Modellierung von Hydrosystemen - SoSe 2022

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

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

[1]Helmholtz Centre for Environmental Research – UFZ, Leipzig

[2]Technische Universität Dresden – TUD, Dresden

[3]Center for Advanced Water Research – CAWR

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

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

Dresden, 01.07.2022

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Zeitplan: Modellierung von Hydrosystemen: Zweiter Block (B2)

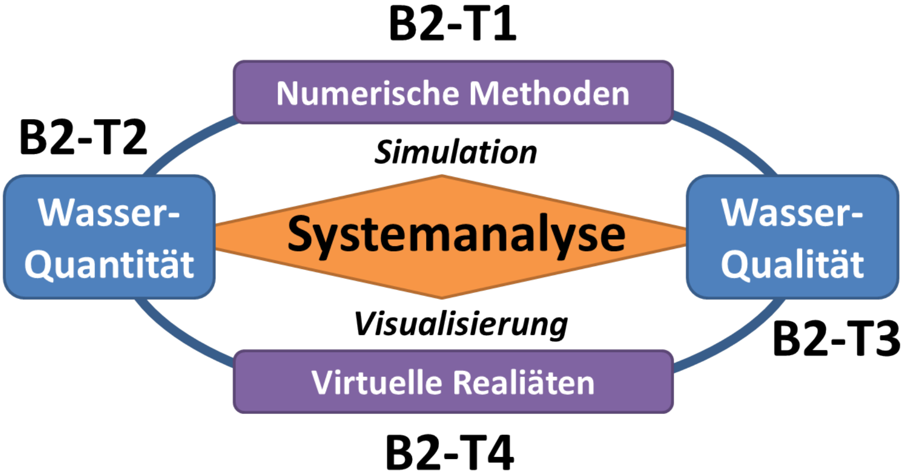
Sommersemester 2022: BHYWI-22-B2

Datum	B2	Thema	Format
27.05.2022	B2-T1.0	Einführung in die Veranstaltung (B2) (Kolditz)	Online
27.05.2022	B2-T1.1	Hydromechanik und Numerische Methoden (Kolditz)	Online
27.05.2022	B2-T1.2	Grundwasserhydraulik und Prinzipbeispiel (Kolditz)	Online
03.06.2022	B2-T3.1	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao)	HSZ/403
03.06.2022	B2-T3.2	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao)	HSZ/403
10.06.2022	–	Vorlesungsfrei (Pfingsten)	
17.06.2022	B2-T2.1	Regionale Grundwassersysteme (Nixdorf)	HSZ/403
17.06.2022	B2-T2.2	Regionale Grundwassersysteme (Nixdorf)	HSZ/403
17.06.2022	B2-T2.3	Regionale Grundwassersysteme (Nixdorf): Übung	HSZ/403
24.06.2022	B2-T4.1	Virtuelle VISLAB Tour - Vorlesung (Rink/Bilke)	Online
24.06.2022	B2-T4.2	Virtuelle VISLAB Tour - Demo (Rink/Bilke)	Online
01.07.2022	B2-T1.3	Finite-Differenzen-Methode: Explizit (Kolditz)	HSZ/403
01.07.2022	B2-T1.4	Finite-Differenzen-Methode: Implizit (Kolditz)	HSZ/403
01.07.2022	B2-T1.5	Finite-Differenzen-Methode: Übungen (Kolditz)	HSZ/403
08.07.2022	B2-T3.3	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao)	GER/38
08.07.2022	B2-T3.4	Stofftransport in Hydrosystemen (Shao)	GER/38
15.07.2022	B2-T1.6	Zusammenfassung der Veranstaltung (Hartmann/Kolditz)	HSZ/403
15.07.2022	B2-T1.7	Vorbereitung Klausur (Hartmann/Kolditz)	HSZ/403

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

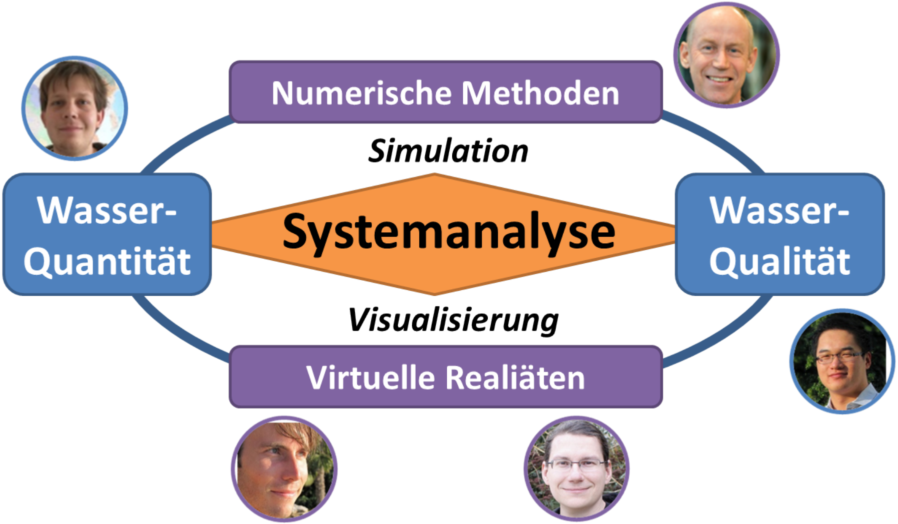
Übersicht der Lehrveranstaltung

Konzept

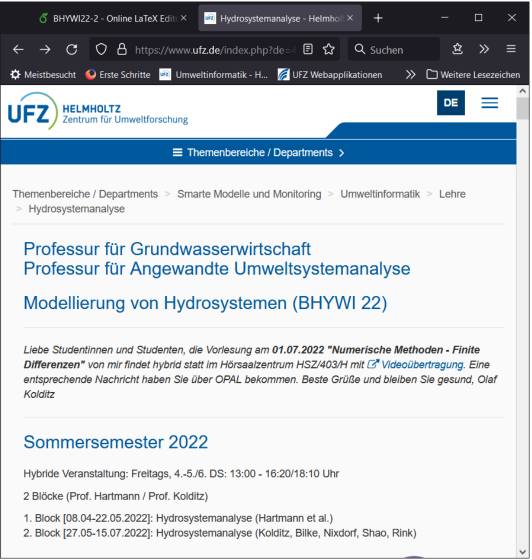


Übersicht der Lehrveranstaltung

Dozenten



Vorlesungsmaterialien



- OPAL[a]
  - Prof. Hartmann, B1 Material
  - B2: für Informationen per Mail (mittwochs)
- UFZ Lehre-Webseite: `https://www.ufz.de/index.php?de=40426`
- Vorlesungs-PDFs und Links
  - online Vorlesung (overleaf)[b]
  - Übungen (github)[c]
  - Videos und weiteres Material (next-cloud)[d] (pwd: aj8seWjPn4)
  - Technisches Tutorial overleaf)[e]

[a] https://bildungsportal.sachsen.de/opal/auth/RepositoryEntry/21837283329
[b] https://www.overleaf.com/read/szgpcjggwdqc
[c] https://github.com/OlafKolditz/HYDROSYSTEMS
[d] https://nc.ufz.de/s/wHm5BBndNX3G4tB
[e] https://www.overleaf.com/read/vyxbhdmfczpf

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Umfrage (Bitte der Fachrichtung Hydrowissenschaften)

Es wäre toll, wenn Sie diesen in Ihre LV "Modellierung von Hydrosystemen" integrieren können und den Studierenden ca. 10-15 min hierfür zur Verfügung stellen. Vielleicht können Sie im Nachgang ja auch noch den Link zur Befragung in die OPAL-Gruppe stellen für alle Studierenden, die verhindert waren: `https://bildungsportal.sachsen.de/umfragen/limesurvey/index.php/883372?lang=de`

Die Befragung dient dazu (Umfrage enthält 24 Fragen):

- Einen Überblick zu bekommen, wie und warum die Studierenden Ihre Wahl für genau dieses Studium getroffen haben
- Wie zufrieden sie mit der Wahl und dem Studium sind
- und ob es ggf. Probleme gibt

Hinweis: Das Zentrum für Qualitätsmanagement (ZQA) wird im Rahmen seiner jährlichen TUD-weiten Studierendenbefragung zu einem späteren Zeitpunkt noch eine ausführlichere Befragung durchführen. Dennoch sind die Angaben für uns sehr wichtig.

Umfrage (Bitte der Fachrichtung Hydrowissenschaften)

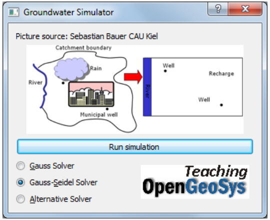
SCAN ME

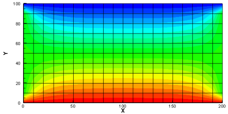
https://bildungsportal.sachsen.de/umfragen/limesurvey/index.php/883372?lang=de

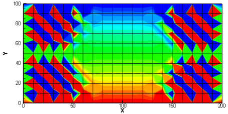
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Übersicht: Numerische Verfahren

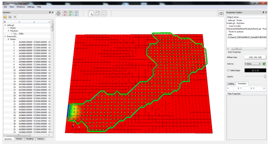
explizite FDM

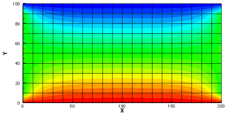


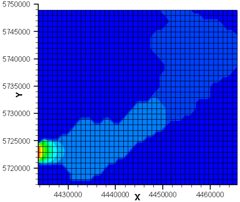




implizite FDM

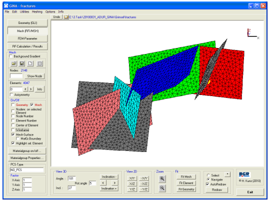


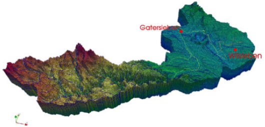




- Pro / Cons
- FDM: einfache Implementierung, starre Geometrien
- FEM: schwieriger zu implementieren (heute), flexible Geometrien

FEM





Fahrplan für heute ...

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

Grundlagen - GWE

- PDE

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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Grundlagen - TSE

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

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

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

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

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

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

Grundlagen - FDM

- Zeitableitung

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^n - 0(\Delta t^2) \tag{5}$$

- in space

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

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

FDM - explizites Schema

$$
\begin{aligned}
& S_{i,j} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n}}{\Delta t} \\
-K_{i,j}^{x} \frac{u_{i+1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i-1,j}^{n}}{\Delta x^2} \quad - \quad & K_{i,j}^{y} \frac{u_{i,j+1}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i,j-1}^{n}}{\Delta y^2} = Q_{i,j}
\end{aligned} \tag{8}
$$

$$
\begin{aligned}
u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^{n} \\
&+ \frac{K_{i,j}^{x}}{S_{i,j}} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i-1,j}^{n} \\
&+ \frac{K_{i,j}^{y}}{S_{i,j}} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} u_{i,j+1}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i,j-1}^{n} \\
&+ \frac{Q_{i,j}}{S_{i,j}}
\end{aligned} \tag{9}
$$

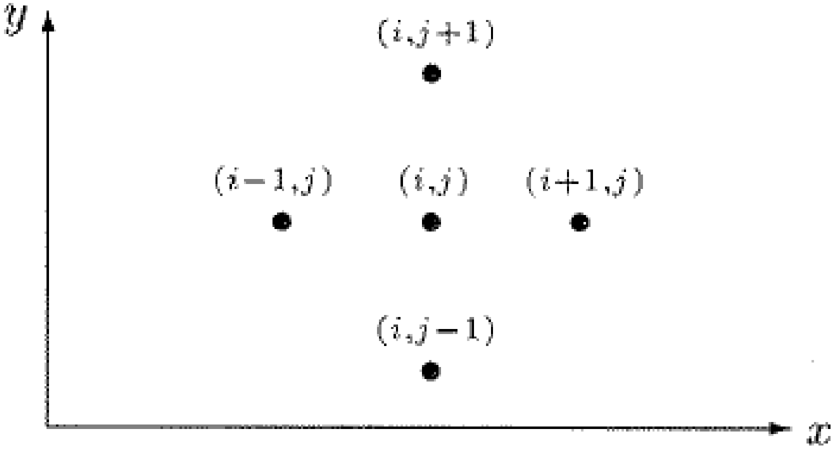


Fig.: 5-Punkte-Stern (Knabner und Angermann 2000)

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	$\Delta t, \Delta x, \Delta y$

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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

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

Listing 1: Datenstrukturen

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

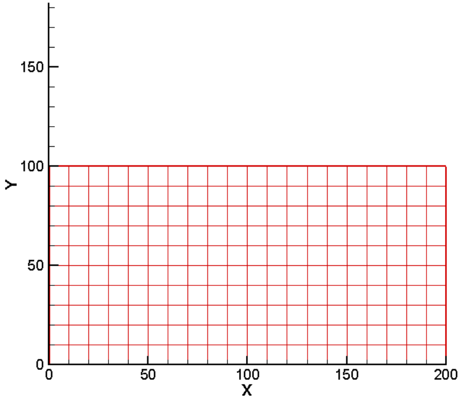


Fig.: Rechen-Gitter für den Rechteck-Aquifer

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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

```
for(j=0;j<jy;j++)
{
  nn = j*ix;
  for( i=0;i<ix;i++)
  {
    n = nn+i;
    u_new[n] = u[n] \
             + Kf/S0*dt/dx2 * (u[n+1]-2*u[n]+u[n-1]) \
             + Kf/S0*dt/dy2 * (u[(j+1)*ix+i]-2*u[n]+u[(j-1)*ix+i]) \
             + Q/S0;
  }
}
```

Listing 2: Rechenschema

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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.

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

Listing 3: Speicher für Lösungsvektoren

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

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

Natürlich müssen auch die Parameter vor der Berechnung initialisiert werden

```
ix = 21;
jy = 11;
dx = 10.; //Einheiten
dy = 10.;
dt = 0.25e2;
S0 = 1e-5;
Kf = 1e-5;
Q  = 0.;
u0 = 0.;
```

Listing 4: Daten-Initialisierung

- Welche Einheiten haben die einzelnen Parameter?

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

Das mit den Anfangsbedingungen ist eine einfache Sache. Mit der Doppelschleife über alle Knoten, können wir sehr einfach einen Wert `u0` als Anfangsbedingung überall zuweisen.

```
for(int i=0;i<ix;i++)
  for(int j=0;j<jy;j++)
  {
    u[j*(ix+1)] = u0;
    u_new[j*(ix+1)] = u0;
  }
}
```

Listing 5: Anfangsbedingungen setzen

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

Mit den Randbedingungen ist es etwas kniffliger ...

```
//top and bottom
int l;
for(int i=0;i<ix;i++)
{
  bc_nodes.push_back(i); u[i] = u_top  u_new[i] = u_top;
  l = ix*(jy-1)+i;
  bc_nodes.push_back(l); u[l] = u_bottom;  u_new[l] = u_bottom;
}
//left and right side
for(int j=1;j<jy-1;j++)
{
  l = ix*j;
  bc_nodes.push_back(l); u[l] = u_left;  u_new[l] = u_left;
  l = ix*j+ix-1;
  bc_nodes.push_back(l); u[l] = u_right;  u_new[l] = u_right;
}
```

Listing 6: Randbedingungen setzen

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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

```
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.

```
for(int j=0;j<jy;j++)
{
  nn = j*ix;
  for(int i=0;i<ix;i++)
  {
    n = nn+i;
    if(IsBCNode(n,bc_nodes))
      continue;
    ...
  }
```

Listing 8: Randbedingungen setzen

Wie funktioniert nun IsBCNode?

```
bool IsBCNode(int n,std::vector<int>bc_nodes)
{
  bool is_node_bc = false;
  for(int k=0;k<(size_t)bc_nodes.size();k++)
  {
    if(n==bc_nodes[k])
    {
      is_node_bc = true;
      return is_node_bc;
    }
  }
  return is_node_bc;
}
```

Listing 9: Randbedingungen setzen

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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.

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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

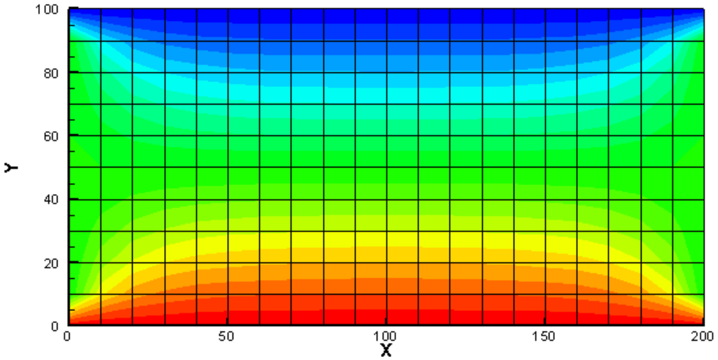
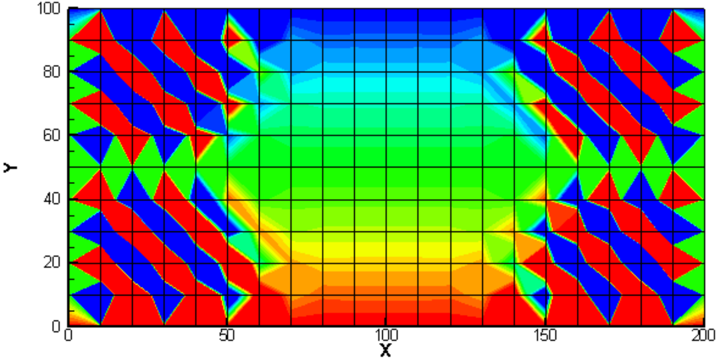


Fig.: Berechnete Druckverteilung im Rechteck-Aquifer nach 100 Zeitschritten $\Delta t = 25$ sec

Übung - BHYWI-E2-FDM-Rechteck

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

Numerische Stabilität

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.

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

Numerische Stabilität

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.

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

Numerische Stabilität

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

$$\alpha_x = \frac{K_x}{S}$$
$$\alpha_y = \frac{K_y}{S} \tag{12}$$

- Welche Einheit hat unser Grundwasser-α ?

Numerische Stabilität

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

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

Numerische Stabilität

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

Rechenzeit

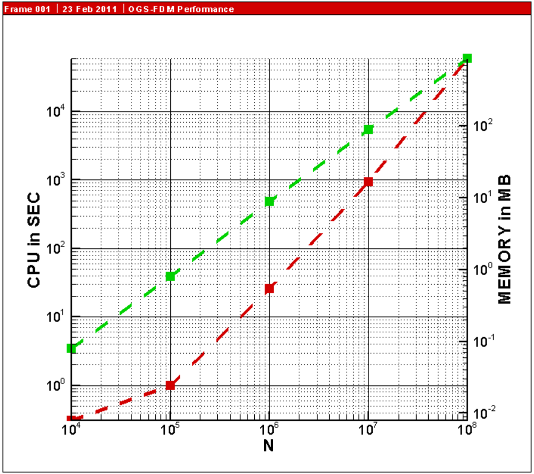


Fig.: Rechenzeit und Speicherbedarf für explizite FDM

Rechenzeit

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.

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN