterstützung der Auswertung der Experimente herangezogen

werden. Ein weiteres Testbeispiel zeigt, daß der Code auch in der Lage ist, Instabilitäten zu simulieren.

Ein Problem bei mehrdimensionalen Verfahren auf bewegten Gittern ist die Gitterverformung. Dadurch, daß beliebige Geschwindigkeiten zugelassen werden, kann es zu einer starken Verzerrung des Gitters kommen. Dies führt zu Ineffizienz und zu einer Verstärkung numerischer Fehler.

Da im Verfahren das Rechengebiet in Teilgebiete zerlegt werden kann, eignet es sich auch zur Parallelisierung. Allerdings kann die Anzahl der Gitterzellen in den einzelnen Teilgebieten sehr unterschiedlich sein.

Eine weitere Möglichkeit ist die Einführung eines lokalen Zeitschritts. In den verschiedenen Teilgebieten können die Gitterzellen unterschiedliche Größen besitzen. In Gebieten, in denen sich die physikalischen Größen sehr langsam ändern und auch räumlich nur gering variieren, reicht ein recht grobes Gitter aus. In anderen Bereichen, in denen starke Gradienten vorkommen, wird ein sehr feines Gitter benötigt. Dieses feine Gitter bestimmt jedoch den Zeitschritt für das gesamte Rechengebiet. Die Idee ist nun, in Teilgebieten mit feinem Gitter auch zeitlich eine höhere Auflösung zu wählen.

Anhang A

Transformation im dreidimensionalen Raum

Wir betrachten den Fluß in Richtung der Einheitsnormalen $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$, $|\mathbf{n}| = 1$,

$$(A.1) \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{n}) = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{f}_i(\mathbf{u}) .$$

Das System (1.19) ist für $N = 3$ rotationsinvariant. Mit

$$(A.2) \quad \mathcal{Q} = \mathcal{Q}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_1 & n_2 & n_3 & 0 \\ 0 & \Leftrightarrow n_2 & n_1 & 0 & 0 \\ 0 & \Leftrightarrow n_1 n_3 & \Leftrightarrow n_2 n_3 & n_1^2 + n_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

gilt

$$(A.3) \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{n}) = \mathcal{Q}^{-1} \mathbf{f}_1(\mathcal{Q} \mathbf{u}) .$$

Die zugehörige Transformation der kartesischen Koordinaten

$$(A.4) \quad \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \tilde{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ \Leftrightarrow n_2 & n_1 & 0 \\ \Leftrightarrow n_1 n_3 & \Leftrightarrow n_2 n_3 & n_1^2 + n_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

führt auf einen neuen Zustandsvektor

$$(A.5) \quad \mathbf{q} = \mathcal{Q} \mathbf{u} = (\varrho, \varrho \tilde{v}_1, \varrho \tilde{v}_2, \varrho \tilde{v}_3, e)^T ,$$

mit

$$(A.6) \quad \begin{aligned} \tilde{v}_1 &= n_1 v_1 + n_2 v_2 + n_3 v_3, \\ \tilde{v}_2 &= n_1 v_2 \Leftrightarrow n_2 v_1, \\ \tilde{v}_3 &= (n_1^2 + n_2^2) v_3 \Leftrightarrow n_1 n_3 v_1 \Leftrightarrow n_2 n_3 v_2, \end{aligned}$$

der das System

$$(A.7) \quad \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \mathbf{f}_i(\mathbf{q})}{\partial \tilde{x}_i} = 0$$

erfüllt. Die Flüsse \mathbf{f}_i sind identisch mit den Flüssen in (A.1).

Anhang B

Lineare Stabilitätstheorie für Rayleigh-Taylor-Instabilitäten

Zur mathematischen Untersuchung von Instabilitäten bedient man sich der linearen Stabilitätstheorie [6]. Man beginnt mit einer kleinen Anfangsstörung und geht davon aus, daß die verschiedenen physikalischen Variablen, die das System beschreiben, kleine Zuwächse erlauben. Die Gleichung dieser Zuwächse erhält man aus den relevanten Bewegungsgleichungen, indem man nur die Terme, die linear in den Störungen sind, betrachtet. Eine vollständige Stabilitätsuntersuchung, die alle möglichen Störungen einbezieht, wird erreicht, indem eine beliebige Störung als Überlagerung gewisser möglicher Basismoden dargestellt wird und die Stabilität des Systems bezüglich jeder dieser Moden untersucht wird. Um diese Vorgehensweise zu illustrieren, wird ein System betrachtet, welches durch zwei parallele Ebenen begrenzt ist und in dem die physikalischen Größen im stationären Zustand nur von der Koordinate senkrecht zu den Ebenen (o.B.d.A. sei diese z) abhängen. In diesem Fall kann eine beliebige Störung als Überlagerung von zweidimensionalen periodischen Wellen dargestellt werden.

B.1 Modalanalysis

Stellt $A(\mathbf{r}, t)$ eine typische Amplitude dar, die die Störung beschreibt, so kann sie in der Form

$$(B.1) \quad A(\mathbf{r}, t) = \int A_k(\mathbf{r}, t) dk$$

geschrieben werden. Dabei geht man davon aus, daß die Größe k sämtliche Parameter repräsentiert, die nötig sind, um die verschiedenen Moden zu unterscheiden. Ein wichtiger Punkt bei der weiteren Vorgehensweise ist, daß eine Entwicklung der Störungen in eine vollständige Menge normaler Moden möglich ist.

Die Gleichungen, die für die allgemeinen Störungen maßgebend sind, können jetzt für die normalen Moden spezialisiert werden. Die Zeitabhängigkeit läßt sich eliminieren, indem man Lösungen der Form

$$(B.2) \quad A_k(\mathbf{r}, t) = \tilde{A}_k(\mathbf{r}) \cdot e^{i\omega_k t}$$

sucht, wobei ω_k eine noch zu bestimmende Konstante ist. Jetzt müssen Lösungen dieser letzten Gleichung gesucht werden, die gewisse Randbedingungen erfüllen. Im allgemeinen werden diese Gleichungen nicht für jedes beliebige ω_k nichttriviale Lösungen zulassen. Die Suche nach nichttrivialen Lösungen, die die Randbedingungen erfüllen, führt direkt auf ein charakteristisches Anfangswertproblem für ω_k . Damit hat sich das Problem auf die Bestimmung von ω_k für verschiedene Moden reduziert. Dieser sogenannte charakteristische Wert für ω_k ist im allgemeinen komplex. Mit $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ können die Störungen häufig auch in der Form

$$(B.3) \quad A(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A_k(z) e^{i(k_x x + k_y y + \omega_k t)} dk_x dk_y$$

dargestellt werden, wobei

$$(B.4) \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$$

die mit der Störung verbundene Wellenzahl ist. Da die Störungsgleichungen linear sind, kann die Reaktion des Systems auf eine allgemeine Störung bestimmt werden, wenn die Reaktion des Systems auf Störungen aller auftretenden Wellenzahlen bekannt ist. Die Stabilität des Systems hängt also von seiner Stabilität bezüglich der Störungen aller Wellenzahlen ab, und die Instabilität folgt direkt aus der Instabilität gegenüber Störungen lediglich einer Wellenzahl.

B.2 Die Störungsgleichungen für eine Rayleigh-Taylor-Instabilität

Für die Rayleigh-Taylor-Instabilität sind die zugrundeliegenden Gleichungen die Massenerhaltungsgleichung, die Gleichung für die Divergenzbedingung und die Impulsgleichung. Als äußere Kraft wird lediglich die Gravitationskraft angesetzt. Dann haben die drei Gleichungen die Form

$$(B.5) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \mathbf{v}) = 0,$$

$$(B.6) \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

und

$$(B.7) \quad \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \Leftrightarrow \nabla p \Leftrightarrow \rho \mathbf{g} .$$

Diese werden jetzt unter der Annahme kleiner Störungen linearisiert. Dann werden nur die Terme, die erster Ordnung in den Störungen sind, betrachtet. Das Ziel dabei ist, die zeitliche Entwicklung dieser Störungen zu finden. Wenn sie mit der Zeit wachsen, so liegt eine Instabilität vor, oszillieren sie nur, so handelt es sich um Wellenlösungen, aber keine Instabilitäten.

Setzt man die Divergenzbedingung (B.6) in die beiden anderen Gleichungen ein, so ergibt sich

$$(B.8) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \rho = 0 ,$$

und

$$(B.9) \quad \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \Leftrightarrow \nabla p \Leftrightarrow \rho \mathbf{g} .$$

Jetzt wird weiter vorausgesetzt, daß die Gravitationskraft nur in z -Richtung wirkt, das heißt $\mathbf{g} = (0, 0, g)^T$, und daß der ungestörte Zustand die Geschwindigkeit Null, einen konstanten Druck und nur Gradienten in z -Richtung besitzt. Geschwindigkeit, Druck und Dichte werden linear in die ungestörten Terme $\mathbf{v}_0 = 0$, p_0 , ρ_0 und die Terme kleiner Störungen $\mathbf{v}_1 = (u_1, v_1, w_1)^T$, p_1 und ρ_1 zerlegt. Unter diesen Voraussetzungen und wenn man die einzelnen Komponenten der Impulsgleichung ausschreibt, erhält man

$$(B.10) \quad \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \left(w_1 \frac{\partial \rho_0}{\partial z} + u_1 \frac{\partial \rho_1}{\partial x} + v_1 \frac{\partial \rho_1}{\partial y} + w_1 \frac{\partial \rho_1}{\partial z} \right) = 0 ,$$

$$(B.11) \quad \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial v_1}{\partial y} + \frac{\partial w_1}{\partial z} = 0 ,$$

$$(B.12) \quad (\rho_0 + \rho_1) \frac{\partial u_1}{\partial t} = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial x} ,$$

$$(B.13) \quad (\rho_0 + \rho_1) \frac{\partial v_1}{\partial t} = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial y} ,$$

$$(B.14) \quad (\rho_0 + \rho_1) \frac{\partial w_1}{\partial t} = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial z} \Leftrightarrow (\rho_0 + \rho_1) g .$$

Betrachtet man nun nur die Terme erster Ordnung in den Störungen, so reduzieren sich die Gleichungen auf

$$(B.15) \quad \frac{\partial \rho_1}{\partial t} = \Leftrightarrow w_1 \frac{\partial \rho_0}{\partial z},$$

$$(B.16) \quad \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial v_1}{\partial y} + \frac{\partial w_1}{\partial z} = 0,$$

$$(B.17) \quad \rho_0 \frac{\partial u_1}{\partial t} = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial x},$$

$$(B.18) \quad \rho_0 \frac{\partial v_1}{\partial t} = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial y},$$

und

$$(B.19) \quad \rho_0 \frac{\partial w_1}{\partial t} = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial z} \Leftrightarrow \rho_1 g.$$

B.3 Die Fourierentwicklung

Für alle gestörten Größen wird nun eine Fourierentwicklung in ebene Wellen durchgeführt. Ersetzt man in der Gleichung (B.3) die Integration durch die Summation über alle Wellenzahlen, so erhält man die Fourierentwicklung

$$(B.20) \quad A(x, y, z, t) = \sum_k A_k(z) e^{i(k_x x + k_y y + \omega_k t)}.$$

Im allgemeinen wird die Wellenzahl k als bekannt vorausgesetzt, und die Natur der Wellenfrequenz ω wird untersucht. Ist ω reell, so stellt die Gleichung (B.20) Wellen oder Oszillationen dar, und das System ist stabil. Hat ω jedoch einen nicht verschwindenden imaginären Anteil, dann stellt die Gleichung (B.20) eine Störung dar, die exponentiell mit der Zeit wächst, das System ist instabil. Zur Vereinfachung der Schreibweise wird im folgenden der Index k weggelassen. Wählt man für sämtliche gestörten Größen diesen Fourieransatz, so ergeben sich aus den Gleichungen (B.15) bis (B.19) die Gleichungen

$$(B.21) \quad i\omega \rho_1 = \Leftrightarrow w_1 \frac{\partial \rho_0}{\partial z},$$

$$(B.22) \quad ik_x u_1 + ik_y v_1 + \frac{\partial w_1}{\partial z} = 0,$$

$$(B.23) \quad i\omega \rho_0 u_1 = \Leftrightarrow i k_x p_1 ,$$

$$(B.24) \quad i\omega \rho_0 v_1 = \Leftrightarrow i k_y p_1 ,$$

und

$$(B.25) \quad i\omega \rho_0 w_1 = \Leftrightarrow \frac{\partial p_1}{\partial z} \Leftrightarrow \rho_1 g .$$

Aus den Gleichungen (B.23) und (B.24) folgt

$$(B.26) \quad \Leftrightarrow i(k_x^2 + k_y^2)p_1 = i\omega \rho_0(k_x u_1 + k_y v_1)$$

und mit der Gleichung (B.22) die Gleichung

$$(B.27) \quad k^2 p_1 = \Leftrightarrow i\omega \rho_0 \frac{\partial w_1}{\partial z} .$$

Setzt man die Gleichung (B.21) in die Gleichung (B.25) ein, so ergibt sich

$$(B.28) \quad \frac{\partial p_1}{\partial z} = \Leftrightarrow i\omega \rho_0 w_1 + \frac{g}{i\omega} w_1 \frac{\partial \rho_0}{\partial z} .$$

Durch Elimination von p_1 erhält man aus den Gleichungen (B.27) und (B.28) die Gleichung

$$(B.29) \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_0 \frac{\partial w_1}{\partial z} \right) \Leftrightarrow k^2 \rho_0 w_1 + \lambda g k^2 \frac{\partial \rho_0}{\partial z} w_1$$

mit $\lambda = \frac{1}{\omega^2}$. Da der Gradient der ungestörten Dichte in dem Problem vorgegeben ist, ist dies eine Gleichung für $w_1(\omega, k)$. Setzt man nun $w_1 = 0$ für $z \rightarrow \pm\infty$, so liegt ein Sturm-Liouvillesches Eigenwertproblem vor [8, 41].

Beim Sturm-Liouvilleschen Eigenwertproblem interessiert man sich für die Fälle, in denen das Problem nichttriviale Lösungen besitzt. Dies ist nur für bestimmte Werte von λ möglich, die Eigenwerte des Problems genannt werden. Sind die Eigenwerte positiv, so entsprechen alle Eigenfunktionen Schwingungsvorgängen. Ist ein Eigenwert negativ, so hat die Eigenfunktion einen aperiodischen Verlauf. Dies entspricht in unserem Beispiel einer Instabilität.

Aus der Sturm-Liouvilleschen Theorie ergibt sich also auch, daß Instabilitäten genau dann auftreten, wenn ω^2 einen nichtverschwindenden imaginären Anteil besitzt. Aus dieser Theorie erhält man außerdem noch die folgende Aussage. Zu dem Eigenwertproblem (B.29) gibt es unendlich viele Eigenwerte, falls $\rho_0 > 0$ und $\Leftrightarrow g k^2 \frac{\partial \rho_0}{\partial z} > 0$ sind. Da $\rho_0 > 0$ und g positiv sind, gilt dies genau dann, wenn $\frac{\partial \rho_0}{\partial z} < 0$ ist.

Damit ist gezeigt, daß $\omega^2 > 0$ ist, wenn $\frac{\partial \rho_0}{\partial z} < 0$ überall gilt und umgekehrt $\omega^2 < 0$ ist, wenn $\frac{\partial \rho_0}{\partial z} > 0$ irgendwo in der Strömung gilt. Das heißt, eine Dichtestruktur, die mit z wächst ist stabil, während eine mit z fallende Dichtestruktur instabil ist.

B.4 Die Wachstumsraten der Instabilitäten

Der nächste Schritt ist nun, die Wachstumsraten der Instabilitäten zu bestimmen und festzustellen, ob alle Wellenzahlen instabil sind. Dazu vereinfachen wir das System auf den Fall zweier gleichförmiger Flüssigkeiten, die durch eine horizontale Grenzfläche an der Stelle $z = 0$ voneinander getrennt sind. Entfernt man sich von dieser Grenzfläche, so geht die Gleichung (B.29) über in die Gleichung

$$(B.30) \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} \Leftrightarrow k^2 \right) w_1 = 0 ,$$

welche allgemein die exponentielle Lösung

$$(B.31) \quad w_1 = A e^{kz} + B e^{-kz}$$

besitzt. Da die Geschwindigkeit w_1 für $z \rightarrow \pm\infty$ verschwinden muß, wird

$$(B.32) \quad w_1 = \begin{cases} A e^{kz} & \text{für } z < 0 \\ A e^{-kz} & \text{für } z > 0 \end{cases}$$

gesetzt. Dabei wird für positive und negative z dieselbe Konstante A gewählt, um die Stetigkeit von w_1 an der Stelle $z = 0$ zu gewährleisten. Um nun die Lösungen links und rechts der Grenzfläche miteinander zu verbinden, werden Sprungbedingungen benötigt. Dazu wird ein infinitesimal kleines z -Intervall, das den Nullpunkt enthält, betrachtet und die Gleichung (B.28) über dieses Intervall integriert. Größen, die stetig an der Stelle $z = 0$ sind, werden mit dem Index s versehen, und mit

$$(B.33) \quad \Delta_s f$$

wird der Sprung einer unstetigen Größe f an der Stelle $z = 0$ bezeichnet. Damit erhält man aus der Gleichung (B.28) die Gleichung

$$(B.34) \quad \Delta_s p_1 = \frac{g}{i\omega} w_{1s} \Delta_s \rho_0 .$$

Die gleiche Methode, angewandt auf die Gleichung (B.27), liefert

$$(B.35) \quad k^2 \Delta_s p_1 = \Delta_s \left(\Leftrightarrow i\omega \rho_0 \frac{\partial w_1}{\partial z} \right) .$$

Eliminiert man aus diesen beiden Gleichungen $\Delta_s p_1$, so ergibt sich

$$(B.36) \quad \Delta_s \left(\rho_0 \frac{\partial w_1}{\partial z} \right) = \frac{k^2}{\omega^2} g w_{1s} \Delta_s \rho_0 .$$

In dem betrachteten System ist aber

$$(B.37) \quad \Delta_s \rho_0 = \rho_2 \Leftrightarrow \rho_1 ,$$

wobei ρ_2 den oberen und ρ_1 den unteren Dichtewert bezeichnen. Außerdem ist

$$(B.38) \quad \frac{\partial w_1}{\partial z} = \mp k w$$

für $z > 0$ bzw. $z < 0$. Daraus erhält man das Ergebnis

$$(B.39) \quad \omega^2 = \Leftrightarrow g k \left(\frac{\rho_2 \Leftrightarrow \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} \right).$$

Man sieht auch hier wieder, daß das System instabil ist ($\omega^2 < 0$), wenn $\rho_2 > \rho_1$ ist. Dieses Ergebnis stimmt auch mit den Überlegungen der Energiemethode überein. Man erkennt an der Gleichung (B.39) auch, daß im Fall $\rho_2 > \rho_1$ alle Wellenzahlen instabil sind, und daß die Wachstumsrate proportional zur Wurzel der Wellenzahl ist,

$$(B.40) \quad |\omega| \sim \sqrt{k}.$$

Dieses letzte Ergebnis gilt für kleine Störungen. Wächst die Instabilität, dann dominieren Störungen höherer Ordnung, die hier nicht berücksichtigt werden.

Häufig möchte man direkt eine Gleichung für die zeitliche Entwicklung der Amplitude kleiner Störungen zur Verfügung haben. Diese läßt sich aus den bisherigen Gleichungen ableiten. Im folgenden sei $a = a(t)$ die Amplitude einer kleinen sinusartigen Störung der Grenzfläche, die die Bedingung

$$(B.41) \quad k a \ll 1$$

erfüllt, wobei k wieder die Wellenzahl bezeichnet. Die zeitliche Änderung dieser Amplitude ist gerade die Geschwindigkeitskomponente w_1 der gestörten Terme in z -Richtung, das heißt

$$(B.42) \quad w_1(t) = \frac{da(t)}{dt}.$$

Nach dem Ansatz (B.20) gelten

$$(B.43) \quad \frac{d^2 a(t)}{dt^2} = \frac{dw_1(t)}{dt} = i \omega w_1(t)$$

und

$$(B.44) \quad a(t) = \int w_1(t) dt = \frac{1}{i \omega} w_1(t).$$

Daraus folgt

$$(B.45) \quad \frac{d^2 a(t)}{dt^2} = \omega^2 \frac{i}{\omega} w_1(t) = \Leftrightarrow \omega^2 a(t).$$

Setzt man nun die Gleichung (B.39) in die letzte Gleichung ein, so ergibt sich eine Differentialgleichung für die Amplitude a ,

$$(B.46) \quad \frac{d^2 a(t)}{dt^2} = k g(t) a(t) \frac{\varrho_2 \Leftrightarrow \varrho_1}{\varrho_2 + \varrho_1},$$

wobei hier die Beschleunigung g als zeitlich veränderlich zugelassen wird.

Symbolverzeichnis

t	Zeit
m	Masse
ϱ	Dichte
p, P	Druck
\mathbf{v}	Geschwindigkeitsvektor
v_1, v_2, v_3	Geschwindigkeitskomponenten
ε	spezifische innere Energie
e	Gesamtenergie pro Einheitsvolumen
γ	Adiabatexponent
c	Schallgeschwindigkeit
H	Enthalpie
S	Entropie
N	Anzahl der Raumdimensionen
V	N -dimensionales Volumen
$V(t)$	zeitabhängiges Volumen
∂V	Rand des Volumens V
Ω	Raum-Zeit-Gebiet
\mathbf{u}	Vektor der Erhaltungsgrößen
\mathbf{f}_i	physikalische Flüsse
\mathbf{n}	Einheitsnormale
$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots$	Matrizen
\mathcal{I}	Einheitsmatrix
\mathcal{F}	Flußmatrix
\mathcal{A}_i	Funktionalmatrizen
\mathcal{Q}	Transformationsmatrix

U	Entropiefunktion
F_i	Entropieflüsse
s	Stoßwellengeschwindigkeit
a_k	Eigenwerte
\mathbf{r}_k	Eigenvektoren
\mathbf{g}, \mathbf{h}	numerische Flüsse
\mathbf{v}	exakte Riemannlösung
\mathbf{w}	näherungsweise Riemannlösung
\mathcal{A}_r	Roe-Matrix
$\bar{\mathbf{u}}$	Roe-Mittelwert
$a_{roe,i}$	Eigenwerte der Roe-Matrix
\mathbf{q}	transformierte Erhaltungsgröße
v_g	Gittergeschwindigkeit
\mathbf{g}_b	numerischer Fluß mit Berücksichtigung der Gitterbewegung
\mathbf{U}	erweitertes System von Erhaltungsgrößen
i, j	Indizes des Gitters
$\Delta x, \Delta y$	Raumschrittweiten
Δt	Zeitschrittweite
n	Zeitindex
\mathbf{u}_Δ	Gitterfunktion
V_{ij}	Gitterzellen
$S_{ij,k}$	Seiten der Gitterzelle V_{ij}
Ω_{ij}^n	Raum-Zeit-Gitterzellen
\mathbf{s}_i^n	Steigungsvektoren
$\mathbf{u}_{i\pm}$	Randwerte der Gitterzelle mit dem Index i
A	Amplitude einer Störung
k	Wellenzahl
ω	Wellenfrequenz
g	Beschleunigung
λ	Wellenlänge
$\varrho_0, p_0, \mathbf{v}_0$	ungestörte Terme
$\varrho_1, p_1, \mathbf{v}_1$	Terme kleiner Störungen

Literaturverzeichnis

- [1] W. Bauer, H. Blum, P. Hoppé, H.U. Karow, and H. Laqua. Erzeugung und Fokussierung von Leichtionenstrahlen mit Impulsenergien von 50 kJ und Leistungsdichten um 1 TW/cm^2 . *KfK-Nachrichten*, Jahrg. 24(1):3–12, 1992.
- [2] K. Baumung, H. Bluhm, P. Hoppé, G. I. Kanel, S. V. Razorenov, D. Rusch, J. Singer, O. Stoltz, and A. V. Utkin. Target experiments with high-power proton beams. In K. Jungwirth, editor, *Beams'96: Proceedings of the 11th Internat. Conf. on High-Power Particle Beams*, volume 1, pages 72–80. Academy of Sciences of the Czech Republic, Juni 1996.
- [3] K. Baumung, H. J. Bluhm, B. Goel, P. Hoppé, H.U. Karow, D. Rusch, V.E. Fortov, G. I. Kanel, S. V. Razorenov, A. V. Utkin, and O. Yu. Vorobjev. Shock-wave physics experiments with high-power proton beams. *Laser and Particle Beams*, 14(2):181–209, 1996.
- [4] K. Baumung, H. U. Karow, D. Rusch, G. Kanel, and V. Licht. Targetexperimente an KALIF: Erzeugung und Untersuchung von kondensierter Materie in extremen Zuständen hoher Energiedichte. *KfK-Nachrichten*, Jahrg. 24(4):223–233, 1992.
- [5] G. Bruhn. Erhaltungssätze und schwache Lösungen in der Gasdynamik. *Math. Meth. in Appl. Sci*, 7:470–479, 1985.
- [6] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 1961.
- [7] A. J. Chorin. Random choice solution of hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.*, 22:517–533, 1976.
- [8] R. Courant and D. Hilbert. *Methoden der Mathematischen Physik I*. Julius Springer Verlag Berlin, 2 edition, 1931.
- [9] B. Einfeldt. On Godunov-type methods for gas dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 25:294–318, 1988.
- [10] N. Elsner. *Grundlagen der Technischen Thermodynamik*. Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, 3 edition, 1985.

- [11] M. Feistauer. *Mathematical Methods in Fluid Dynamics*, volume 67 of *Pitman Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics*. Longman Scientific & Technical, Harlow, 1993.
- [12] V. E. Fortov, B. Goel, C.-D. Munz, A. L. Ni, A. V. Shutov, and O. Y. Vorobiev. Numerical simulations of nonstationary fronts and interfaces by the Godunov method in moving grids. *Nucl. Science and Engineering*, 123:169–189, 1996.
- [13] P. Glaister. An approximate linearised Riemann solver for the Euler equations for real gases. *J. Comput. Phys.*, 74:382–401, 1988.
- [14] S. K. Godunov. Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mat. Sbornik (russisch; englische Übersetzung: Cornell Aeronautical Lab.)*, 47:271–306, 1959.
- [15] B. Goel and O.Yu. Vorobiev. Equation of state information from beam-target interaction experiments at KALIF. *Laser and Particle Beams*, 14(4):637–653, 1996.
- [16] N. K. Gupta, C.-D. Munz, and B. Goel. High resolution shock capturing scheme for numerical simulation of plasma-shock interaction. KfK-Bericht 4696, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, 1990.
- [17] A. Harten, P. D. Lax, and B. van Leer. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 18:289–315, 1981.
- [18] E. Hopf. On the right weak solution of the Cauchyproblem for a quasi-linear equation of first order. *J. of Math. and Mech.*, 19:483–487, 1969.
- [19] P. Hoppé, H. Bachmann, W. Bauer, H. Bluhm, L. Buth, H. Massier, D. Rusch, O. Stoltz, and W. Fäth. Characteristics of the ion beam produced by the b_θ -diode. In H.-J. Bluhm, editor, *Physics of intense light ion beams and production of high energy density in matter, annual report 1994*, FZKA 5590, pages 51–57. 1995.
- [20] P. Jenny, B. Müller, and H. Thomann. Correction of conservative Euler solvers for gas mixtures. *J. Comput. Phys.*, 132(1):91–107, 1997.
- [21] P. D. Lax. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 7:159–193, 1954.
- [22] P. D. Lax. Shock waves and entropy. In E. H. Zarantonello, editor, *Symposium at the University of Wisconsin*, pages 603–634, 1971.
- [23] P. D. Lax. Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. *SIAM, Regional conference series in Applied Mathematics*, 11, 1972.
- [24] P. D. Lax and B. Wendroff. Systems of conservation laws. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 13:217–237, 1960.

- [25] R. J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Lectures in Mathematics. Birkhäuser Verlag Basel, 2 edition, 1992.
- [26] M.-S. Liou, B. van Leer, and J. S. Shuen. Splitting of inviscid fluxes for real gases. *J. Comput. Phys.*, 87:1–24, 1990.
- [27] C.-D. Munz. On the comparison and construction of two-step-schemes for the Euler equations. *Notes on Numerical Fluid*, 14:195–217, 1986.
- [28] C.-D. Munz. Theorie und Numerik nichtlinearer hyperbolischer Differentialgleichungen I. Die skalare Erhaltungsgleichung. KfK-Bericht 4805, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, 1990.
- [29] C.-D. Munz. Godunov-Typ Verfahren für die Gleichungen der kompressiblen Strömungsmechanik. KfK-Bericht 5058, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1992.
- [30] O. A. Oleinik. Discontinuous solutions of nonlinear differential equations. *Amer. Math. Soc. Trans., Ser.2*, 1957.
- [31] S. Osher and S. Chakravarthy. High resolution schemes and the entropy condition. *SIAM J. Numer. Anal.*, 21:955–984, 1984.
- [32] K. Oswatitsch. *Grundlagen der Gasdynamik*. Springer-Verlag. Wien/New York, 1976.
- [33] R. D. Richtmyer. Taylor Instability in Shock Acceleration of Compressible Fluids. *Comm. Pure and Applied Mathematics*, 13:297–319, 1960.
- [34] P. L. Roe. Approximative Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *J. Comput. Phys.*, 43:357–372, 1981.
- [35] P. L. Roe. The use of the Riemann problem in finite difference schemes. In *Lecture Notes in Physics*, volume 141, pages 354–359. Springer-Verlag, 1981.
- [36] D. Rusch and W. Ratajczak. Die Erzeugung hoher elektrischer Energiedichten mit dem Impulsgenerator KALIF. *KfK-Nachrichten*, Jahrg. 24(1):13–18, 1992.
- [37] G. A. Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 27:1–31, 1978.
- [38] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, and C. W. Mastin. Boundary fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations – A review. *J. Comput. Phys.*, 47:1–108, 1982.
- [39] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, and C. W. Mastin. *Numerical Grid Generation, Foundations and Applications*. North-Holland, New York, Amsterdam, Oxford, 1985.
- [40] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov’s method. *J. Comput. Phys.*, 32:101–136, 1979.

- [41] W. Walter. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, volume 110 of *Heidelberger Taschenbücher*. Springer-Verlag Berlin, 1972.
- [42] B. L. Roždestvenskiĭ and N. N. Janenko. *Systems of Quasilinear Equations and Their Applications to Gas Dynamics*, volume 55 of *Translations of Mathematical Monographs*. American Mathematical Society, Providence Rhode Island, 1983.