

Modellierung von Hydrosystemen - SoSe 2023

BHYWI-22-B2-T1.3: Finite-Differenzen-Methode: Explizit

Olaf Kolditz, Lars Bilke, Karsten Rink, Haibing Shao, Erik Nixdorf

¹Helmholtz Centre for Environmental Research – UFZ, Leipzig

²Technische Universität Dresden – TUD, Dresden

³Center for Advanced Water Research – CAWR

⁴TUBAF-UFZ Center for Environmental Geosciences – C-EGS, Freiberg / Leipzig

⁴Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe – BGR, Hannover / Berlin

Dresden, 16.06.2023

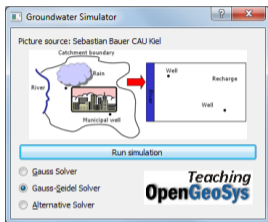
Zeitplan: Modellierung von Hydrosystemen: Zweiter Block (B2)

Sommersemester 2023: BHYWI-22-B2

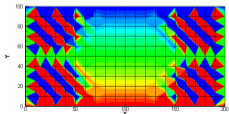
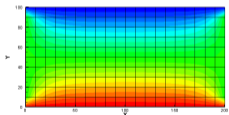
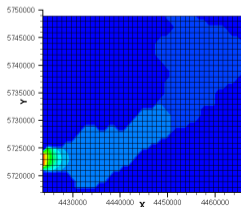
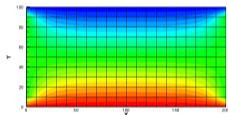
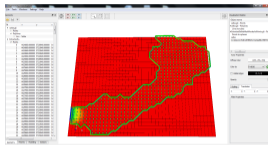
Datum	B2	Thema	Format
16.06.2023	B2-T1.0	Einführung in die Veranstaltung (B2) (Kolditz)	HSZ/403
16.06.2023	B2-T1.1	Hydromechanik und Numerische Methoden (Kolditz)	HSZ/403
16.06.2023	B2-T1.2	Grundwasserhydraulik und Prinzipbeispiel (Kolditz)	HSZ/403
16.06.2023	B2-T1.3	Finite-Differenzen-Methode: Explizit (Kolditz)	HSZ/403
16.06.2023	B2-T1.4	Finite-Differenzen-Methode: Implizit (Kolditz)	HSZ/403
23.06.2023	B2-T2.1	Regionale Grundwassersysteme (Nixdorf)	HSZ/403
23.06.2023	B2-T2.2	Regionale Grundwassersysteme (Nixdorf)	HSZ/403
23.06.2023	B2-T2.3	Regionale Grundwassersysteme (Nixdorf): Übung	HSZ/403
30.06.2023	B2-T3.1	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao/Chen)	HSZ/403
30.06.2023	B2-T3.2	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao/Chen)	HSZ/403
30.06.2023	B2-T3.3	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao/Chen)	GER/37/H
07.07.2023	B2-T4.1	Virtuelle VISLAB Tour - Vorlesung (Rink/Bilke)	VISLAB UFZ
07.07.2023	B2-T4.2	Virtuelle VISLAB Tour - Demo (Rink/Bilke)	VISLAB UFZ
14.07.2023	B2-T1.6	Zusammenfassung der Veranstaltung Numerik (Kolditz)	HSZ/403
14.07.2023	B2-T1.7	Zusammenfassung der Veranstaltung (Hartmann/Kolditz)	HSZ/403
14.07.2023	B2-T1.8	Vorbereitung Klausur (Hartmann/Kolditz)	HSZ/403

Übersicht: Numerische Verfahren

explizite FDM

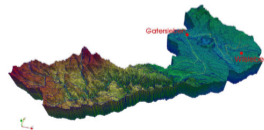
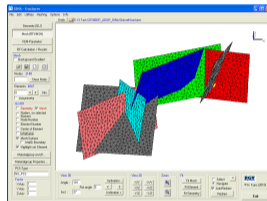


implizite FDM



- Pro / Cons
- FDM: einfache Implementierung, starre Geometrien
- FEM: schwieriger zu implementieren (heute), flexible Geometrien

FEM



Bisher

- ▶ Wiederholung Hydromechanik: Grundwasserströmungsgleichung
- ▶ Übung Einzugsgebiet: Berechnungsverfahren

Heute: Finite-Differenzen-Verfahren

- ▶ Grundlagen - GWE
- ▶ Grundlagen - TSE
- ▶ Übungen zur expliziten FDM (page 12) [BHYWI-22-E2]

Übungen: Werkzeuge

► PDE

$$S \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) = Q \quad (1)$$

in time ($\Delta t = t^{n+1} - t^n$)

$$u_j^{n+1} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta t^m}{m!} \left[\frac{\partial^m u}{\partial t^m} \right]_j^n \quad (2)$$

in space ($\Delta x = x_{i+1}^n - x_i^n$)

$$u_{i+1}^n = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta x^m}{m!} \left[\frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right]_i^n \quad (3)$$

in space ($\Delta y = y_{j+1}^n - y_j^n$)

$$u_{j+1}^n = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta y^m}{m!} \left[\frac{\partial^m u}{\partial y^m} \right]_j^n \quad (4)$$

► Zeitableitung

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t} \right]_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right]_j^n - O(\Delta t^2) \quad (5)$$

► in space

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right]_{i,j}^n = \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right]_{i,j}^n - \dots \quad (6)$$

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]_{i,j}^n = \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} - \frac{\Delta y^2}{12} \left[\frac{\partial^4 u}{\partial y^4} \right]_{i,j}^n - \dots \quad (7)$$

$$S_{i,j} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - K_{i,j}^x \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} - K_{i,j}^y \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} = Q_{i,j} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n \\ &+ \frac{K_{i,j}^x}{S_{i,j}} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n \\ &+ \frac{K_{i,j}^y}{S_{i,j}} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n \\ &+ \frac{Q_{i,j}}{S_{i,j}} \end{aligned}$$

(9)

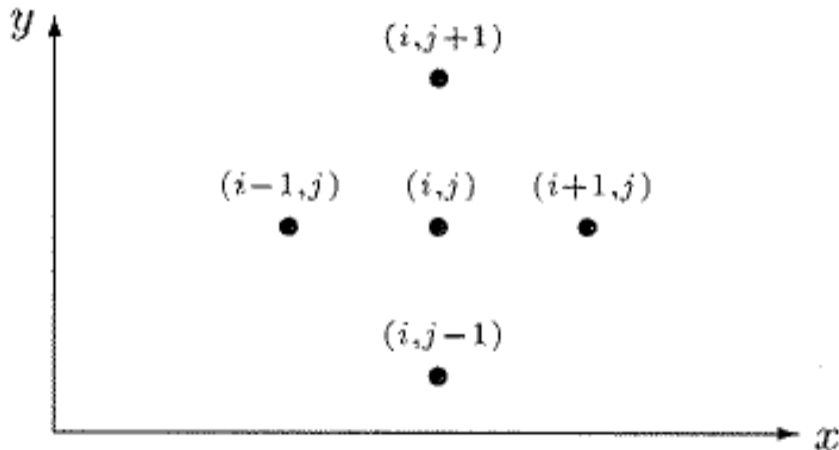


Fig.: 5-Punkte-Stern (Knabner und Angermann 2000)

Übung

- Finite-Differenzen-Methode: Explizites Verfahren

GitHub-Repository für die Übungen:

<https://github.com/OlafKolditz/HYDROSYSTEMS>

► Datenstrukturen

Table:

Feldgröße	u
Physikalische Parameter	S, K, Q
Numerische Parameter	$\Delta t, \Delta x, \Delta y$

Die Minimal-Datenstrukturen für die Programmierung der Gleichung (9) sind damit:

```
1  std::vector<float>u_new;  
2  std::vector<float>u_old;  
3  float S0,Kf,Q;  
4  float dx,dy,dt;
```

Listing 1: Datenstrukturen

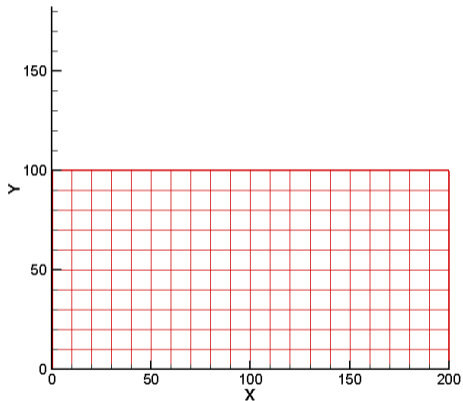


Fig.: Rechen-Gitter für den Rechteck-Aquifer

Um dieses Gitter "abtasten" zu können, schreiben wir folgende doppelte Schleife.

```
1 for(j=0;j<jy;j++)
2 {
3     nn = j*ix;
4     for( i=0;i<ix;i++)
5     {
6         n = nn+i;
7         u_new[n] = u[n] \
8                 + Kf/S0*dt/dx2 * (u[n+1]-2*u[n]+u[n-1]) \
9                 + Kf/S0*dt/dy2 * (u[(j+1)*ix+i]-2*u[n]+u[(j-1)*ix+i]) \
10                + Q/S0;
11     }
12 }
```

Listing 2: Rechenschema

Dabei ist j der Laufindex über die y Richtung und i der Laufindex über die x Richtung. Ganz wichtig ist natürlich, den Speicher für die Vektoren bereitzustellen, bevor es los geht.

```
1 u.resize(ix*jy);  
2 u_new.resize(ix*jy);
```

Listing 3: Speicher für Lösungsvektoren

- ▶ Welche Rolle spielen ix und jy bei der Speicherreservierung?

Natürlich müssen auch die Parameter vor der Berechnung initialisiert werden

```
1  ix = 21;  
2  jy = 11;  
3  dx = 10.; //Einheiten  
4  dy = 10.;  
5  dt = 0.25e2;  
6  S0 = 1e-5;  
7  Kf = 1e-5;  
8  Q  = 0.;  
9  u0 = 0.;
```

Listing 4: Daten-Initialisierung

- ▶ Welche Einheiten haben die einzelnen Parameter?

Das mit den Anfangsbedingungen ist eine einfache Sache. Mit der Doppelschleife über alle Knoten, können wir sehr einfach einen Wert u_0 als Anfangsbedingung überall zuweisen.

```
1 for(int i=0;i<ix;i++)
2   for(int j=0;j<jy;j++)
3     {
4       u[j*(ix+1)] = u0;
5       u_new[j*(ix+1)] = u0;
6     }
7 }
```

Listing 5: Anfangsbedingungen setzen

Mit den Randbedingungen ist es etwas kniffliger ...

```
1 //top and bottom
2 int l;
3 for(int i=0;i<ix;i++)
4 {
5     bc_nodes.push_back(i); u[i] = u_top    u_new[i] = u_top;
6     l = ix*(jy-1)+i;
7     bc_nodes.push_back(l); u[l] = u_bottom;    u_new[l] = u_bottom;
8 }
9 //left and right side
10 for(int j=1;j<jy-1;j++)
11 {
12     l = ix*j;
13     bc_nodes.push_back(l); u[l] = u_left;    u_new[l] = u_left;
14     l = ix*j+ix-1;
15     bc_nodes.push_back(l); u[l] = u_right;    u_new[l] = u_right;
16 }
```

Listing 6: Randbedingungen setzen

Sie sehen, dass wir für die Zuweisung der Randbedingungen eine neue Datenstruktur eingeführt haben.

```
1 std::vector<float>u_bc;
```

Listing 7: Vektor für Randbedingungen

Das Einbauen der Randbedingungen integrieren wir direkt in die Doppelschleife zur Berechnung der Knotenwerte. Dabei kommt eine neue Funktion `IsBCNode` ins Spiel, die wir uns gleich noch näher anschauen. `IsBCNode` soll eigentlich nichts anderes machen, als beim Auftreten einer Randbedingung nichts zu tun (i.e. `continue`). Randbedingungswerte sind gesetzt, müssen also nicht gerechnet werden.

```
1 for(int j=0;j<jy;j++)
2 {
3     nn = j*ix;
4     for(int i=0;i<ix;i++)
5     {
6         n = nn+i;
7         if(IsBCNode(n, bc_nodes))
8             continue;
9         ...
10 }
```

Listing 8: Randbedingungen setzen

Wie funktioniert nun IsBCNode?

```
1 bool IsBCNode(int n, std::vector<int>bc_nodes)
2 {
3     bool is_node_bc = false;
4     for(int k=0;k<(size_t)bc_nodes.size();k++)
5     {
6         if(n==bc_nodes[k])
7         {
8             is_node_bc = true;
9             return is_node_bc;
10        }
11    }
12    return is_node_bc;
13 }
```

Listing 9: Randbedingungen setzen

Struktur der Funktion:

- ▶ Rückgabewert: logischer Wert wahr oder falsch
- ▶ Parameter: aktueller Gitterpunkt und Randbedingungsknotenvektor

Die Funktion überprüft, ob der Gitterpunkt n ein Randbedingungsknoten ist und gibt den entsprechenden logischen Wert zurück.

Das Ergebnis der finite Differenzen Simulation sehen wir in der Abb.

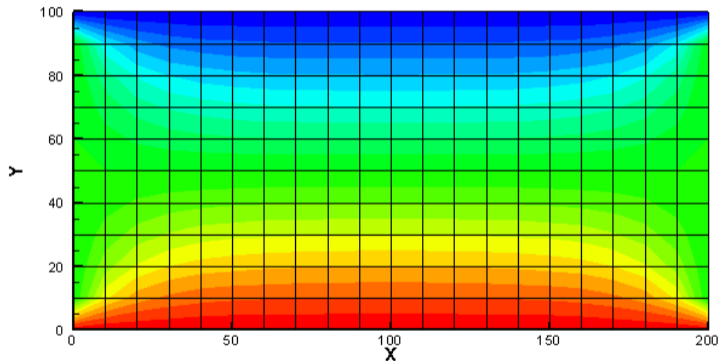
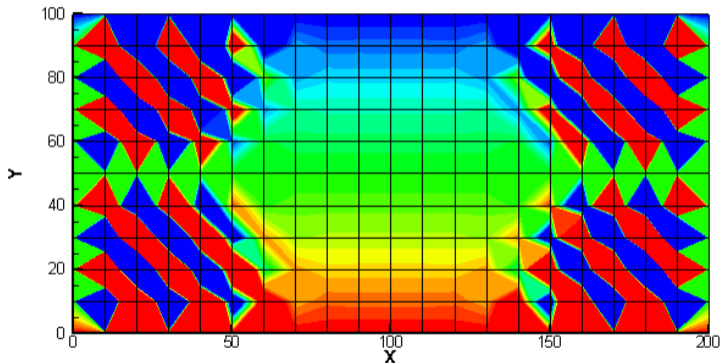


Fig.: Berechnete Druckverteilung im Rechteck-Aquifer nach 100 Zeitschritten $\Delta t = 25 \text{ sec}$

Jetzt werden wir mutig und vergrößern mal den Zeitschritt, sagen wir mal verdoppeln:
 $\Delta t = 50$ sec. Das Maleur sehen wir in der Abb. Was ist hier los?



Numerische Stabilität

- Finite-Differenzen-Methode: Explizites Verfahren

Wir erinnern uns noch dunkel daran, dass der Preis für das einfache explizite FDM ein strenges Stabilitätskriterium war (siehe Hydroinformatik, Teil II, Abschn. 3.2.2 und Abschn. 4.1). Dabei muss die Neumann-Zahl kleiner einhalb sein.

$$Ne = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (10)$$

Prima, aber was ist jetzt α und warum steht nur Δx und nicht auch Δy in der Gleichung? Zur bestimmung des α schreiben wir die Grundwassergleichung in eine Diffusionsgleichung wie folgt um.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{K_x}{S} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{K_y}{S} \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{Q}{S} \quad (11)$$

Wir sehen, dass es eigentlich zwei α -s gibt, für jede Richtung eins.

$$\begin{aligned}\alpha_x &= \frac{K_x}{S} \\ \alpha_y &= \frac{K_y}{S}\end{aligned}\tag{12}$$

- ▶ Welche Einheit hat unser Grundwasser- α ?

Der richtige Zeitschritt für unser explizites FD Verfahren ergibt sich somit zu:

$$\Delta t \leq \frac{\min(\Delta x^2, \Delta y^2)}{2\alpha} \quad (13)$$

$$\Delta t \leq \frac{100m^2}{2 \times 1m^2/s} = 50s \quad (14)$$

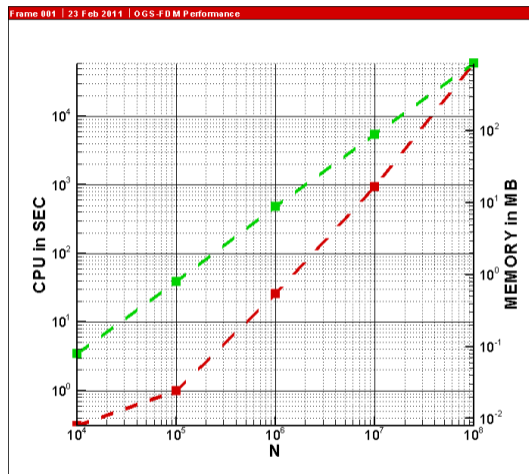


Fig.: Rechenzeit und Speicherbedarf für explizite FDM

Wie stellen wir eine Zeitmessung in einem Programm an.

```
clock_t start, end; Definitionen
...
start = clock();    Beginn Zeitmessung
...
end = clock();      Ende Zeitmessung
...
time= (end-start)/(double)(CLOCKS_PER_SEC); Differenz
```

Übung E2 Der Quelltext für diese Übung befindet sich in EXERCISES.

Übung

- Explizite FDM

`https://github.com/OlafKolditz/HYDROSYSTEMS/tree/main/BHYWI-22-E2_FDM-explizit-Rechteck-python`

```
1 cd ... \HYDROSYSTEMS \BHYWI-22-E2_FDM-explizit-Rechteck-python
```

Listing 10: Verzeichnis auswählen

run.bat

```
1 set PATH=%PATH%;C:\MinGW\bin
2 g++ main.cpp
3 a.exe
4 python isolines.py
```

Listing 11: Skript