

Erweiterungen der Methode der Finiten Massen

Dissertation

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Mathematischen Fakultät
der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

vorgelegt von
Christoph Gauger
aus Tübingen

Juli 2000

Dissertation eingereicht am:
Tag der mündlichen Prüfung:

4. Juli 2000
18. September 2000

Dekan:

1. Berichterstatter:
2. Berichterstatter:

Prof. Dr. Wilhelm Kaup
Prof. Dr. Harry Yserentant
Prof. Dr. Christian Lubich

Danksagung

Mein besonderer Dank für die fachkundige Unterstützung und gute Zusammenarbeit gilt meinem Betreuer Herrn Prof. Dr. Harry Yserentant, sowie Dr. Peter Leinen. Bedanken möchte ich mich auch bei den anderen Mitgliedern des Arbeitsbereiches für Anregungen und vielfältige Hilfe, aber auch für die freundschaftliche Atmosphäre, in der diese Arbeit entstehen konnte.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Einführung in die Methode der Finiten Massen	5
2.1	Das Konzept sich überlappender Massenpakete	5
2.1.1	Ein Teilchen	5
2.1.2	Massendichte und Geschwindigkeit	10
2.1.3	Thermodynamische Größen	11
2.2	Die Bewegungsgleichungen für adiabatische Strömungen	12
2.3	Wärmeerzeugung in Stößen	14
2.4	Viskose Fluide	15
2.4.1	Grundlagen	15
2.4.2	Modellierung	16
2.4.3	Viskosität am Gebietsrand	17
2.5	Weitere physikalische Effekte	17
2.5.1	Externe Kräfte	17
2.5.2	Ränder	18
2.5.3	Wärmeleitung	18
2.6	Diskretisierungen	18
2.6.1	Diskretisierung der Integrale	19
2.6.2	Zeitdiskretisierungen	20
2.7	Eigenschaften	21
2.7.1	Erhaltungseigenschaften	21
2.7.2	Konvergenzaussagen	23
2.7.3	Bemerkungen zur Approximation	24
2.8	Verwendete Beispiele	26
2.8.1	Stoßrohre	26
2.8.2	Gasringe im Zentralpotential	28

3	Neu- und Wiederaufsetzen der Rechnung im uniformen Fall	33
3.1	Motivation und Überblick	33
3.2	Das Schema	34
3.2.1	Auswahl der Approximationsgrößen	35
3.2.2	Regularisierung der globalen Größen	35
3.2.3	Tensorprodukt-B-Splines auf uniformen Gittern	35
3.3	Verwendete Teilchen	36
3.3.1	A priori unzulässige Teilchen	36
3.3.2	A posteriori nichtverwendete Teilchen	37
3.4	Die Approximation der Massendichte	37
3.4.1	Interpolation	37
3.4.2	Globale Approximation	42
3.4.3	Quasiinterpolation für B-Splines	43
3.5	Die Approximation der Entropiedichte	49
3.6	Die Approximation der Geschwindigkeit	49
3.6.1	Der Ansatz	49
3.6.2	Reduktion des Problems und Eigenschaften	50
3.6.3	Geschwindigkeitsapproximation mit Teilchen	53
3.6.4	Eine Abschätzung für symmetrisch gewichtete Normen	54
3.7	Beispielrechnung: Gasringe	57
3.7.1	Keplersche Bewegung	58
3.7.2	Der viskose Gasring	61
4	Regularisierungen	63
4.1	Motivation und Überblick	63
4.1.1	Generelle Ansätze	64
4.2	Die Problemfamilie	65
4.2.1	Der Rahmen	65
4.2.2	Ein Modellproblem	67
4.2.3	Existenz und Eindeutigkeit	68
4.2.4	Charakterisierung der Minimumstelle	69
4.2.5	Die Totale Variation als Strafterm	70

4.3	Das kontinuierliche Problem mit TV_β -Strafterm	71
4.3.1	Definition	71
4.3.2	Existenz und Eindeutigkeit	72
4.3.3	Stabilität	73
4.3.4	Die Differentialgleichung	76
4.4	Diskretisierung des Minimum-Problems	77
4.4.1	Minimum-Problem über endlichdimensionalen Teilräumen	77
4.4.2	Eine Diskretisierung	77
4.4.3	Existenz und Eindeutigkeit	79
4.4.4	Stabilität	79
4.5	Lösung des diskretisierten Minimum-Problems	80
4.5.1	Möglichkeiten	80
4.5.2	Lösung mit FP	81
4.5.3	Konvergenz von FP	82
4.5.4	Implementierung von FP	83
4.6	Anwendung auf die Restart-Situation	83
4.6.1	Die regularisierten Größen	84
4.6.2	Gebiet und Randbedingungen	85
4.7	Beispielrechnung: Stoßrohre	85
5	Adaptive Erweiterungen des Restart-Schemas	87
5.1	Einführung	87
5.1.1	Motivation	87
5.1.2	Startsituation mit Teilchen auf hierarchischen Gittern . .	88
5.2	Ein einfaches zweistufiges Verfahren für Dichten	90
5.2.1	Schema des zweistufigen Verfahrens	90
5.2.2	Verfeinerungskriterium für Dichten	91
5.2.3	Bestimmung der Koeffizienten der B-Splines	92
5.2.4	Positivität der Koeffizienten der B-Splines	92
5.2.5	Behandlung des Gebietsrandes	93
5.2.6	Approximationsgüte	93
5.3	Strategie für mehrere Stufenübergänge	94

5.3.1	Gürtelbedingungen	94
5.3.2	Schließbedingungen	97
5.4	Das konkrete Verfahren für Dichten	104
5.4.1	Schemadarstellung	104
5.4.2	Bemerkungen zur Implementierung	104
5.4.3	Approximation von Massen- und Entropiedichte	107
5.5	Hinzunahme der Geschwindigkeitsapproximation	107
5.5.1	Verfeinerungskriterium	107
5.5.2	Werteberechnung	108
5.5.3	Bemerkungen zu den Konvergenzresultaten in Abschnitt 3.6	110
5.6	Beispielrechnung: Stoßrohr	111
5.7	Ein verwandtes Schema von Preußer und Rumpf	114
5.7.1	Die verwendeten Gleichungen	114
5.7.2	Der Lösungsansatz	115
5.7.3	Adaptive Gitter mit Fehlerindikatoren	115
5.7.4	Bemerkungen zur Übertragbarkeit auf die Restart- Berechnung	116
A	Bezeichnungen	119
A.1	Generelle Schreibweisen	119
A.2	Allgemeine Symbole	120
A.3	Referenzsituation der Teilchen	120
A.4	Größen der Teilchen	120
A.5	Globale Größen	120
A.5.1	Felder	121
A.5.2	Energien	121
A.5.3	Koeffizienten	121
A.6	Symbole bei der Approximation globaler Felder mit Teilchen	122
A.7	Bezeichnungen bei der Regularisierung	122
A.8	Symbole für die mehrstufige Approximation	123

Kapitel 1

Einleitung

In der Strömungsmechanik beschäftigt man sich mit der Bewegung von Gasen und Flüssigkeiten, den sogenannten Fluiden. Die Analyse von Strömungen ist heutzutage aus einer Vielzahl von technischen Entwicklungsprozessen und wissenschaftlichen Forschungen nicht mehr wegzudenken. Die Konstruktion von Flugzeugen, Autos, Turbinen, die Auslegung von Belüftungsanlagen sowie Vorhersagen von Klima und Umweltverschmutzung benötigen Aussagen über die zeitliche Entwicklung von Strömungen. Aber auch für die astrophysikalische Grundlagenforschung sind Strömungssimulationen, beispielsweise bei der Sternentstehung, von erheblichem Interesse.

Neben experimentellen Untersuchungen sind theoretische Überlegungen zur Auswahl der relevanten Beschreibungsgrößen und der mathematischen Beschreibung ihrer Zeitentwicklung eine wichtige Aufgabe der klassischen Strömungsmechanik. Den Ausgangspunkt dazu bilden physikalische Grundprinzipien und Materialannahmen. Wählt man die nach Euler benannte ortsfeste Betrachtungsweise, kann man aus ihnen Bilanzgleichungen ableiten. Für glatte Strömungen ergeben sich daraus, je nachdem ob Viskosität eine Rolle spielt, die Euler- oder die Navier-Stokes-Gleichungen als Formulierung mit Differentialgleichungen. Für einige hochsymmetrische oder stark vereinfachte Beispiele lassen sich diese Gleichungen explizit lösen. Praxisrelevante Fragestellungen über die zeitliche Entwicklung gegebener Konfigurationen sind für ein explizites Lösen jedoch fast immer zu kompliziert. Dort, wo Experimente zu aufwendig oder sogar unmöglich sind, müssen numerische Methoden zum Einsatz kommen. Anstatt die Gleichungen selbst zu lösen, werden endlichdimensionale Ersatzprobleme entworfen und gelöst. Obwohl schon vor der Verwendung von Computern auf diesem Gebiet gearbeitet wurde, wie im historischen Überblick in [GDN99] dargestellt wird, haben solche Methoden erst mit zunehmender Verfügbarkeit von elektronischen Rechenmaschinen Popularität erlangt. Computer sind hier nicht mehr wegzudenken und dieses Arbeitsgebiet wird mittlerweile im allgemeinen mit *Computational Fluid Dynamics*, kurz CFD, bezeichnet. Oft werden diese Bilanz- oder Differentialgleichungen direkt angegangen, wie dies bei Finite-Volumen-, Finite-Differenzen- oder Finite-Element-Verfahren der Fall ist. Oder man wählt statt der ortsfesten die mitbewegte, Lagrangesche Betrachtungsweise.

se, um zu einer Diskretisierung zu kommen. Dabei wird die Bewegung der Masse verfolgt.

Ein sehr populäres Verfahren dieser Art ist *Smoothed Particle Hydrodynamics*, vgl. z.B. [Mon92], das vor allem in der Astrophysik große Verbreitung findet. Aber auch Ansätze wie beispielsweise die in [HSS00] untersuchten Finite-Volumen-Teilchenmethoden beruhen auf der Sichtweise von Teilchen, die vom Fluß mitbewegt werden, um die Strömung zu diskretisieren. Andere Teilchenmethoden orientieren sich mehr am Zugang der kinetischen Gastheorie. Allerdings handelt es sich bei den betrachteten Situationen meist um stark verdünnte Gase, vgl. [RW96].

Ein neues Lagrangesches Verfahren zur Simulation kompressibler Fluide ist die Methode der Finiten Massen, die auf Arbeiten von Yserentant beruht und von Gauger, Leinen und Yserentant in [GLY00] vorgestellt wurde. Die in der Strömung vorhandene Masse wird in kleine, sich überlappende Pakete zerlegt, die sich unabhängig von einander bewegen und linear deformieren können. Deren innere Masseverteilung wird durch eine vorgegebene Formfunktion festgelegt. Diese Pakete modellieren nicht nur das mechanische System, sondern auch die thermodynamischen Zusammenhänge. Die Evolutionsgleichungen ergeben sich aus inneren und äußeren Kräften und unter Berücksichtigung der Gesetze der Thermodynamik. Die Kräfte gehen nicht auf die Euler- oder Navier-Stokes-Gleichungen, sondern auf die physikalischen Grundprinzipien wie Erhaltung von Masse, Impuls und Energie zurück. Bei der Konstruktion der Methode war es wesentlich, diskrete Erhaltungseigenschaften zu garantieren. Obwohl diese Methode rein Lagrangeschen Charakter hat, ist sie in mancherlei Hinsicht klassischen Diskretisierungen wie Finite-Element-Verfahren ähnlicher als vielen Teilchenverfahren, die im Unterschied zur betrachteten Methode diskrete Maße statt differenzierbaren Funktionen als Approximierende ergeben.

Einerseits hat die Methode der Finiten Massen aufgrund der linearen Deformation der Teilchen ein großes Potential, um genaue Approximationen von Flüssen zu liefern, andererseits führt dieser Ansatz möglicherweise zu extremen Verformungen der Massenpakete, beispielsweise zu langen spitzen Nadeln. Bei großer Länge sind diese oft nicht mehr geeignet, gekrümmten Flüssen zu folgen. Außerdem werden mit solchen Teilchen auch Probleme mit der algorithmischen Effizienz des Verfahrens aufgeworfen.

In dieser Arbeit werden Ansätze präsentiert, eine Rechnung in einer solchen Situation weiterzuführen. Neue, undeformierte Teilchen werden verwendet, um den aktuellen physikalischen Zustand zu approximieren. Mit Hilfe dieser neu-aufgesetzten Rechnung kann die Simulation dann fortgesetzt werden. Durch diesen auch als *Restart* bezeichneten Prozeß ergibt sich eine Erweiterung des Anwendungsbereiches der Methode der Finiten Massen.

Die Berechnung des physikalischen Zustandes aus gegebenen Teilchen in beliebigen Raumpunkten ist integraler Bestandteil der Methode der Finiten Massen. Um aus solchen globalen Größen nun eine neue Teilchenverteilung zu gewinnen, beschränken wir uns zunächst auf Teilchen, die auf einem regelmäßigen Würfelgitter ausgerichtet sind und betrachten als Formfunktionen Tensorprodukt-B-

Splines. Gerade für additive Größen wie die Massendichte, die sich als Superposition der Beiträge der einzelnen Teilchen ergibt, erhält man durch Interpolation oder durch die sogenannte Quasiinterpolation sehr gute Approximationen. Für die Geschwindigkeit der Teilchen gehen wir anders vor. Die Parameter der Teilchen lassen auf dem Teilchenträger die Vorgabe eines linearen Polynoms als Geschwindigkeit zu. Diese wird für jedes Teilchen durch einen Least-Squares-Ansatz, der den Abstand zum vorgegebenen globalen Geschwindigkeitsfeld auf einem feinen Gitter auf dem Teilchenträger minimiert, bestimmt. Das beschriebene Vorgehen läßt sich auch auf Teilchen unterschiedlicher Größe verallgemeinern, wobei eine Hierarchie von regelmäßigen Gittern Verwendung findet. Dadurch kann der Speicherbedarf und der Rechenaufwand deutlich reduziert werden. Oft ist es allerdings notwendig, die globalen Felder zu glätten, bevor sie zur Bestimmung der Parameter der neuen Teilchen dienen. Dabei ist wichtig, daß Sprünge erhalten bleiben, kleine Oszillationen aber gedämpft werden. Verfahren, die im Bereich der Bilddatenrekonstruktion große Popularität genießen, liefern hier die Grundlage.

Der Restart ist im wesentlichen eine Rückprojektion gegebener Flußgrößen auf eine regelmäßig ausgerichtete Diskretisierung. Er entspricht insofern dem üblichen Vorgehen bei Finite-Volumen-Verfahren, bei dem in jedem Zeitschritt nach einer Evolution der Größen eine Projektion auf Zellen stattfindet. Da bei der Methode der Finiten Massen ein solches Neuaufsetzen aber im Vergleich zu den Finite-Volumen-Verfahren sehr selten zu geschehen hat, ist die dadurch in das Verfahren eingebrachte Diffusion auch wesentlich geringer.

Im nächsten Kapitel wird die Methode der Finiten Massen, die die Basis unserer Strömungssimulation bildet, vorgestellt. Danach wird das generelle Vorgehen beim Restart thematisiert. Wir beschränken uns aber zunächst auf uniforme Situationen und auf die Approximation gegebener globaler Felder. In Kapitel 4 wird dargelegt, wie Felder, die aus Teilchendaten gewonnen werden, geeignet geglättet werden können, um sinnvoll als Eingabedaten des beschriebenen Approximationsprozesses dienen zu können. Das abschließende Kapitel 5 gibt ein Schema an, das eine neue Teilchenapproximation mit Teilchen unterschiedlicher Größe zuläßt. Beispielrechnungen werden jeweils am Ende der einzelnen Kapitel präsentiert, um die Verwendbarkeit der vorgestellten Ansätze zu demonstrieren.

Kapitel 2

Einführung in die Methode der Finiten Massen

Die Methode der Finiten Massen basiert auf den Arbeiten [Ys97], [Ys99a] und [Ys99b] von Yserentant und wurde in [GLY00] in der Form präsentiert, die hier dargestellt wird. Während in den früheren Arbeiten die Teilchen in ihrer Verformung stark eingeschränkt waren — zuerst war keinerlei Verformung zugelassen, später nur gleichmäßige Größenänderungen — ist bei der Methode der Finiten Massen eine lineare Deformation der Teilchen erlaubt. Erst in der Arbeit [GLY00] sind genaue Angaben zur Implementierung enthalten, während die anderen Quellen die verwendeten Kraftterme motivieren und das Konvergenzverhalten in der Form von Kompaktheitsresultaten beschreiben. Aber auch die neueren Arbeiten [Ys00a] und [Ys00b] von Yserentant beleuchten Aspekte dieses Ansatzes. In der vorletzten Quelle ist eine Analyse der Bewegung in äußeren Kraft- und Geschwindigkeitsfeldern gegeben, in der letzten wird für ein vereinfachtes Teilchenmodell Schallausbreitung näher untersucht.

Es folgt nun eine Beschreibung dieser Methode, bei der die wesentlichen Teile hergeleitet oder motiviert werden, und eine Übersicht ihrer wichtigsten Eigenschaften. Grundlagen zur Kontinuumsmechanik und zur Fluidodynamik findet man in den Standardwerken von Courant und Friedrichs [CF48], von Chorin und Marsden [CM93] und von Landau und Lifschitz [LL91].

2.1 Das Konzept sich überlappender Massenpakete

2.1.1 Ein Teilchen

Definition und Formfunktion

Teilchen sind, grob gesprochen, Massenpakete endlicher Ausdehnung, die sich gegenseitig durchdringen können. Sie können sich im Raum bewegen und linear

deformieren. Das heißt, für das Teilchen mit der Nummer n bewegen sich die Massenpunkte entlang der Trajektorien

$$t \mapsto \mathbf{q}_n(t) + \mathbf{H}_n(t)\mathbf{y} . \quad (2.1)$$

Dabei muß zu allen Zeiten die Orientierung der Teilchen erhalten bleiben, also $\det \mathbf{H}_n(t) > 0$ gelten. Die folgende Konstruktion ist derart, daß $\mathbf{q}_n(t)$ die Position des Schwerpunktes zur Zeit t angibt. $\mathbf{H}_n(t)$ ist die lineare Verformung des Teilchens, die sowohl Drehung, Scherung als auch Dehnung beinhaltet.

Man kann auch aus der Ortskoordinate \mathbf{x} zur Zeit t auf die Körperkoordinaten dieses Teilchens zurückgehen mit

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}_n(t)^{-1}[\mathbf{x} - \mathbf{q}_n(t)] . \quad (2.2)$$

Wir machen damit für die lokale Massendichte des Teilchens n zur Zeit t den Ansatz

$$\mathbf{x} \mapsto m_n [\det \mathbf{H}_n(t)]^{-1} \psi \left(\mathbf{H}_n(t)^{-1}[\mathbf{x} - \mathbf{q}_n(t)] \right) \quad (2.3)$$

mit einer Konstanten m_n . Dabei ist, bei gegebener Raumdimension d , die Formfunktion $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ein elementarer Bestandteil dieser Methode. Sie beschreibt die interne Massenverteilung der Pakete, in die das Fluid aufgeteilt wurde. Wir verlangen ausreichende Differenzierbarkeit für die nachfolgend hergeleiteten Kräfteberechnungen, Nichtnegativität als natürliche Forderung für Massendichten und einen kompakten Träger für Approximationsaussagen und auch aus implementatorischen Gesichtspunkten. Um die Kraftterme in einer prägnanten Form darstellen zu können, benötigen wir die Normierungsbedingungen

$$\int \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = 1 \quad , \quad (2.4)$$

$$\int \psi(\mathbf{y}) \mathbf{y} \, d\mathbf{y} = \mathbf{0} \quad , \quad (2.5)$$

$$\int \psi(\mathbf{y}) y_k y_l \, d\mathbf{y} = J \delta_{kl} \quad (2.6)$$

mit einem positiven skalaren Wert J . Damit ist die Referenzmasse 1, der Referenzschwerpunkt liegt im Ursprung und das Referenzteilchen hat identische Hauptträgheitsmomente.

Lemma 2.1 (Teilchenmasse und -schwerpunkt)

Unter den obigen Voraussetzungen an die Formfunktion ψ hat das in (2.3) definierte Teilchen die Masse m_n und den Schwerpunkt \mathbf{q}_n .

Beweis: Mit der kontinuumsmechanischen Definition der Masse eines Körpers und (2.4) gilt

$$\begin{aligned} & \int m_n [\det \mathbf{H}_n(t)]^{-1} \psi \left(\mathbf{H}_n(t)^{-1}[\mathbf{x} - \mathbf{q}_n(t)] \right) \, d\mathbf{x} \\ &= m_n \int [\det \mathbf{H}_n(t)]^{-1} \psi(\mathbf{y}) |\det \mathbf{H}_n(t)| \, d\mathbf{y} = m_n . \end{aligned}$$

Damit gilt für den Schwerpunkt

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{m_n} \int m_n [\det \mathbf{H}_n(t)]^{-1} \psi \left(\mathbf{H}_n(t)^{-1} [\mathbf{x} - \mathbf{q}_n(t)] \right) \mathbf{x} \, d\mathbf{x} \\
&= \int [\det \mathbf{H}_n(t)]^{-1} \psi(\mathbf{y}) [\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n(t)\mathbf{y}] |\det \mathbf{H}_n(t)| \, d\mathbf{y} \\
&= \mathbf{q}_n \int \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} + \mathbf{H}_n(t) \int \psi(\mathbf{y}) \mathbf{y} \, d\mathbf{y} = \mathbf{q}_n \, ,
\end{aligned}$$

wenn wir die Gleichungen (2.4) und (2.5) benutzen. \square

Bemerkung: Für die Form der Teilchen sind die Bedingungen (2.4), (2.5) und (2.6) keine eigentliche Einschränkung. Eine beliebige Formfunktion $\tilde{\psi}$ erfüllt nach Skalierung mit $[\int \tilde{\psi}(\mathbf{z}) \, d\mathbf{z}]^{-1}$ die Massenbedingung (2.4). Ist sie für ein $\tilde{\psi}$ erfüllt, so ist durch eine Verschiebung um $(-\int \tilde{\psi}(\mathbf{z})\mathbf{z} \, d\mathbf{z})$ auch die Schwerpunktsbedingung (2.5) gegeben.

Auch die Bedingung (2.6) stellt keine eigentliche Einschränkung dar. Erfülle nun $\tilde{\psi}$ bereits (2.4) und (2.5). Die Matrix $\tilde{\mathbf{J}} = \int \tilde{\psi}(\mathbf{y})\mathbf{y}\mathbf{y}^T \, d\mathbf{y}$ ist symmetrisch, also diagonalisierbar in der Form $\tilde{\mathbf{J}} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T$ mit einer orthogonalen Matrix \mathbf{Q} und einer diagonalen Matrix \mathbf{D} . \mathbf{D} hat lediglich positive Einträge und \mathbf{Q} ist o.B.d.A. positiv orientiert. Wählen wir nun $\mathbf{A} := \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{Q}^T$, so hat \mathbf{A} eine positive Determinante und mit $\psi(\mathbf{y}) := [\det \mathbf{A}]^{-1}\tilde{\psi}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{y})$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
\mathbf{J} &= \int \psi(\mathbf{y})\mathbf{y}\mathbf{y}^T \, d\mathbf{y} = \int \psi(\mathbf{A}\mathbf{z})[\mathbf{A}\mathbf{z}][\mathbf{A}\mathbf{z}]^T |\det \mathbf{A}| \, d\mathbf{z} = \mathbf{A} \int \tilde{\psi}(\mathbf{z})\mathbf{z}\mathbf{z}^T \, d\mathbf{z} \mathbf{A}^T \\
&= \mathbf{A}\tilde{\mathbf{J}}\mathbf{A}^T = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}[\mathbf{D}^{-1/2}]^T = \mathbf{Id} \, .
\end{aligned}$$

Es ist leicht zu sehen, daß dieses ψ auch die beiden anderen Normierungsbedingungen erfüllt. Statt $\mathbf{J} = \mathbf{Id}$ ist auch jedes andere $J\mathbf{Id}$ mit $J \in \mathbb{R}^+$ erlaubt. Dieser Freiheitsgrad kann nun dazu benutzt werden, das Teilchen umzuskalieren, um die Größe des Referenzträgers vorzugeben.

Beispiel einer Formfunktion

Prinzipiell sind für die Wahl von ψ sehr viele Möglichkeiten denkbar. Rotations-symmetrische Funktionen sind sicher möglich, wir stellen hier aber Tensorprodukte von B-Splines vor. Sie sind je nach Ordnung entsprechend glatt und haben, ausgerichtet auf regelmäßigen Gittern, hervorragende Approximationseigenschaften, vgl. [dBo90]. Damit sind sie sehr geeignet, Anfangsapproximationen bereitzustellen. Lediglich Ränder und die Nichtnegativität der Teilchenmassen können in gewissen Bereichen zur Reduktion der von Splines bekannten hohen Approximationsordnungen führen, da sie die betrachtete Funktionsmenge einschränken. Ein anderer, für uns wichtiger Aspekt dieser Formfunktionen ist, daß sie die Möglichkeit der Unterteilung in gleichartige Funktionen der halben Ausdehnung bieten. Damit ist eine Grundlage für adaptiv erzeugte Anfangsverteilungen gegeben. Darauf wird in Kapitel 5 näher eingegangen.

Wenden wir uns nun den Faktoren der Tensorprodukte zu. Zunächst betrachten wir eindimensionale B-Splines auf einem Gitter der Maschenweite 1, deren

Superposition die Funktion $x \mapsto 1$ ergibt. Dies ist gleichbedeutend mit der Forderung, daß die Integrale über diese Splines jeweils 1 ergeben. Wir folgen beispielsweise [Wer92a, S.178ff] und definieren mit charakteristischen Funktionen auf Intervallen rekursiv

$$\begin{aligned} B_{i,1} &:= \chi_{[i,i+1]}, \\ B_{i,k+1} &:= \chi_{[i,i+k]} \frac{x-i}{k} B_{i,k} + \chi_{[i+1,i+1+k]} \frac{(i+1+k)-x}{k} B_{i+1,k}. \end{aligned}$$

Dann ist der regelmäßige B-Spline der Ordnung s auf dem Intervall $[0, s]$ durch $B_{0,s}$ gegeben. Oft werden verschobene B-Splines B_s , deren Mittelpunkt auf 0 liegt, als Referenz betrachtet. Die wichtigsten Fälle in diesem Zusammenhang sind

$$B_1(x) = \chi_{[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]} \quad (2.7)$$

$$B_2(x) = \begin{cases} 1 - |x|, & \text{für } |x| \leq 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.8)$$

$$B_3(x) = \begin{cases} \frac{3}{4} - |x|^2, & \text{für } |x| \leq \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}|x|^2 - \frac{3}{2}|x| + \frac{9}{8}, & \text{für } \frac{1}{2} < |x| \leq \frac{3}{2} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.9)$$

$$B_4(x) = \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{1}{2}|x|^2(2 - |x|), & \text{für } |x| \leq 1 \\ \frac{1}{6}(2 - |x|)^3, & \text{für } 1 < |x| \leq 2 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.10)$$

In [GLY00] wird eine Trägernormierung auf $[-1, 1]$ vorausgesetzt, die wir leicht mit

$$B_s^{(GLY)} : x \mapsto s B_s\left(\frac{x}{s}\right)$$

erreichen können, die aber in den folgenden Darstellungen nicht weiter verwendet wird.

Tensorprodukte mit solchen Faktoren erfüllen die Bedingungen (2.4), (2.5) und (2.6). Wenn wir im folgenden von B-Splines reden, schließen wir den Tensorprodukt-Fall mit ein. Aus Gründen der Glattheit und der Lokalität der Träger sind vor allem B_3 und B_4 interessant. Aufgrund der Grade der beteiligten Polynome bezeichnen wir sie als quadratische und kubische B-Splines.

Um nun einen Eindruck einer standardmäßig verwendeten Formfunktion zu erhalten, wenden wir uns Abbildung 2.1 zu. Hier ist exemplarisch ein zweidimensionaler kubischer B-Spline zu sehen. Der untere Bildabschnitt zeigt die Funktionswerte aufgetragen über dem Referenzgebiet. Hierunter kann man sich beispielsweise die diesem Teilchen zugehörige Massendichte vorstellen. Das darüber eingezeichnete grobe Gitter gibt ausschnittsweise die Lage der Mittelpunkte derjenigen gleichartigen Splines an, die zu einer Partition der Eins notwendig sind

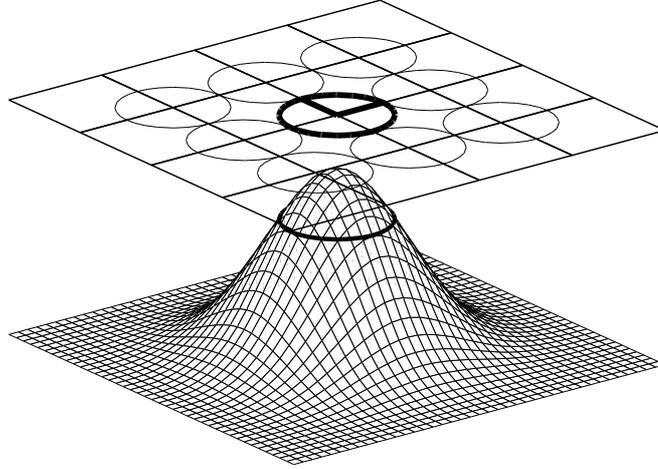


Abbildung 2.1: Darstellung eines zweidimensionalen kubischen B-Splines mit eingezeichneter Höhenlinie für die projizierte Darstellung.

und die den entsprechenden Splineraum aufspannen. Die eingezeichnete Höhenlinie ist gerade so gewählt, daß in der Projektion auf das obige Gitter in dieser Standardsituation die entsprechenden Linien jedes Teilchens die seiner Nachbarn berührt. Es sei in diesem Zusammenhang erwähnt, daß die Höhenlinien nicht zu geringer Werte fast Kreise sind. Im Innern dieses zentralen Bereiches liegt etwa ein Drittel der Gesamtmasse des Teilchens. In späteren Grafiken zur Visualisierung der Teilchenbewegungen in zweidimensionalen Rechnungen werden wir nur diese Höhenlinien und darin kleine lokale Koordinatenachsen ausgeben, um die gegenseitigen Lageveränderungen und die Verformungen und Rotationen zu verdeutlichen.

Wichtige Größen der Teilchen

Im folgenden verwenden wir die Abkürzung

$$\psi_n = [\det \mathbf{H}_n]^{-1} \psi(\mathbf{H}_n^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_n)) = [\det \mathbf{H}_n]^{-1} \psi(\mathbf{y})$$

für die im Raum transformierte, aber nicht mit der Masse skalierte Formfunktion. Wir benötigen im weiteren ihre Ableitungen.

Lemma 2.2 (Ableitungen der Teilchenformfunktion)

Es gilt für den Gradienten, also die Ableitung nach \mathbf{x} , der Zusammenhang

$$\nabla \psi_n = [\det \mathbf{H}_n]^{-1} \mathbf{H}_n^{-T} \nabla \psi \quad . \quad (2.11)$$

Damit lassen sich die Ableitungen der Teilchen nach den Parametern \mathbf{q}_n und

\mathbf{H}_n angeben durch

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} \psi_n = -\nabla \psi_n , \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{H}_n} \psi_n = -[\nabla \psi_n][\mathbf{y}]^T - \psi_n \mathbf{H}_n^{-T} . \quad (2.13)$$

zum Beweis: Für diese Rechnung sei auf [GLY00, Abschnitt 2] verwiesen.

Die Geschwindigkeit eines Körperkoordinaten-Punktes \mathbf{y} bezüglich der Bewegung des Teilchens n ist durch

$$t \mapsto \mathbf{q}'_n(t) + \mathbf{H}'_n(t)\mathbf{y}$$

gegeben. Damit ist

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{x}, t) := \mathbf{q}'_n(t) + \mathbf{H}'_n(t)\mathbf{H}_n(t)^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_n(t))$$

das zugehörige Geschwindigkeitsfeld bezüglich der Ortskoordinaten.

2.1.2 Massendichte und Geschwindigkeit

Die globale Massendichte wird als Überlagerung der lokalen Massendichten der Teilchen angesetzt, also

$$\rho(\mathbf{x}, t) := \sum_n m_n \psi_n(\mathbf{x}, t) . \quad (2.14)$$

Zunächst ist es nicht direkt möglich, Ortspunkten Geschwindigkeiten zuzuweisen, denn die Geschwindigkeiten sich überlagernder Teilchen sind unterschiedlich. Deshalb definieren wir zuerst den Massenfluß durch Superposition

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) := \sum_n m_n \psi_n(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}_n(\mathbf{x}, t) .$$

Definieren wir nun die globale Geschwindigkeit \mathbf{v} über den Massenfluß durch

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) ,$$

so erhalten wir mit der Definition der lokalen Masseanteile der Teilchen

$$\chi_n(\mathbf{x}, t) := \frac{m_n \psi_n(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}$$

auf dem masserfüllten Gebiet dort die Darstellung

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \sum_n \chi_n(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}_n(\mathbf{x}, t)$$

als Konvexkombination der einzelnen Teilchengeschwindigkeiten. Dieses Gebiet ist die Vereinigung der inneren Gebiete der einzelnen Teilchenträger. Da die lokalen Massenanteile in Kraftintegralen auftreten werden, ist es sinnvoll, sie und ihre Gradienten durch 0 auf den gesamten Raum fortzusetzen.

2.1.3 Thermodynamische Größen

Um nun eine vollständige Beschreibung des Fluides zu erhalten, brauchen wir neben der Dichte eine zweite thermodynamische Größe wie beispielsweise die Temperatur. In unserem Kontext ist es sinnvoll, die Entropiedichte s zu verwenden. Die Motivation für dieses Vorgehen ist die Tatsache, daß für adiabatische Strömungen, also solche, die zeitreversible Prozesse beschreiben, die Entropie eine Erhaltungsgröße ist. In diesem Fall werden die spezifischen Entropien im Fluß mitbewegt, nicht aber zeitlich verändert. In allgemeinen Strömungen müssen zeitliche Veränderungen zugelassen werden, und so machen wir den Superpositionsansatz

$$s(\mathbf{x}, t) = \sum_n S_n(t) m_n \psi_n(\mathbf{x}, t) .$$

Dieser Ansatz bedeutet, daß ein Teilchen n zu einem Zeitpunkt t die konstante spezifische Entropie $S_n(t)$ besitzt.

Alle thermodynamischen Größen sind nun als Funktionen von ρ und s gegeben. Im weiteren von Bedeutung sind die Dichte der inneren Energie ε , der Druck π und die Temperatur θ . Sie sind durch die Gibbssche Fundamentalrelation verknüpft, die in dieser Situation auf die Zusammenhänge

$$\theta = \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} ,$$

$$\pi = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \rho + \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} s - \varepsilon$$

führt. Für $\varepsilon(\rho, s)$ verlangen wir zweimalige stetige Differenzierbarkeit, Positivität und Positivität der partiellen Ableitungen nach der Entropie. Außerdem soll ε/ρ und die Ableitungen erster Ordnung an der Stelle $(\rho, s) = (0, 0)$ durch den Wert 0 fortsetzbar sein, so daß die Funktionen auf Sektoren $|s| < S^* \rho$ für beliebige $S^* > 0$ stetig sind.

Barytropisch ideale Gase

Ein einfaches und wichtiges Beispiel sind ideale Gase. Für sie gilt zwischen Druck, Temperatur und Dichte der einfache Zusammenhang

$$\pi \sim \theta \rho .$$

Die spezifische innere Energie als Funktion von Temperatur und Dichte ist dann unabhängig von der Dichte. Eine wichtige Klasse sind barytropisch ideale Gase, für die die spezifische innere Energie linear von der Temperatur abhängt. Durch eine Reihe von Überlegungen, vgl. z.B. [Hut95] und [LeV92], ist es möglich, hier eine Gasgleichung anzugeben, die diese Eigenschaften hat. Der Proportionalitätsfaktor von Änderungen der spezifischen inneren Energie und der Temperatur c_v heißt spezifische Wärme bei konstantem Volumen. Entsprechend ist

die spezifische Wärme bei konstantem Druck c_p auch unabhängig vom Zustand des Gases. Der Quotient $\gamma = c_p/c_v$ ist der für das Gasgesetz wichtige sogenannte Adiabatenexponent. Diese Größen sind experimentell leicht zugänglich, aber auch aus Überlegungen der kinetischen Gastheorie ergibt sich der Wert von γ . Wenn f die Anzahl der molekularen Freiheitsgrade ist, so gilt

$$\gamma = \frac{f + 2}{f} .$$

Für einatomige Gase, beispielsweise Helium, ergibt sich durch die translatorischen Freiheitsgrade der Wert $\gamma = 5/3$. Für zweiatomige Gase, beispielsweise Wasserstoff oder Sauerstoff, erhalten wir wegen der zusätzlichen rotatorischen Freiheiten den Wert $f = 5$, also $\gamma = 1,4$, wenn der mögliche oszillatorische Freiheitsgrad noch eingefroren ist. Auch für das Gasgemisch Luft können wir in weiten Bereichen um die Normalbedingungen $\gamma = 1,4$ verwenden.

Für diese Gase gilt das Gasgesetz

$$\varepsilon(\rho, s) := \frac{\pi_0}{\gamma - 1} \left[\frac{\rho}{\rho_0} \right]^\gamma \exp\left(\frac{s}{c_v \rho}\right) ,$$

wenn zur Normierung der Entropiedichte auf den Wert 0 der Zustand $\rho = \rho_0$ und $\pi = \pi_0$ dient. Temperatur und Druck sind dann durch

$$\theta = \frac{\pi_0}{c_v[\gamma - 1]\rho_0} \left[\frac{\rho}{\rho_0} \right]^{\gamma-1} \exp\left(\frac{s}{c_v \rho}\right) , \quad \pi = \pi_0 \left[\frac{\rho}{\rho_0} \right]^\gamma \exp\left(\frac{s}{c_v \rho}\right)$$

gegeben. Umgekehrt kann die Entropie aus Dichte und Druck mit

$$s = c_v \rho \left[\ln \frac{\pi}{\pi_0} - \gamma \ln \frac{\rho}{\rho_0} \right]$$

berechnet werden.

2.2 Die Bewegungsgleichungen für adiabatische Strömungen

In adiabatischen, also zeitreversiblen Strömungen bleiben spezifische Entropien konstant. Um für diesen Fall Bewegungsgleichungen zu erhalten, verwenden wir den klassischen Lagrangeschen Formalismus. Dazu benötigen wir die kinetische und die potentielle Energie unseres Systems. Zunächst ist die kinetische Energie des Teilchens n durch

$$E_n(t) := \int m_n \psi_n(\mathbf{x}, t) |\mathbf{v}_n(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$$

gegeben und hat die geschlossene Darstellung

$$E_n(t) = \frac{1}{2} m_n |\mathbf{q}'_n(t)|^2 + \frac{1}{2} m_n J |\mathbf{H}'_i(t)|^2 .$$

Damit ergibt sich die gesamte Bewegungsenergie des Systems als Summe

$$E(t) := \sum_n E_n(t) .$$

Als potentielle Energie ist in unserem System die innere Energie vorhanden. Ihre Dichte ist bereits definiert und als Funktion von Massendichte und Entropiedichte eingeführt. Also erhalten wir die innere Energie durch

$$V(t) := \int \varepsilon(\rho(\mathbf{x}, t), s(\mathbf{x}, t)) \, d\mathbf{x} .$$

Nun bilden wir das Lagrange-Funktional

$$\mathcal{L} = E - V$$

und erhalten direkt die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}'_n} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_n} = \mathbf{0} \quad , \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{H}'_n} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{H}_n} = \mathbf{0} \quad , \quad (2.15)$$

die in diesem Fall nach einer Normierung mit der Masse die Form

$$\mathbf{q}''_n = \frac{1}{m_n} \left(- \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_n} \right) =: \mathbf{F}_n \quad , \quad (2.16)$$

$$J \mathbf{H}''_n = \frac{1}{m_n} \left(- \frac{\partial V}{\partial \mathbf{H}_n} \right) =: \mathbf{M}_n \quad (2.17)$$

mit

$$\mathbf{F}_n = - \int \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + S_n \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right] \frac{\partial \psi_n}{\partial \mathbf{q}_n} \, d\mathbf{x} \quad , \quad (2.18)$$

$$\mathbf{M}_n = - \int \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + S_n \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right] \frac{\partial \psi_n}{\partial \mathbf{H}_n} \, d\mathbf{x} \quad (2.19)$$

annehmen.

In diese Bewegungsgleichungen gehen die Teilchenmassen nur noch in die Terme ρ und s , also in die Argumente der inneren Energie, ein. Die auftretenden partiellen Ableitungen sind mit Lemma 2.2 leicht zu berechnen.

In [Ys97] wird dargelegt, daß die Kräfte, die auf eine Gruppe von Teilchen wirken, als Oberflächenkraft verstanden werden können. Gerade im Fall konstanter spezifischer Entropie lassen sich die Kraftterme im Sinne von Abschnitt 2.4.2 direkt als Approximation von Oberflächenintegralen über den Druck interpretieren.

Notwendigkeit zur Ergänzung der Gleichungen

Im bisherigen Modell sind sowohl die Gesamtenergie, vgl. Theorem 2.5, als auch die Gesamtentropie Erhaltungsgrößen und das System ist zeitsymmetrisch.

Auch in allgemeinen reibungsfreien Strömungen ist dies nicht mit der Kontinuumsmechanik zu vereinbaren. Es ist wohlbekannt, daß es Lösungen der Eulergleichung gibt, in denen Stöße auftreten. Die Zeitsymmetrie geht dort verloren und es wird kinetische Energie in Wärme umgewandelt.

Diese Diskrepanz resultiert daraus, daß unterschiedliche Bewegungsenergien in die Modelle eingehen. Während in der Kontinuumsmechanik nur die mittlere Bewegungsenergie

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{x}, t) |\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$$

definiert ist, basiert der verwendete Ansatz auf der Summe der Bewegungsenergien der einzelnen Teilchen und differiert um die Fluktuationsenergie

$$\bar{\bar{E}} := E - \bar{E} = \frac{1}{4} \int \rho \sum_{n, \bar{n}=1}^N \chi_n \chi_{\bar{n}} |\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_{\bar{n}}|^2 d\mathbf{x} .$$

In glatten Flüssen ist $\bar{\bar{E}}$ normalerweise vernachlässigbar, aber in Stößen kann diese Energie doch beachtlich sein. Deshalb benötigen wir ein Konzept, das diese Fluktuationsenergie in echte innere Energie umwandelt.

2.3 Wärmeerzeugung in Stößen

Um die Umwandlung von Fluktuationsenergie in innere Energie zu gewährleisten, wurde in [Ys99b] eine Reibungskraft eingeführt, die in unserer Situation die Gestalt

$$\mathbf{F}_n^{(r)} := - \int R \psi_n [\mathbf{v}_n - \mathbf{v}] d\mathbf{x} \quad (2.20)$$

hat. Die Kraft $\mathbf{F}_n^{(r)}$ weist in Richtung des globalen Geschwindigkeitsfeldes und wird in der Stärke vom Reibungskoeffizienten $R \geq 0$ bestimmt, der zum Beispiel eine Funktion der Dichte sein kann. Damit hat sie die Eigenschaft, daß lokale Geschwindigkeitsunterschiede ausgedämpft werden. Für glatte Flüsse ist sie normalerweise verschwindend gering, kann aber in Stößen dominierende Beiträge liefern. Die entsprechende Deformationskraft

$$\mathbf{M}_n^{(r)} := - \int R \psi_n [\mathbf{v}_n - \mathbf{v}] [\mathbf{H}_n^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_n)]^T d\mathbf{x} \quad (2.21)$$

ist so konstruiert, daß die Energieerhaltung, die in Unterabschnitt 2.7.1 thematisiert wird, garantiert werden kann.

Um nun die Reibungsarbeit in Wärme umzuwandeln, verwenden wir die Terme

$$\theta_n S_n'(t) = \delta Q_n(t) \quad (2.22)$$

mit den Größen

$$\theta_n := \frac{1}{m_n} \frac{\partial V}{\partial S_n},$$

die wegen der Darstellung

$$\theta_n = \int \theta(\rho(\mathbf{x}, t), s(\mathbf{x}, t)) \psi_n(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

die Temperaturmittelwerte der Teilchen sind. Und

$$\delta Q_n^{(r)} = \frac{1}{m_n} \int \chi_n R q d\mathbf{x} \quad (2.23)$$

ist die Wärmeentwicklung des Teilchens n , die auf der Fluktuationsenergiedichte

$$q := \frac{1}{4} \rho \sum_{n, \bar{n}=1}^N \chi_n \chi_{\bar{n}} |\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_{\bar{n}}|^2 \geq 0$$

aufsetzt. Beachtenswert ist, daß mit diesem Ansatz die spezifische Entropie keines Teilchens sinken kann. (2.22) ist für das Teilchenmodell der zweite Hauptsatz der Thermodynamik, der die Energieerhaltung im System gewährleistet.

Geschwindigkeitsdämpfung im Modellproblem

Als Modellproblem dient in [GLY00] ein einzelnes Teilchen im externen Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v} = \mathbf{0}$, das keinen Druck erfährt und einen konstanten Reibungskoeffizienten hat. Die Bewegungsgleichung des Schwerpunktes

$$\mathbf{q}'' = -\frac{R}{2} \mathbf{q}'$$

ist analytisch integrierbar und lautet mit $T := \frac{2}{R}$

$$\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}(t_0) + \left(1 - \exp\left(\frac{t_0 - t}{T}\right)\right) T \mathbf{q}'(t_0) .$$

T hat also die Rolle einer Dämpfungszeit. In der Zeit T wird die Geschwindigkeit um den Faktor e reduziert, und die Endposition dieses Teilchens ist $\mathbf{q}(t_0) + T \mathbf{q}'(t_0)$.

2.4 Viskose Fluide

2.4.1 Grundlagen

In viskosen, also zähen Fluiden kommt eine zusätzliche Kraft hinzu, die durch

$$\int_{\partial W_t} \mathbf{Tn} dA \quad (2.24)$$

auf die Oberflächen mitbewegter Teilvolumina W_t wirkt. Der symmetrische Tensor \mathbf{T} ist der viskose Anteil des Spannungstensors und ist eine Funktion der thermodynamischen Größen, also beispielsweise von Dichte und Temperatur, und der dynamischen Aspekte, also der Geschwindigkeit. Diese letzte Abhängigkeit läßt sich auf eine Abhängigkeit vom symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$$

reduzieren. Für Newtonsche Fluide wird diese Abhängigkeit sogar als linear vorausgesetzt. \mathbf{T} hat dann für die Raumdimension d zwingend die Gestalt

$$\mathbf{T} = 2\eta \left[\mathbf{D} - \frac{1}{d} [\text{spur } \mathbf{D}] \mathbf{Id} \right] + \zeta [\text{spur } \mathbf{D}] \mathbf{Id} .$$

Dabei ist der erste Summand spurfrei und beschreibt Scherkräfte im Fluid, der zweite ist eine Volumenviskosität. Die Koeffizienten η und ζ sind Funktionen der thermodynamischen Größen und sind wegen des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik nichtnegativ.

2.4.2 Modellierung

Um Oberflächenkräfte zu modellieren, wird wegen

$$\int_{\partial W} \mathbf{T} \mathbf{n} \, dA = \int \chi_W \operatorname{div} \mathbf{T} \, d\mathbf{x}$$

zu der charakteristische Funktion χ_W des Teilvolumens W eine Folge von approximierenden Funktionen $(\chi_{W,k})_k$ betrachtet. Diese $\chi_{W,k}$ sind stetig differenzierbar, verschwinden außerhalb von W und konvergieren punktweise gegen χ_W . Damit können wegen

$$\int_{\partial W} \mathbf{T} \mathbf{n} \, dA = - \lim_{k \rightarrow \infty} \int \mathbf{T} \nabla \chi_{W,k} \, d\mathbf{x}$$

die Oberflächenkräfte als Volumenintegrale mit Approximationen von charakteristischen Funktionen in Zusammenhang gebracht werden. Im folgenden benutzen wir eine diskrete Entsprechung. Dazu betrachten wir zu einem Testvolumen W alle Teilchen, deren Träger vollständig darin enthalten sind und bezeichnen die zugehörige Indexmenge mit I . Nun benutzen wir als Teilchenapproximation des Testvolumens

$$\sum_{n \in I} \chi_n(\mathbf{x}, t)$$

und teilen die zugehörige Oberflächenkraftnäherung durch

$$\mathbf{F}_n^{(v)} := - \frac{1}{m_n} \int \mathbf{T} \nabla \chi_n \, d\mathbf{x} \quad (2.25)$$

auf die einzelnen Teilchen auf. Die zugehörigen Momente haben die Form

$$\mathbf{M}_n^{(v)} = -\frac{1}{m_n} \int [\mathbf{T} \nabla \chi_n] [\mathbf{H}_n^{-1} [\mathbf{x} - \mathbf{Q}_n]]^T d\mathbf{x} - \frac{1}{m_n} \int \chi_n \mathbf{T} \mathbf{H}_n^{-1} d\mathbf{x} \quad , \quad (2.26)$$

um die Energieerhaltung zu gewährleisten. Die dabei entstehende Wärme wird gemäß

$$\delta Q_n^{(v)} = \frac{1}{m_n} \int \chi_n \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} d\mathbf{x} \geq 0 \quad (2.27)$$

auf die Teilchen verteilt. Die Nichtnegativität dieser Anteile wird durch die Nichtnegativität der Parameter η und ζ von \mathbf{T} sichergestellt.

2.4.3 Viskosität am Gebietsrand

Die viskose Oberflächenkraft (2.24) wirkt nur an den Randbereichen, die an weitere Masse grenzen, also im Innern des von Masse erfüllten Gebietes. Am Gebietsrand ist sie nicht vorhanden. Für Stücke dieses Randes geht für die zugehörigen Teilchenensmbel I in die entsprechende diskrete, viskose Kraft $\sum_{n \in I} m_n \mathbf{F}_n^{(v)}$ der Faktor $\sum_{n \in I} \nabla \chi_n = 0$ in den Integranden ein. Also ist diese Definition auch am Rand sinnvoll und damit universell verwendbar.

Dennoch gibt es bei mehr als einer Raumdimension dadurch Probleme, daß die Gradienten der einzelnen lokalen Massenanteile $\nabla \chi_n$ Singularitäten am Gebietsrand haben können. Sie brauchen nicht mehr quadratintegabel zu sein. Zunächst scheint dies problematisch, denn mit der Definition von \mathbf{T} ist ersichtlich, daß es Integrale gibt, die $|\nabla \chi_n|^2$ als Faktor enthalten. Glücklicherweise spielt das in unserem Kontext normalerweise deshalb keine Rolle, weil das Abklingverhalten des viskosen Spannungstensors, gesteuert über die Viskositätsparameter η und ζ , dieses Verhalten zumeist kompensiert, wie in [GLY00, Abschnitt 2] präzise ausgeführt ist. Ansonsten ist es möglich, für diese Kräfte eine Regularisierung der Massenanteile vorzunehmen, wie in [Ys97] und [Ys99a] vorgeschlagen wird.

2.5 Weitere physikalische Effekte

2.5.1 Externe Kräfte

Das Hinzunehmen von Potentialkräften bereitet für diesen Ansatz keine Schwierigkeiten. Wir müssen die innere Energie um das entsprechende Potential

$$V^{(e)} := \int U(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

erweitern, vgl. [Ys00a, Abschnitt 4]. Dann erhalten wir im Lagrangeschen Formalismus mit der potentiellen Kraft $\mathbf{f} = -\nabla U$ die zusätzlichen Teilchen-Kräfte

$$\mathbf{F}_n^{(e)} := -\frac{1}{m_n} \frac{\partial V^{(e)}}{\partial \mathbf{q}_n} = \int \mathbf{f}(\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \quad , \quad (2.28)$$

$$\mathbf{M}_n^{(e)} := -\frac{1}{m_n} \frac{\partial V^{(e)}}{\partial \mathbf{H}_n} = \int [\mathbf{f}(\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{y})][\mathbf{y}]^T \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \quad . \quad (2.29)$$

2.5.2 Ränder

Eine Möglichkeit, Teilchen in einem Rechengebiet zu halten, besteht darin, ein Randpotential vorzugeben. Damit sind wir wieder im Fall externer Kräfte aus dem vorigen Unterabschnitt. Der Ansatz in [Ys97] fällt auch in diese Kategorie, wobei dort das Potential als skalierte charakteristische Funktion des Außengebietes gegeben ist.

Eine andere Möglichkeit zur Modellierung von Randbedingungen besteht darin, am Rand zusätzliche Teilchen einzuführen. Jedes Teilchen, das den Rand schneidet, definiert eine Spiegelebene und dazugehörig ein Spiegelteilchen, so daß durch Überlagerung lokal die Gleit- oder Haftbedingungen an dieser Ebene erfüllt sind. Diese Spiegelteilchen dienen nur zur Kräfteberechnung, sie werden nicht durch Kraftgleichungen weiterbewegt.

2.5.3 Wärmeleitung

In [GLY00, Abschnitt 2] wird die Wärmeleitung über die Aufteilung des Wärmeflusses \mathbf{k} auf die Teilchen gemäß ihrer Masseanteile einbezogen, also

$$\delta Q_n^{(h)} := \frac{1}{m_n} \int \mathbf{k} \cdot \nabla \chi_n \, d\mathbf{x} \quad . \quad (2.30)$$

Der Wärmefluß \mathbf{k} ist meist durch das Fouriersche Gesetz

$$\mathbf{k} := \kappa \nabla \theta$$

mit dem Wärmeleitkoeffizienten κ gegeben. Die Singularitätsproblematik der Massenanteile am Rand ist auch hier — wie für die viskosen Kräfte — vorhanden. Mit entsprechenden Abfallbedingungen des Koeffizienten κ kann aber auch hier auf eine Regularisierung verzichtet werden.

2.6 Diskretisierungen

Um die angegebenen Gleichungen einer numerischen Behandlung zugänglich zu machen, sind außer der Aufteilung der Masse in diskrete Pakete weitere Diskretisierungen notwendig. Einerseits ist es nicht möglich, die Integralterme analytisch auszuwerten, andererseits bedürfen die gewöhnlichen Differentialgleichungen einer Diskretisierung.

2.6.1 Diskretisierung der Integrale

Die Diskretisierung der Integrale sollte den Lagrangeschen Charakter des Verfahrens widerspiegeln — das Modell ist invariant gegen Verschiebungen, Drehungen und, was die Teilchengestalt anbelangt, sogar gegen allgemeine lineare Transformationen des Raumes.

Wir verwenden, daß Integrale über Dichten teilchenweise auf die spezifischen Größen zurückgeführt werden können. Diese können jeweils auf der Referenzkonfiguration ausgewertet werden durch

$$\int f \rho \, d\mathbf{x} = \sum_n m_n \int f(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \sum_n m_n \int f(\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \quad . \quad (2.31)$$

Nun ersetzen wir die Integrale durch eine Quadraturformel

$$\int g(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \rightarrow \sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} \alpha_\nu g(\mathbf{a}_\nu) \quad (2.32)$$

mit positiven Gewichten α_ν , um numerisch stabile Quadratur zu gewährleisten, und Stützstellen \mathbf{a}_ν im Träger der Referenzformfunktion ψ , die in diesem Ausdruck die Rolle einer Gewichtsfunktion hat.

Definition 2.3 (Quadraturformel für die FM-Methode)

Aus einer Referenzquadraturformel mit Gewichten α_ν zu Stützstellen \mathbf{a}_ν erhalten wir die Quadraturformel für Integrale über Dichten als

$$\int f \rho \, d\mathbf{x} \rightarrow \sum_n m_n \left[\sum_\nu \alpha_\nu f(\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{a}_\nu) \right] =: \int f \, d\lambda \quad . \quad (2.33)$$

Hier basieren die Gewichte $m_n \alpha_\nu$ und die Knoten $\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{a}_\nu$ auf der Diskretisierung der Masse und nicht auf einer Aufteilung des Raumes in Zellen.

Anstatt die Integrale der Teilchen-Druckkräfte zu diskretisieren, gehen wir auf das Potential zurück. Dieses Vorgehen ist für die diskreten Erhaltungssätze in Unterabschnitt 2.7.1 von zentraler Bedeutung. Für die spezifische innere Energie $\tilde{\varepsilon} := \varepsilon/\rho$ erhalten wir das diskrete Potential

$$V^D = \int \tilde{\varepsilon}(\rho, s) \, d\lambda \quad (2.34)$$

und können aus dem zugehörigen Lagrangefunktional die normalisierten Druckkräfte

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_n &= - \int \left[\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \rho} + S_n \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial s} \right] \frac{\partial \psi_n}{\partial \mathbf{q}_n} \, d\lambda - \sum_\nu \alpha_\nu [\nabla \tilde{\varepsilon}](\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{a}_\nu) \quad , \\ \mathbf{M}_n &= - \int \left[\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \rho} + S_n \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial s} \right] \frac{\partial \psi_n}{\partial \mathbf{H}_n} \, d\lambda - \sum_\nu \alpha_\nu [[\nabla \tilde{\varepsilon}](\mathbf{q}_n + \mathbf{H}_n \mathbf{a}_\nu)][\mathbf{a}_\nu]^T \end{aligned}$$

berechnen. Die jeweils zweiten Terme für \mathbf{F}_n und \mathbf{M}_n stehen damit in Zusammenhang, daß die Quadraturpunkte mit den Teilchen mitbewegt werden. Sie beinhalten nur Auswertungen an Quadraturpunkten, die von Teilchen n selbst stammen. Die Teilchentemperatur ergibt sich als

$$\theta_n = \int \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial s} \psi_n d\lambda .$$

Um die Reibungskräfte (2.20), (2.21), die viskosen Kräfte (2.25), (2.26) und die entsprechenden Wärmeanteile (2.23), (2.27) zu diskretisieren, werden einfach die Integrale über das diskrete Maß genommen. Damit haben wir für die rechte Seite unseres Differentialgleichungssystems Ausdrücke, die auf dem Computer realisierbar sind. Mit den Voraussetzungen an das Abklingverhalten der inneren Energie und der Konstruktion der Quadraturformeln ist das Verhalten dieser näherungsweise Integration auch am Rand stabil.

Unsere bisherige Erfahrung zeigt, daß es nicht genügt, hohe Polynomgrade bei der Quadratur zu reproduzieren, sondern daß auch eine gewisse feine Auflösung des Gebietes durch die Stützstellen notwendig ist. Für die eindimensionalen kubischen B-Splines ist beispielsweise die Quadraturformel

Stützstellen	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
Gewichte	$\frac{41}{1280}$	$\frac{316}{1280}$	$\frac{566}{1280}$	$\frac{316}{1280}$	$\frac{41}{1280}$

eine brauchbare Wahl. Sie ist exakt für Polynome bis zum Grad 5.

Auch die externen Kräfte (2.28) und (2.29) werden aus einem diskreten Potential abgeleitet. Aufgrund der Entkopplung dieser Kräfte ist es möglich, sie teilchenbezogen rein lokal zu bestimmen und damit auch ohne algorithmische Nachteile hier andere, möglicherweise höhere Auflösungen zu verwenden.

2.6.2 Zeitdiskretisierungen

Das Resultat der bisherigen Diskretisierung ist ein großes System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Nun ist eine Zeitdiskretisierung notwendig. Lubich hat dafür ein exponentielles Integrationsschema im Sinne der Arbeit [HL97] vorgeschlagen, das in [GLY00] angegeben ist. Der Integrator nutzt die spezielle Struktur der Gleichungen effizient aus, wenn die steifen Anteile der Gleichung von Reibungs- und Viskositätskräften herrühren. Dabei wird verwendet, daß es sich im richtigen Kontext bei diesen Kräften um negativ definite symmetrische lineare Operatoren der Geschwindigkeitskomponenten handelt und Geschwindigkeiten sonst an keiner Stelle eingehen. Das Schema integriert diese in der Geschwindigkeit steifen Anteile exakt, so daß keine Einschränkung an die Zeitschrittweite durch den steifen linearen Anteil mehr besteht. Bei fast inkompressiblen Fluiden oder dominierenden externen Kräften sind die Einschränkungen dieses Termes nicht mehr wesentlich, so daß dann eventuell Standardverfahren zu bevorzugen sind. Beispielsweise das adaptive Integrationsschema DOPRI5 von Dormand und Prince, siehe [HNW91, S.178], findet für die Zeitintegration der Gasringe in Abschnitt 3.7 Verwendung.

2.7 Eigenschaften

2.7.1 Erhaltungseigenschaften

Massenerhaltung

Die Erhaltung der Gesamtmasse gilt aufgrund der Superposition aus den Teilchenmassen und deren Erhaltung nach Lemma 2.1. In der Kontinuumsmechanik benutzt man zumeist eine differentielle Formulierung, die *Kontinuitätsgleichung*. Sie bringt die zeitliche Änderung der Massendichte mit ihrem Fluß in Zusammenhang und lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0 \quad .$$

Unsere Definitionen der entsprechenden globalen Größen sind konsistent mit dieser Formulierung.

Lemma 2.4 (Kontinuitätsgleichung für Teilchen)

Für eine endliche Menge von Teilchen mit gegebenen Massen m_n , Positionsparametern \mathbf{q}_n und \mathbf{H}_n und Geschwindigkeitsparametern \mathbf{q}'_n und \mathbf{H}'_n gilt die Kontinuitätsgleichung.

Beweis: Mit

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} (\rho \mathbf{v}) = \sum_n m_n \left[\frac{\partial}{\partial t} \psi_n + \operatorname{div} (\psi_n \mathbf{v}_n) \right]$$

erhalten wir die Aussage, wenn wir das Verschwinden der einzelnen Summanden der rechten Seite nachweisen. Mit den Ergebnissen aus Lemma 2.2 gilt einerseits

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi_n &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} \psi_n \cdot \mathbf{q}'_n + \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}_n} \psi_n : \mathbf{H}'_n \\ &= -\nabla \psi_n \cdot \mathbf{q}'_n - [\nabla \psi_n][\mathbf{y}]^T : \mathbf{H}'_n - \psi_n \mathbf{H}_n^{-T} : \mathbf{H}'_n \\ &= -\nabla \psi_n \cdot \mathbf{v}_n - \psi_n \mathbf{H}_n^{-T} : \mathbf{H}'_n \quad , \end{aligned}$$

andererseits ist

$$\operatorname{div} (\psi_n \mathbf{v}_n) = \nabla \psi_n \cdot \mathbf{v}_n + \psi_n \operatorname{div} \mathbf{v}_n \quad .$$

Diese Terme heben sich wegen $\operatorname{div} \mathbf{v}_n = \mathbf{H}_n^{-T} : \mathbf{H}'_n$ gegenseitig auf. \square

Auch für nichtdifferenzierbare Formfunktionen, die beispielsweise in der Betrachtung von [Ys00a] mit eingeschlossen sind, gilt die Kontinuitätsgleichung in der schwachen Formulierung, wie in Abschnitt 2 der zitierten Quelle dargestellt ist.

Erhaltung von Impuls, Drehimpuls und Energie

Für die Betrachtung der Erhaltungseigenschaften beschränken wir uns auf den Fall, der keine externe Kräfte enthält. Anstatt den Drehimpuls, der im dreidimensionalen Raum die Gestalt

$$\int \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \times \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

annimmt, selbst zu betrachten, ist es geschickter, seine Komponenten zu untersuchen. Sie alle lassen sich mit geeigneten schiefsymmetrischen Matrizen \mathbf{W} schreiben als

$$\int \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \cdot \mathbf{W} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} .$$

Da diese von den Kreuzprodukt-Komponenten herrührenden Matrizen eine Basis des Raumes der schiefsymmetrischen Matrizen sind, kann man das Verschwinden eines solchen Kreuzprodukt-Ausdruckes durch das Verschwinden des entsprechenden Ausdruckes mit beliebigen schiefsymmetrischen Matrizen testen. Diese Sichtweise ist auch für eine und zwei Raumdimensionen möglich.

Theorem 2.5 (Erhaltungseigenschaften)

Erfüllen die Teilchen die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_n'' &= \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_n^{(r)} + \mathbf{F}_n^{(v)} \\ J \mathbf{H}_n'' &= \mathbf{M}_n + \mathbf{M}_n^{(r)} + \mathbf{M}_n^{(v)} \end{aligned}$$

und die Entropiegleichung

$$\theta_n S_n' = \delta Q_n^{(r)} + \delta Q_n^{(v)}$$

so sind Impuls, Drehimpuls und Energie Erhaltungsgrößen, d.h. es gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \mathbf{v} d\mathbf{x} = 0 ,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \mathbf{x} \cdot \mathbf{W} \mathbf{v} d\mathbf{x} = 0 ,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (V + E) = 0$$

mit beliebigen schiefsymmetrischen Matrizen \mathbf{W} .

zum Beweis: Der Beweis ist in [GLY00, Abschnitt 3] angegeben. Wichtige Eigenschaften dabei sind, daß die χ_n eine Partition der Eins auf dem von Masse erfüllten Gebiet bilden und daß die Identität

$$\mathbf{q}_n' \cdot \mathbf{f} + \mathbf{H}_n' : [\mathbf{f}][\mathbf{H}_n^{-1}[\mathbf{x} - \mathbf{q}_n]]^T = \mathbf{v}_n \cdot \mathbf{f}$$

für beliebige Vektoren \mathbf{f} gilt. Dadurch motivieren sich auch die entsprechenden Terme in den Deformationskräften $\mathbf{M}_n^{(r)}$ und $\mathbf{M}_n^{(v)}$.

Wenn externe Kräfte, wie in Unterabschnitt 2.5.1 eingeführt, vorhanden sind, bleibt zumindest die Energie weiterhin erhalten, denn für dieses Argument wird keine spezielle Gestalt des Potentials benötigt. Impuls und Drehimpuls können sich allerdings ändern. Der angegebene Wärmefluß beeinflußt keine der Erhaltungseigenschaften.

Existenz der Trajektorien

Eine wichtige Folgerung der Energieerhaltung ist die globale Existenz der Trajektorien des Systems der gewöhnlichen Differentialgleichungen, das die Teilchenevolution beschreibt. Die Gesamtenergie ist eine obere Schranke der kinetischen Energie des Systems, und damit sind Schranken für jede Geschwindigkeitskomponente gegeben. Da auch die potentielle Energie beschränkt ist, können die spezifischen Entropien der Teilchen nicht beliebig wachsen. Mit Stetigkeitsargumenten der rechten Seiten ergibt sich die globale Existenz der Trajektorien mit Standardargumenten aus der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen.

Diskrete Erhaltung von Impuls, Drehimpuls und Energie

Auch bei der Diskretisierung der Integrale bleiben die angesprochenen Größen erhalten.

Theorem 2.6 (Erhaltung im integraldiskretisierten Modell)

Im integraldiskretisierten Fall werden Impuls, Drehimpuls und die integraldiskretisierte Energie $\mathcal{E}^D = E + V^D$ erhalten.

zum Beweis: Für diesen Beweis sei auf [GLY00, Abschnitt 4] verwiesen.

Eine analoge Aussage kann beim Übergang zur Zeitdiskretisierung nicht mehr erwartet werden. Allerdings ist zu bemerken, daß das angesprochene exponentielle Schema aus [GLY00] dann, wenn keine viskosen oder Reibungskräfte vorhanden sind, in das symplektische Verlet-Schema übergeht und Impuls und Drehimpuls erhalten werden. Der Fehler in der Energie ist für das Verlet-Schema auch für Langzeitsimulationen zu vernachlässigen, vgl. [HL00].

2.7.2 Konvergenzaussagen

Die vorgestellte Methode der Finiten Massen wird üblicherweise dazu benutzt, um Flüsse zu simulieren, die normalerweise mit den Euler- bzw. den Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden. Da Existenz, Eindeutigkeit und Regularität von Lösungen dieser Gleichungen nur für Spezialfälle bekannt sind,

können wir hier keine starken Ergebnisse erwarten. Dennoch ist es möglich, Aussagen über die zugrundeliegenden physikalischen Prinzipien zu treffen.

In den Arbeiten [Ys97] und [Ys99b] sind Konvergenzaussagen für Teilchenensembles angegeben. Die Resultate sind zwar für Teilchen mit weniger inneren Freiheitsgraden hergeleitet, übertragen sich aber auf die vorliegende Situation. Ausgehend von einem Zustand, der durch ein Teilchenensemble gegeben ist, wird untersucht, wie sich ein sukzessives Aufteilen jedes Teilchens in mehrere kleinere Teilchen, etwa B-Splines der halben Größe, auswirkt. Das Resultat in [Ys97] beruht auf der Lagrangeschen Sichtweise. Für reine Potentialkräfte wird gezeigt, daß zu gegebenen beliebigen mitbewegten Teilvolumina die Newtonsche Bewegungsgleichung, die die Masse des Volumens, deren Schwerpunkt und die Gesamtkraft in den bekannten Zusammenhang

$$m\mathbf{q}'' = \mathbf{F}$$

stellt, für Grenzwerte der Teilchenapproximation gilt. Dazu wird das Volumen für jedes Teilchenensemble durch die Teilmenge der darin vollständig enthaltenen Teilchen genähert, die Masse, der Schwerpunkt und die darauf wirkende Kraft für diese Teilchenmengen definiert und deren Konvergenz gezeigt. Dann gilt für die Grenzwerte die obige Gleichung im distributionellen Sinn.

In [Ys99b] werden Ergebnisse für die Eulersche Sichtweise des Flußes angegeben. Dafür sind gewisse Einschränkungen an das Gasgesetz, die für ideale Gase erfüllt sind, notwendig. Eine weitere wichtige Voraussetzung für diese Überlegungen ist die Beschränktheit des Flußgebietes. Für den nichtviskosen Fall werden schwache Konvergenzen für Masse, Entropie, die entsprechenden Flüsse und die Entropieproduktion der Reibungskraft angegeben. Für die Limites wird eine distributionelle Kontinuitätsgleichung und eine distributionelle Form des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik, der die Entropie bilanziert, gezeigt.

2.7.3 Bemerkungen zur Approximation

Auch wenn die nachfolgenden Analysen keine direkten Aussagen über die Strömungssimulation treffen, sehen wir sie doch als Indizien für die Brauchbarkeit der Methode der Finiten Massen.

Ausrichtung der Teilchen

An dieser Stelle soll bemerkt werden, daß die Teilchen der Methode der Finiten Massen ihre relativen Ausrichtungen im wesentlichen beibehalten. Anders als beispielsweise bei der populären *Smoothed Particle Hydrodynamics* Methode, vgl. beispielsweise [Mon92] und [Spe98], bei der oft Nachbarschaftsänderungen auftreten, wird hier die lokale Situation zwar verzerrt, topologisch bleibt sie aber zumeist erhalten. Um dieses Verhalten zu verdeutlichen, ist die Abbildung 2.2 angegeben. Sie stellen Ergebnisse einer zweidimensionalen Beispielrechnung der periodischen Scherströmung aus [GLY00, Abschnitt 6] dar. Markiert sind die

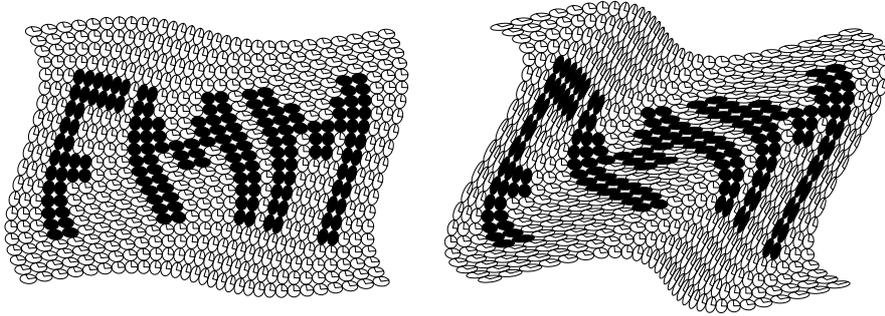


Abbildung 2.2: *Teilchenpositionen einer Rechnung der periodischen Scherströmung aus [GLY00] mit der in Unterabschnitt 2.1.1 beschriebenen Darstellung.*

Teilchen nach dem in Unterabschnitt 2.1.1 angegebenen Schema. Es wurden einige Teilchen schwarz eingefärbt, um die gesamte Verzerrung besser zu verdeutlichen. Obwohl diese gerade im rechten Bild sehr deutlich zu sehen ist, ist auch zu beobachten, daß — gemessen an dieser verwendeten Höhenlinie — die Teilchen ihre relativen Positionen genau beibehalten.

Bewegung in gegebenen Kraft- oder Geschwindigkeitsfeldern

In [Ys00a] wird eine Konvergenzanalyse der Konvektion in externen Kraft- und Geschwindigkeitsfeldern durchgeführt. Da sich in diesem Kontext keinerlei Interaktion der Teilchen ergibt — die besprochene Reibungskraft wird hier nicht zugelassen —, entkoppeln die gewöhnlichen Differentialgleichungen, die ihre Bewegungen und Verformungen beschreiben und können getrennt betrachtet werden. Die resultierenden lokalen Maximumnormaussagen werden dann zu Aussagen über globale Größen kombiniert.

Die Abschätzungen gelten für ein Zeitintervall $[0, T]$ und beinhalten die Ausdehnung der Teilchen. Deshalb benötigen wir die Größe

$$\|\mathbf{H}_n\| := \max_{0 \leq t \leq T} |\mathbf{H}_n(t)| .$$

Für die Bewegung in einem gegebenen Geschwindigkeitsfeld ergibt sich die folgende Aussage.

Theorem 2.7 (Bewegung im gegebenen Geschwindigkeitsfeld)

Werden Teilchen mittels

$$\begin{aligned} \mathbf{q}'_n(t) &= \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{q}_n(t), t) , \\ \mathbf{H}'_n(t) &= \nabla \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{q}_n(t), t) \mathbf{H}_n(t) \end{aligned}$$

in einem gegebenen Geschwindigkeitsfeld $\tilde{\mathbf{v}}$ mitbewegt, so ergibt sich für das globale Geschwindigkeitsfeld der Teilchen die Abschätzung

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{O}\left(\sum_n \chi_n(\mathbf{x}, t) \|\mathbf{H}_n\|^2\right) .$$

Dieses Resultat ergibt sich aus der Abschätzung in [Ys00a, Theorem 1], wenn die Gesamtgeschwindigkeit aus den einzelnen Teilchengeschwindigkeiten kombiniert wird. In [Ys00a, Theorem 6] wird eine entsprechende Aussage für externe Kraftfelder gezeigt.

Theorem 2.8 (Bewegung im externen Kraftfeld)

Werden Teilchen nur mit den externen Kräften aus Unterabschnitt 2.5.1 bewegt, so ergibt sich für das globale Geschwindigkeitsfeld der Teilchen im Vergleich mit dem Geschwindigkeitsfeld $\tilde{\mathbf{v}}$, das zum von der Kraft induzierten Fluß gehört, im gegebenen Zeitintervall die Abschätzung

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) - \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{O}\left(\sum_n \chi_n(\mathbf{x}, t) \|\mathbf{H}_n\|^2\right) .$$

Für die Masse gibt es Konvergenzaussagen in Dualräumen, die einerseits von der Güte der Approximation des Flusses in der Zeit und andererseits von der Approximation der Massendichte zum Startzeitpunkt abhängen. Es wird mit [Ys00a, Theorem 2] Konvergenz zweiter Ordnung im Dualraum von $C_0^1(\mathbb{R}^d)$ gezeigt.

Akustik

Die Gleichungen der Akustik ergeben sich aus der Linearisierung der Eulergleichungen um einen Gleichgewichtszustand. In [Ys00b] wird in diesem Zusammenhang ein vereinfachtes Teilchenmodell betrachtet, bei dem keine Verformungen der Teilchen zugelassen sind. Dort wird eine Linearisierung der Kräfte einer uniform verteilten Teilchenmenge um einen Gleichgewichtszustand konstanter Dichte durchgeführt und die Verschiebungen betrachtet. Es wird, abhängig von der Gestalt der Formfunktion, gezeigt, daß die entstehenden Differentialgleichungen für die Verschiebung eine konsistente und stabile Diskretisierung der akustischen Geschwindigkeitsgleichung sind. Damit pflanzen sich Störungen in den Positionen der Teilchen wie Schallwellen fort.

2.8 Verwendete Beispiele

An dieser Stelle werden die physikalischen Beispiele vorgestellt, die später zur Demonstration der Brauchbarkeit der besprochenen Ansätze dienen. Sie sind hier der Übersichtlichkeit halber zusammengefaßt und dienen für die nachfolgenden Kapitel als Referenz.

2.8.1 Stoßrohre

Das klassische Riemann-Problem der Gasdynamik ist das Anfangswertproblem der eindimensionalen Eulergleichung zu einem Startzustand, der zwei Bereiche mit jeweils konstantem Zustand des Gases, die sich bei 0 treffen, umfaßt.

Dabei wird im allgemeinen ein ideales Gas vorausgesetzt. Es stellt sich als sinnvoll heraus, den Zustand durch die Größen Massendichte, Geschwindigkeit und Druck, also mit dem Vektor $\mathbf{u} := (\rho, v, \pi)$, zu beschreiben. Diese Wahl hat ihren Grund in erster Linie darin, daß sich die Analyse der zugehörigen Gleichungen und die Beschreibung der auftretenden Phänomene vereinfacht. Die Anschaulichkeit dieser Größen erleichtert die weitere Argumentation. Ausführliche Beschreibungen der Lösung dieses Problems finden sich an vielen Stellen, beispielsweise in [CM93], [CF48], [LeV92] oder [Smo83].

Durch Umskalierung der Gleichung ist leicht einzusehen, daß allgemeine Lösungen die Form

$$\mathbf{u}(x, t) = \tilde{\mathbf{u}}\left(\frac{x}{t}\right)$$

haben. Aufgrund der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit von Störungen in hyperbolischen Gleichungen sind die Anfangszustände für Bereiche, die weit vom Ursprung entfernt liegen, auch später noch gültig.

Detaillierte Überlegungen mit Charakteristiken, die auch thermodynamische Aspekte wie Entropiebedingungen beinhalten, ergeben, daß es drei grundlegende Möglichkeiten gibt, durch die zwei konstante Zustände miteinander verbunden sein können. Eine allgemeine Lösung des Riemannproblems ergibt sich durch Kombination solcher Übergänge und einer geeigneten Wahl von Zwischenzuständen. Die Kompatibilität der Zwischenzustände wird durch zusätzliche Forderungen, die die Lösung dann eindeutig bestimmen, sichergestellt.

Als stetige Lösungen sind nur Verdünnungswellen möglich, da ein Treffen der Charakteristiken ausgeschlossen werden muß. Hier wird keinerlei Entropie erzeugt. Die Welle bewegt sich durch das Gas. Kontaktunstetigkeiten bewegen sich mit dem Gas, keine Masse passiert diese Stelle. Als einzige Größe kann die Dichte der beiden angrenzenden Zustände differieren, Druck und Geschwindigkeit sind identisch. Andere Unstetigkeiten nennt man Stöße. Aus den Rankine-Hugoniot-Bedingungen ergibt sich eine Einschränkung der durch Stöße direkt verbindbaren Zustände auf eine Einparameterfamilie. Außerdem ergibt sich, daß in diesem Fall eine Unstetigkeit in sämtlichen Größen vorliegen muß. Der Stoß bewegt sich durch das Gas und es wird Entropie erzeugt.

Als Stoßrohr bezeichnet man ein spezielles Riemannproblem, bei dem keine Anfangsgeschwindigkeiten vorhanden sind. Es kann als Rohr verstanden werden, bei dem zwei thermodynamisch verschiedene Zustände durch eine Membran getrennt sind, die zum Zeitpunkt 0 entfernt wird. In diesem Fall ergibt sich stets die Situation, daß sich eine Verdünnungswelle, eine Kontaktunstetigkeit und ein Stoß in dieser oder der umgekehrten Reihenfolge bilden. Dabei bestimmt die Bewegung der Kontaktunstetigkeit die Seite, auf der sich der Stoß befindet. Man könnte die Membran in der Kontaktunstetigkeit mitbewegen oder auch durch eine Kolbenbewegung ersetzen. Damit ist klar, daß sich in Richtung der Bewegung der Kontaktunstetigkeit der Stoß, auf der anderen Seite die Verdünnungswelle befindet.

Stoßrohr A

Das erste Testbeispiel ist ein in unserer Arbeitsgruppe oft verwendetes Stoßrohr. Wir betrachten ein barytropisch ideales Gas mit $\gamma = 1,4$. Die Zustandsparameter der Anfangskonfiguration resultieren aus Vorgaben der Massendichte und der Entropie und sind für dieses Beispiel:

	ρ	v	π
links	2	0	1.196
rechts	1	0	0.4

Stoßrohr B

Dieses Beispiel stammt aus der Monographie von LeVeque [LeV92]. Das barytropisch ideale Gas hat die Gaskonstante $\gamma = 1,4$, die Zustandsparameter der Anfangskonfiguration für dieses Beispiel sind:

	ρ	v	π
links	3	0	3
rechts	1	0	1

2.8.2 Gasringe im Zentralpotential

Im folgenden werden zwei Beispiele vorgestellt, die zweidimensionale Gasringe in einem Zentralpotential beschreiben. Während der erste Fall nur eine Bewegung im externen Kraftfeld umfaßt, also kontinuumsmechanische Kräfte wie Druck oder Viskosität nicht berücksichtigt, behandelt der zweite Fall auch Viskosität. In [Spe98] werden solche Ringe aufgrund fehlender Druckkräfte als Staubringe bezeichnet.

Wir werden versuchen, diese Strömungen mit Teilchenapproximationen nachzuvollziehen. Da die einzelnen Teilchen dabei extremen Verformungen unterworfen sind und mit der Zeit zu spitzen Nadeln degenerieren, die die Krümmung des Flusses nicht mitverfolgen können, sind diese Beispiele gut geeignet, die Brauchbarkeit des Wiederaufsetzens von Teilchenkonfigurationen im nächsten Kapitel zu demonstrieren.

Keplersche Bewegung

Das in [Ys00a] untersuchte Beispiel ist eine stationäre Strömung, bei der sich ein rotationssymmetrischer Gasring mit Keplergeschwindigkeit in einem Zentralpotential bewegt. Es handelt sich um eine zweidimensionale Situation, in der weder Druck noch Viskosität vorhanden sind.

Wir betrachten ein Zentralpotential U als Funktion des Radius $r := |\mathbf{x}|$, das auf das Kraftfeld

$$\mathbf{f} = -U'(r) \frac{\mathbf{x}}{r}$$

führt. Wählen wir als Geschwindigkeitsfeld speziell

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \omega(r) \begin{pmatrix} -x_2 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

mit der Winkelgeschwindigkeit

$$\omega(r) := \sqrt{\frac{U'(r)}{r}} \text{ ,}$$

so ist eine Lösung der Bewegungsgleichung gegeben. Auch die Dichte setzen wir als

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0(r)$$

rotationssymmetrisch an. Damit ist auch die Kontinuitätsgleichung erfüllt. Da in diesem Modell Druckkräfte nicht berücksichtigt werden sollen, spielen thermodynamische Effekte hier keine Rolle und das Differentialgleichungssystem ist vollständig.

Speziell wählen wir als Potential

$$U(r) := \frac{4\pi^2}{r} \text{ ,}$$

damit ist für den Ring mit Radius 1 die Umlaufzeit 1. Im weiteren werden Umlaufzahlen oder -zeiten stets bezüglich dieses Ringes angegeben.

Ein viskoser Gasring

Dieses Beispiel ist eine Erweiterung des obigen Gasrings, bei dem Viskosität mit berücksichtigt werden soll. Es ist vor allem deshalb von Interesse, weil zu einer reduzierten Gleichung, in der gewisse kleine Terme vernachlässigt werden, eine analytische Lösung angegeben werden kann.

Das betrachtete Modell stammt aus der Astrophysik, als Beschreibung einer Akkretionsscheibe um eine kompakte Zentralmasse, wie in [Ott95] und [Spe98] detailliert ausgeführt ist. Betrachtet werden zunächst die dreidimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen für eine dünne Gasscheibe, die annähernd mit Keplergeschwindigkeit um eine Zentralmasse rotiert. Eigengravitation wird dabei vernachlässigt. Mit Annahmen über die Dicke der Scheibe und die Unabhängigkeit gewisser Größen, wie beispielsweise der Temperatur oder der kinematischen Viskosität $\nu = \eta/\rho$, von der vertikalen Position im Ring kann das dreidimensionale Problem auf die zweidimensionale Situation reduziert werden. Anschließend werden Druckkräfte weggelassen, so daß auch hier Thermodynamik keine

Rolle spielt und wir es nur mit den Zustandsgrößen Dichte und Geschwindigkeit zu tun haben. Die naheliegende Formulierung in Polarkoordinaten führt auf ein Gleichungssystem, bei dem durch Vernachlässigung einiger Terme, die die vergleichsweise kleinen radialen Geschwindigkeiten beinhalten, eine analytische Lösung angegeben werden kann. Die reduzierten Differentialgleichungen können teilweise direkt aufgelöst werden, und es ergibt sich das System

$$\begin{aligned} v_\varphi &= \sqrt{\frac{GM}{r}} \ , \\ v_r &= -\frac{3}{\rho\sqrt{r}} \frac{\partial}{\partial r} (\nu\rho\sqrt{r}) \ , \\ \frac{\partial\rho}{\partial r} &= \frac{3}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\sqrt{r} \frac{\partial}{\partial r} (\nu\rho\sqrt{r}) \right) \end{aligned}$$

mit der Zentralmasse M , der Gravitationskonstanten G und der konstanten kinematischen Viskosität ν . Die Funktion

$$\rho(r, t) = \frac{m}{12\pi\nu t} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{r_0^2 + r^2}{12\nu t}\right) I_{\frac{1}{4}}\left(\frac{rr_0}{6\nu t}\right)$$

ist eine Lösung der Kontinuitätsgleichung zu der mit der Diracschen Delta-Distribution formulierten Anfangsbedingung

$$\rho_0(r) = \frac{m}{2\pi r_0} \delta(r - r_0) \ ,$$

wobei I_b die modifizierte Besselfunktion zur Basis b ist. Der Ring besitzt die Masse m und den Radius r_0 , an dem die Masse zum Startzeitpunkt $t = 0$ lokalisiert ist. Nach einer Normalisierung der Längen durch $\hat{r} = \frac{r}{r_0}$ und der Zeit durch $\tau = \frac{12\nu t}{r_0^2}$ ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} \rho(\hat{r}, \tau) &= \frac{m}{\pi r_0^2} \hat{r}^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{1 + \hat{r}^2}{\tau}\right) I_{\frac{1}{4}}\left(\frac{2\hat{r}}{\tau}\right) \ , \\ v_r(\hat{r}, \tau) &= 6 \frac{\nu \left[\hat{r} I_{\frac{1}{4}}\left(\frac{2\hat{r}}{\tau}\right) - I_{-\frac{3}{4}}\left(\frac{2\hat{r}}{\tau}\right) \right]}{r_0 \tau I_{\frac{1}{4}}\left(\frac{2\hat{r}}{\tau}\right)} \ . \end{aligned}$$

Für alle positiven Zeiten ist der gesamte Raum von Masse erfüllt, fällt aber für moderate Zeiten und Viskositäten sehr schnell ab.

Eine Umsetzung dieses Ansatzes in einer Rechnung beinhaltet für uns einerseits ein Abschneiden der Bereiche, in denen kaum Masse lokalisiert ist, andererseits geeignete Wahlen der Parameter, um ein schnelles und starkes Zerlaufen des Ringes zu verhindern. Das ist für uns deshalb wichtig, um etliche Umläufe simulieren zu können, ohne durch die extrem schnellen Umdrehungen weit innen liegender Ringe entsprechend starke Restriktionen an die Zeiträume für ein Wiederaufsetzen der Rechnung zu erhalten. Wir verwenden im wesentlichen die Parameter aus [Ott95], benutzen aber als Viskosität ein Zehntel des dortigen Wertes, also $\nu = 3 \cdot 10^{-9}$. Das bedeutet, daß in der Zeit, in der unser Profil

soweit zerläuft wie das in der zitierten Quelle, bei uns die zehnfache Anzahl von Umdrehungen der Ringe durchgeführt wird.

Als weitere Überlegung ist die Verwendung einer geeigneten Anfangsbedingung von Bedeutung. Die angegebene Verteilung ρ_0 ist nicht realisierbar, so daß wir in Übereinstimmung mit [Ott95] die Simulation mit einem Profil starten, das aus der näherungsweise analytischen Lösung zu einem späteren Zeitpunkt stammt. Das gewählte Profil ist das, welches auch in der zitierten Arbeit verwendet wurde und entspricht der viskosen Zeit $\tau = 0,016$.

Kapitel 3

Neu– und Wiederaufsetzen der Rechnung im uniformen Fall

3.1 Motivation und Überblick

Die Freiheitsgrade der Teilchen lassen weitgehende Verformungen zu, die zu dramatischen Aspektverhältnissen und vielfachen Überlagerungen führen können. Als Beispiele dienen die Simulation der Scherviskosität, die in Abbildung 2.2 dargestellt ist und in [GLY00, Abschnitt 6] beschrieben wird, und insbesondere die Ergebnisse in [Ys00a]. Die Abbildung 3.1 zeigt exemplarisch eine Teilmen-

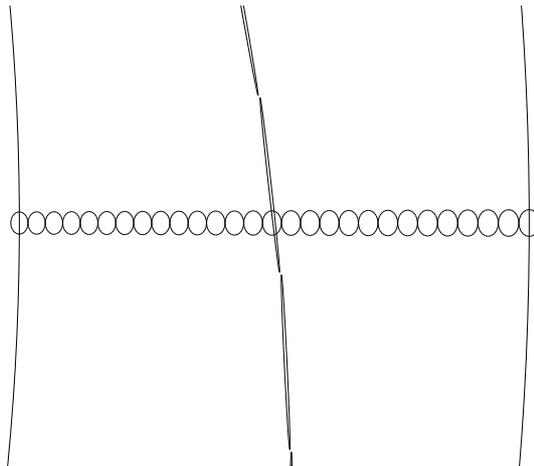


Abbildung 3.1: Exemplarische Teilchenpositionen einer Rechnung des Keplerschen Gasrings zu zwei Zeitpunkten, die in etwa eine Umdrehung auseinanderliegen, mit der in Unterabschnitt 2.1.1 beschriebenen Darstellung, allerdings ohne lokale Koordinatensysteme.

ge von Teilchen, die im reinen externen Kraftfeld des Potentials aus Unterabschnitt 2.8.2 mitbewegt wird. Dargestellt sind die Teilchen zu Beginn, wo sie

radial angeordnet sind, und darübergelegt die Anordnung nach etwa einer Umdrehung des Rings mit Radius eins, wo extreme Verformungen gut zu erkennen sind. Um die Übersichtlichkeit zu erhöhen, wurde in diesem Bild auf die lokalen Koordinatensysteme verzichtet.

Sowohl von theoretischer als auch von praktischer Seite ist es nicht sinnvoll, mit solchen extremen Verformungen zu arbeiten. Einerseits ist die lokale Approximation im wesentlichen durch den Umkreisradius der Teilchen bestimmt und extrem lange Teilchen können den Krümmungen nicht folgen, andererseits führen extreme Aspektverhältnisse der Teilchen oft zu einem immensen Anwachsen der Rechenzeit. Für die in [GLY00] vorgeschlagene Implementierung kommt das daher, daß für die Berechnung der Kräfte ein Suchbaum verwendet wird, dessen Qualität von achsenparallelen Rechtecken abhängt, die die Teilchen umschreiben. Und deren Passgenauigkeit hängt eng mit den Aspektverhältnissen der Teilchen zusammen.

In solchen Fällen ist es sicher notwendig, die Simulationsrechnung anzuhalten. Die dann gültigen globalen Felder können als Anfangsdaten einer neuen Rechnung dienen. Aus ihnen muß für diesen Zweck eine neue Teilchenverteilung gewonnen werden. Für dieses Vorgehen benutzen wir die Bezeichnung *Restart*. Zunächst stellen wir das Konzept für Teilchen, die auf einem regelmäßigen Gitter ausgerichtet sind, auf. Nach einer Vorstellung des Restart-Schemas gehen wir auf die Approximation der einzelnen Größen ein. Den Abschluß dieses Kapitels bilden Beispielrechnungen.

3.2 Das Schema

Um einen Restart durchzuführen, müssen wir aus einer gegebenen Teilchenverteilung globale Feldgrößen extrahieren. Diese, oder geeignete abgeleitete Größen, werden dazu benutzt, eine neue Anfangsapproximation zu generieren. Sie sind, zumindest teilweise, nur auf einem Teilgebiet $\tilde{\Omega}$ definiert, das normalerweise das masserfüllte Gebiet der alten Teilchenkonfiguration ist. Die neuen

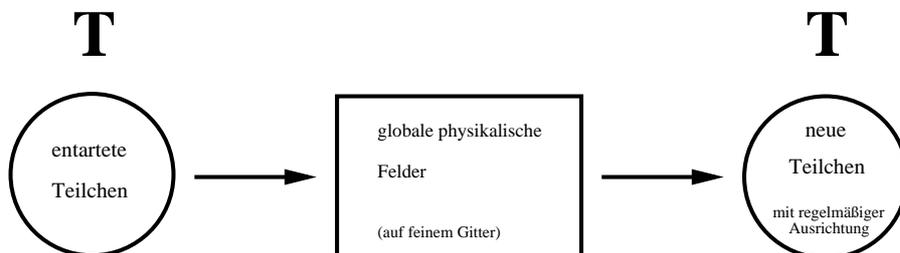


Abbildung 3.2: Schemadarstellung für das Vorgehen beim Restart.

Positionen \mathbf{q}_n und Anfangsdeformationen \mathbf{H}_n der Teilchen sind durch ein regelmäßiges Gitter vorgegeben. Die noch freien Teilchenparameter m_n, S_n, \mathbf{q}'_n

und \mathbf{H}'_n werden dazu verwendet, einen sinnvollen Satz von Zustandsgrößen zu approximieren. Abbildung 3.2 stellt das Vorgehen schematisch dar.

3.2.1 Auswahl der Approximationsgrößen

Zunächst gilt es also, einen Zustandsvektor festzulegen, der die Größen beinhaltet, durch die die freien Teilchenparameter definiert werden sollen. Die Masendichte ist eine elementare Größe, die sich durch ihre Verbindung zu den Teilchenmassen als Approximationsgröße direkt anbietet. Als zweite thermodynamische Größe stehen beispielsweise Temperatur, Druck und Entropie zur Wahl. Wir folgen hier im wesentlichen dem Vorgehen von [GLY00] und benutzen die Entropiedichte s um daraus die spezifischen Teilchenentropien zu gewinnen. Die Dichten sind als additive Größen einer Verteilung auf Ansatzfunktionen leicht zugänglich.

Eine Näherung der Geschwindigkeit, die nur das globale Feld gut erfaßt, reicht oft nicht aus. Es ist nämlich möglich, daß die einzelnen Teilchen Geschwindigkeiten haben, die nicht die lokale Situation wiedergeben, sondern nur durch die Überlagerung gute Näherungen ergeben. Gerade wenn keine Interaktion der Teilchen vorhanden ist, wie beispielsweise bei ausschließlicher Verwendung externer Kräfte, laufen die einzelnen Bewegungen der Pakete ungünstig auseinander. Deshalb approximieren wir die Geschwindigkeit für jedes Teilchen direkt, anstatt zum Beispiel über den Massenfluß zu einer Näherung zu kommen. Die Teilchengeschwindigkeiten haben aufgrund der zusätzlichen Freiheitsgrade \mathbf{H}'_n lokal gute Näherungseigenschaften, die sich auf das globale Geschwindigkeitsfeld übertragen.

3.2.2 Regularisierung der globalen Größen

Gerade in der Nähe von Kontaktunstetigkeiten und Stößen ist zu beobachten, daß leichte Oszillationen in den Feldern auftreten, etwa vergleichbar mit dem Gibbsschen Phänomen bei der Approximation mit Fourierpolynomen an Sprungstellen, vgl. [CH68]. Auch können für sehr stark deformierte Teilchen kleine Dichteoszillationen auftreten, die mit der schlechteren Anpassung langer schmaler Teilchen an Krümmungen zusammenhängen, vgl [Ys00a]. Um einen Einfluß solcher Effekte auf die Rechnung zu verhindern, ist es oft sinnvoll, die globalen Größen zu regularisieren, bevor sie durch einen Satz neuer Teilchen approximiert werden. Ein geeignetes Vorgehen wird im nächsten Kapitel thematisiert.

3.2.3 Tensorprodukt-B-Splines auf uniformen Gittern

Als konkrete Situation, die diesem Kapitel zugrunde liegt, betrachten wir Tensorprodukt-B-Splines, die auf uniformen Gittern ausgerichtet sind. Für die Approximation der Geschwindigkeit wird dies an vielen Stellen nicht benötigt werden. Wir nähern die Geschwindigkeit auf jedem Teilchen separat und erhalten

globale Aussagen durch Konvexkombination. Für die zugehörigen Verfahren und Analysen sind sowohl für die Ansatzfunktionen als auch für die Teilchenpositionen wesentlich mehr Freiheiten möglich. Hingegen für Masse und Entropie macht diese Einschränkung eine erste Behandlung überhaupt erst möglich. Eine Verallgemeinerung auf den nichtuniformen Fall ist in Kapitel 5 angegeben.

Ein regelmäßiger eindimensionaler B-Spline der Ordnung s unterteilt seinen Träger in s gleichgroße Intervalle, in denen er jeweils ein Polynom vom Grad $s - 1$ darstellt. Diese Eigenschaft überträgt sich auf Tensorprodukte. Zu einem gegebenen uniformen axial ausgerichteten Gitter der Maschenweite h_G werden nun solche B-Splines gewählt, deren polynomiale Zellen auf Gittermaschen liegen. Für ungerade Ordnungen liegen die Teilchenmittelpunkte \mathbf{q}_n somit in Maschenmittelpunkten, ansonsten liegen sie auf Gitterpunkten. Die Anfangsdeformationen sind $\mathbf{H}_n := \frac{s}{2} h_G \mathbf{Id}$.

3.3 Verwendete Teilchen

Die Entscheidung, welche Teilchen für eine Simulationsrechnung sinnvoll definiert werden können und dann letztendlich Verwendung finden, ist ein mehrstufiger Prozeß. Zunächst muß ein geeigneter Bereich definiert werden, der das für uns relevante Gebiet $\tilde{\Omega}$ — normalerweise den bisherigen von Masse erfüllten Bereich — großzügig umfaßt, um Effekte des Gebietsrandes auszuschließen.

Dieser üblicherweise rechteckige Bereich wird mit einem Gitter überzogen auf dem die B-Splines, wie eben beschrieben, ausgerichtet sind. Diese *potentiellen Teilchen* werden einer Vorsortierung unterworfen. Zwei Aspekte spielen dabei eine Rolle. Einerseits kommt die Positivitätsbedingung der Teilchenmassen schon hier ins Spiel. Andererseits muß auch garantiert werden, daß die vorgeschlagenen Schemata für die einzelnen Größen durchgeführt werden können. Diese Bedingung spielt insbesondere für Geschwindigkeitsapproximationen eine Rolle. Die resultierende Menge der sogenannten *zulässigen Teilchen* wird zur Approximation der Massendichte verwendet und liefert die Teilchenmassen. Die Verfahren haben dafür Sorge zu tragen, daß keine negativen Werte möglich sind. Dennoch ist es möglich, daß der Wert Null auftritt, der zu unbrauchbaren Teilchen führen würde. Es muß sich also an die Massenberechnung eine Nachsortierung der Teilchen anschließen.

3.3.1 A priori unzulässige Teilchen

Da sich die Massendichte als Überlagerung positiver Funktionen ergibt, ist es naheliegend, Stellen, die im Vakuum liegen, nicht als Teilchenpositionen zuzulassen. Für die Interpolation in Unterabschnitt 3.4.1 führen solche Stellen sicher zu irgendwelchen nichtpositiven Massen. Auch für die anschließend diskutierte Quasiinterpolation führen die Gewichtungen der Stützstellenwerte zumeist zu nichtpositiven Massen. Diese Bedingung erweitern wir geringfügig und verwenden das

Paradigma der zulässigen Teilchen: Ein Teilchen gilt dann als zulässig, wenn eine geeignete Umgebung um seinen Mittelpunkt im Gebiet $\tilde{\Omega}$ liegt.

Diese schärfere Voraussetzung benötigen wir, um bei der Geschwindigkeitsapproximation ein Vorgehen durchführen zu können, bei dem gewisse Punkte in der Nachbarschaft des Mittelpunktes benötigt werden. In der Praxis wird diese notwendige Umgebung klein gehalten. Eine typische Größe ist ein Viertel des Teilchenradiuses.

3.3.2 A posteriori nichtverwendete Teilchen

Nach der Berechnung der Massen sind Teilchen, deren ermittelte Massen Null sind, zu entfernen. Es gibt aber auch weitergehende Überlegungen zur Herausnahme gewisser Teilchen aus der Approximationsmenge. Für die Praxis ist wichtig, ein ständiges Wachstum des Approximationsbereiches zu verhindern. Wenn aufgrund einer Umsetzung des Paradigmas der zulässigen Teilchen die Randbereiche bei jedem Restart durchschnittlich um einen bestimmten Faktor eines Teilchenradiuses erweitert werden, kommen mit der Zeit große Bereiche zu unserer Simulationsrechnung hinzu, in denen sich kaum Masse befindet. Sie sind damit für die physikalischen Felder zwar unbedeutend, aber im wesentlichen Artefakte unseres Schemas. Die Auswirkungen auf die Simulationsrechnung sind ungünstig, denn es muß ein größeres Gebiet betrachtet werden. Das geht zu Lasten der Genauigkeit oder des Aufwandes. Die Einführung eines Schwellwertes für die Massendichtebeiträge der einzelnen Teilchen, der in der Größenordnung der Approximationsgüte der Massendichte liegt, ist nach unseren Erfahrungen gut geeignet, um zu verhindern, daß bei jedem Neuaufsetzen der Rechnung das von Masse erfüllte Gebiet unangemessen wächst.

3.4 Die Approximation der Massendichte

Die freien Parameter für diese Approximation sind die Teilchenmassen. Sie bestimmen mit den Formfunktionen die Massendichtebeiträge. Für eine Menge zulässiger Teilchen mit Nummern $k = 1, \dots, \tilde{N}$ werden zugehörige Massen \tilde{m}_k berechnet und anschließend über das obige Kriterium die Menge der verwendeten Teilchen bestimmt. Der Übergang zur Teilmenge wird durch den Wechsel zu neuen Indizes $n = 1, \dots, N$ symbolisiert.

3.4.1 Interpolation

Eine Interpolationsaufgabe in den Teilchenschwerpunkten ist für Tensorprodukt-B-Splines ein naheliegender Ansatz mit sehr guten Approximationseigenschaften. Wir suchen zu gegebenen potentiellen Teilchen k diejenigen Massen

\tilde{m}_k , so daß in allen Mittelpunkten \mathbf{q}_k die Interpolationsbedingungen

$$\sum_{k'=1}^{\tilde{N}} \psi_{k'}(\mathbf{q}_k) \tilde{m}_{k'} = \rho(\mathbf{q}_k) \quad \forall k = 1, \dots, \tilde{N} \quad (3.1)$$

erfüllt sind. In dieser Situation besteht allerdings eine Schwierigkeit: Wir haben nämlich die zusätzlichen Bedingungen der Nichtnegativität der Teilchenmassen zu berücksichtigen. Damit ist im allgemeinen die Interpolationsaufgabe so nicht mehr lösbar. Stattdessen kann eine Approximationsaufgabe formuliert werden.

Dennoch wird in vielen konkreten Anwendungsfällen dieser Aspekt keine wesentliche Rolle spielen, wenn sich nämlich ergibt, daß auch bei der Interpolation keine negativen Massen auftreten. Es wird sich herausstellen, daß das resultierende Gleichungssystem symmetrisch und positiv definit ist. Die eindeutige Lösbarkeit ist damit garantiert, aber auch die Konvergenz des Gauß-Seidel-Iterationsverfahrens oder der SOR-Iteration mit geeignetem Dämpfungsparameter, vgl. z.B. [Hac91]. Da diese Operatoren unabhängig von der Gitterweite gut konditioniert sind, wie nachfolgende Überlegungen zeigen werden, sind solche iterativen Verfahren effizient einsetzbar.

Wir setzen zunächst voraus, daß die zulässigen Teilchen die Anordnung eines Quaders haben. Dann kann auch für die Teilchenpositionen ein Tensorproduktansatz gemacht werden — eine zentrale Ingredienz im nachfolgenden Beweis. Direktere Argumente, wie beispielsweise starke Diagonaldominanz, besitzen hier keine allgemeine Gültigkeit. Schon für quadratische B-Splines ist sie in drei Raumdimensionen verletzt.

Lemma 3.1 (Interpolationsgleichungssystem auf Quadergebiet)

Betrachten wir Teilchen, deren Formfunktionen Tensorprodukte linearer, quadratischer oder kubischer B-Splines sind, die auf dem Gitter ausgerichtet sind und die alle Positionen eines Quaders besetzen. Dann ist das Interpolationsgleichungssystem (3.1) symmetrisch und positiv definit. Die Matrix ist unabhängig von der Gitterweite gut konditioniert.

Beweis: Wir haben eine Tensorprodukt-Situation in den Teilchenpositionen vorliegen. In Raumrichtung i gebe es \tilde{N}_i potentielle Teilchen und damit sind es insgesamt $\tilde{N} := \prod_{i=1}^d \tilde{N}_i$. Eine geschickte Indizierung für uns sind Multiindizes

$$\mathbf{k} := (k_1, \dots, k_d) \in K := \prod_{i=1}^d \{1, \dots, \tilde{N}_i\} .$$

Die Komponenten der Positionen sind hier nur abhängig von der entsprechenden Position im Multiindex und wir schreiben: $\mathbf{q}_\mathbf{k} = (q_{1,k_1}, \dots, q_{d,k_d})$. Desweiteren verwenden wir hier für die Größe der Teilchen die Abkürzung $\bar{h} := \frac{s}{2} h_G$ mit den Bezeichnungen aus Abschnitt 3.2.3.

Die eindimensionale Situation: Wir definieren für diesen Beweis die Matrizen der eindimensional reduzierten Situationen durch

$$\mathbf{M}^i := \left(\frac{1}{\bar{h}} \hat{\psi}^{(1D)} \left(\frac{q_{i,k_i} - q_{i,k'_i}}{\bar{h}} \right) \right)_{k_i, k'_i \in K} .$$

Sie alle sind symmetrisch und positiv definit. Für die angegebenen linearen, quadratischen und kubischen B-Splines ergeben sich die mit der Gitterweite skalierten Tridiagonal-Systeme mit Werten $(0, 1, 0)$, $(\frac{1}{8}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8})$ und $(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6})$. Die Definitheit gilt hier wegen der Diagonaldominanz der \mathbf{M}^i bei positiver Diagonalen. Eine symmetrische, stark diagonaldominante Matrix \mathbf{A} mit positiver Diagonalen hätte sonst einen nichtpositiven Eigenwert λ mit zugehörigem Eigenvektor \mathbf{u} . Dessen betragsgrößte Komponente u_r sei o.B.d.A positiv. Dann erhalten wir einen Widerspruch mit

$$\begin{aligned} 0 &\geq \lambda u_r = (\mathbf{A}\mathbf{u})_r = \sum_s A_{rs}u_s = A_{rr}u_r + \sum_{s \neq r} A_{rs}u_s \\ &\geq A_{rr}u_r - \sum_{s \neq r} |A_{rs}|u_r = \left[A_{rr} - \sum_{s \neq r} |A_{rs}| \right] u_r > 0 . \end{aligned}$$

Insbesondere ist damit auch $\min_r A_{rr} - \sum_{s \neq r} |A_{rs}|$ eine untere Schranke für den kleinsten und mit analogen Überlegungen $\max_r \sum_s |A_{rs}| = 1$ eine Schranke für den größten Eigenwert. Konkret ergeben sich für die Gleichungssysteme der eindimensionalen linearen, quadratischen und kubischen B-Splines daraus als Schranken für die Spektralkondition die Werte 1, 2 und 3 aus den entsprechenden Quotienten.

Die mehrdimensionale Situation: Das Gleichungssystem

$$\sum_{\mathbf{k}' \in K} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{q}_{\mathbf{k}}) \tilde{m}_{\mathbf{k}'} = \rho(\mathbf{q}_{\mathbf{k}}) =: \rho_{\mathbf{k}} \quad \forall \mathbf{k} \in K$$

hat mit

$$\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{q}_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{h^d} \prod_{i=1}^d \hat{\psi}^{(1D)}\left(\frac{q_{i,k_i} - q_{i,k'_i}}{h}\right) = \left(\mathbf{M}^1 \otimes \dots \otimes \mathbf{M}^d\right)_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$$

die Darstellung

$$\left[\mathbf{M}^1 \otimes \dots \otimes \mathbf{M}^d\right] \cdot (\tilde{m}_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k}} = (\rho_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k}} .$$

Mit obiger Analyse der Matrixfaktoren ist es symmetrisch und positiv definit. Es hat als Spektralkondition das Produkt der entsprechenden Werte der Faktoren, denn es gilt allgemein:

Tensorprodukte von symmetrisch positiv definiten Matrizen sind symmetrisch und positiv definit, und die Spektralkondition ergibt sich durch Multiplikation derjenigen der Faktormatrizen: Seien \mathbf{B} und \mathbf{C} quadratische Matrizen der Dimensionen m und n und \mathbf{y} , \mathbf{z} Vektoren in den entsprechenden Räumen. Wir betrachten nun die Tensorprodukte

$$\mathbf{y} \otimes \mathbf{z} := (y_j z_l)_{jl} \quad \text{mit der Darstellung} \quad \begin{pmatrix} y_1 \mathbf{z} \\ y_2 \mathbf{z} \\ \vdots \\ y_m \mathbf{z} \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{B} \otimes \mathbf{C} := (B_{ij}C_{kl})_{ikjl} \quad \text{mit der Darstellung} \quad \begin{pmatrix} B_{11}\mathbf{C} & B_{12}\mathbf{C} & \cdots & B_{1m}\mathbf{C} \\ B_{21}\mathbf{C} & B_{22}\mathbf{C} & \cdots & B_{2m}\mathbf{C} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{m1}\mathbf{C} & B_{m2}\mathbf{C} & \cdots & B_{mm}\mathbf{C} \end{pmatrix},$$

dann gilt insbesondere

$$\begin{aligned} [\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}] \cdot [\mathbf{y} \otimes \mathbf{z}] &= \left(\sum_{j,l} [B_{ij}C_{kl}][y_j z_l] \right)_{ik} \\ &= \left(\left[\sum_j B_{ij} y_j \right] \left[\sum_l C_{kl} z_l \right] \right)_{ik} \\ &= \mathbf{B}\mathbf{y} \otimes \mathbf{C}\mathbf{z} . \end{aligned}$$

Für symmetrische Faktoren ergibt sich die Symmetrie des Tensorproduktes direkt aus der Definition. Seine Eigenvektoren lassen sich kanonisch aus Eigenvektoren der Faktoren zusammensetzen. Sei \mathbf{y} ein Eigenvektor von \mathbf{B} mit Eigenwert λ und \mathbf{z} ein Eigenvektor von \mathbf{C} mit Eigenwert μ , so gilt

$$[\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}] \cdot [\mathbf{y} \otimes \mathbf{z}] = \mathbf{B}\mathbf{y} \otimes \mathbf{C}\mathbf{z} = \lambda\mathbf{y} \otimes \mu\mathbf{z} = [\lambda\mu] [\mathbf{y} \otimes \mathbf{z}] .$$

Also ist $\mathbf{y} \otimes \mathbf{z}$ ein Eigenvektor von $\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}$ zum Eigenwert $\lambda\mu$. Die lineare Unabhängigkeit von Mengen überträgt sich kanonisch auf die Produkte, denn für die beiden linear unabhängigen Tupplel $(\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^2, \dots, \mathbf{y}^r)$ und $(\mathbf{z}^1, \mathbf{z}^2, \dots, \mathbf{z}^s)$ ist auch die kanonische Tensorproduktmenge $\{\mathbf{y}^i \otimes \mathbf{z}^j \mid i=1, \dots, r, j=1, \dots, s\}$ linear unabhängig und von der Mächtigkeit rs . Dafür zeigen wir, daß nur die triviale Linearkombination $\mathbf{0}$ ergibt.

$$\begin{aligned} &\sum_{i,j} \alpha_{ij} \mathbf{y}^i \otimes \mathbf{z}^j = \mathbf{0} \\ \Rightarrow \quad \forall k : &\sum_{i,j} \alpha_{ij} y_k^i \mathbf{z}^j = \mathbf{0} \\ \Rightarrow \quad \forall k \forall j : &\sum_i \alpha_{ij} y_k^i = 0 \quad , \text{ da } \{\mathbf{z}^1, \dots, \mathbf{z}^s\} \text{ linear unabhängig} \\ \Rightarrow \quad \forall j : &\sum_i \alpha_{ij} \mathbf{y}^i = \mathbf{0} \\ \Rightarrow \quad \forall j \forall i : &\alpha_{ij} = 0 \quad , \text{ da } \{\mathbf{y}^1, \dots, \mathbf{y}^r\} \text{ linear unabhängig} \end{aligned}$$

Sind also \mathbf{B} und \mathbf{C} symmetrisch und positiv definit, so ist es auch die Tensorproduktmatrix, denn es existieren jeweils vollständige Orthonormalsysteme zu positiven Eigenwerten und diese werden per Tensorprodukt zu einem linear unabhängigen System von Eigenvektoren der Mächtigkeit mn . Damit bilden sie eine Basis der Tensorproduktmatrix. Die zugehörigen Eigenwerte sind sämtlich positiv als Produkte positiver Eigenwerte der Faktoren. Auch die Kondition als

Quotient entsprechender Eigenwerte ergibt sich als Produkt der Spektralkonditionen der Faktoren. \square

Mit diesem Lemma können wir nun auch die allgemeinere Situation kontrollieren.

Lemma 3.2 (Interpolationsgleichungssystem)

Betrachten wir eine allgemeine Menge potentieller Teilchen, die von Tensorprodukten linearer, quadratischer und kubischer B-Splines stammen und auf dem Gitter ausgerichtet sind. Dann ist das Interpolations-Gleichungssystem (3.1) symmetrisch und positiv definit und die Spektralkondition dieser Matrix ist unabhängig von der Gitterweite beschränkt.

Beweis: Die Symmetrie folgt wie im Beweis zu Lemma 3.1 direkt aus den Definitionen. Betrachten wir nun alle potentiellen Teilchen eines Quaders, der die obigen Menge umfaßt. Bei den Bezeichnungen halten wir uns auch an diesen Beweis und indizieren durch Multiindizes der Menge K . Wir erhalten das Gleichungssystem

$$\sum_{\mathbf{k}' \in K} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{q}_{\mathbf{k}}) \tilde{m}_{\mathbf{k}'} = \rho_{\mathbf{k}} \quad \forall \mathbf{k} \in K$$

und nennen den dadurch definierten linearen Operator \mathbf{M} . Das hier betrachtete lineare Gleichungssystem ergibt sich nun durch eine Einschränkung der erlaubten Indizes auf eine Teilmenge $\check{K} \subset K$ und der zugehörige Operator ist

$$\check{\mathbf{M}} = (\mathbf{M}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'})_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \check{K}} \ .$$

Mit der natürlichen Einbettung von $\check{V} := \{(x_{\check{\mathbf{k}}})_{\check{\mathbf{k}} \in \check{K}}\}$ nach $V := \{(x_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k} \in K}\}$ als $\check{V}^{(e)} = \{(x_{\mathbf{k}})_{\mathbf{k} \in K} | x_{\mathbf{k}} = 0, \mathbf{k} \notin \check{K}\}$ ist $\check{\mathbf{M}}$ als Operator auf dem Unterraum zu verstehen.

Nun verwenden wir die Min-Max-Charakterisierung von Eigenwerten symmetrischer Matrizen, vgl. z.B. [Par80]. Bei den angegebenen Minimierungsmengen wird Null stets implizit ausgeschlossen. Für den kleinsten Eigenwert erhalten wir

$$\check{\lambda}_{\min} = \min_{\check{\mathbf{x}} \in \check{V}} \frac{(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{M}}\check{\mathbf{x}})_2}{(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{x}})_2} = \min_{\mathbf{x} \in \check{V}^{(e)}} \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{M}\mathbf{x})_2}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})_2} \geq \min_{\mathbf{x} \in V} \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{M}\mathbf{x})_2}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})_2} = \lambda_{\min} \ ,$$

wobei $\lambda_{\min} > 0$ die Aussage von Lemma 3.1 ist und die positive Definitheit beweist.

Für die Spektralkondition benötigen wir auch eine Abschätzung des maximalen Eigenwerts. Wir können völlig analog die Max-Min-Charakterisierung verwenden, um

$$\check{\lambda}_{\max} \leq \lambda_{\max}$$

zu erhalten. Damit ist die Kondition dieser reduzierten Situation durch diejenige, die im Beweis von Lemma 3.1 ermittelt wurde, beschränkt. \square

3.4.2 Globale Approximation

Um die Positivitätsproblematik der Teilchenmassen zu handhaben, ist es auch möglich, die Interpolation auf eine Approximationsaufgabe zu verallgemeinern. Es kann beispielsweise eine Minimierung des Funktionals

$$F_1 : \mathbf{x} \mapsto \|\mathbf{M}\mathbf{x} - \mathbf{f}\|_2^2$$

auf der Menge

$$P := \{\mathbf{x} \mid x_i \geq 0 \quad \forall i\}$$

durchgeführt werden. Im vorliegenden Fall ist \mathbf{M} die B-Spline-Interpolationsmatrix, der Vektor \mathbf{f} enthält die Knotenwerte der Dichte und der Lösungsvektor \mathbf{x} übernimmt die Rolle der Teilchenmassen. Dieses Problem enthält sicher die Interpolationsaufgabe, wenn diese mit nichtnegativen Massen zu lösen ist.

Ein Lösungsverfahren ist die Punktrelaxation, die sich dadurch ergibt, daß sukzessive eindimensionale Probleme gelöst werden, so daß

$$F(x_1^{k+1}, \dots, x_{j-1}^{k+1}, x_j^{k+1}, x_{j+1}^k, \dots, x_N^k) \leq F(x_1^{k+1}, \dots, x_{j-1}^{k+1}, \bar{x}, x_{j+1}^k, \dots, x_N^k) \quad \forall \bar{x} \geq 0$$

gilt. Das führt im vorliegenden Fall auf das Projizierte Gauß-Seidel-Verfahren mit der Matrix $\mathbf{A} := \mathbf{M}^2$ und der rechten Seite $\mathbf{b} := \mathbf{M}\mathbf{f}$. Die neuen Näherungen ergeben sich komponentenweise durch

$$x_j^{k+1} = \max \left\{ 0, \frac{1}{A_{jj}} \left[b_j - \sum_{\bar{j} < j} A_{j\bar{j}} x_{\bar{j}}^{k+1} - \sum_{\bar{j} > j} A_{j\bar{j}} x_{\bar{j}}^k \right] \right\} .$$

Wenn statt des angegebenen Funktionals nun

$$F_2 : \mathbf{x} \mapsto \|\mathbf{x} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{f}\|_{\mathbf{M}}^2 = \|\mathbf{M}\mathbf{x} - \mathbf{f}\|_{\mathbf{M}^{-1}}^2 = \|\mathbf{M}^{1/2}\mathbf{x} - \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{f}\|_2^2$$

minimiert wird, ergibt sich das Projizierte Gauß-Seidel-Verfahren mit der Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{M}$ und der rechten Seite $\mathbf{b} = \mathbf{f}$. Aufgrund der guten Kondition der Spline-Matrix \mathbf{M} ist die Wahl der Normen in diesem Funktional von theoretischer Seite durchaus vertretbar, sie läßt sich noch einfacher implementieren als das erste Verfahren. In beiden Fällen ist die Konvergenz gewährleistet.

Lemma 3.3 (Konvergenz des Projizierten Gauß-Seidel-Verfahrens)

Für die Funktionale F_1 und F_2 und die Menge P konvergiert das Projizierte Gauß-Seidel-Verfahren gegen die Lösung des Minimierungsproblems.

zum Beweis: Der vorliegende Fall läßt sich auf Standardsituationen von Minimierung unter Nebenbedingungen zurückführen. Das Theorem 1.2 in Kapitel 2 aus [GLT81] ist direkt anwendbar, denn die vorliegenden Funktionale sind differenzierbar, koerziv und strikt konvex. \square

3.4.3 Quasiinterpolation für B-Splines

Eine andere Möglichkeit zur Bestimmung der Teilchenmassen besteht in der Verwendung von Quasiinterpolationsoperatoren. Für eine allgemeine Definition der Quasiinterpolanten folgen wir [dBHR93, S.63]:

Definition 3.4 (allgemeine Quasiinterpolanten)

Ein Quasi-Interpolant Q für einen Splineraum S ist eine lineare Abbildung nach S , die lokal und beschränkt ist in einer relevanten Norm und einen nichttrivialen Polynomraum mit Polynomen vom totalen Grad bis einschließlich s' reproduziert. Ihm wird die polynomiale Ordnung $s' + 1$ zugeordnet.

Die geforderte Linearität führt zu einer Familie $(Q_n)_n$ von linearen Funktionalen für eine Basis, hier für die B-Splines. Die Konkretisierungen dieser Definition sind durchaus unterschiedlich, vgl z.B. [dBo73], [dBHR93] und [Kra98]. Normalerweise wird die Lokalität dadurch erreicht, daß eine Auswertung der einzelnen Q_n nur auf dem Träger des zugehörigen B-Splines erlaubt ist. Oft sind die verwendeten Funktionale eine Linearkombination aus geeigneten Auswertungen der Funktion oder ihrer Ableitungen an bestimmten Punkten. Wir beschränken uns auf die Auswertung der Funktion selbst in einzelnen Punkten. Im nichtregularisierten Fall würden sich kleine Oszillationen sonst sehr ungünstig auswirken und nach einer Regularisierung wie in Kapitel 4 sind keine Gradienten mehr zugänglich.

Definition 3.5 (Quasiinterpolation für den Restart)

Der Quasiinterpolant für den Restart ist eine lineare Abbildung stetiger Funktionen auf den Splineraum, der von einer Menge zulässiger Teilchen, die auf einem regelmäßigen Tensorproduktgitter ausgerichtet sind, aufgespannt wird. Er hat die Darstellung

$$Q(f) = \sum_n Q_n(f) \psi_n$$

mit einer Schar von linearen Funktionalen $(Q_n)_n$. Sie alle seien darstellbar als Linearkombination von Punktauswertungen

$$Q_n(f) = \sum_r \alpha_r^n f(\mathbf{a}_r^n)$$

und gehen mit

$$\alpha_r^n := [\det \mathbf{H}] \alpha_r^{(ref)} \quad , \quad \mathbf{a}_r^n := \mathbf{H} \mathbf{a}_r^{(ref)} + \mathbf{q}_n$$

auf ein Referenzfunktional $Q_{(ref)}(f) := \sum_r \alpha_r^{(ref)} f(\mathbf{a}_r^{(ref)})$ zurück, das zum Referenzteilchen einer uniformen Referenzsituation gehört. Dabei ist \mathbf{H} die Formmatrix der Teilchen, die aufgrund der Ausrichtung für alle Teilchen identisch ist.

Die Reproduktionseigenschaft für Polynome wird nur auf einem Teilgebiet ω verlangt. Das ist die Vereinigung aller Gitterzellen, in denen die überlagernden Teilchen des zugrundeliegenden unbeschränkten Gitters sämtliche zulässig sind.

Bemerkungen zu Definition 3.5

Referenzfunktional: Da die einzelnen Teilchen durch

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\det \mathbf{H}_n} \psi_{(ref)}(\mathbf{H}_n^{-1}[\mathbf{x} - \mathbf{q}_n])$$

auf ein Referenzteilchen zurückführbar sind und eine regelmäßige Anordnung besitzen, ist der Bezug auf eine Referenzsituation naheliegend. Die Skalierung kommt aus der Forderung, daß die transformierten Funktionale die selben Polynomräume lokal erhalten, die in der Referenzsituation reproduziert werden. Da Formfunktionen über ihr Integral normiert sind, bedeutet das Schrumpfen von Teilchen auch das Schrumpfen der Gewichte; es sind ja mehr Teilchen im selben Gebiet vorhanden.

Beschränktheit: Hier liegt Beschränktheit bezüglich $\|\cdot\|_\infty$ vor. Mit dem festen Überdeckungsgrad der uniformen Anordnung und der Beschränktheit der gegebenen ψ_n ist lediglich die Beschränktheit der Funktionale Q_n zu garantieren. Für Punktauswertungen gilt

$$Q_n(f) \leq \sum_r |\alpha_r^n| \|f\|_\infty .$$

Unter dem lokalen *Überdeckungsgrad* verstehen wir allgemein zu einem gegebenen Punkt die Anzahl der Teilchen, die einen Beitrag in diesem Punkt liefern können. Der Überdeckungsgrad eines Gebiets ist dann das Maximum der Werte der Punkte.

Projektionseigenschaft: Der Quasiinterpolant ist kein Projektor, aber er reproduziert lokal Polynome.

Invarianz auf Polynomen: Durch das Vorhandensein eines Randes erhält der so definierte Quasiinterpolant die Polynomräume auch nicht auf einem festen Teilgebiet, weil mit jeder Anwendung von Q der Randbereich wächst, in dem die Funktion dieses Polynom nicht mehr darstellt.

Positivität der Funktionale: In dieser Definition ist noch keine Aussage über Positivitätseigenschaften getroffen. Dieser Aspekt wird später thematisiert.

Lemma 3.6 (Konvergenz der Quasiinterpolation)

Betrachten wir die reguläre Situation auf einem Gitter der Maschenweite h , eine Quasiinterpolante Q der Ordnung s' auf $\omega \subset \Omega$ und eine glatte Funktion $f \in C^{\bar{s}}(\Omega)$ mit o.B.d.A. $\bar{s} < s'$. Dann gilt die Abschätzung

$$\|f - Q(f)\|_{\infty, \omega} \leq C h^{\bar{s}+1}$$

mit einer Konstanten C , die nur von der Raumdimension, der Referenzfunktion, der Referenzquadraturformel und der Funktion f abhängt.

Beweis: Wir betrachten eine Gitterzelle aus ω und das Taylorpolynom T vom Grad \bar{s} um deren Mittelpunkt \mathbf{q} zur Funktion f und haben die Abschätzung

$$\delta(\mathbf{x}) := f(\mathbf{x}) - T(\mathbf{x}) \leq c_1 |\mathbf{x} - \mathbf{q}|^{\bar{s}+1} .$$

Die Indizes der Teilchen, die zu dieser Gitterzelle einen Beitrag liefern, fassen wir zur Indexmenge I zusammen. Aufgrund der regulären Situation gibt es ein c_2 , so daß die beitragenden Teilchen ihre Stützstellenwerte nicht weiter als $c_2 h$ entfernt liegen haben. Wir erhalten mit der Polynomreproduktion auf ω

$$\begin{aligned} [f - Q(f)](\mathbf{x}) &= T(\mathbf{x}) + \delta(\mathbf{x}) - [Q(T)](\mathbf{x}) - [Q(\delta)](\mathbf{x}) \\ &= \delta(\mathbf{x}) - \sum_{\bar{n} \in I} Q_{\bar{n}}(\delta) \psi_{\bar{n}}(\mathbf{x}) . \end{aligned}$$

Nun ist $\delta = f - T$ bereits beschränkt, für seine Approximierende $Q(\delta)$ brauchen wir Abschätzungen der einzelnen Summanden. Diese erhalten wir mit

$$\begin{aligned} Q_n(\delta) &= \sum_r \alpha_r^n \delta(\mathbf{a}_r^n) \\ &\leq \sum_r |\det \mathbf{H}_n \alpha_r^{(ref)}| c_1 [c_2 h]^{\bar{s}+1} = \det \mathbf{H}_n \left[c_1 c_2^{\bar{s}+1} \sum_r |\alpha_r^{(ref)}| \right] h^{\bar{s}+1} \end{aligned}$$

und der Beschränktheit der Terme $|\det \mathbf{H}_n \psi_n(\mathbf{x})|$ durch $\|\psi_{(ref)}\|_\infty$. Aufgrund der Beschränktheit des Überdeckungsgrades $|I|$ ist die Behauptung mit der Konstanten

$$C := c_1 + |I| \|\psi_{(ref)}\|_\infty c_1 c_2^{\bar{s}+1} \sum_r |\alpha_r^{(ref)}|$$

erfüllt. □

Auch für die Konstruktion von Quasiinterpolanten nutzen wir die Tensorprodukt-Eigenschaften aus und setzen den mehrdimensionalen Fall aus Lösungen des eindimensionalen Falles zusammen.

Lemma 3.7 (Tensorprodukt-Quasiinterpolant)

Zu einem gegebenem eindimensionalem Quasi-Interpolant $Q^{(1D)}$ der Ordnung s' für uniform verteilte Ansatzfunktionen auf \mathbb{R} zu Mittelpunkten q_k mit den Funktionalen $\sum_{r \in R} \alpha_r f(q_k + a_r)$ definieren wir d -dimensionale Tensorprodukt-Funktionale für die zugehörigen Tensorprodukt-Ansatzfunktionen durch

$$Q_{(k_1, \dots, k_d)}(f) := \sum_{\mathbf{r} \in R^d} \left[\prod_{i=1}^d \alpha_{r_i} \right] f(\mathbf{q}_{\mathbf{k}} + \mathbf{a}_{\mathbf{r}}) .$$

Dabei ist $\mathbf{a}_{\mathbf{r}} = (a_{r_1}, \dots, a_{r_d})$ und $\mathbf{q}_{\mathbf{k}} = (q_{1,k_1}, \dots, q_{d,k_d})$. Dann ist $Q := \sum_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}$ ein d -dimensionaler Quasi-Interpolant für den Restart mit Ordnung s' auf dem ganzen Gitter.

Wird für einen Quasi-Interpolanten nur eine Teilmenge der Indexmenge \mathbb{Z}^d benutzt, so erhalten wir auf dem Teilgebiet ω , das wie in Definition 3.5 gegeben ist, auch diese Reproduktion.

Beweis: Diese Eigenschaft folgt direkt aus der Tensorprodukt-Struktur. Testen wir die Reproduktion des d -dimensionalen Monoms $p : \mathbf{x} \mapsto \prod_{i=1}^d x_i^{e_i}$ mit $e_i < s'$

für alle i . Den Faktor, mit dem der Referenz-Tensorprodukt-B-Spline in jeder Raumrichtung skaliert werden werden muß, nennen wir \bar{h} . Die entsprechenden Summen laufen komponentenweise für die Vektoren \mathbf{k} und \mathbf{r} ; für k_i in \mathbb{Z} und für r_i in der Indexmenge R . Es gilt

$$\begin{aligned}
[Q(p)](\tilde{\mathbf{x}}) &= \sum_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{x} \mapsto \prod_{i=1}^d x_i^{e_i}\right) \psi_{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{x}}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{r}} \left[\prod_{i=1}^d \alpha_{r_i} \right] \left[\prod_{i=1}^d [q_{i,k_i} + a_{r_i}]^{e_i} \right] \frac{1}{\bar{h}^d} \left[\prod_{i=1}^d \hat{\psi}^{(1D)}\left(\frac{[\tilde{x}_i - q_{i,k_i}]^{e_i}}{\bar{h}}\right) \right] \\
&= \sum_{k_1, r_1} \dots \sum_{k_d, r_d} \prod_{i=1}^d \left[\alpha_{r_i} [q_{i,k_i} + a_{r_i}]^{e_i} \frac{1}{\bar{h}} \hat{\psi}^{(1D)}\left(\frac{[\tilde{x}_i - q_{i,k_i}]^{e_i}}{\bar{h}}\right) \right] \\
&= \prod_{i=1}^d \sum_{k_i, r_i} \left[\alpha_{r_i} [q_{i,k_i} + a_{r_i}]^{e_i} \frac{1}{\bar{h}} \hat{\psi}^{(1D)}\left(\frac{[\tilde{x}_i - q_{i,k_i}]^{e_i}}{\bar{h}}\right) \right] \\
&= \prod_{i=1}^d \sum_{k_i} Q_{k_i}^{(1D)}(x \mapsto x^{e_i}) \psi_{k_i}^{(1D)}(\tilde{x}_i) = \prod_{i=1}^d \tilde{x}_i^{e_i} = p(\tilde{\mathbf{x}}) ,
\end{aligned}$$

und damit wird der notwendige d -dimensionale Polynomraum erhalten.

Für eine Quasiinterpolante mit eingeschränkter Indexmenge gilt die entsprechende Aussage auf ω , indem für eine Zelle von ω als Indizes nur die Menge der dort notwendigen Teilchen betrachtet wird. \square

Wie aus dem Beweis ersichtlich ist, werden nicht nur die Polynome mit durch s' beschränktem totalem Grad, sondern sogar die mit dem durch diese Konstante beschränkten maximalen Grad reproduziert.

Nun wollen wir für eindimensionale B-Spline-Ansatzfunktionen geeignete Quasi-Interpolanten herleiten. Für die Reproduktion von Polynomen ist es mit der Linearität ausreichend, zu garantieren, daß Monome bis zu einem bestimmten Grad erhalten bleiben. Wir bestimmen also die Koeffizienten des im Ursprung liegenden B-Splines, die für die lokale Darstellung der Monome dort notwendig sind. Werden diese Monomkoeffizienten reproduziert, so werden wegen der Linearität auch entsprechende Polynomkoeffizienten an dieser Stelle richtig berechnet und mit Translationsargumenten stimmen die Koeffizienten auf dem gesamten Referenzgitter, so daß ein eindimensionaler Quasiinterpolant entsprechender Ordnung gegeben ist.

Eindimensionale Splinekoeffizienten für Monome

Für die eindimensionalen, zum Ursprung symmetrischen Referenz-B-Splines B_s aus Abschnitt 2.1.1 wollen wir die Koeffizienten berechnen, die zur Darstellung der Monome durch B-Splines notwendig sind. Zum Monom vom Grad e mit $e < s$ gibt es sicher Koeffizienten, so daß die Darstellung

$$x^e = \sum_k \beta_k B_s(x - k)$$

gültig ist, denn $x \mapsto x^e$ befinden sich im Splineraum. Wir sind hier am Koeffizienten $\beta := \beta_0$ interessiert.

Koeffizienten ungerader Grade: Wenn wir wissen, daß ein gegebener Splineraum das betrachtete Monom enthält, so können wir mit Symmetrieüberlegungen den entsprechenden Koeffizienten bestimmen. Mit der Achsensymmetrie des Referenz-B-Splines und der Punktsymmetrie der zu reproduzierenden Funktionen hat der Koeffizient den Wert 0.

Koeffizienten für 0-ten Grad: Nach Konstruktion der angegebenen Referenzsituation ist klar, daß die Koeffizienten für die Funktion $x \mapsto 1$ sämtlich eins sind.

Für die höheren Monome sind die einzelnen Ansatzfunktionen zu unterscheiden.

Koeffizienten für 2-ten Grad für quadratische B-Splines: Wir vergleichen auf dem um Null liegenden B-Spline-Teilintervall das Monom x^2 mit der Superposition der Beiträge derjenigen B-Splines, die dieses Intervall betreffen. Ein Abgleich der Polynomkoeffizienten ergibt ein lineares Gleichungssystem für die B-Spline-Koeffizienten. Daraus ergibt sich der gesuchte Wert

$$\beta = -\frac{1}{4} .$$

Koeffizienten für 2-ten Grad für kubische B-Splines: Analoge Überlegungen zu oben ergeben auf dem Intervall $[0, 1]$ vier Koeffizienten von beitragenden Splines. Für den um Null zentrierten Referenzspline erhalten wir

$$\beta = -\frac{1}{3} .$$

Andere Monome liegen nicht in den betrachteten Splineräumen und sind daher auch nicht von Interesse.

Eindimensionale Quasiinterpolationsformeln

Nun haben wir Bedingungen für die Quasiinterpolanten bestimmt und können uns um konkrete Beispiele kümmern. Da wir es mit symmetrischen Ansatzfunktionen zu tun haben, ist es naheliegend, auch für diese Quasiinterpolationsfunktionale Symmetrie zu fordern. Damit sind die Bedingungen für die Monome ungeraden Grades automatisch erfüllt. Wir betrachten Referenzformeln der Form

$$Q_{(ref)}^{(1D)}(f) = \sum_{r=1}^{r_{max}} \alpha_r [f(a_r) + f(-a_r)] .$$

Wenn Null als Auswertungspunkt auftritt, können die beiden identischen Stellen zusammengefaßt werden und das Gewicht wird mit α_0 bezeichnet.

Quasiinterpolation zweiter Ordnung: Da die Monombedingung für Grad 1 bereits erfüllt ist, brauchen wir nur diejenigen zu Grad 0 garantieren. Wir müssen

Tabelle 3.1: einige Quasiinterpolationsformeln

für quadratische B-Splines				
a)	Position	-1	0	1
	Gewichte	$-\frac{1}{8}$	$\frac{5}{4}$	$-\frac{1}{8}$
b)	Position	-2	0	-2
	Gewichte	$-\frac{1}{32}$	$\frac{17}{16}$	$-\frac{1}{32}$
c)	Position	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
	Gewichte	$-\frac{1}{2}$	2	$-\frac{1}{2}$
für kubische B-Splines				
a)	Position	-1	0	1
	Gewichte	$-\frac{1}{6}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{6}$
b)	Position	-2	0	2
	Gewichte	$-\frac{1}{24}$	$\frac{13}{12}$	$-\frac{1}{24}$
c)	Position	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
	Gewichte	$-\frac{2}{3}$	$\frac{7}{3}$	$-\frac{2}{3}$

sicherstellen, daß die Summe über alle Gewichte eins ergibt. Das einfachste Beispiel ist die Mittelpunktsauswertung.

Quasiinterpolation mindestens dritter Ordnung: Versuchen wir, mit einer geringen Anzahl von Stützstellen auszukommen, so bemerken wir, daß Zweipunktformeln nicht genügen. Dies liegt daran, daß die Bedingungen

$$2\alpha_1 = 1 \quad ; \quad 2\alpha_1[a_1]^2 = \beta < 0$$

nicht gleichzeitig erfüllbar sind. Wohl aber sind Dreipunktformeln möglich. Sie führen auf

$$\alpha_0 + 2\alpha_1 = 1 \quad ; \quad 2\alpha_1[a_1]^2 = \beta < 0 \quad ,$$

wobei diese Gleichungen unterbestimmt sind. Es ist noch die Vorgabe der Lage der Stützstellen möglich. Geschickte Stellen sind solche, die von mehreren benachbarten B-Splines geteilt werden. Im Hinblick auf Kapitel 5 ist auch eine Übereinstimmung dieser Stellen in einer Gitterhierarchie vorteilhaft. Unter diesen Aspekten sind die Referenz-Quasiinterpolationsfunktionale aus Tabelle 3.1 naheliegend.

Da für kubische B-Splines auch die Polynome vom Grad 3 reproduziert werden und die zugehörige Bedingung mit der Symmetrie bereits erfüllt ist, haben wir dann bereits Quasiinterpolanten vierter Ordnung.

Nichtnegative Massen

Die Benutzung negativer Gewichte ist für Quasiinterpolationen mit einer Ordnung größer als zwei unvermeidbar. Für unsere Situation bedeutet das, daß negative Massenwerte auch bei der Approximation positiver Dichten möglich wären. Das muß hier ausgeschlossen werden und wird durch Nullsetzen negativer Werte erreicht. Wir nennen dieses Vorgehen *Quasiinterpolation mit Projektion*.

Wenn eine nichtnegative Funktion zu approximieren ist, so ergibt eine Anwendung der Mittelpunktsregel als Quasiinterpolation zweiter Ordnung auch stets nichtnegative Koeffizienten. Insofern kann die Quasiinterpolation mit Projektion als geeignete Mittelung der benutzten Quasiinterpolation mit derjenigen zweiter Ordnung verstanden werden.

3.5 Die Approximation der Entropiedichte

Um eine Teilchennäherung der Entropiedichte zu berechnen, kann fast wie für die Masse vorgegangen werden. Auch sie ist eine additive Größe, hat aber keine Einschränkung des Vorzeichens. Aus den resultierenden Beiträgen s_n der einzelnen Teilchen ergeben sich die spezifischen Teilchenentropien S_n dem Ansatz entsprechend durch

$$S_n = \frac{s_n}{m_n} .$$

Es kommen damit für diese Approximation nur die bei der Masseapproximation bestimmten Teilchen echt positiver Masse in Frage. Da keine Einschränkungen der S_n zu berücksichtigen sind, kann man für diese Teilchen entweder die Quasiinterpolation ohne Projektion verwenden oder das zu ihnen gehörige Interpolationsgleichungssystem lösen. Hierfür eignet sich nach den Überlegungen in Unterabschnitt 3.4.1 beispielsweise das SOR-Verfahren.

3.6 Die Approximation der Geschwindigkeit

3.6.1 Der Ansatz

Wir wollen für ein gegebenes Teilchenensemble Anfangsgeschwindigkeiten für die Simulation festlegen. Als Parameter sind dabei für jedes Teilchen Werte für \mathbf{q}' und \mathbf{H}' zu bestimmen. Eine Möglichkeit dafür ist in [GLY00, Abschnitt 6] beschrieben. Dort wird das globale Geschwindigkeitsfeld, das sich aus der Überlagerung der Teilcheneinzelgeschwindigkeiten ergibt, mittels Spline-Interpolation für die Massenflüsse ermittelt. Aufgrund der Approximationseigenschaften der Spline-Interpolation wird damit das globale Geschwindigkeitsfeld sehr gut approximiert. Oft ist diese Eigenschaft nicht ausreichend. Wenn nämlich die Teilchengeschwindigkeiten einzeln betrachtet schlechte Näherungen darstellen und

nur durch die Überlagerung eine gute Approximation erreicht wird, so laufen die Teilchen nach kurzer Zeit schief übereinander und verlieren die Näherungseigenschaft. Insbesondere, wenn die Kopplung der Teilchen schwach ist, tritt dieser Effekt auf. Daher scheint ein Ansatz vielversprechender, der für die Geschwindigkeit jedes einzelnen Teilchens eine brauchbare Approximation ergibt. Deren Güte überträgt sich auch auf die Konvexkombination und damit auf die Gesamtgeschwindigkeit.

Der Vorschlag, lokal Taylorpolynome zu verwenden, um analytisch gegebene glatte Anfangsgeschwindigkeiten auf den Teilchen zu approximieren, liefert in [Ys00a] vielversprechende Ergebnisse bei Bewegungen in externen Kraftfeldern. Solche Bewegungen sind besonders schwierig, da die Teilchen nicht gegenseitig interagieren und damit nicht regularisierend wirken können. In der Restart-Situation sind Taylorpolynome keine sinnvolle Wahl, denn es gibt hier durchaus leichte Oszillationen der zu approximierenden Größen, die sich sehr nachteilig auswirken. Auch für das verwandte Problem des ersten Aufsetzens einer Rechnung aus punktwise experimentell gewonnenen Daten ist dieser Ansatz nicht direkt verwendbar.

Um eine lokale Approximation eines gegebenen Geschwindigkeitsfeldes durch eine Teilchengeschwindigkeit zu erhalten, verfolgen wir den naheliegenden Ansatz von normoptimalen Approximierenden. Die dabei verwendete Norm muß sicher einen lokalen Charakter haben, da das Teilchen ja nur auf seinem Träger Geschwindigkeitsbeiträge liefert. Gesucht sind also für das n -te Teilchen die Parameter \mathbf{q}'_n und \mathbf{H}'_n , so daß die Teilchengeschwindigkeit $\mathbf{v}_{n;\mathbf{q}',\mathbf{H}'}$: $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{q}' + \mathbf{H}'\mathbf{H}_n^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_n)$ eine gegebene globale Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{v}}$ in einer geeigneten lokalen Norm $\|\cdot\|_{V_n}$ optimal approximiert. Es soll

$$\|\mathbf{v}_{n;\mathbf{q}'_n,\mathbf{H}'_n} - \tilde{\mathbf{v}}\|_{V_n} = \min_{\mathbf{q}',\mathbf{H}'} \|\mathbf{v}_{n;\mathbf{q}',\mathbf{H}'} - \tilde{\mathbf{v}}\|_{V_n}$$

gelten.

Ein natürlicher und wichtiger Fall sind Hilbertraumnormen, die auf lineare Operatoren führen. Im Diskreten sind es Least-Squares-Approximationen, auf die wir uns im weitem beschränken.

3.6.2 Reduktion des Problems und Eigenschaften

Teilchengeschwindigkeit als affine Funktion

Zu gegebenen Lageparameter \mathbf{q}_n und \mathbf{H}_n definieren die Teilchengeschwindigkeitsparameter \mathbf{q}' und \mathbf{H}' die Geschwindigkeit als

$$\mathbf{v}_{n;\mathbf{q}',\mathbf{H}'}(\mathbf{x}) = \mathbf{q}' + \mathbf{H}'\mathbf{H}_n^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_n) .$$

Das ist eine affine Funktion. Umgekehrt läßt sich eine allgemeine affine Geschwindigkeitsfunktion $\mathbf{a} : \mathbf{x} \mapsto \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ auch durch die Teilchenparameter darstellen mit $\mathbf{H}' := \mathbf{A}\mathbf{H}_n$ und $\mathbf{q}' := \mathbf{b} + \mathbf{A}\mathbf{q}_n$.

Wenn also das Minimierungsproblem für affine Funktionen eindeutig lösbar ist, so legt dessen Lösung die Geschwindigkeitsparameter fest. Damit brauchen wir uns nicht auf eine spezielle Parametrisierung bei der Minimierung festzulegen.

Sinnvolle Normen

Da wir uns auf Hilberträume konzentrieren wollen, betrachten wir Skalarprodukte. Um das Problem auf skalarwertige Funktionen reduzieren zu können, beschränken wir uns auf nichtnegative symmetrische Bilinearformen der Gestalt

$$(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{2 \times \mu} := \int (\mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{u}(\mathbf{x}))_2 \, d\mu \quad .$$

Zu Maßen μ bilden sie auf geeigneten Räumen Skalarprodukte. Für eine gegebene Orthonormalbasis entkoppeln die Komponenten wegen

$$(\mathbf{w}, \mathbf{u})_{2 \times \mu} = \sum_{i=1}^d (w_i, u_i)_\mu := \sum_{i=1}^d \int w_i(\mathbf{x}) u_i(\mathbf{x}) \, d\mu$$

in eine Darstellung mit Skalarprodukten skalarwertiger Funktionen.

Im Hinblick auf die Implementierung sind für uns vor allem diskrete, insbesondere endliche Maße von Interesse. Für die letzteren verwenden wir die Darstellung

$$\int f \, d\mu = \sum_l \bar{\mu}_l f(\bar{\mathbf{x}}_l)$$

mit gegebenen Stützstellen $\bar{\mathbf{x}}_l$ und Gewichten $\bar{\mu}_l$.

Reduktion auf den skalaren Fall

Das Ausgleichsproblem kann komponentenweise gelöst werden. Zunächst ist

$$\|\mathbf{a} - \mathbf{w}\|_{2 \times \mu} \rightarrow \min \quad \Leftrightarrow \quad \|\mathbf{a} - \mathbf{w}\|_{2 \times \mu}^2 = \sum_{i=1}^d \|a_i - w_i\|_\mu^2 \rightarrow \min \quad .$$

Sei dabei $a_i : \mathbf{x} \mapsto \sum_k A_{ik} x_k + b_i$ die i -te Komponente, die ausschließlich von b_i und $A_{i1} \dots A_{id}$ abhängt. Da diese Parameter in keiner anderen Komponente eine Rolle spielen, entkoppeln die Terme der letzten Summe und wir können die Teilprobleme

$$\|a_i - w_i\|_\mu \rightarrow \min \quad \forall i \in \{1, \dots, d\}$$

getrennt lösen.

Räume und Operatoren

Für die skalaren Probleme kümmern wir uns nun um geeignete Räume. Als kanonischen, unserem Problem zugrundeliegenden Hilbertraum betrachten wir den Tuppelraum über den Stützstellen und bezeichnen ihn mit l_μ^2 . Die Einschränkung der linearen Polynome Π auf die Stützstellen des Maßes $R^{(d)} : \Pi \rightarrow l_\mu^2$ nennen wir im folgenden *Stützstellenrestriktion*. Ihr Bild sei $\Pi^{(d)}$. Damit ist die folgende Definition angemessen.

Definition 3.8 (diskreter Least-Squares-Operator)

Der skalare diskrete Least-Squares-Operator ist durch

$$LS_\mu^{(d)}(w) := \arg \min_{a \in \Pi^{(d)}} \|a - w\|_\mu$$

gegeben. Als Argumente sind Funktionen aus l_μ^2 zugelassen, für stückweise stetige Funktionen wird die kanonische Einbettung mittels Punktauswertung benutzt.

Er hat folgende Eigenschaften:

Charakterisierung: Minimumstellen \tilde{w} lassen sich charakterisieren durch

$$(w - \tilde{w}, u)_\mu = 0 \quad \forall u \in \Pi^{(d)} . \quad (3.2)$$

Es ist nämlich

$$\|w - [\tilde{w} + u]\|_\mu^2 = \|w - \tilde{w}\|_\mu^2 - 2(w - \tilde{w}, u)_\mu + \|u\|_\mu^2 \quad (3.3)$$

und damit die Bedingung (3.2) hinreichend, da durch Störung in eine beliebige Richtung u die interessierende Norm wächst. Andererseits führt die Variationsbedingung

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \|w - [\tilde{w} + \varepsilon u]\|_\mu^2 \Big|_{\varepsilon=0} = 0 \quad \forall u \in \Pi^{(d)}$$

mit (3.3) direkt auf (3.2).

Wohldefiniertheit: Mit der Abgeschlossenheit von $\Pi^{(d)}$ folgt die Existenz und Eindeutigkeit der Minimumstellen. Insbesondere ist $LS_\mu^{(d)}$ wohldefiniert. Entweder verwendet man eine Argumentation wie in den Unterabschnitten 4.2.3 und 4.3.2 oder die obige Charakterisierung. Die Eindeutigkeit gilt, denn die Annahme zweier verschiedener Minima \tilde{w} und \bar{w} führt mit

$$\begin{aligned} (w - \tilde{w}, \bar{w} - \tilde{w})_\mu = 0 \quad ; \quad (w - \bar{w}, \tilde{w} - \bar{w})_\mu = 0 \\ \Rightarrow \quad 0 = (\bar{w} - \tilde{w}, \bar{w} - \tilde{w})_\mu = \|\bar{w} - \tilde{w}\|_\mu^2 \end{aligned}$$

auf einen Widerspruch. Die Existenz ist gesichert, da das Problem auf die kompakte Menge

$$\{ u \in \Pi^{(d)} \mid \|u\|_\mu \leq 2\|w\|_\mu \}$$

eingeschränkt werden kann und dort ein stetiges Funktional minimiert wird.

Linearität: Sie folgt wegen

$$\begin{aligned} & (\alpha w_1 + \beta w_2 - [\alpha LS_\mu^{(d)}(w_1) + \beta LS_\mu^{(d)}(w_2)], u)_\mu \\ &= \alpha(w_1 - LS_\mu^{(d)}(w_1), u)_\mu + \beta(w_2 - LS_\mu^{(d)}(w_2), u)_\mu = 0 \quad \forall u \in \Pi^{(d)} . \end{aligned}$$

unmittelbar aus der obigen Charakterisierung.

Projektion: Der Operator $LS_\mu^{(d)}$ ist eine Projektion auf $\Pi^{(d)}$, denn für $w \in \Pi^{(d)}$ wird $\min_{a \in \Pi^{(d)}} \|a - w\|_\mu = 0$ in $a = w$ angenommen.

Kontraktion: In der zugehörigen Norm ist $LS_\mu^{(d)}$ nach Definition eine Kontraktion, da $0 \in \Pi^{(d)}$ und damit $\|LS_\mu^{(d)}(w)\|_\mu \leq \|0 - w\|_\mu = \|w\|_\mu$ ist.

Skalierungsinvarianz: Es gilt $LS_{c\mu}^{(d)} = LS_\mu^{(d)}$ für $c \in \mathbb{R}^+$, da alle Normen mit dem Faktor c skaliert werden, so daß die Minimumstelle gleichbleibt. Insofern spielt beispielsweise später eine Skalierung der lokalen Norm eines Teilchens mit seiner Masse keine Rolle.

Ist $R^{(d)}$ injektiv, so können wir Π mit $\Pi^{(d)}$ identifizieren. Diese Situation ist im folgenden immer gegeben, weil der Raum \mathbb{R}^d mit der Bedingung für zulässige Teilchen von den Stützstellen des Maßes μ aufgespannt wird. Damit gelten alle Eigenschaften auch für Π anstelle von $\Pi^{(d)}$. Wir bezeichnen diesen Operator mit LS_μ .

3.6.3 Geschwindigkeitsapproximation mit Teilchen

Gehen wir davon aus, daß für eine gegebene Teilchenmenge die Lageparameter \mathbf{q}_n und \mathbf{H}_n bereits gegeben sind. Wir wollen Teilchengeschwindigkeiten mit dem vorgestellten Least-Squares-Ansatz festlegen und können uns bei der Verwendung von Normen in obiger Form auf die Approximation der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten zurückziehen. Nun geht es also darum, geeignete lokale Normen zu finden. Eine nicht zu geringe Anzahl von Stützstellen und eine gleichmäßige Verteilung in der Umgebung des Teilchenschwerpunktes sind erstrebenswerte Eigenschaften.

Eine Möglichkeit besteht darin, von einer passenden globalen l^2 -artigen Norm solche lokalen Normen abzuleiten. Wir verfolgen einen anderen Weg und definieren lokale Normen dadurch, daß eine auf dem Referenzteilchen definierte Norm auf jedes Teilchen transformiert wird. Eine naheliegende Möglichkeit einer solchen Referenznorm sind gleiche Gewichte auf einem regelmäßigen Gitter, das den Teilchenträger überzieht. Oder die Norm wird stärker um den Teilchenmittelpunkt gewichtet, um den Einfluß von Bereichen, die wenig zur Teilchenmasse beitragen, zu reduzieren. Eine Skalierung der Gewichte mit den Punktwerten der Formfunktion ψ leistet das gewünschte.

Für eine Implementierung ist es interessant, daß möglichst viele Stützstellen benachbarter Teilchen übereinstimmen, da an allen Stützstellen Geschwindigkeiten berechnet werden müssen. Bei Verwendung von B-Splines als Ansatzfunktionen ist eine regelmäßige Ausgangskonfiguration auf einem Gitter üblich.

Damit ist auch diese Koinzidenz von Stützstellen benachbarter Teilchen leicht zu erreichen.

Generell ist der Rand des Definitionsbereiches $\tilde{\Omega}$ der alten Geschwindigkeit für diese Überlegungen ein kritischer Bereich. Neue Teilchen, die die alten Größen approximieren sollen, liegen möglicherweise so, daß auch Bereiche undefinierter Geschwindigkeit überdeckt werden. Es muß also verhindert werden, daß solche Bereiche in die lokale Norm, die die Geschwindigkeitsapproximation liefert, eingehen. Garantiert das Approximationsschema nun generell $\Omega \subset \tilde{\Omega}$, so ist dieses Problem umgangen. Andere Strategien, mit dieser Art von Problemen umzugehen, werden unten näher beschrieben und beinhalten lokale Normen mit kleineren Trägern, welche für die zulässigen Teilchen nach Definition garantiert in $\tilde{\Omega}$ liegen. Dazu werden beispielsweise die obigen Vorschläge auf den kleinen Bereich eingeschränkt.

3.6.4 Eine Abschätzung für symmetrisch gewichtete Normen

Ein Teilchen

Betrachten wir nun ein Teilchen und für dieses eine symmetrische diskrete lokale Norm. Es sind also Stützstellen \mathbf{x}_l und Gewichte $\bar{\mu}_l$ so gegeben, daß sie eine Würfelsymmetrie zum Teilchenmittelpunkt \mathbf{q} aufweisen. Als Beispiel denken wir uns ein axial ausgerichtetes Teilchen, das symmetrisch von einem feinen Gitter überzogen ist. Dessen Punkte beschreiben die Stützstellen, deren Gewichte sämtliche identisch sind oder von Punktauswertungen der Formfunktion stammen.

Nun können wir eine orthogonale Basis von $\Pi \subset l_\mu^2$ direkt angeben. Die konstante Funktion und die Komponentenfunktionen

$$\begin{aligned} b_0 &: \mathbf{x} \mapsto 1, \\ b_i &: \mathbf{x} \mapsto x_i - q_i \quad \text{für } i = 1, \dots, d \end{aligned}$$

erfüllen die Orthogonalitätsrelation und haben die notwendige Mächtigkeit.

Damit haben wir nun die Darstellung

$$LS_\mu(w) = \bar{w} := \sum_{i=0}^d \frac{(w, b_i)_\mu}{(b_i, b_i)_\mu} b_i, \quad (3.4)$$

wie man mit der Charakterisierung (3.2) wegen $(\bar{w}, b_i) = (w, b_i)$ leicht sieht. Im aktuellen Fall hat die Bestapproximation eine sehr anschauliche Interpretation. Der Koeffizient der ersten Basisfunktion b_0 ist als

$$\frac{(f, b_0)_\mu}{(b_0, b_0)_\mu} = \frac{\int f \, d\mu}{\int d\mu}$$

ein Mittelwert. Wir betrachten für die Komponentenfunktionen b_1, \dots, b_d exemplarisch b_1 . Das Maß läßt sich aufgrund der angenommenen Symmetrie darstellen durch Stützstellenpaare $(\mathbf{q} + \mathbf{x}_l, \mathbf{q} - \mathbf{x}_l)$, die symmetrisch zur Achse $x_1 = q_1$ liegen und die Gewichte μ_l besitzen. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{(f, b_1)_\mu}{(b_1, b_1)_\mu} &= \frac{\sum_l [f(\mathbf{q} + \mathbf{x}_l) - f(\mathbf{q} - \mathbf{x}_l)] x_{l,1} \bar{\mu}_l}{\sum_l 2x_{l,1}^2 \bar{\mu}_l} \\ &= \sum_l \alpha_l \frac{f(\mathbf{q} + \mathbf{x}_l) - f(\mathbf{q} - \mathbf{x}_l)}{2x_{l,1}} \end{aligned}$$

mit

$$\alpha_l := \frac{x_{l,1}^2 \bar{\mu}_l}{\sum_k x_{k,1}^2 \bar{\mu}_k} \geq 0 \quad .$$

Die Faktoren α_l bilden eine Zerlegung der Eins, so daß es sich beim betrachteten Term um eine Konvexkombination von symmetrischen Differenzenquotienten handelt.

Nun können wir unter geeigneten Glattheitsvoraussetzungen eine lokale Fehlerabschätzung angeben. Als Gültigkeitsbereich kommt hier der Durchschnitt des Teilchenträgers mit dem Definitionsbereich der zu approximierenden Funktion in Betracht. Im aktuellen Kontext nennen wir diesen Bereich den *relevanten Teil des Teilchenträgers*.

Lemma 3.9 (lokale $\|\cdot\|_\infty$ -Abschätzungen des Fehlers)

Zu einer gegebenen Referenzformfunktion und einer zugehörigen Referenznorm $\|\cdot\|_{\hat{\mu}}$ betrachten wir ein daraus durch Skalierung mit dem Faktor h hervorgehendes Teilchen mit zugehöriger Norm $\|\cdot\|_\mu$. Für eine Funktion $f \in C^{\bar{s}}$ mit $\bar{s} \leq 2$, deren Definitionsbereich den Träger von μ umfaßt, gilt auf dem relevanten Teil des Teilchenträgers

$$\|f - LS_\mu(f)\|_{loc, \infty} \leq C_{\hat{\mu}} C_f h^{\bar{s}} \quad .$$

Die Konstante $C_{\hat{\mu}}$ hängt nur von der Referenznorm, C_f nur von der Funktion f auf dem relevanten Teil des Teilchenträgers ab.

Beweis: 1. *Reduktion mit Taylorpolynom:* Diese lokalen Abschätzungen beruhen auf dem Satz von Taylor. Da LS_μ eine Projektion auf den Raum Π ist, gilt mit der Linearität für das Taylorpolynom T vom Grad $\bar{s} - 1$

$$f - LS_\mu(f) = f - T - LS_\mu(f - T) \quad . \quad (3.5)$$

Auf den ersten Summanden $\delta := f - T$ ist der Satz von Taylor direkt anwendbar, um auf dem relevanten Teil des Teilchenträgers eine Abschätzung mit $C_f h^{\bar{s}}$ zu erhalten. Für den zweiten Summanden kann man im betrachteten Fall ein entsprechendes Ergebnis erzielen, wie folgt.

2. *Abschätzung der reduzierten Situation:* Aufgrund der Darstellung in Gleichung (3.4) ist

$$\|LS_\mu(\delta)\|_\infty \leq \sum_i \left| \frac{(\delta, b_i)_\mu}{(b_i, b_i)_\mu} \right| \|b_i\|_\infty \leq \left[\sum_i \left| \frac{(1, |b_i|)_\mu}{(b_i, b_i)_\mu} \right| \|b_i\|_\infty \right] \|\delta\|_{loc, \infty}$$

und der erste Faktor geht mit einer Transformation auf die Referenzkonfiguration in $C_{\hat{\mu}}$ ein. Auf dem relevanten Teil des Teilchenträgers ist der zweite Faktor wie oben abschätzbar und die Behauptung folgt. \square

Ein Teilchenensemble

Für Fehlerabschätzungen, hier also bei einem Vergleich der globalen Geschwindigkeiten, können wir generell nur das Gebiet $\Omega \cap \tilde{\Omega}$ betrachten. Dabei ist Ω das neue masserfüllte Gebiet. Nur auf dem angegebenen Bereich sind beide Geschwindigkeiten definiert. Unter Verwendung der obigen Abschätzung macht folgendes Lemma Sinn, um globale Aussagen zu erhalten.

Lemma 3.10 (Maximumnorm bei Konvexkombinationen)

Umfaßt der Definitionsbereich einer Funktion f die Träger der lokalen Normen $\|\cdot\|_{\mu_n}$ aller Teilchen und haben wir jeweils auf dem relevanten Teil des Teilchenträgers eine lokale Abschätzung der Form

$$\|f - LS_{\mu_n}(f)\|_{loc, \infty} \leq C_n \quad ,$$

so gilt auf dem gemeinsamen Definitionsbereich der alten und neuen Funktion

$$\|f - \sum_n \chi_n LS_{\mu_n}(f)\|_\infty \leq \max_n C_n \quad .$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \|f - \sum_n \chi_n LS_{\mu_n}(f)\|_\infty &= \left\| \sum_n \chi_n [f - LS_{\mu_n}(f)] \right\|_\infty \\ &\leq \max_{\mathbf{x}} \sum_n \chi_n(\mathbf{x}) |f(\mathbf{x}) - LS_{\mu_n}(f)(\mathbf{x})| \leq \max_{\mathbf{x}} \sum_n \chi_n(\mathbf{x}) C_n \leq \max_n C_n \end{aligned}$$

\square

Die Komponenten der globalen Geschwindigkeit haben die verwendete Gestalt einer Konvexkombination. Die obige Abschätzung liefert nun Aussagen, wenn beispielsweise in einem Approximationsschema die Teilchengröße gegen Null geht und die Konstanten der einzelnen Teilchen aus Lemma 3.9 beschränkt bleiben. Wir fordern eine Beschränktheit der Faktoren, die aus den verwendeten lokalen Normen stammen und können dann die Abschätzung auf die Regularitätsanteile, also die Faktoren, die aus der Taylorabschätzung der Funktion stammen, zurückführen. Die Anwendung des K -Funktional, vgl. [BS88] und [DeVL93], ermöglicht es, abhängig von der tatsächlichen Regularität der zu

approximierenden Funktion auch Konvergenz mit gebrochenen Exponenten zu erhalten.

Die Normanteile der Einzelabschätzungen bleiben beschränkt, wenn es eine feste Menge von Referenznormen gibt. Mehr als eine Referenznorm zu betrachten, ist oft im Zusammenhang mit Rändern geschickt. Wie bereits erwähnt, sind für Randteilchen Probleme mit dem Definitionsbereich der zu approximierenden Geschwindigkeit zu erwarten. In diesem Kontext ist es deshalb sinnvoll und notwendig, auch symmetrische lokale Maße μ zu verwenden, die einen kleineren Träger als den Teilchenträger haben. Nach dem Kriterium der zulässigen Teilchen ist eine lokale Umgebung gewisser Größe um den Teilchenmittelpunkt im Definitionsbereich $\tilde{\Omega}$ der Geschwindigkeit enthalten. Damit kann beispielsweise dort, wo nicht der ganze Teilchenträger zur Verfügung steht, mit einer zentrierteren Least-Squares-Approximation gearbeitet werden. Solche Wahlen wirken sich zwar auf die obige Konstante $C_{\tilde{\mu}}$ aus, aber bei einer festen Menge verwendeter Referenznormen gibt es eine universelle Konstante. Die nicht so stark zentrierten Versionen werden dort, wo es möglich ist, verwendet, um eine größere Stabilität zu erhalten.

3.7 Beispielrechnung: Gasringe

Als Beispiele, um die prinzipielle Funktionstüchtigkeit der besprochenen Vorgehensweisen zu demonstrieren, dienen die zweidimensionalen Gasringe aus Unterabschnitt 2.8.2. Die differentielle Rotation dominiert das Verhalten der Lösung und macht eine längere Zeitentwicklung eines Teilchenensembles de facto unmöglich. Durch die Bewegung der einzelnen Kreisbahnen mit Keplereschwindigkeit werden radial benachbarte Punkte innerhalb von relativ kurzer Zeit weit voneinander entfernt. Die zugehörigen Kräfte führen für die Teilchen der Methode der Finiten Massen zu immensen Deformationen, wie in Abbildung 3.1 exemplarisch nach etwa einer Umdrehung dargestellt ist. Sie werden quasi zu langen schmalen Nadeln, die die Krümmung des Fluids nicht nachbilden können. Ohne Restarts ist es kaum vorstellbar, mehrere Umdrehungen des Gases simulieren zu können.

Wir folgen für die Generierung von Anfangskonfigurationen dem Ansatz in [Ys00a]. Rechteckige Teilchen werden auf einem polarkoordinatischen Gitter ausgerichtet. Damit wird die Symmetrie dieses Problems so weit wie möglich mitberücksichtigt, denn in der Anfangskonfiguration ergibt sich eine Drehsymmetrie zum Winkel des Gittersektors. Da der verwendete Ansatz auf Lagrangeschen Quadraturpunkten beruht, bleibt diese Symmetrie erhalten, und es ist möglich, die Rechnung auf einem Sektor mit periodischen Randbedingungen durchzuführen.

Die Festlegung der Teilchenpositionen und der Ausgangsdeformationen erfolgt durch ein polarkoordinatisches Gitter mit geometrisch wachsenden Radien. Dadurch haben alle verwendeten Teilchen die selben Aspektverhältnisse. Auch wird dem Umstand Rechnung getragen, daß lokale Geschwindigkeitsdifferenzen

in der Nähe der Singularität am Ursprung wesentlich größer sind. Durch diese Wahl der Teilchengrößen ist eine geeignete adaptive Verteilung gegeben, denn so sind die Verhältnisse von Geschwindigkeiten innerhalb eines Teilchens für alle Teilchen die selben. Zu einer festzulegenden Sektoranzahl N_1 und einer radialen Auflösung N_2 zwischen gegebenen Radien r_{\min} und r_{\max} wählen wir die Teilchenmittelpunkte

$$\mathbf{q}_{n_1 N_2 + n_2} := \hat{r}_{n_2} \begin{pmatrix} \cos \omega_{n_1} \\ \sin \omega_{n_1} \end{pmatrix} \quad \text{für } n_1 = 0, \dots, N_1 - 1, \quad n_2 = 1, \dots, N_2$$

mit zugehörigen Winkeln und Radien

$$\omega_{n_1} := n_1 \frac{2\pi}{N_1}, \quad \hat{r}_{n_2} := r_{\min} \left[\frac{r_{\max}}{r_{\min}} \right]^{\frac{n_2-1}{N_2-1}}.$$

Benutzen wir als Ansatzfunktionen B-Splines der Ordnung s , so sind die Verformungen zu Beginn durch

$$\mathbf{H}_{n_1 N_2 + n_2} := \begin{pmatrix} \cos \omega_{n_1} & -\sin \omega_{n_1} \\ \sin \omega_{n_1} & \cos \omega_{n_1} \end{pmatrix} \frac{s}{2} \hat{r}_{n_2} \begin{pmatrix} \tan \frac{2\pi}{N_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{N_2-1} \ln \frac{r_{\max}}{r_{\min}} \end{pmatrix}$$

gegeben. Der Faktor $s/2$ in dieser Matrix entspricht der normalen Überdeckung dieser Ansatzfunktionen. Das Vorgehen entspricht im wesentlichen dem in [Ys00a] mit dem Unterschied, daß dort zwingend quadratische Anfangsteilchen benutzt werden, indem N_1 und N_2 passend gewählt werden und als radialer Wert auch der tangentialer verwendet wird.

Nun haben wir es nicht mehr mit echten Rechtecksgittern zu tun, aber bei der verwendeten Anzahl von Teilchen sind lokal die Abweichungen von Rechtecksgittern sehr gering. Auf solchen Gittern ausgerichtete B-Spline-Teilchen sind durchaus zu sehr genauen Approximationen in der Lage. Auch für die Teilchengeschwindigkeiten werden statt der lokalen Rechtecksgitter auf den Teilchenträgern Ausschnitte aus einem sektoriellen Gitter benutzt. Dadurch verringert sich der Rechenaufwand, denn eine mehrfache Verwendung der abgetasteten Geschwindigkeitswerte für unterschiedliche Teilchen ist möglich. Insgesamt sind die Symmetriebedingungen der lokalen Maße dann nur noch näherungsweise erfüllt. Die Teilchen mit ihren lokalen Approximationsnormen sind aber weiterhin ähnlich zueinander, so daß sich das Maximumnorm-Konvergenzresultat der Geschwindigkeit mit etwas schlechteren Konstanten auf diese Situation übertragen läßt.

3.7.1 Keplersche Bewegung

Die einzigen Kräfte im kontinuierlichen Problem sind externe Kräfte. Für unsere Teilchendiskretisierung heißt das, daß als Interaktion zwischen den Teilchen höchstens Reibung vorhanden sein kann. Auch sie wurde in die angegebene

Rechnung nicht aufgenommen, so daß die behandelte Situation für die Methode der Finiten Massen der in [Ys00a] beschriebenen entspricht. Der damit verbundene Ausschluß jeglicher Interaktion bedeutet auch einen Verzicht auf eine regularisierende Wirkung der Zeitevolution. Da wir keine Druckkräfte zulassen, ist die Entropie hier nicht von Interesse und die hier notwendigen Zustandsvariablen sind nur Dichte und Geschwindigkeit. Das Profil der Anfangsdichte in radialer Richtung ρ_0 ist ein eindimensionaler kubischer B-Spline mit Träger zwischen 0,9 und 1,1.

Die in [Ys00a] dargestellte Oszillation der Dichte legt es nahe, dieses Feld in gewisser Weise zu glätten. Da wir es mit hochfrequenten Störungen einer glatten Funktion zu tun haben, verwenden wir hier eine Faltung mit kleinem Träger. Für die Geschwindigkeit ist eine Glättung nicht notwendig, da solche hochoszillatorischen Anteile durch die angegebene Geschwindigkeitsberechnung mittels Least-Squares-Approximation herausgenommen werden. Bei der Berechnung der neuen Teilchenapproximation bestimmen wir die Dichte durch Interpolation. Für die Teilchengeschwindigkeiten verwenden wir den Least-Squares-Ansatz mit den Gewichtungen der Formfunktion für das zugehörige diskrete Maß. Als Ansatzfunktionen benutzen wir kubische B-Splines. Die Anzahl der

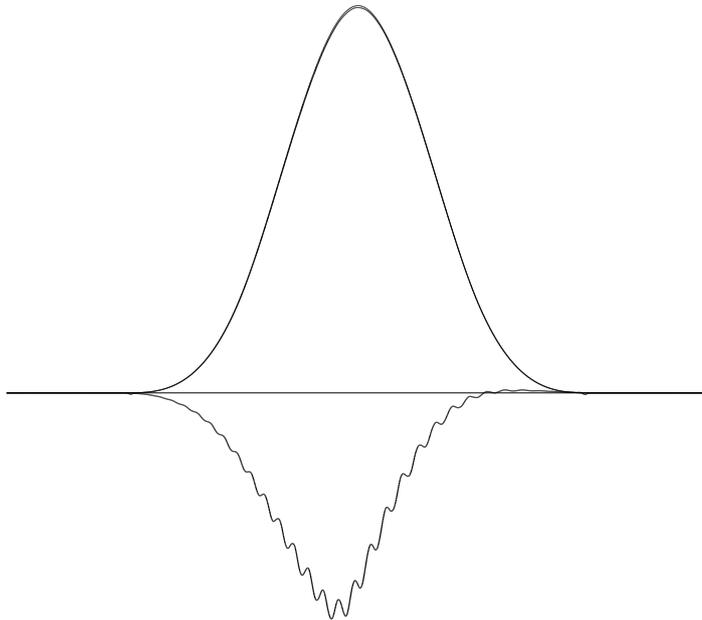


Abbildung 3.3: *Massendichte des Keplerschen Gasrings: Anfangssituation im Vergleich mit Endsituation nach 100 Umdrehungen und Fehler mit Faktor 100.*

Teilchen in der dargestellten Rechnung wurde so bestimmt, daß die potentiell zur Verfügung stehende Auflösung von 300 Teilchen in radialer Richtung auf dem gesamten potentiellen Ring zwischen $r_{\min} = 0,88$ und $r_{\max} = 1,14$ bei regelmäßiger Ausrichtung fast quadratische Teilchen ergibt. Damit ist in

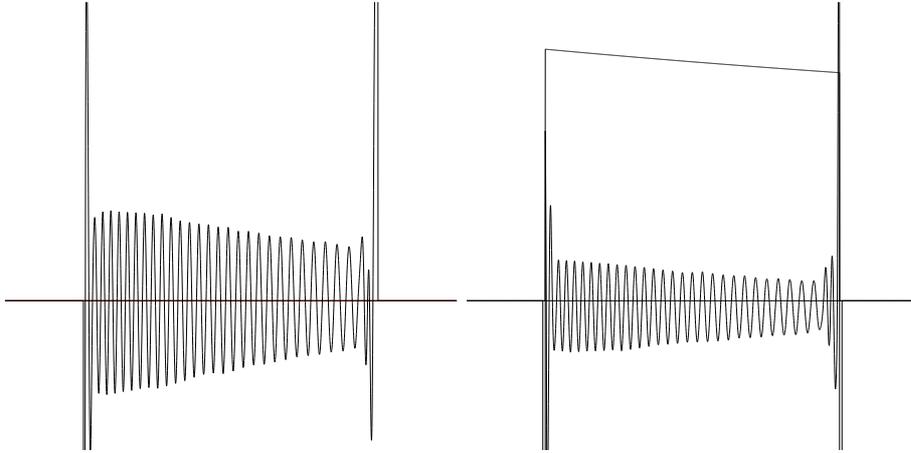


Abbildung 3.4: Radiale und tangentielle Geschwindigkeit des Keplerschen Gasrings: Anfangssituation im Vergleich mit Endsituation nach 100 Umdrehungen und Fehler mit Faktor 10^6 .

diesem Fall $N_2 = 300$ und $N_1 = 7257$, also gibt es insgesamt 2 177 100 potentielle Teilchen. Angegeben ist die Approximation nach 100 Umdrehungen, wobei Umdrehungen hier auf den Ring mit Radius 1 bezogen sind. Jeweils nach einer halben Umdrehung wurde ein Restart durchgeführt. Für den Restart wurde das Gitter mit einem um den Faktor 10 feineren Gitter der selben Art überzogen; einerseits um dort die Glättung der Dichte durchführen zu können, andererseits um genügend Stützstellen für die Least-Squares-Approximation zur Verfügung zu haben und damit Oszillationseffekte auszuschließen. Ein Teilchen ist für diese Rechnung dann zulässig, wenn mindestens die Zellen des B-Spline-Gitters, die dem Teilchenmittelpunkt unmittelbar benachbart sind, in $\tilde{\Omega}$ liegen. Für die Massenschranke wurde hier der Faktor 10^{-5} gewählt, um zu leichte Teilchen von der Approximation auszuschließen.

In den Abbildungen 3.3 und 3.4 sind für radiale Schnitte durch den Ring entlang der Abszisse die Werte der Dichte und der radialen und tangentialen Geschwindigkeitskomponenten und auch die skalierten Fehler eingezeichnet. Man kann daran ablesen, daß die Dichtefehler nach 100 Umdrehungen unter einem Prozent liegen und die Geschwindigkeiten noch wesentlich genauer reproduziert werden. Sie sind im Innern in der Größenordnung 10^{-6} und zeigen nur am Rand ein etwas schlechteres Verhalten, das aber für die Flüsse aufgrund der geringen Masse keine Rolle spielt.

Eine Verwendung der Quasiinterpolation ist in diesem Fall auch möglich und liefert vergleichbare Ergebnisse. Wenn allerdings die lokale Situation weniger genau einem Rechteckgitter entspricht — beispielsweise bei der Verwendung weniger Teilchen — so ist es notwendig, die Gewichte der Quasiinterpolation auf diese geometrisch wachsende Situation anzupassen.

3.7.2 Der viskose Gasring

Dieses Problem umfaßt neben den Kräften des obigen Beispiels jetzt auch zusätzliche viskose Kräfte. Einerseits macht die damit verbundene Interaktion ein wesentlich häufigeres Wiederaufsetzen der Rechnung notwendig, so daß sich hier Oszillationen längst nicht so stark auswirken können. Dadurch kann auch auf die Regularisierung des Dichtefeldes mit der Faltungsglättung verzichtet werden. Andererseits ergibt sich durch diese Wechselwirkung auch ein stabilisierender Effekt, so daß nun auch eine geringere Ortsauflösung und die damit verbundene ungenauere Restart-Approximationen keine fatale Auswirkung auf die gesamte Rechnung haben.

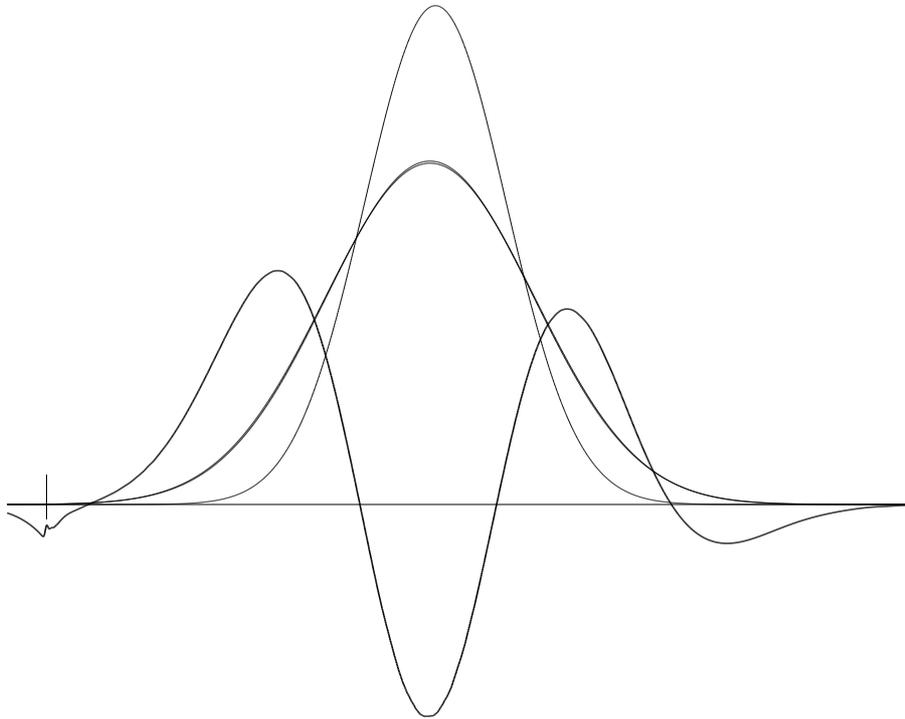


Abbildung 3.5: *Massendichte des viskosen Gasrings: Anfangssituation, Endsituation nach ca. 50 Umdrehungen im Vergleich zur analytischen Näherungslösung und Fehler der Endsituation mit Faktor 100.*

Das Anfangsprofil ist in Unterabschnitt 2.8.2 angegeben und der für uns potentiell interessante Bereich ist der Ring zwischen $r_{\min} = 0,5$ und $r_{\max} = 1,8$. Wir benutzen im Prinzip das obige Schema für den Restart auch hier, verwenden aber abweichend eine Auflösung von $N_2 = 200$ Teilchen in radialer Richtung. Da es sich bei der Geschwindigkeitsapproximation negativ auswirkt, wenn die Teilchen der gegebenen Krümmung des Sektors schlecht entsprechen, wählen wir in diesem Beispiel statt quasi quadratischen Teilchen solche, die in tangentialer Richtung etwa die halbe Ausdehnung besitzen. Das führt auf eine

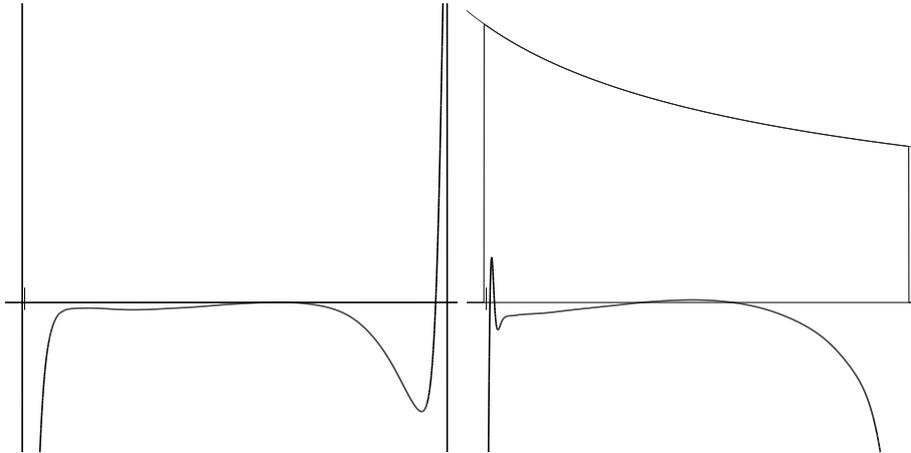


Abbildung 3.6: Radiale und tangentielle Geschwindigkeit des viskosen Gasrings: Endsituation nach ca. 50 Umdrehungen und Fehler der Endsituation mit Faktor 10^4 .

Winkelauflösung von $N_1 = 1952$ Teilchen, und damit auf insgesamt 390 400 potentielle Teilchen. Die Rechnung wurde für eine Zeitspanne von $\Delta\tau = 0,018$ durchgeführt, was hier in etwa 50 Umdrehungen des Ringes auf Radius 1 entspricht. Dabei wurden insgesamt 500 Restarts durchgeführt. Der verwendete Reibungsparameter ist die mit der Ringmasse m skalierte Dichte $R = 1 \cdot \frac{\rho}{m}$. Auch hier wurde für die relative Schranke der Massendichte, die Teilchen mit zu geringer Dichte von der Approximation ausschließt, der Wert 10^{-5} gewählt. Die Zulässigkeit der Teilchen zur Rechnung aufgrund des Trägerkriteriums wurde genau wie im vorigen Unterabschnitt entschieden.

In den Abbildungen 3.5 und 3.6 sind die Ergebnisse dargestellt und zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit der näherungsweise analytischen Lösung. Der Dichtefehler liegt unter einem Prozent und die Geschwindigkeitsfehler unter 10^{-4} im Ringinnern. Auch hier sind an den Ringrändern etwas größere Fehler zu beobachten, die aber auf den Massefluß wegen der geringen Dichte im Randbereich keinen wesentlichen Einfluß haben.

Kapitel 4

Regularisierungen

4.1 Motivation und Überblick

Lösungen der Eulergleichungen beinhalten oftmals Unstetigkeitsstellen, zum Beispiel in Stößen, die in der Methode der Finiten Massen als Überlagerung glatter Funktionen zu steilen Flanken werden. Mit dieser Methode sind in der Nähe solcher Stellen normalerweise gewisse Oszillationen als Überschwinger zu beobachten, wie exemplarisch in Abbildung 4.1 zu sehen ist. Aber auch durch kleine Ungenauigkeiten bei der Geschwindigkeitsapproximation werden geringe Oszillationen in die Rechnung eingeschleppt. In diesem Kapitel gehen wir der

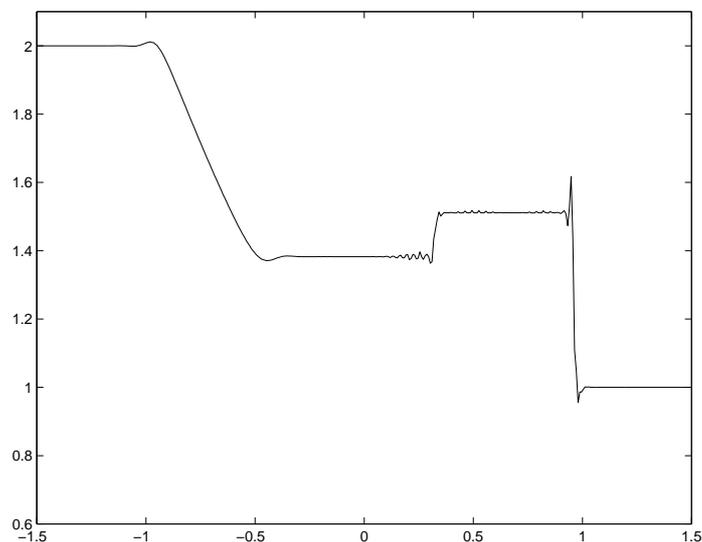


Abbildung 4.1: Überschwinger der Teilchenapproximation bei einem Stoßrohr.

Frage nach, wie wir auf geeignetem Wege solche Oszillationen dämpfen können, da sie sich bei einem Neuaufsetzen der Rechnung mit den Konzepten aus dem vorigen Kapitel nachteilig auswirken. Nach der Extraktion der globalen Größen

aus dem Satz der alten Teilchen sollten sie reguliert werden, bevor sie als Grundlage für eine neue Teilchenapproximation dienen. Zunächst wenden wir uns der Regularisierung eines beliebigen skalaren Feldes zu. Anschließend betrachten wir die Anwendung auf die Felder, die für das Aufsetzen der Teilchen relevant sind. Dabei ist es unser Ansatz, diese Größen getrennt zu regulieren.

Um die im folgenden benutzte skalare Regularisierung in einem allgemeineren Kontext darzustellen, betrachten wir in den nachfolgenden Abschnitten auch wichtige verwandte Ansätze. Nach einer genauen Definition und der Behandlung grundlegender Eigenschaften des kontinuierlichen Problems gehen wir auf eine Diskretisierung und schließlich auf deren Implementierung ein. Anschließend kümmern wir uns um die konkrete Verwendung dieses Schemas bei der Regularisierung der Felder, die für die Bestimmung der Teilchendaten von Interesse sind. Zum Abschluß dieses Kapitels wird eine Beispielrechnung präsentiert.

4.1.1 Generelle Ansätze

Ein sehr naheliegender Ansatz, um hochfrequente Oszillationen zu dämpfen, sind Faltungsglättungen mit geeigneten Kernen. Beispielsweise können auch Lösungen der Wärmeleitungsgleichung oder geeigneter Diskretisierungen von ihr als Faltungen verstanden werden. Die Differentialgleichung wird dann nur für kurze Zeiten gelöst. Bei dieser linearen Diffusion werden allerdings auch echte Flanken in der selben Größenordnung gedämpft wie die unerwünschten Oszillationen. Für uns ist es eine naheliegende Forderung, hier Regularisierungen zu wählen, die Flanken nicht abflachen, aber dennoch die hochoszillatorischen Anteile aus gegebenen Funktion entfernen. Insofern sprechen wir vom Begriff der Regularisierung nicht in der ursprünglichen Bedeutung — nämlich die Glattheit der Funktion im Sinne der Differenzierbarkeit zu erhöhen — sondern beziehen uns auf Glattheit im Sinne der Oszillationsverminderung.

Es gibt vielfältige Ansätze, um diese Forderung umzusetzen. Zunächst sind nichtlineare Approximationen einer gegebenen Funktion, beispielsweise durch Mehrskalendarstellungen wie Wavelets, wichtige Vorgehensweisen, um kleine Rauschanteile zu ignorieren, echte Kanten aber zu erhalten — vgl. [DeV98], [Bla98]. Dort werden in geeigneten Basisdarstellungen Anteile mit unbedeutenden Koeffizienten ignoriert. Aber auch kontinuierliche Ansätze für entsprechende Regularisierungen sind weit verbreitet. Ein Großteil dieser Arbeiten stammt aus dem Kontext der Bildverarbeitung. Die dort behandelten Probleme, die unserer Situation entsprechen, finden sich unter dem Stichwort *denoising*. Dabei wird versucht, verrauschte Bilddaten zu glätten, ohne echte Kanten abzuflachen. Meist sind dort die betrachteten Rauschanteile wesentlich stärker als die bei uns auftretenden Oszillationen, so daß wir die Parameter eventuell geeignet anpassen müssen. Nichtlineare Diffusion spielt hier oft eine zentrale Rolle. Die hierbei verwendeten Diffusionskoeffizienten sind der lokalen Situation der Daten angepaßt. Ansätze dieser Art finden sich beispielsweise in den populären Arbeiten von Perona und Malik, vgl. [PM90]. Gelegentlich werden statt skalaren auch matrixwertige Diffusionskoeffizienten verwendet, wie übersichtsartig

in [Wei98] dargestellt ist. In [PR99] werden beispielsweise auch solche Ansätze verwendet. Wir werden solche Verfahren in dieser Arbeit nicht weiterverfolgen.

Ein anderer Ausgangspunkt für einen ähnlichen Zugang ist für viele Beiträge zu diesem Thema die Arbeit [ROF92] von Rudin, Osher und Fatemi. Hier werden nicht direkt Diffusionsgleichungen angesetzt, sondern Minima entsprechender Funktionale gesucht. Diese lassen sich aber als stationäre Zustände geeigneter Diffusionsgleichungen interpretieren. Die Totale Variation — kurz mit *TV* bezeichnet — wird hierbei als Maß der Irregularität benutzt. Ausgehend davon wurden verschiedene Lösungsverfahren zur Regularisierung entwickelt, die auf der Totalen Variation basieren. Man unterscheidet im wesentlichen zwei Ansätze.

Bei der *restringierten Minimierung* wird ein geeignetes Maß $J(u)$ für die Oszillation unter der Nebenbedingung, daß die Lösung einen festen Abstand zur gewünschten Funktion hat, minimiert. Dieser Abstand ist vor allem in der Bildentrauschung sinnvoll, wenn a-priori-Informationen über das Rauschen, beispielsweise die Standardabweichung bei weißem Rauschen, bekannt sind. Man betrachtet also das Problem

$$J(v) \rightarrow \min \quad \text{mit } \|v - z\| = \sigma .$$

Dies ist der Ansatz den Rudin, Osher und Fatemi verfolgen. Sie verwenden zur Lösung ein Verfahren basierend auf einer künstlichen Zeitevolution, das die Nebenbedingung mit Hilfe von Lagrangeparametern berücksichtigt.

Auch bei der *unrestringierte Minimierung mit Strafterm* wird ein geeignetes Maß für die Oszillation minimiert, wobei der Abstand zur gewünschten Funktion nun als Strafterm Berücksichtigung findet. Oder anders interpretiert wird der Abstand zur gewünschten Funktion minimiert, wobei Oszillationen als Strafterm wirken. Hier betrachten wir das Problem

$$\|v - z\|^2 + \alpha J(v) \rightarrow \min .$$

Dieser Ansatz ist bekannt unter der Bezeichnung *Tychonoff-Regularisierung*. Arbeiten von Vogel et al. verfolgen diesen Zugang, beispielsweise in [VO96], [VO95] und [Vog97] oder auch Chan et al., wie in [CM96] und [CM99].

Wir werden uns im folgenden nur mit der Tychonoff-Regularisierung beschäftigen, da für unser Problem sinnvolle Nebenbedingungskonstanten nicht zugänglich sind und das Problem unseren Erfahrungen nach deutlich sensitiver auf die Nebenbedingungskonstante als auf den Straftermfaktor reagiert. Auch die numerische Realisierung ist ohne Nebenbedingungen einfacher.

4.2 Die Problemfamilie

4.2.1 Der Rahmen

Tychonoff-artige Regularisierungen beruhen auf der Idee, zu einer gegebenen Funktion z eine reguläre Funktion in ihrer Nähe zu suchen. Deshalb bestrafen

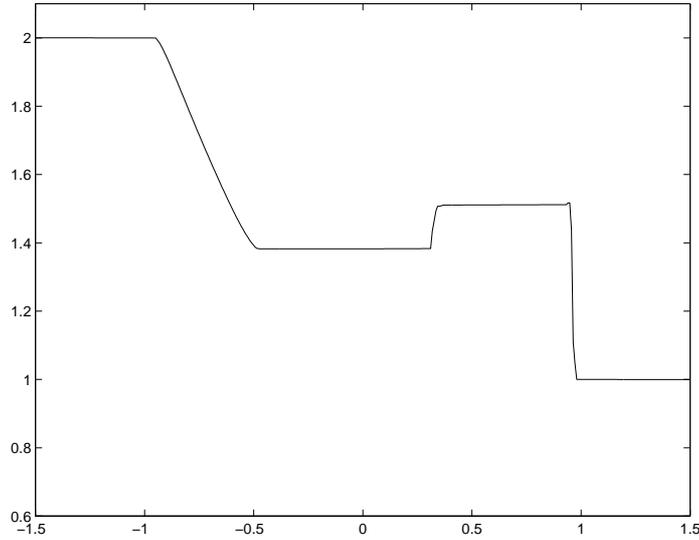


Abbildung 4.2: Regularisierung der Situation von Abbildung 4.1.

wir einerseits die Entfernung, andererseits die Irregularität mit gewissen Gewichtungen. Für die nachfolgenden Ergebnisse definieren wir die betrachteten Probleme zunächst in folgendem abstraktem Rahmen:

Wir betrachten allgemein Funktionale der Form

$$F(v) := \|z - v\|_H^2 + \alpha J(v) \quad (4.1)$$

auf einem geeigneten Hilbertraum H und suchen deren Minimum. Dabei ist der Strafparameter $\alpha > 0$ und J ein nichtnegatives Funktional. Der uneigentliche Wert „ $+\infty$ “ ist hier zugelassen.

Die für uns wichtigen Fälle lassen sich konkretisieren, indem wir als Hilbertraum im weiteren lediglich $L_2(\Omega)$ mit einem beschränkten Gebiet Ω verwenden und für das Straffunktional die Form

$$J(v) = \int_{\Omega} \phi(|\nabla v|) \, d\mathbf{x}$$

— in geeignetem Sinne definiert — vorschreiben. Dabei sei ϕ monoton steigend, nichtnegativ und konvex auf \mathbb{R}_0^+ . Die Wahl $\phi(t) = t^2$ ergibt die H^1 -Regularisierung, die nachfolgend als Modellproblem behandelt wird. Für $\phi(t) = t$ sind wir im Falle des TV-Strafterms, der Sprünge erhält. Besonders interessant ist für uns später die Familie

$$\phi_{\beta}(t) = \sqrt{t^2 + \beta^2} \, ,$$

die den TV-Strafterm für $\beta = 0$ beinhaltet und ansonsten die übliche Regularisierung dieses Funktionals darstellt.

4.2.2 Ein Modellproblem

Exemplarisch betrachten wir hier für ein fest gewähltes α das Funktional

$$F(v) := \|z - v\|_{L_2}^2 + \alpha \|\nabla v\|_{L_2}^2$$

und setzen es für Funktionen aus L_2 , für die dieser Term nicht definiert ist, auf den Wert „ $+\infty$ “. Dann können wir uns auch auf die Minimierung in H^1 zurückziehen. Als Gebiet Ω nehmen wir hier ausnahmsweise den gesamten Raum, um Randbedingungen für die Differentialgleichung zu vermeiden.

Die Differentialgleichung

Für eine solche Minimalstelle u verlangen wir, daß die Gateaux-Ableitungen verschwinden. So gilt bei ausreichender Glattheit der Funktion u für alle Testfunktionen w

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} F(u + \varepsilon w)|_{\varepsilon=0} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\|z - [u + \varepsilon w]\|_{L_2}^2 + \alpha \|\nabla(u + \varepsilon w)\|_{L_2}^2)|_{\varepsilon=0} \\ &= -2 \int \left[\alpha \Delta u + [z - u] \right] w \, dx . \end{aligned}$$

Das führt auf die Euler-Lagrange-Gleichung

$$g(u) := 2[u - z] - 2\alpha \Delta u \stackrel{!}{=} 0 . \quad (4.2)$$

Für $g \in L_2$ ist das der Gradient, also ist $-g$ die Richtung des maximalen Abstiegs.

Lösung als Diskretisierung einer parabolischen Differentialgleichung

Man kann die Lösung dieser Gleichung auch als stationären Punkt der parabolischen Differentialgleichung

$$\dot{v} = -\frac{1}{2}g(v)$$

interpretieren. Der verwendete Vorfaktor bedeutet lediglich eine Umskalierung der Zeit und hat seinen Grund nur in der Darstellung. Da $-\frac{1}{2}g$ für alle nichtminimierenden Funktionen stets eine Abstiegsrichtung und F nach unten beschränkt ist, macht es Sinn, die Zeitentwicklung „bis zur Stationarität“ zu verfolgen.

Betrachten wir nun im eindimensionalen Fall eine Diskretisierung mit zentralen Differenzen für die Ortskoordinaten und explizit in der Zeitrichtung. Als Abkürzung wählen wir $s := h^2/\alpha$ und erhalten

$$\frac{v_i^{(k+1)} - v_i^{(k)}}{\tau} = \frac{v_{i+1}^{(k)} - 2v_i^{(k)} + v_{i-1}^{(k)}}{s} + z_i - v_i^{(k)} ,$$

woraus sich die neuen Vektorkomponenten durch

$$v_i^{(k+1)} = \tau z_i + \frac{\tau}{s} v_{i-1}^{(k)} + \frac{\tau}{s} v_{i+1}^{(k)} + (1 - 2\frac{\tau}{s} - \tau) v_i^{(k)}$$

ergeben. Dieses Verfahren geht in das Jacobi-Verfahren zur Diskretisierung von Gleichung (4.2) über, wenn man hier Zeit- und Ortsauflösung durch $\tau = \frac{s}{2+s}$ koppelt.

4.2.3 Existenz und Eindeutigkeit

Als Grundlage unserer Existenz- und Eindeutigkeitsresultate dienen die folgenden Aussagen, die teilweise in einem allgemeineren Kontext formuliert sind.

Theorem 4.1 (Existenz)

Ist das Funktional F , gegeben wie in (4.1), schwach folgenunterhalbstetig, so hat das Minimierungsproblem eine Lösung.

Beweis: Wir betrachten eine minimierende Folge $(v_n)_n$. Da dann $(F(v_n))_n$ beschränkt ist, ist aufgrund der Nichtnegativität von J die Folge auch normbeschränkt. In reflexiven Räumen sind aber abgeschlossene Kugeln schwach folgenkompakt. Wir wählen nun eine geeignete schwach konvergente Teilfolge $(v_{n_k})_k$ mit dem schwachen Grenzwert \bar{v} . Dann ist \bar{v} wegen

$$F(\bar{v}) \leq \liminf_k F(v_{n_k}) = \inf_{v \in M} F(v) ,$$

ein Minimum. □

Lemma 4.2 (strikte Konvexität von F)

Ist J ein konvexes Funktional, so ist $F : v \mapsto \|z - v\|_H^2 + \alpha J(v)$ strikt konvex.

Beweis: Im Hilbertraum ist die Abbildung $v \mapsto \|v\|_H^2$ strikt konvex, da

$$\begin{aligned} & r(a, a)_H + [1 - r] (b, b)_H - (ra - [1 - r]b, ra - [1 - r]b)_H \\ &= r[1 - r] [(a, a)_H + (b, b)_H - 2(a, b)_H] \\ &= r[1 - r] (a - b, a - b)_H \\ &> 0 \end{aligned} \quad \text{für } 0 < r < 1, a \neq b$$

gilt. Damit ist auch die affin transformierte Abbildung $v \mapsto \|v - z\|_H^2$ strikt konvex. Die Summe eines konvexen und eines strikt konvexen Funktionals ist strikt konvex. Folglich ist F strikt konvex, falls J konvex ist. □

Lemma 4.3 (Eindeutigkeit)

Ist ein Funktional F strikt konvex und sein Definitionsbereich konvex, so gibt es höchstens ein lokales Minimum.

Beweis: Angenommen es gibt zwei verschiedene lokale Minima u_1 und u_2 . Es gelte o.B.d.A. $F(u_1) \leq F(u_2)$. Dann gilt

$$F(su_1 + [1 - s]u_2) < sF(u_1) + [1 - s]F(u_2) \leq F(u_2) .$$

Also sind in jeder Umgebung von u_2 Elemente mit kleinerem Funktionalwert. Das steht im Widerspruch zur Annahme, u_2 sei ein lokales Minimum. □

4.2.4 Charakterisierung der Minimumstelle

Wir definieren die einseitige Richtungsableitung eines reellwertigen Funktionals f an der Stelle v in Richtung w als

$$f'(v, w) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{f(v + \varepsilon w) - f(v)}{\varepsilon}$$

und bezeichnen sie auch als *Gateaux-Ableitung*. Wenn $f'(v, w) = -f'(v, -w)$ ist, so ist f in dieser Richtung klassisch differenzierbar.

Lemma 4.4 (Gateaux-Ableitung konvexer Funktionale)

Konvexe reellwertige Funktionale f , die auf einem reellen Vektorraum definiert sind, sind richtungsdifferenzierbar in jeder Richtung w und es gilt die Ungleichung

$$f(v) + f'(v, w) \leq f(v + w) \ .$$

Für strikt konvexe Funktionale gilt die entsprechende strikte Ungleichung.

zum Beweis: Der in [Wer92b, Kap. 7, Lemma 1.6] angegebene Beweis ist hier direkt anwendbar. \square

Damit gelangen wir zur folgenden Charakterisierung.

Theorem 4.5 (Charakterisierung von Minimalstellen)

Eine Minimalstelle v^ eines strikt konvexen reellwertigen Funktionals f über einem reellen Vektorraum V ist charakterisiert durch*

$$f'(v^*, w) \geq 0 \quad \forall w \in V \ .$$

Beweis: Aus der angegebenen Bedingung folgt die Minimaleigenschaft sofort mit der obigen strikten Ungleichung

$$f(v^* + w) > f(v^*) + f'(v^*, w) \geq f(v^*) \ .$$

Für die Umkehrung nehmen wir eine Richtung \bar{w} , die diese Bedingung verletzt und erhalten aufgrund der Definition von $f'(v^*, \bar{w})$ sofort einen Widerspruch zur angenommenen Minimalität von $f(v^*)$. \square

In unserem Kontext sind diese Überlegungen auch anwendbar, obwohl der Wertebereich von F auch „ $+\infty$ “ umfaßt, denn $\{v \mid J(v) < \infty\}$ ist ein linearer Raum und mit der Einschränkung von F auf ihn sind die Voraussetzungen dieses Abschnitts erfüllt.

4.2.5 Die Totale Variation als Strafterm

Die Totale Variation ist ein Maß für Oszillationen. In der eindimensionalen Situation gibt die Totale Variation einer genügend regulären Funktion die akkumulierten Höhendifferenzen der Funktion an. Diese Höhendifferenzen können auf reellen Intervallen ähnlich wie bei Riemannsummen approximiert werden mit

$$\sup_{(x_i)_{i \in G}} \sum_i |v(x_i) - v(x_{i-1})| ,$$

wenn G hier die Menge aller endlichen Gitter des entsprechenden Intervalls ist und diese durch aufsteigend sortierte Punktetupel gegeben sind. Für stetige, stückweise stetig differenzierbare Funktionen auf einem reellen Intervall I ist die Totale Variation auch gegeben durch $\int_I |v'(x)| dx$. Das entspricht in unserem Rahmen der Wahl $\phi(t) = t$ und wir erhalten für differenzierbare Funktionen als Straffunktional den Term

$$\int_{\Omega} |\nabla v| dx .$$

Zur Verallgemeinerung definieren wir analog zu [AV94] und zu [Giu84] die Totale Variation über eine schwache Formulierung der obigen Gleichung, indem wir mit geeigneten Funktionen testen.

Definition 4.6 (TV-Testfunktionenraum)

Der für die Totale Variation relevante Testfunktionenraum ist eine Teilmenge der stetig differenzierbaren Abbildungen nach \mathbb{R}^d mit Träger innerhalb Ω , nämlich

$$\mathcal{V} := \{ \mathbf{w} \in C_c^1(\Omega, \mathbb{R}^d) \mid |\mathbf{w}(\mathbf{x})|_2 \leq 1 \ \forall \mathbf{x} \in \Omega \} .$$

Definition 4.7 (Totale Variation)

Die Totale Variation einer Funktion $v \in L_1(\Omega)$ ist gegeben durch

$$J_{TV}(v) := \sup_{\mathbf{w} \in \mathcal{V}} \int_{\Omega} -v \operatorname{div} \mathbf{w} dx .$$

Dabei ist auch der uneigentliche Wert „ $+\infty$ “ erlaubt.

Für beschränkte Gebiete ist $L_2(\Omega) \subset L_1(\Omega)$, so daß das Funktional $F : v \mapsto \|z - v\|_{L_2} + J_{TV}(v)$ auf ganz $L_2(\Omega)$ definiert ist. Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen sind für diese Wahl des Straffunktionals möglich. Sie sind als Spezialfälle der entsprechenden Aussagen der regularisierten Funktionale in Unterabschnitt 4.3.2 eingeschlossen. Dazu wählt man dort den Regularisierungsparameter $\beta = 0$.

4.3 Das kontinuierliche Problem mit TV_β -Strafterm

Anstatt wie oben $\phi_{TV}(t) = t$ zu betrachten, wählen wir $\phi_{TV_\beta}(t) = \sqrt{t^2 + \beta^2}$ und erhalten für genügend glatte Funktionen v

$$\int_{\Omega} \sqrt{|\nabla v|^2 + \beta^2} \, dx$$

als Strafterm.

Diese Regularisierung ist eine übliche Technik für solche Gleichungen und wird sowohl von Vogel et al. unter anderem in [AV94] und [VO96] als auch von Chan et al. beispielsweise in [CCZ95] benutzt. Es besteht aber auch ein enger Zusammenhang zu anderen Problemen. Der *Inverse Mittlere Krümmungsfluß* führt auf eine Gleichung mit dem selben Hauptteil wie die Euler-Lagrange-Gleichung des Minimierungsproblems mit J_{TV} . Die dort oft verwendete elliptische Regularisierung, vgl. beispielsweise [Pas98] oder [HI00], führt auf den selben Hauptteil wie die Euler-Lagrange-Gleichung des hier betrachteten Minimierungsproblems. Elliptische Regularisierungen werden auch für andere Krümmungsflüsse, zum Beispiel in [ES91], betrachtet.

4.3.1 Definition

Auch dieses regularisierte Straffunktional läßt sich auf ähnliche Art wie J_{TV} durch Testfunktionen charakterisieren. Unter Verwendung des Testfunktionsraums aus Definition 4.6 erhalten wir

Lemma 4.8 (Gradientendarstellung)

Für Funktionen $v \in W^{1,1}(\Omega)$ ist die Charakterisierung

$$\int_{\Omega} \sqrt{|\nabla v|^2 + \beta^2} \, dx = \sup_{\mathbf{w} \in \mathcal{V}} \int_{\Omega} -v \operatorname{div} \mathbf{w} + \sqrt{\beta^2 [1 - |\mathbf{w}|^2]} \, dx$$

gültig.

zum Beweis: vgl. [AV94, Theorem 2.1]. □

Nun verwenden wir die Charakterisierung als Definition, da sie auf eine größere Funktionenmenge anwendbar ist.

Definition 4.9 (regularisierte Totale Variation)

Als regularisierte Totale Variation bezeichnen wir für $v \in L_1(\Omega)$ den Ausdruck

$$J_\beta(v) := \sup_{\mathbf{w} \in \mathcal{V}} \int_{\Omega} -v \operatorname{div} \mathbf{w} + \sqrt{\beta^2 [1 - |\mathbf{w}|^2]} \, dx ,$$

der auch den Wert „ $+\infty$ “ liefern kann.

Auf glatten Funktionen stimmt Definition von J_β direkt mit dem Funktional aus Unterabschnitt 4.2.1 überein. Sie ist also eine geeignete Verallgemeinerung, denn für beschränkte Gebiete ist das Funktional, analog zu Unterabschnitt 4.2.5, auf ganz $L_2(\Omega)$ definiert.

Es läßt sich direkt ablesen, daß das angegebene Funktional zwar unter Addition beliebiger Konstanten invariant, aber nicht skalierungsinvariant ist. Multiplikationen mit konstanten Faktoren $s > 0$ wirken sich durch

$$J_\beta(sv) = sJ_{\frac{\beta}{s}}(v)$$

auch auf den gewählten Parameter β aus. Eine Skalierungsabhängigkeit des Minimierungsproblems (4.1) kann beispielsweise durch die Wahl $\beta := \|z\| \beta_{ref}$ vermieden werden.

4.3.2 Existenz und Eindeutigkeit

Um in diesem Fall Existenz und Eindeutigkeit nachzuweisen, kümmern wir uns um die Voraussetzungen des allgemeinen Theorems 4.1 und des Lemmas 4.3.

Lemma 4.10 (Konvexität von J_β)

Das Funktional J_β ist konvex.

Beweis: Für $\mathbf{w} \in \mathcal{V}$ gilt

$$\int_{\Omega} -[sv_1 + [1 - s]v_2] \operatorname{div} \mathbf{w} + \sqrt{\beta^2[1 - |\mathbf{w}|^2]} \, d\mathbf{x} \leq sJ_\beta(v_1) + [1 - s]J_\beta(v_2) \, .$$

Damit ist durch den Übergang zum Supremum über die Funktionen aus \mathcal{V} die Ungleichung der Konvexität erfüllt. \square

Bemerkung: Das Funktional J_β ist aber nicht strikt konvex. Dies ist leicht einzusehen, indem man die Funktionenfamilie $u_\gamma := \gamma\chi_{[a,b]}$ auf dem Intervall $[0, 1]$ mit $0 < a < b < 1$ betrachtet. Wegen $J_\beta(u_\gamma) = 2\gamma + \beta$ gilt nämlich

$$\begin{aligned} J_\beta\left(\frac{1}{2}u_0 + \frac{1}{2}u_1\right) &= J_\beta(u_{1/2}) = 1 + \beta = \frac{1}{2}\beta + \frac{1}{2}(2 + \beta) \\ &= \frac{1}{2}J_\beta(u_0) + \frac{1}{2}J_\beta(u_1) \, . \end{aligned}$$

Lemma 4.11 (schwache Folgenunterhalbstetigkeit von J_β und F)

Die Funktionale J_β und $F : v \mapsto \|z - v\|_{L_2}^2 + \alpha J_\beta(v)$ sind schwach folgenunterhalbstetig auf $L_2(\Omega)$.

Beweis: Für J_β betrachten wir in $L_2(\Omega)$ eine schwach konvergente Folge $(v_k)_k$ mit Grenzwert \bar{v} . Für $\mathbf{w} \in \mathcal{V}$ ist $\operatorname{div} \mathbf{w} \in C_c^0(\Omega)$ und liegt damit in $L_2(\Omega)$. Damit gilt

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} -\bar{v} \operatorname{div} \mathbf{w} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \sqrt{\beta^2(1 - |\mathbf{w}(\mathbf{x})|^2)} \, d\mathbf{x} \\ &= \lim_k \int_{\Omega} -v_k \operatorname{div} \mathbf{w} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \sqrt{\beta^2(1 - |\mathbf{w}(\mathbf{x})|^2)} \, d\mathbf{x} \\ &\leq \liminf_k J_\beta(v_k) \, . \end{aligned}$$

Da die Testfunktion beliebig war, gilt die Ungleichung auch beim Übergang zum Supremum und es ist

$$J_\beta(\bar{v}) \leq \liminf_k J_\beta(v_k) .$$

Für $z \mapsto \|v - z\|_{L_2}^2$ ergibt sich die schwache Folgenunterhalbstetigkeit, indem wir für eine Folge $v_k \rightharpoonup \bar{v}$

$$\begin{aligned} & \liminf_k \|v_k - z\|_{L_2}^2 \\ &= \liminf_k \left[\|(v_k - \bar{v})\|_{L_2}^2 + 2(v_k - \bar{v}, \bar{v} - z)_{L_2} + \|(\bar{v} - z)\|_{L_2}^2 \right] \\ &\geq \| \bar{v} - z \|_{L_2}^2 + \liminf_k (v_k - \bar{v}, \bar{v} - z)_{L_2} \\ &= \| \bar{v} - z \|_{L_2}^2 \end{aligned}$$

erhalten.

Für F folgt die Behauptung durch Kombination der beiden Teilergebnisse. \square

4.3.3 Stabilität

Nach Hadamard ist ein Problem dann wohlgestellt, wenn eine Lösung existiert, diese eindeutig ist und stetig von den Parametern abhängt. Da die ersten beiden Punkte bereits geklärt sind, soll nun untersucht werden, inwiefern sich Störungen der Parameter unseres Funktionals auf die Lösung auswirken, sie in diesem Sinne stabil ist. Dabei wird das Straftermgewicht $\alpha > 0$, der Regularisierungsparameter $\beta \geq 0$ und die zu regularisierende Funktion z simultan gestört. Die folgenden Überlegungen sind motiviert durch analoge Ergebnisse von Acar und Vogel in [AV94, Abschnitte 3,4]. Wir benötigen die folgenden Begriffe.

Definition 4.12 (gleichmäßige Koerzivität und Konsistenz)

- Eine Folge von möglicherweise nichtlinearen Funktionalen T_n heiße gleichmäßig koerziv, wenn für beliebige Folgen $(v_n)_n$ gilt

$$\lim_n \|v_n\| = \infty \quad \implies \quad \lim_n T_n(v_n) = \infty .$$

- Eine Folge von möglicherweise nichtlinearen Funktionalen T_n heiße konsistent, wenn sie auf beschränkten Mengen gleichmäßig gegen ein Funktional T konvergieren. Das heißt, für beliebige $B > 0$ gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\|v\| < B} |T_n(v) - T(v)| = 0 .$$

Theorem 4.13 (allgemeine Stabilität)

Gegeben sei ein Hilbertraum H , eine Norm, die nicht schwächer als die Hilbertnorm ist, und eine bezüglich ihr koerzive und konsistente Folge von Funktionalen T_n , welche Minimumstellen u_n besitzen. Ist ihr Grenzwert T schwach folgenunterhalbstetig in H und besitzt er eine eindeutige Minimumstelle \bar{u} , so konvergieren die u_n schwach in H gegen \bar{u} .

Beweis: Nach Definition der u_n ist

$$T_n(u_n) \leq T_n(\bar{u})$$

und damit

$$\limsup_n T_n(u_n) \leq \lim_n T_n(\bar{u}) = T(\bar{u}) .$$

Also sind die u_n aufgrund der gleichmäßigen Koerzivität beschränkt in dieser Norm und damit auch H -beschränkt.

Angenommen $(u_n)_n$ konvergiert nicht wie oben angegeben. Da H reflexiv ist, haben H -beschränkte Mengen eine schwach konvergente Teilfolge und es gibt eine Teilfolge $(u_{n_j})_j$, die H -schwach gegen ein $\hat{u} \neq \bar{u}$ konvergiert. Mit der H -schwachen Folgenunterhalbstetigkeit von T gilt

$$T(\hat{u}) \leq \liminf_j T(u_{n_j}) = \lim_j [T(u_{n_j}) - T_{n_j}(u_{n_j})] + \liminf_j T_{n_j}(u_{n_j}) \leq T(\bar{u}) ,$$

was aber der angenommenen Eindeutigkeit des Minimierers \bar{u} von T widerspricht. \square

Wenden wir dieses Ergebnis nun auf die konkrete Situation an. In Anlehnung an die oft verwendete BV-Norm

$$\|v\|_{BV} := \|v\|_{L_1} + J_{TV}(v)$$

benutzen wir für die folgenden Betrachtungen die Norm

$$\|v\|_J := \|v\|_H + J_{TV}(v) , \quad (4.3)$$

wobei wir als Anwendung hauptsächlich $H := L_2$ im Auge haben.

Theorem 4.14 (Stabilität der TV_β -Regularisierung)

Die Funktionalfolge

$$F_n : v \mapsto \|v - z_n\|_H^2 + \alpha_n J_{\beta_n}(v)$$

erfüllt im Falle $z_n \rightarrow z$ in H , $\alpha_n > 0$ mit $\alpha_n \rightarrow \alpha > 0$ und $\beta_n \geq 0$ mit $\beta_n \rightarrow \beta$ die Bedingungen der gleichmäßigen Koerzivität und der Konsistenz zur Norm $\|\cdot\|_J$ mit dem Grenzwert

$$F : v \mapsto \|v - z\|_H^2 + \alpha J_\beta(v) .$$

Für $H = L_2(\Omega)$ gelten die allgemeinen Stabilitätsaussagen aus Theorem 4.13.

Beweis: *Gleichmäßige $\|\cdot\|_J$ -Koerzivität:* Sei $(v_n)_n$ eine Folge mit $\lim_n \|v_n\|_J = \infty$. Wir zerlegen diese Folge in zwei möglicherweise endliche Teilfolgen $(\hat{v}_j)_j$ und $(\tilde{v}_j)_j$ nach dem Kriterium $\|v_n\|_H > \frac{1}{2}\|v_n\|_J$. Die Glieder der Ausgangsfolge werden also aufgeteilt, je nachdem ob der Normanteil oder der Anteil der totalen Variation überwiegt. Die Indizes für der ursprünglichen Folge sind durch \tilde{n}_j

und \hat{n}_j gegeben, so daß $\tilde{v}_j = v_{\hat{n}_j}$ und $\hat{v}_j = v_{\hat{n}_j}$ gilt. Endliche Teilfolgen sind für Grenzwerte nicht weiter zu betrachten. Es gilt nun einerseits

$$\liminf_j \|\hat{v}_j\|_H > \frac{1}{2} \lim_j \|v_{\hat{n}_j}\|_J = \infty$$

und damit auch aufgrund der Beschränktheit der $\|z_n\|_H$

$$\liminf_j \|\hat{v}_j - z_{\hat{n}_j}\|_H^2 \geq \liminf_j \left[\|\hat{v}_j\|_H - \|z_{\hat{n}_j}\|_H \right]^2 = \infty .$$

Andererseits gilt wegen $J_{\beta_{\hat{n}_j}}(\tilde{v}_j) \geq J_0(\tilde{v}_j) = \|\tilde{v}_j\|_J - \|\tilde{v}_j\|_H \geq \frac{1}{2}\|\tilde{v}_j\|_J$

$$\liminf_j \alpha_{\hat{n}_j} J_{\beta_{\hat{n}_j}}(\tilde{v}_j) \geq \liminf_j \frac{\alpha}{2} \frac{1}{2} \|\tilde{v}_j\|_J = \infty .$$

Also gilt insbesondere

$$\lim_n F_n(v_n) = \|v_n - z_n\|_H^2 + \alpha_n J_{\beta_n}(v_n) = \infty ,$$

weil der erste Term für $(\hat{v}_j)_j$ divergiert und der zweite für $(\tilde{v}_j)_j$.

Konsistenz: Um das Kriterium nachzuweisen, setzen wir ein $B > 0$ voraus. Es gilt

$$\begin{aligned} F_n(v) - F(v) &= \|v - z_n\|_H^2 - \|v - z\|_H^2 + \alpha_n J_{\beta_n}(v) - \alpha J_{\beta}(v) \\ &= 2(v, z - z_n)_H + \|z_n\|_H^2 - \|z\|_H^2 + [\alpha_n - \alpha] J_{\beta_n}(v) \\ &\quad + \alpha [J_{\beta_n}(v) - J_{\beta}(v)] . \end{aligned}$$

Nun ist $(v, z - z_n)_H \leq \|v\|_H \|z - z_n\|_H \leq B \|z - z_n\|_H$, also liegt gleichmäßige Konvergenz auf beschränkten Mengen vor. Nach Voraussetzung konvergiert $z_n \rightarrow z$ und damit auch $\|z_n\|_H^2 \rightarrow \|z\|_H^2$. Weiterhin ist $J_{\beta_n}(v) \leq J_0(v) + \sup_n \beta_n |\Omega|$, also beschränkt auf $\|\cdot\|_J$ -beschränkten Mengen, was zur Folge hat, daß mit der Konvergenz der α_n auch der vorletzte Summand verschwindet. Der letzte Summand konvergiert aufgrund der folgenden Überlegung. Zunächst sei $a(\mathbf{w}) := \int_{\Omega} -v \operatorname{div} \mathbf{w} + \beta \sqrt{1 - |\mathbf{w}|^2} \, d\mathbf{x}$ und $a_n(\mathbf{w})$ analog für β_n statt β . Nun ist

$$\sup_{\mathbf{w}} a_n(\mathbf{w}) - \sup_{\mathbf{w}'} a(\mathbf{w}') = \sup_{\mathbf{w}} [a_n(\mathbf{w}) - \sup_{\mathbf{w}'} a(\mathbf{w}')] \leq \sup_{\mathbf{w}} [a_n(\mathbf{w}) - a(\mathbf{w})]$$

und damit

$$J_{\beta_n}(v) - J_{\beta}(v) \leq \sup_{\mathbf{w}} \int_{\Omega} [\beta_n - \beta] \sqrt{1 - |\mathbf{w}|^2} \, d\mathbf{x} \leq |\beta_n - \beta| |\Omega| .$$

Analog gilt

$$\sup_{\mathbf{w}} a_n(\mathbf{w}) - \sup_{\mathbf{w}} a(\mathbf{w}) = -[\sup_{\mathbf{w}} a(\mathbf{w}) - \sup_{\mathbf{w}} a_n(\mathbf{w})] \geq -\sup_{\mathbf{w}} [a(\mathbf{w}) - a_n(\mathbf{w})]$$

und damit

$$J_{\beta_n}(v) - J_{\beta}(v) \geq -|\beta - \beta_n| |\Omega| .$$

Aufgrund der Konvergenz $\beta_n \rightarrow \beta$ gilt damit auch für den letzten Summand die von v unabhängige Konvergenz.

Schwache Folgenunterhalbstetigkeit: Die schwache Folgenunterhalbstetigkeit des Funktionals F im Fall $H = L_2(\Omega)$ ist das Ergebnis von Lemma 4.11, so daß in diesem Fall die Voraussetzungen von Theorem 4.13 erfüllt sind. \square

Aus dem eben vorgeführten Beweis ergibt sich insbesondere der folgende Zusammenhang zwischen der Totalen Variation und ihrer Regularisierung.

Korollar 4.15 (*TV_β konvergiert gegen TV*)

Für $\beta \rightarrow 0+$ konvergieren die Funktionale J_β gleichmäßig gegen das nichtregularisierte TV -Funktional $J_0 = J_{TV}$.

Bemerkung: Mit der $\|\cdot\|_J$ -Koerzivität für $H = L_2(\Omega)$ gilt auch die von Acar und Vogel in [AV94] verwendete $\|\cdot\|_{BV}$ -Koerzivität, denn auf beschränkten Gebieten ist die Abschätzung

$$\|v\|_{L^1} = (v, 1)_{L_2} \leq \|v\|_{L_2} \|1\|_{L_2} = \sqrt{|\Omega|} \|v\|_{L_2}$$

gültig.

4.3.4 Die Differentialgleichung

Weil sich hier entgegengesetzte Richtungsableitungen entsprechen, gilt für die Gateaux-Ableitungen von J_β bei entsprechender Glattheit der Argumente

$$J'_\beta(v, w) = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} J_\beta(v + \varepsilon w)|_{\varepsilon=0} = \int_\Omega \frac{\nabla v \nabla w}{\sqrt{|\nabla v|^2 + \beta^2}} \, d\mathbf{x} \ .$$

Wir benutzen nun die Charakterisierungsbedingung für Minima. Wenn w am Rand verschwindet und partielle Integration möglich ist, so erhalten wir für das Minimum u von F die Bedingung

$$0 \stackrel{!}{=} F'(u, w) = \int_\Omega \left[2[u - z] - \alpha \operatorname{div} \left(\frac{\nabla u}{\sqrt{|\nabla u|^2 + \beta^2}} \right) \right] w \, d\mathbf{x} \ .$$

$F'(u, w) = 0$ ist also die schwache Formulierung der Gleichung

$$g(u) := 2[u - z] - \alpha \operatorname{div} \left(\frac{\nabla u}{\sqrt{|\nabla u|^2 + \beta^2}} \right) = 0 \ . \tag{4.4}$$

Ist $g(u) \in L_2(\Omega)$, so ist das der Gradient.

Für diese Differentialgleichung ist es notwendig, Randbedingungen vorzugeben. Wählte man Dirichletrandbedingungen, so würde das einem eingeschränkten Funktionenraum entsprechen. Die natürlichen Randbedingungen sind hier Neumannrandbedingungen.

4.4 Diskretisierung des Minimum-Problems

4.4.1 Das Minimum-Problem über endlichdimensionalen Teilräumen

Wir betrachten hier den Fall, daß die Minimierung nur auf einem endlichdimensionalen Teilraum durchgeführt wird. Dann sind Konvergenzbetrachtungen einfacher, denn alle Normen sind äquivalent und auch schwache Konvergenz ist gleichbedeutend mit Normkonvergenz. Außerdem gilt der Satz von Heine und Borel.

Liegt der betrachtete endlichdimensionale Raum vollständig in $W^{1,1}(\Omega)$, so können wir nach Lemma 4.8 die Darstellung

$$J_\beta(v) = \int_\Omega \sqrt{|\nabla v|^2 + \beta^2} \, d\mathbf{x}$$

benutzen.

4.4.2 Eine Diskretisierung

Wir betrachten ein d -dimensionales Würfelgitter und darauf die stetigen, stückweise multilinearen Funktionen. Sei nun $(v_{\vec{i}})_{\vec{i}}$ der Koeffizientenvektor einer solchen Funktion v zur nodalen Basis. In diesem Abschnitt identifizieren wir Funktionen mit ihren Koeffizientenvektoren. Für solche Vektoren benutzen wir deshalb entgegen den generellen Bezeichnungsregeln keine fett gesetzten Buchstaben.

Eine direkte Verwendung des Funktionals $F : v \mapsto \|z - v\|_{L_2}^2 + \alpha J_\beta(v)$ ist in dieser Situation für eine Implementierung nicht zugänglich. Wir bilden daher ein diskretes Analogon dieses Funktionals. Eine oft verwendete Diskretisierung der regularisierten Totalen Variation besteht darin, das diskrete Funktional

$$J_\beta^D((v_{\vec{i}})_{\vec{i}}) := \sum_{\vec{i}} |\Omega_{\vec{i}}| \sqrt{|\nabla_{\vec{i}}^D v|^2 + \beta^2} = \sum_{\vec{i}} |\Omega_{\vec{i}}| |\nabla_{\vec{i}}^D v|_\beta \quad (4.5)$$

zu betrachten. Dabei ist $\nabla_{\vec{i}}^D v$ ein geeigneter Differenzenquotientvektor im Knoten \vec{i} , $\Omega_{\vec{i}}$ die zugehörige Gitterzelle und wir benutzen für Vektoren $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^d$ die Abkürzung

$$|\mathbf{a}|_\beta := \sqrt{|\mathbf{a}|_2^2 + \beta^2} \, .$$

Als Diskretisierung der L_2 -Norm dient die auf das Gebiet skalierte l^2 -Norm des Koeffizientenvektors. Für stetige Funktionen erhalten wir durch Punktauswertungen Knotenwerte einer multilinearen Funktion und damit eine Projektion auf diesen diskreten Funktionenraum. Zu mindestens stetig differenzierbaren Funktionen \tilde{z} und \tilde{v} konvergieren die diskreten Funktionale der projizierten

Funktionen z^h und v^h zu Gitter der Maschenweite h für $h \rightarrow 0$ punktweise gegen das kontinuierliche Funktional der ursprünglichen Funktionen, wie aus

$$\begin{aligned}
& \left| \int_{\Omega} [\tilde{v} - \tilde{z}]^2 + \alpha \int_{\Omega} \sqrt{|\nabla \tilde{v}|^2 + \beta^2} \, d\mathbf{x} - \sum_{\vec{i}} \frac{1}{h^d} [v_{\vec{i}}^h - z_{\vec{i}}^h]^2 - \alpha \sum_{\vec{i}} \frac{1}{h^d} |\nabla_{\vec{i}}^D v^h|_{\beta} \right| \\
& \leq \left| \int_{\Omega} [\tilde{v} - \tilde{z}]^2 - \sum_{\vec{i}} \frac{1}{h^d} [v_{\vec{i}}^h - z_{\vec{i}}^h]^2 \right| \\
& \quad + \alpha \left| \int_{\Omega} \sqrt{|\nabla \tilde{v}|^2 + \beta^2} \, d\mathbf{x} - \sum_{\vec{i}} \frac{1}{h^d} \sqrt{|\nabla \tilde{v}(\mathbf{x}_{\vec{i}})|^2 + \beta^2} \right| \\
& \quad + \alpha \left| \sum_{\vec{i}} \frac{1}{h^d} \sqrt{|\nabla \tilde{v}(\mathbf{x}_{\vec{i}})|^2 + \beta^2} - \sum_{\vec{i}} \frac{1}{h^d} \sqrt{|\nabla_{\vec{i}}^D v^h|^2 + \beta^2} \right|
\end{aligned}$$

ersichtlich ist.

Als diskretes Minimierungsproblem betrachten wir also

$$F^D(v) := \frac{1}{2} \sum_{\vec{i}} |\Omega_{\vec{i}}| [v_{\vec{i}} - z_{\vec{i}}]^2 + \alpha \sum_{\vec{i}} |\Omega_{\vec{i}}| |\nabla_{\vec{i}}^D v|_{\beta} \rightarrow \min, \quad (4.6)$$

wobei wir im Hinblick auf die folgenden Charakterisierungen den Vorfaktor $\frac{1}{2}$ verwendet haben. Seine Verwendung entspricht aber lediglich einer Umskalierung des Parameters α . Da alle Gitterzellen die selbe Größe haben, spielen die Faktoren $|\Omega_{\vec{i}}|$ für die Suche nach dem Minimum keine Rolle. Von Chan und Mullet wird in [CM99] diese Diskretisierung in zwei Raumdimensionen mit dem Vorwärtsdifferenzenvektor vorgeschlagen.

Als notwendige Bedingung für Extrema erhalten wir für dieses Problem für die Koeffizientenvektoren die Gleichung

$$\alpha \sum_{\vec{i}} \nabla_{\vec{i}}^{D^T} \left(\frac{\nabla_{\vec{i}}^D u}{|\nabla_{\vec{i}}^D u|_{\beta}} \right) + u - z = 0. \quad (4.7)$$

Bemerkung: Im eindimensionalen Fall stimmt im Gebietsinnern J_{β}^D mit J_{β} auf den stetigen stückweise linearen Ansatzfunktionen überein, da deren Gradienten stückweise konstant sind, also jeweils das Integral dieser Summe entspricht. Durch andere Wahlen der diskreten Funktionenräume ist es auch in höheren Dimensionen möglich, das kontinuierliche Straffunktional J_{β} weiterhin zu benutzen. Wenn wir die Würfelzellen in Simplexe aufteilen, vgl. z.B. [Bey00], und auf den einzelnen Simplexe lineare Funktionen, gegeben durch die Werte der Ecken, ansetzen, so sind durch die Ausrichtung der Vorgabewerte auf den Gitterpunkten die Gradienten als Differenzen gegeben. Die dabei entstehenden Differenzenquotienten sind zu den verwendeten ähnlich, ihre Anzahl ist aber deutlich höher. Dies liegt in einer feineren Unterteilung der Bereiche begründet, was zur Folge hat, daß die Summe im Vergleich zu (4.5) deutlich mehr Summanden besitzt. Eventuell ist es gewünscht, im Ansatzfunktionenraum eine Richtungsbevorzugung zu vermeiden. Das kann durch Hinzunahme von Mittelpunkten, deren Werte durch Mittelung der Eckenwerte gebildet werden, erreicht werden.

4.4.3 Existenz und Eindeutigkeit

Existenz und Eindeutigkeit für das Minimierungsproblem (4.6) ergeben sich aus den Resultaten in Unterabschnitt 4.2.3, denn das Funktional auf dem Koeffizientenvektor $(v_{\vec{i}})_{\vec{i}}$ ist stetig und strikt konvex. Die Stetigkeit ist offensichtlich, da es sich bei diesem Funktional nur um Verkettungen stetiger Funktionen in den Koeffizienten handelt.

Da l^2 ein Hilbertraum ist, brauchen wir uns hier wegen Lemma 4.2 lediglich noch die Konvexität von J_{β}^D zu verdeutlichen. Die Abbildung $u \mapsto \nabla_{\vec{i}}^D u$ ist nach Definition linear. Allgemein sind Normen konvex, damit insbesondere $|\cdot|_2$. Weiterhin sind Verkettungen von monoton steigenden konvexen reellen Funktionen f mit konvexen Funktionalen auch konvexe Funktional, denn es ist

$$f(g(sa + [1 - s]b)) \leq f(sg(a) + [1 - s]g(b)) \leq sf(g(a)) + [1 - s]f(g(b)) .$$

Konkret ist die Funktion $x \mapsto \sqrt{x^2 + \beta^2}$ monoton steigend und konvex auf \mathbb{R}_0^+ . Da auch Summen konvexer Funktional konvex sind, haben wir nachgewiesen, daß die angegebene Bildung des diskreten Funktional J_{β}^D konvex ist.

Aber auch in irgendeiner Norm des entsprechenden Teilraumes ist das Funktional stetig, denn in endlichdimensionalen Räumen sind alle Normen äquivalent. Da Basiskoeffizienten linear von der dargestellten Funktion abhängen, ist das Funktional der Funktion statt des Koeffizientenvektors ebenfalls konvex.

4.4.4 Stabilität

Die Stabilitätsaussagen von Theorem 4.13 gelten hier analog. Wir modifizieren dazu die Definition (4.3) durch Verwendung von J_0^D statt J_0 . In Theorem 4.14 benutzen wir l^2 anstelle von L_2 . Betrachten wir nun den Beweis dieses Theorems. Die Koerzivität gilt genau wie bisher. Für die Konsistenz ist als einzige Änderung die folgende Abschätzung notwendig. Es gilt

$$\begin{aligned} |J_{\beta_n}^D(v) - J_{\beta}^D(v)| &= \left| \sum_{\vec{i}} |\Omega_{\vec{i}}| \left[\sqrt{|\nabla_{\vec{i}}^D v|^2 + \beta_n^2} - \sqrt{|\nabla_{\vec{i}}^D v|^2 + \beta^2} \right] \right| \\ &\leq \sum_{\vec{i}} \left| |\Omega_{\vec{i}}| \left[\sqrt{|\nabla_{\vec{i}}^D v|^2 + \beta_n^2} - \sqrt{|\nabla_{\vec{i}}^D v|^2 + \beta^2} \right] \right| \\ &\leq \sum_{\vec{i}} |\Omega_{\vec{i}}| \sqrt{|\beta_n^2 - \beta^2|} = |\Omega| \sqrt{|\beta_n^2 - \beta^2|} , \end{aligned}$$

denn es ist für $a, \Delta \in \mathbb{R}$ mit $a, a + \Delta > 0$

$$|\sqrt{a} - \sqrt{a + \Delta}| = \frac{|a - (a + \Delta)|}{\sqrt{a} + \sqrt{a + \Delta}} \leq \frac{|\Delta|}{\sqrt{|\Delta|}} = \sqrt{|\Delta|} .$$

Die letzte Ungleichung gilt für positive Δ wegen $\sqrt{a + \Delta} > \sqrt{a}$ und ansonsten mit $\sqrt{a} > \sqrt{|\Delta|}$, denn $a + \Delta$ ist nach Voraussetzung positiv.

Natürlich ist die Konvergenzaussage von Theorem 4.13 hier in der endlichdimensionalen Situation eine Konvergenz in jeder Norm.

4.5 Lösung des diskretisierten Minimum-Problems

4.5.1 Möglichkeiten

In der Literatur gibt es mehrere Ansätze zur Lösung der Minimierungsaufgabe (4.6).

Standardverfahren für Minimierung ohne Nebenbedingung

Gerade in [ROF92] wird angeregt, eine zu (4.7) analoge Gleichung als stationären Punkt einer parabolischen Differentialgleichung zu sehen und diese zeitlich zu verfolgen, bis ausreichende Stationarität erreicht ist. Ähnlich wie in Unterabschnitt 4.2.2 gibt es auch hier eine Entsprechung von Zeitdiskretisierungen mit dem expliziten Eulerverfahren und Gradientenverfahren gegebener Schrittweite. Allgemein sind Gradientenverfahren Abstiegsverfahren, bei denen die Richtung durch die des steilsten Abstiegs gegeben ist. Oft kommt der Schrittweitensteuerung eine besondere Bedeutung zu. Einzelheiten dazu finden sich beispielsweise in [Fle87, Abschnitt 2.6]. Insgesamt sind hier aber sehr kleine Schrittweiten notwendig, so daß dieses Verfahren nur sehr langsam konvergiert, wie Ergebnisse beispielsweise in [VO96, Abschnitt 4] zeigen. In dieser Quelle wird in Abschnitt 1 auch besprochen, daß es denkbar ist, Methoden wie CG oder Newton-Verfahren zu verwenden. Für realistische und damit kleine β -Werte führt die Nähe zur Nichtdifferenzierbarkeit allerdings zu erheblichen Problemen mit Robustheit und Effizienz. Um diese Unzulänglichkeiten zu beheben, wird in [CCZ95] eine Kontinuitätsmethode vorgeschlagen, die mit relativ großen Werten für β beginnt, für die effizient eine Lösung berechnet werden kann. Diese wird als Startnäherung für sukzessiv kleinere β verwendet. Ein solches Vorgehen ist zwar effizient, aber eine Kontrolle dieses Prozesses ist nicht einfach und erfordert eine Menge Heuristik, wie in [CGM96] angegeben ist.

Primal-Dual-Methode für TV-Minimierung

Ein anderer, erwähnenswerter Zugang zur Lösung von TV-Regularisierungen wird von Chan, Golub and Mulet in [CGM96] im allgemeineren Kontext des *deblurring* vorgeschlagen. Für unseren Kontext wird nicht die regularisierte Gleichung (4.4) betrachtet, sondern die zu J_{TV} gehörige Gleichung

$$[u - z] - \alpha \operatorname{div} \left(\frac{\nabla u}{|\nabla u|} \right) = 0 .$$

Die Idee besteht darin, eine duale Variable

$$\mathbf{w} := \frac{\nabla u}{|\nabla u|}$$

einzuführen, die Gleichung in

$$\begin{aligned} |\nabla u| \mathbf{w} - \nabla u &= 0 , \\ -\alpha \operatorname{div} \mathbf{w} + [u - z] &= 0 \end{aligned}$$

umzuschreiben und erst anschließend zu linearisieren, um eine Newton-Methode anzuwenden. Das in [CGM96] beobachtete Konvergenzverhalten ist weit besser als im Newtonverfahren für die Gleichung (4.4).

Lagged diffusivity fixed point iteration — FP

Ein robustes und effizientes Verfahren ist die sogenannte *lagged diffusivity fixed point iteration*, die von Vogel und Oman in [VO96, Abschnitt 1] vorgeschlagen und favorisiert, aber auch von Chan und Mullet in [CM99] diskutiert wird. Als Abkürzung verwenden wir die gängige Bezeichnung FP. Wir gehen nachfolgend näher auf dieses Verfahren ein.

4.5.2 Lösung mit FP

Wir folgen hier im wesentlichen der Darstellung von [CM99]. Man löst sukzessive zu einer gegebenen Näherung $u^{(k)}$ die Gleichung

$$\alpha \sum_{\vec{i}} \nabla_{\vec{i}}^{DT} \left(\frac{\nabla_{\vec{i}}^D u^{(k+1)}}{|\nabla_{\vec{i}}^D u^{(k)}|_{\beta}} \right) + u^{(k+1)} - z = 0 \quad (4.8)$$

für $u^{(k+1)}$, um diesen Wert als neue Näherung zu benutzen. Diese Iteration wird als *lagged diffusivity fixed point iteration* bezeichnet, da es sich beim Hauptteil dieser Gleichung um einen diskretisierten Diffusionsterm handelt, dessen Diffusionskoeffizient $|\nabla_{\vec{i}}^D u^{(k)}|_{\beta}^{-1}$ von der verzögert eingesetzten Näherung der Lösung abhängt.

Für ein tieferes Verständnis der Methode ist es geschickt, dieses Problem als Minimierungsaufgabe über einer größeren Menge im Sinne der *halbquadratischen Regularisierung* aufzufassen. Dazu betrachten wir die Funktion $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R} : x \mapsto xt^2 + \frac{1}{4x}$. Bei gegebenem t nimmt sie ihr Minimum in $x = 1/2t$ an und hat dort den Wert $f(x) = t$, wie eine eindimensionale Kurvendiskussion leicht ergibt. Also läßt sich das diskrete Minimierungsproblem (4.6) nach Umskalierung mit $|\Omega_{\vec{i}}|$ schreiben als

$$\begin{aligned} \min_u \sum_{\vec{i}} \left[\alpha |\nabla_{\vec{i}}^D u|_{\beta} + \frac{1}{2} [u_{\vec{i}} - z_{\vec{i}}]^2 \right] \\ &= \min_u \sum_{\vec{i}} \left[\alpha \min_{v_{\vec{i}} > 0} \left[v_{\vec{i}} |\nabla_{\vec{i}}^D u|_{\beta}^2 + \frac{1}{4v_{\vec{i}}} \right] + \frac{1}{2} [u_{\vec{i}} - z_{\vec{i}}]^2 \right] \\ &= \min_u \min_{v > 0} \sum_{\vec{i}} \left[\alpha v_{\vec{i}} |\nabla_{\vec{i}}^D u|_{\beta}^2 + \alpha \frac{1}{4v_{\vec{i}}} + \frac{1}{2} [u_{\vec{i}} - z_{\vec{i}}]^2 \right] \\ &=: \min_{u, v > 0} \Theta(u, v) \quad , \end{aligned}$$

wobei die Ungleichungsbedingung $v > 0$ komponentenweise zu verstehen ist. Wenn wir diese Minimierung alternierend in u und v durchführen, also

$$v^{(k+1)} := \arg \min_v \Theta(u^{(k)}, v) \quad , \quad (4.9)$$

$$u^{(k+1)} := \arg \min_u \Theta(u, v^{(k+1)}) \quad , \quad (4.10)$$

so entkoppelt die Gleichung (4.9) komponentenweise und wir erhalten für den Index \vec{i} den Wert

$$v_{\vec{i}}^{(k+1)} = \frac{1}{2} \frac{1}{|\nabla_{\vec{i}}^D u^{(k)}|_{\beta}} .$$

Das zu (4.10) gehörige Funktional $u \mapsto \Theta(u, v^{(k+1)})$ ist offensichtlich quadratisch in u , weshalb man dieses Schema halbquadratisch nennt. Mit der Konvexität dieses Funktionals erhalten wir $u^{(k+1)}$ als eindeutige Lösung der zugehörigen notwendigen Bedingung. Setzen wir den Wert von $v^{(k+1)}$ ein, so ist das genau die Gleichung (4.8). Die halbquadratische Minimierung ist demnach eine andere Formulierung des FP-Verfahrens. Sie wird beispielsweise auch von Vogel in [Vog97] thematisiert.

4.5.3 Konvergenz von FP

Die obige alternierende Minimierung läßt sich als verallgemeinerte Weizfeld-Methode interpretieren. Diese Sichtweise bildet die Grundlage der folgenden Konvergenzsätze, die von Chan und Mullet in [CM99] bewiesen werden. Die mit der notwendigen Einführung von Notationen und den verwendeten Hilfslemmata mehrseitigen Beweise werden hier nicht ausgeführt, stattdessen werden die Referenzen angegeben.

Zum globalen Konvergenzverhalten gibt der folgende Satz Auskunft.

Theorem 4.16 (Globale Konvergenz von FP nach [CM99])

Für die mit FP gewonnene Folge $(u^{(k)})_k$ gilt

- $F^D(u^{(k+1)}) \leq F^D(u^{(k)}) \quad \forall k$,
- $\lim_k \|u^{(k+1)} - u^{(k)}\| = 0$,
- $(u^{(k)})_k$ konvergiert gegen die Minimumstelle von F^D .

zum Beweis: Dieses Resultat entspricht [CM99, Lemma 5.1]. Dabei läßt sich die angegebene Methode mit [CM99, Lemma 4.1, Lemma 3.1] in den Kontext der generalisierten Weizfeld-Methode einbetten. \square

Betrachten wir nun die Konvergenzgeschwindigkeit. Dazu benötigen wir den Begriff der *R-linearen Konvergenz*. Im Unterschied zur *Q-linearen Konvergenz* bedeutet sie nicht, daß eine entsprechende Reduktion zwischen zwei aufeinanderfolgenden Folgengliedern vorliegen muß. Es muß statt dessen asymptotisch die Reduktion bezogen auf den Startwert erfüllt sei. Für genauere Definitionen sei beispielsweise auf [Blu72, Abschnitt 5.8] verwiesen.

Theorem 4.17 (Lokal lineare Konvergenz von FP nach [CM99])

Die mit FP gewonnene Folge $(u^{(k)})_k$ konvergiert mindestens *R-linear* gegen die Lösung u^* , d.h.

$$\limsup_k \sqrt[k]{\|u^{(k)} - u^*\|} < 1 ,$$

und die zugehörigen Funktionalwerte konvergieren sogar Q -linear, d.h.

$$\limsup_k \frac{|F^D(u^{(k+1)}) - F^D(u^*)|}{|F^D(u^{(k)}) - F^D(u^*)|} < 1 .$$

zum Beweis: Mit der im obigen Beweis angegebenen Einbettung folgt dieser Satz aus [CM99, Theorem 6.1]. \square

Auf weitere Konvergenzresultate zu dieser Methode wird beispielsweise in [DV97, Abschnitt 5] eingegangen.

4.5.4 Implementierung von FP

In der eindimensionalen Situation ist das in (4.8) angegebene Gleichungssystem eine Tridiagonalmatrix und damit mit einem einfachen Eliminationsverfahren lösbar.

Eine von Vogel in [Vog95] vorgestellte Implementierung für Rechteckgitter mit Neumannrandbedingungen verwendet die vorkonditionierte Methode der konjugierten Gradienten (PCG – Preconditioned Conjugate Gradient Method). Als Vorkonditionierung dient ein Mehrgitterverfahren (MG – Multigrid) basierend auf einer geeigneten zellenzentrierten Finite-Differenzen Diskretisierung ($CCFD$ – cell centered finite differences). Das Mehrgitterverfahren verwendet das Gauß-Seidel-Verfahren. Da es als Vorkonditionierer eingesetzt wird, ist die Symmetrie dieses Verfahrens zu gewährleisten. Deshalb wird schachbrettartig rot-schwarz aufgeteilt und als Vorglättung Red-then-Black-, als Nachglättung Black-then-Red-Gauß-Seidel verwendet. Numerische Resultate sind in [VO96] angegeben. Für den dreidimensionalen Fall ist das entsprechende Verfahren in [VO95] erwähnt.

4.6 Anwendung auf die Restart-Situation

Für die Restart-Situation ist es notwendig, nicht nur ein skalares Feld, sondern sämtliche für ein Neuaufsetzen der Teilchendifferenzierung relevanten physikalischen Felder zu regularisieren. Das sind Massendichte, Entropiedichte und Geschwindigkeit, wie in Kapitel 3 dargestellt ist. Anstatt nun diese Felder direkt zu bearbeiten, ist es auch möglich, geeignete abgeleitete Größen zu regularisieren und daraus wieder die Approximationsgrößen zu gewinnen.

Um die vorhandenen Schemata anwenden zu können und die Implementierung zu vereinfachen, glätten wir alle Größen als skalare Felder separat, Vektorfelder komponentenweise. Da die Kantenpositionen beim vorgestellten Verfahren extrem gut getroffen werden, ist diese separate Approximation sinnvoll durchführbar.

4.6.1 Die regularisierten Größen

Die Dichte als zentrale Größe der Methode der Finiten Massen wird direkt regularisiert. Die Einschränkung der Nichtnegativität wird bei dieser Approximation nicht verletzt.

Lemma 4.18 (Regularisierung nichtnegativer Funktionen)

Ist die zu regularisierende Funktion z nichtnegativ, also $(z_{\vec{i}})_{\vec{i}} \geq 0$, und $(\tilde{u}_{\vec{i}})_{\vec{i}}$ eine Näherung der Lösung des Minimierungsproblems für F^D , die negative Komponenten enthält, so ist

$$(\bar{u}_{\vec{i}})_{\vec{i}} := (\max\{0, \tilde{u}_{\vec{i}}\})_{\vec{i}}$$

eine Näherung mit geringerem Funktionalwert und näher an der richtigen Lösung.

Beweis: Nach den Voraussetzungen ist offensichtlich

$$\sum_{\vec{i}} |z_{\vec{i}} - \bar{u}_{\vec{i}}|^2 < \sum_{\vec{i}} |z_{\vec{i}} - \tilde{u}_{\vec{i}}|^2 ,$$

denn an den Stellen, an denen \tilde{u} negative Komponenten besitzt, sind die Differenzen für \bar{u} kleiner, sonst gleich. Dasselbe gilt auch für die Differenzenquotienten, so daß sicher

$$|\nabla_{\vec{i}}^D \bar{u}| \leq |\nabla_{\vec{i}}^D \tilde{u}|$$

gilt. Durch Kombination folgt, daß der Funktionalwert geringer ist. Da mit dieser Überlegung auch die Lösung keine negativen Komponenten enthalten kann, ist \bar{u} näher an ihr als \tilde{u} . \square

Als zweite thermodynamische Größe ist die Entropiedichte für uns von Interesse. Im Approximationsprozeß der Teilchenparameter wird sie allerdings durch die entsprechende Teilchenmasse geteilt. Letztendlich werden spezifische Entropien verwendet und deshalb regularisieren wir die globale spezifische Entropie. Da beim Restart die globalen physikalischen Felder von alten Teilchen stammen, ist sie, als Quotient von Entropiedichte und Massendichte, auch am Rand beschränkt.

Die dritte Größe ist die Geschwindigkeit. Oft ist es nicht notwendig, sie zu regularisieren, denn auch schon die Least-Squares-Approximation, die eine Mittelung auf dem Teilchenträger durchführt, hat eine glättende Wirkung. Soll die Geschwindigkeit dennoch geglättet werden, so muß das Schema direkt auf diese Größe angewendet werden, anstatt mit dem Massenfluß zu arbeiten. Sonst würde sie als Quotient der regularisierten Größen Massenfluß und Massendichte berechnet werden. Ein solches Vorgehen wäre damit in Randnähe, wo die Masse eventuell auf sehr kleine Werte reduziert wird, instabil.

4.6.2 Gebiet und Randbedingungen

Es ist naheliegend, auch für die Regularisierung nur das von Masse erfüllte Gebiet zu betrachten, da nur dort auf sinnvolle Weise die notwendigen Größen, wie beispielsweise die Geschwindigkeit, definiert sind. An Gebietsrändern sind für die Euler-Lagrange-Gleichung Randbedingungen vorzugeben. Für die Masse sind offensichtlich Dirichletrandbedingungen angesagt, für die beiden anderen Größen, die spezifische Entropie und die Geschwindigkeit, sind es Neumannrandbedingungen, da beide nicht zu Null abfallen.

Um vorläufig mit einem Mehrgitteransatz arbeiten zu können, kann man das Gebiet in eine große Box einbetten und auf ihr die Lösung berechnen. Die Felder werden durch Null fortgesetzt, aber die nicht korrekten Randbedingungen wirken sich nur marginal aus.

4.7 Beispielrechnung: Stoßrohre

Um die Brauchbarkeit dieser Regularisierung zu demonstrieren, dient die Berechnung eindimensionaler Stoßrohre in der Nähe des Ursprungs. Die Parameter der betrachteten Riemannprobleme sind in Unterabschnitt 2.8.1 angegeben. Als Endzeit der Rechnung ist $T = 1$ gewählt. Bis dahin werden 10 Restarts durchgeführt. Wir benutzen quadratische B-Splines. Jedes Einheitsintervall wird uni-

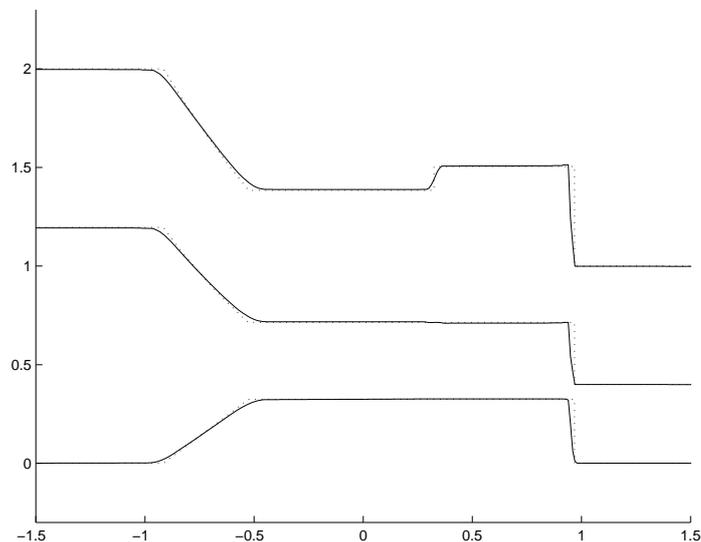


Abbildung 4.3: Rechnung zu Stoßrohr A mit 10 Restarts auf uniformen Gittern.

form in 50 Zellen unterteilt und das Rechengebiet so groß gewählt, daß Randeffekte sich bis zur Zeit $T = 1$ nicht auf das Observationsgebiet auswirken. Für die Rechnung wählen wir den Reibungsparameter $R = 250 \rho$, die Regularisierungsparameter sind $\alpha = 4 \cdot 10^{-7}$ und $\beta = 10^{-4}$. Die Berechnung der

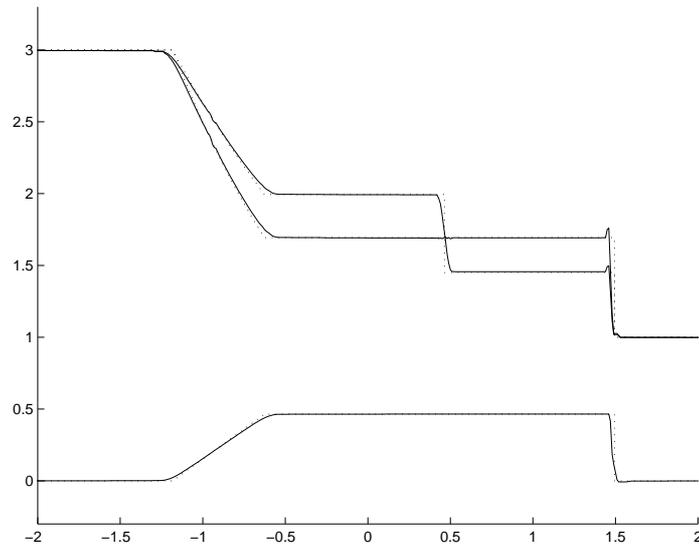


Abbildung 4.4: *Rechnung zu Stoßrohr B mit 10 Restarts auf uniformen Gittern.*

Dichten führen wir mit der in Unterabschnitt 3.4.3 angegebenen Quasiinterpolationsformel zweiter Ordnung durch, die als Stützstellen die Mittelpunkte der Nachbarpartikel hat. Als Norm der Least-Squares-Berechnung der Geschwindigkeit benutzen wir auf dem Teilchenträger ein Gitter mit 6 Zellen und als lokale Gewichte in den Gitterpunkten die Werte der jeweiligen Formfunktion an diesen Stellen.

In den Abbildungen 4.3 und 4.4 sind die kontinuierlichen Größen Massendichte, Druck und Geschwindigkeit zum Endzeitpunkt angegeben, die analytischen Lösungen zum Vergleich gepunktet daruntergelegt.

Kapitel 5

Adaptive Erweiterungen des Restart-Schemas

5.1 Einführung

5.1.1 Motivation

Oft sind große Bereiche einer zu untersuchenden Strömung glatt, und lediglich in wenigen stark lokalisierten Zonen finden große Änderungen statt. Nur in diesen kleinen Bereichen der Strömung ist eine hohe Auflösung notwendig, um die Situation angemessen zu beschreiben. Für konkrete Verfahren macht man deshalb oft adaptive Ansätze, die diesen geometrischen Gegebenheiten Rechnung tragen. Man versucht im wesentlichen, die Genauigkeit einer uniform feinen Situation zu erreichen, ohne die entsprechende Anzahl von Freiheitsgraden tatsächlich zu benötigen. Damit sind normalerweise auch gewisse Einschränkungen der feinen Konfiguration, etwa an die Zeitschrittweiten, gültig. Bei den populären Finite-Volumen-Verfahren werden solche Ansätze vielfach benutzt, indem der Raum in Zellen unterschiedlicher Größe unterteilt wird, vgl. beispielsweise [Krö97]. Für Strömungen, die fast stationär sind, kann man dieses ortsfeste Gitter meist während der Simulation beibehalten, andernfalls muß es an die sich zeitlich ändernde Situation angepaßt werden. Oder man verwendet sogenannte Multiresolution-Algorithmen, wie von Harten in [Har95] vorgeschlagen und beispielsweise in [DGM98] mehrdimensional implementiert. Dort wird auf einer Hierarchie von Gittern eine Mehrskalen-Repräsentation benutzt, aus der Basiselemente mit unbedeutenden Koeffizienten entfernt werden.

Auch unsere Methode läßt durch Konfigurationen mit verschiedenen großen Teilchen lokal unterschiedliche Auflösungen zu. Diese Auflösung wird hier natürlich mit der Masse transportiert. Für Effekte, die auf Konvektion beruhen, also dem Transport mit dem Fluid, ist diese Art von Adaptivität sehr zufriedenstellend. Allerdings spielen für die Gasdynamik auch Effekte, die nicht auf reiner Konvektion beruhen, eine Rolle. Schallausbreitung und Stoßwellen sind wichtige Beispiele für die Eulergleichungen. Dort wandern mit der Zeit große Teile

des Fluids durch solche Zonen, in denen eine höhere Feinheit wünschenswert ist. Der für unsere Methode zunächst naheliegend scheinende Ansatz, einfach die Teilchen zerplatzen zu lassen — denn jeder B-Spline kann beispielsweise durch eine Menge von B-Splines zur halben Gitterweite repräsentiert werden — ist allerdings nicht problemlos. Schon in zwei Raumdimensionen zerfällt ein kubischer B-Spline in 25 Teilchen halben Durchmessers. Das ist eine immense Anzahl, die hier dem Faktor 4 einer uniformen Verfeinerung zu Beginn der Simulation entgegensteht. Diese geringere Anzahl hat ihren Grund darin, daß beim Verfeinern der uniformen Situation die Nachfahren mehrerer Teilchen übereinander liegen und zusammengefaßt werden können. Das Zerplatzenlassen wäre nur dann konkurrenzfähig, wenn die betroffenen Bereiche sehr klein sind, oder wenn Nachfahren von Nachbarpartikeln, die fast aufeinanderliegen, auf sinnvolle Art zusammengenommen werden könnten. Auch ein geeignetes Vergröbern der Auflösung an Stellen des Fluids, die solche Zonen passiert haben, ist schwer in das bisherige Konzept einzubinden.

In unserem Kontext bei der Verwendung von Restarts ist eine Realisierung dieser Überlegungen leichter möglich. Es brauchen nur die Teile des Fluids hoch aufgelöst werden, die zwischen zwei Restarts solche interessanten Zonen durchlaufen. In den meisten Fällen handelt es sich dabei, wenn genügend Restarts gemacht werden, um die momentan interessanten Bereiche, die um kleine Umgebungen erweitert werden. Solche Umgebungen nennen wir im folgenden *Gürtel*. Durch die nachfolgend beschriebene Startsituation gelten hier für die Teilchenanzahlen im wesentlichen lokal die Wachstumsraten der uniformen Gitter anstatt derjenigen des Zerplatzens nichtausgerichteter Teilchen, also in zwei Raumdimensionen 4 statt 25 bei Halbierung der Teilchengrößen.

Zunächst soll unser Vorgehen in aller Kürze zusammengefaßt werden, eine genaue Beschreibung der einzelnen Schritte und ihre Motivation folgt im weiteren. Das Ziel, Bereiche abhängig von den lokalen Genauigkeitsanforderungen unterschiedlich fein aufzulösen, wird mit einer mehrstufigen Gitterhierarchie erreicht. Zunächst wird eine Approximation auf der größten Stufe bestimmt. Dann werden Bereiche detektiert, in denen diese Approximation zu ungenau ist. Diese Bereiche werden erweitert, um auch in der weiteren Strömungssimulation sinnvolle Approximationen liefern zu können und um mehrere Verfeinerungsschritte durchführen zu können. Eine Homogenisierung der entstandenen Bereiche zum Auffüllen von schmalen Spalten und kleinen Löchern schließt sich an, auch um die theoretischen Eigenschaften des Schemas zu gewährleisten. Dann können für die verfeinerten Bereiche an deren Rändern die bisherigen Approximationen übertragen werden — sie waren ja ausreichend genau —, im Innern werden die Koeffizienten neu berechnet. Dieser Verfeinerungsschritt kann jetzt sukzessive auf die folgenden Hierarchiestufen angewendet werden. Dabei kann garantiert werden, daß die zur Verfeinerung ausgewählten Bereiche geschachtelt liegen.

5.1.2 Startsituation mit Teilchen auf hierarchischen Gittern

Wir wenden uns nochmals der Abbildung 3.2, die das generelle Approximationsschema angibt, zu. Unser Interesse hier richtet sich auf den Übergang von

den globalen Feldgrößen auf die Teilchenapproximation.

Für die Entscheidung, welche Arten von Anfangsbedingungen wir zulassen wollen, spielt es eine Rolle, daß die wesentlichen Ideen und Ergebnisse aus Kapitel 3 übertragen werden sollen. Die Geschwindigkeit ist als Konvexkombination vergleichsweise einfach zu handhaben und wird nachträglich in das Schema integriert. Deshalb wenden wir uns zunächst den Dichten zu, die sich durch Superposition ergeben. Um auch weiterhin die Approximationseigenschaften von Tensorprodukt-B-Splines zu verwenden, werden wir auch im folgenden mit entsprechenden Gittern arbeiten. Wichtig hierbei ist, daß sich B-Splines durch eine Menge von B-Splines, die auf einem Gitter halber Maschenweite ausgerichtet sind, darstellen lassen. Die entsprechenden Koeffizienten sind auch positiv, was wegen der Positivitätsforderung an Teilchenmassen sehr begrüßenswert ist. So ist es möglich, große Teilchen verlustfrei durch kleine zu ersetzen, wo es erwünscht ist, oder aber lokal die Genauigkeit durch eine geeignete Wahl von Koeffizienten zu verbessern. Wir machen einen hierarchischen Ansatz und verwenden mehrere Gitterstufen, auf denen die Teilchen zu Beginn ausgerichtet sein können. Sie gehen jeweils durch Halbierung der Maschenweiten auseinander hervor und sind von 0 bis J nummeriert. In einigen Ansätzen orientieren wir uns an den Ideen der Dissertation von Kraft [Kra98]. Die Menge der potentiellen Teilchen ist jetzt wesentlich größer als die des uniform feinen Gitters und in gewisser Weise redundant. Um sinnvoll eindeutige Approximationen der Dichte und Entropie machen zu können, wollen wir uns auf linear unabhängige Mengen von B-Splines beschränken. Es darf also nicht vorkommen, daß sowohl ein Teilchen als auch alle seine möglichen direkten Nachfahren vorhanden sind. Diese Menge soll im masseerfüllten Gebiet lokal Splineräume, deren Auflösung sich nach den Erfordernissen der lokalen Situation richtet, aufspannen. Außerdem verlangen wir, daß Feingitter-Teilchen nur vorkommen, wenn sie irgendein Grobgitter-Teilchen ersetzen. Sonst würden mit den Feingitter-Teilchen nur Differenzfunktionen approximiert werden. Das wäre sowohl bei der Massendichte problematisch, da hier die Positivitätsbedingung eine Rolle spielt, als auch für die spezifische Entropie, die sich als Quotient ergibt, dessen Nenner dann nicht zu kontrollieren ist.

Die Festlegung der Bereiche, in denen eine hohe Auflösung benutzt wird, könnte durch eine Vorgabe von außen geschehen. Sinnvoller scheint es allerdings, einen Automatismus zu verwenden, der solche Bereiche identifiziert. Beim Restart sind allerdings keine dynamischen Informationen, sondern nur die eines festen Zeitpunktes gegeben. Diese momentanen Größen können wir für die Generierung einer momentan angepaßten Konfiguration verwenden. Mit groben Annahmen über das Durchwandern von Stößen, beispielsweise in Abhängigkeit der Schallausbreitung, und der Verwendung gewisser Toleranzspielräume ist es vielfach möglich, durch die momentane Situation auch eine — eher kurze — Zeit zwischen zwei Restarts ausreichend genau zu erfassen. Um das Problem einer unzureichenden Vorhersage anzugehen, ist es denkbar, *rejected-steps* einzuführen. Für die Zeit zwischen zwei Restarts müßte analysiert werden, ob die benutzten Auflösungen fein genug waren, um gegebenenfalls mit einer besser angepaßten Approximation der Ausgangssituation nochmals zu beginnen.

Zur Anzahl der Gitterstufen sei bemerkt, daß punktuell extrem feine Auflösungen wie beispielsweise bei Finite-Element-Codes in der Elastostatik oder bei der Berechnung stationärer Strömungen mit Finite-Volumen-Verfahren für uns nicht von großem Interesse sind. Erstens sind die hier interessanten Gebiete wegen der Gürtel nicht ganz so lokal, zweitens richten sich wichtige Verfahrensparameter wie die Zeitschrittweite nach der feinsten Auflösung und zum Dritten werden auch durch eventuell notwendige Regularisierungen beim Restart Fehler eingeschleppt, die den Sinn solcher momentan extrem genauen Approximationen in Frage stellen. Für eine ungefähre Vorstellung ist es sinnvoll, hier von zwei, drei oder vier Hierarchiestufen auszugehen.

Insgesamt handelt es sich bei unserem Ansatz nicht um ein klassisches Verfeinerungsschema, in dem zu einer gegebenen Anzahl von Freiheitsgraden eine möglichst optimale Approximation bestimmt wird. Viel eher hat es die Charakteristika eines Vergrößerungsschemas, in dem versucht wird, die Güte einer uniform feinen Approximation mit weniger Freiheitsgraden zu erreichen. So geht beispielsweise auch Harten in [Har95] bei seinem Multiresolution-Ansatz vor. In gewissen Bereichen, in denen ohne wesentliche Verluste gröbere Darstellungen benutzt werden können, kommen diese zum Einsatz.

In Abschnitt 5.2 betrachten wir ein zweistufiges Schema, an dem wir Verfeinerungskriterien und Werteberechnung darstellen. Der folgende Abschnitt befaßt sich damit, wie das Schema erweitert werden sollte, um es sukzessive auf mehrere Stufenübergänge anwenden zu können. Dabei spielt auch eine Homogenisierung des Verfeinerungsbereiches eine zentrale Rolle. Abschnitt 5.4 stellt das resultierende Verfahren schematisch dar und geht auf die Implementierung ein. Anschließend wird behandelt, wie die Geschwindigkeitsapproximation in das Verfahren einzubauen ist. In Abschnitt 5.6 wird eine Beispielrechnung präsentiert. Der letzte Abschnitt beleuchtet einen anderen Zugang. Ausgehend von der Arbeit von Preußner und Rumpf [PR99] soll ein Eindruck davon gegeben werden, inwiefern sich Fall Regularisierung und adaptive Approximation kombinieren lassen. Der dort verwendete Fall von linearen B-Splines als FE-Ansatzfunktionen ist allerdings deutlich einfacher als die hier verwendeten B-Splines höherer Ordnung.

5.2 Ein einfaches zweistufiges Verfahren für Dichten

Die Approximation der Massen- und Entropiedichte hat im Prinzip die Schwierigkeit der Approximation eines beliebigen skalaren Feldes durch Superposition von Einzelbeiträgen der B-Splines. Die Positivität, die für Teilchenmassen eine wichtige Bedingung ist, muß hierbei Berücksichtigung finden.

5.2.1 Schema des zweistufigen Verfahrens

Unser Vorgehen ist kanonisch. Wir gehen von einer Approximation der Grobgitterstufe aus, die mit dem Vorgehen aus Kapitel 3 berechnet werden kann.

Nun entscheiden wir über ein Fehlerkriterium, welche Bereiche verfeinert werden müssen. Nach den vorigen Überlegungen erweitern wir diese Bereiche um geeignete Gürtel. Die eigentliche Verfeinerung beinhaltet einerseits das Entfernen entsprechender Grobgitter-Teilchen, andererseits das Hinzunehmen von Feingitter-Teilchen, und die Bestimmung ihrer Parameter. Wir erhalten Schema 5.1.

Initialisierung Berechnung der Approximation auf dem Grobgitter mit dem Vorgehen aus Kapitel 3.

Verfeinerung

- (1) Auswahl des zu verfeinernden Bereichs nach Verfeinerungskriterien der einzelnen Zellen.
- (2) Erweiterung der Verfeinerungsbereiche um Gürtel.
- (3) Deaktivieren der entsprechenden Grobgitter-Teilchen und aktivieren der notwendigen Feingitter-Teilchen.
- (4) Bestimmung der Parameter für die Feingitter-Teilchen auf den verfeinerten Bereichen

Schema 5.1: Algorithmus für zweistufige Dichtebestimmung

5.2.2 Verfeinerungskriterium für Dichten

Um nun die momentan interessanten Bereiche zu finden, testen wir die einzelnen Gitterzellen und messen die lokalen Fehler für die uns interessierenden Größen in der Maximumnorm. Nur damit werden auch große Abweichungen auf sehr kleinen Gebieten sauber erkannt. Außerdem ist dieses Vorgehen eine wichtige Ingredienz für die Erweiterung des Schemas auf mehrere Stufenübergänge.

Um in Bereichen großer Fehler gute Approximationen zu erhalten, legen wir für die Verfeinerung das folgende Vorgehen fest.

Verfeinerungsparadigma: Für Gitterzellen, in denen die bisherige Approximation unbefriedigend ist, muß der Spline-Raum so erweitert werden, daß dort lokal die volle Auflösung des feinen Spline-Raums zur Verfügung steht.

Um zu erreichen, daß auf der entsprechenden Zelle die Auflösung der zum feinen Gitter gehörigen stückweisen Polynomräume vorhanden ist, müssen geeignete Grobgitter-Teilchen verfeinert werden. Wie man sich leicht überlegt, reicht generell eines der Grobgitter-Teilchen, dessen Mittelpunkt zu dieser Zelle gehört, aus. Im Fall, daß die Ordnung der betrachteten B-Splines ungerade ist, liegt gerade ein Teilchen symmetrisch auf der entsprechenden Zelle und genau dieses

wird verfeinert. Im andern Fall verfeinern wir aus Symmetriegründen sämtliche Teilchen, die auf den Eckpunkten dieser Zelle liegen.

Dennoch sollten noch weitere Teilchen verfeinert werden, nämlich die eines bestimmten Gürtels um den Bereich, der aufgrund des Fehlerkriteriums zur Verfeinerung ausgewählt wurde. Wir verwenden hier überall Gürtel der selben vorgegebenen Breite. Es ist auch denkbar, dieses Vorgehen weiter auszubauen, indem, beispielsweise gesteuert durch die Schallgeschwindigkeit, gewisse Gürtelbreiten lokal angepaßt werden. Sowohl im Zusammenhang mit der Positivitätsproblematik als auch bei der Erweiterung des Schemas auf mehrere Stufen sind Gürtelbreiten auch für theoretische Eigenschaften des Verfahrens von großem Interesse. So hängen beispielsweise die Durchführbarkeit des mehrstufigen Schemas, geeignete Übergangsbedingungen der Bereiche verschiedener Feinheit und Positivitätseigenschaften berechneter Werte an der Mindestgürtelbreite.

5.2.3 Bestimmung der Koeffizienten der B-Splines

Für das grobe Gitter kann wie in Kapitel 3 beschrieben, vorgegangen werden. Das feine Gitter läßt zwei prinzipiell verschiedene Möglichkeiten zur Bestimmung der B-Spline-Koeffizienten zu. Einerseits ist es möglich, die Koeffizienten der B-Splines des Feingitters derart zu berechnen, daß lokale Approximationseigenschaften gewährleistet sind. Andererseits kann gerade in Gürtelbereichen die Approximation des Grobgitters auf das feine übertragen werden, da sie dort schon ausreichend war.

Die Übertragung bedeutet, daß der Spline, der aus den zu entfernenden B-Splines des Grobgitters besteht, in der Basis der B-Splines des Feingitters dargestellt wird. Für die interessierenden Feingitter-Teilchen werden die entsprechenden Koeffizienten benutzt. Effizient läßt sich das implementieren, indem jedes herausgenommene Grobgitter-Teilchen seine lokale Darstellung in der B-Spline-Basis des Feingitters auf die zugehörigen Feingitter-Teilchen verteilt.

Die Koeffizientenberechnung kann prinzipiell mit den Methoden aus Kapitel 3 erfolgen. Da wir sie aber nur auf Teilmengen des Feingitters benötigen, ist insbesondere die rein lokale Vorgehensweise der Quasiinterpolation interessant. Dadurch, daß sich die neue Approximation als Summe von Grobgitter-Teilchen und Feingitter-Teilchen ergibt, kommen eventuell von Grobgitter-Teilchen Anteile auf die Feingitter-Teilchen, wenn die Darstellung der Feingitterbasis verwendet wird. Also ist es notwendig, die noch aktiven Grobgitter-Teilchen in der Basis der B-Splines des feinen Gitters darzustellen und an entsprechenden Stellen die berechneten Werte um diese Anteile zu korrigieren. Durch Subtraktion der Feingitteranteile der aktiven Grobgitter-Teilchen vom berechneten Wert erhalten wir die gewünschten Koeffizienten.

5.2.4 Positivität der Koeffizienten der B-Splines

Stellen wir uns nun die Frage nach der Positivität der Koeffizienten, die gerade für Teilchenmassen von Interesse ist. Wie in Unterabschnitt 3.4.3 vorgeschlagen,

benutzen wir die Quasiinterpolation mit Projektion.

Bei den eben angesprochenen Korrekturen kann es zur Subtraktion von Grobgitteranteilen kommen. Für geeignete Gürtel und Übergangsbedingungen existieren, wie weiter unten ausgeführt wird, solche Anteile gar nicht. Auch wenn die dort angegebenen Abstände nicht ganz eingehalten werden, sind beitragende Grobgitter-Teilchen so weit entfernt, daß deren Anteile vergleichsweise gering sind und in der Praxis von den lokalen Beiträgen kompensiert werden. Dabei ist auch die nachfolgend beschriebene generelle Verfeinerung am Rand von Interesse. Sie verhindert, daß am Gebietsrand, wo kleine Dichten auftauchen, Überträge von Grobgitter-Teilchen stattfinden.

5.2.5 Behandlung des Gebietsrandes

Die zulässigen Teilchen wurden schon in Unterabschnitt 3.3.1 thematisiert. Hier ist aber eine weitere Überlegung notwendig. Für unser Schema ist es ein Problem, wenn zu einem zu verfeinernden B-Spline nicht alle B-Splines, in die er zerfallen würde, zulässig sind. Dann ist nämlich eine korrekte Übertragung der bisherigen Masse auf die neuen Teilchen nicht mehr möglich. Um solche Situationen zu vermeiden, machen wir den folgenden Ansatz.

Randverfeinerungsparadigma: Alle Teilchen, deren Träger den Gebietsrand schneiden, werden stets verfeinert und dort werden die Koeffizienten aller Feingitter-Teilchen, die nicht vollständig im Gebiet liegen, berechnet.

Da alle Grobgitter-Teilchen am Rand verfeinert werden, ist insbesondere garantiert, daß am Rand keine Grobgitterbeiträge vorhanden sind.

Eine andere Sichtweise ist die, daß Teilchen, deren Träger einen Schnitt mit dem Komplementärgebiet, das wir im folgenden auch als *Außengebiet* bezeichnen werden, haben — und damit insbesondere alle unzulässigen Teilchen — sowieso verfeinert werden. Teilchen, die vollständig dort liegen, sind sicher unzulässig, genau wie ihre Nachfahren. Sie liefern somit keine Beiträge zu unserer Approximation, so daß auch diese Betrachtung zum selben Ergebnis führt, aber theoretisch einfacher zu handhaben ist.

5.2.6 Approximationsgüte

Bei der vorgestellten Approximation kann garantiert werden, daß in den Bereichen, die nur Grobgitter-Teilchen oder Feingitter-Teilchen mit übertragenen Beiträgen betreffen, die vorgegebene Fehlerschranke eingehalten wird. In den Bereichen, die nur Feingitter-Teilchen mit berechneten Beiträgen betreffen, wird die Approximation des Feingitters gewährleistet.

5.3 Strategie für mehrere Stufenübergänge

Wir wollen nun das zweistufige Schema auf mehrere Stufen übertragen. Beginnend mit Stufe 0 wird das obige Schema sukzessive auf alle Stufenübergänge angewendet. Das Ergebnis des beschriebenen Prozesses ist eine Approximation, bei der nur auf dem feinsten Gitter das Fehlerkriterium verletzt sein kann.

Für die Durchführung ist notwendig, daß auf jeder Stufe alle potentiellen Teilchen, die zur Verfeinerung ausgewählt wurden, auf dieser Stufe tatsächlich vorhanden sind. Diese Eigenschaft kann, neben einigen anderen, durch geeignete Bedingungen an Gürtelbreite und Koeffizientenbestimmung garantiert werden, wie in Unterabschnitt 5.3.1 ausgeführt ist.

Ein anderes Ziel besteht darin, die zu verfeinernden Bereiche zu homogenisieren. Das ist vor allem deshalb interessant, weil dadurch die Bereiche, in denen lokal mit der höheren Auflösung approximiert wird, erweitert werden und die Übergänge zwischen berechneten und übertragenen Werten reduziert werden, ohne die Teilchenanzahl nennenswert zu erhöhen. Unterabschnitt 5.3.2 befaßt sich mit diesem Thema.

5.3.1 Gürtelbedingungen

Unter einem Gürtel verstehen wir hier die Erweiterung einer gegebenen Teilchenmenge auf einer festen Stufe um alle jene Teilchen, die eine gewisse Entfernung zu der Ausgangsmenge nicht überschreiten. Als Abstandsmaß wird die Länge des kürzesten Weges im Nachbarschaftsgraph genommen. Dabei sind, wie für Tensorproduktansätze üblich, alle Elemente im umgebenden Würfel direkte Nachbarn. Beispielsweise in zwei Raumdimensionen hat ein Teilchen jeweils acht Nachbarn. Die vorgegebene Entfernungsschranke nennen wir *Gürtelbreite*.

Der Ausgangspunkt für die Anwendung unseres Übergangsschemas zweier Gitterstufen auf die Situation mehrerer Stufen bildet das

1. *Bereichsübergangsparadigma*: Eine Approximationsberechnung wird nur für die tatsächlich notwendigen Teilchen durchgeführt. Auf den restlichen Teilchen des Gürtels wird der Wert aus Anteilübertragungen herausgenommener Grobgitter-Teilchen ermittelt.

Wir führen die folgenden Überlegungen für quadratische und kubische B-Splines in der eindimensionalen Situation, benötigen aber im wesentlichen einen verlustfreien Übertragungsmechanismus, der hier an der Darstellung eines Teilchens durch gleichartige Teilchen halber Ausdehnung — eine Eigenschaft, die auch bei Wavelets eine zentrale Rolle spielt — und der Positivität der Koeffizienten liegt.

Für quadratische B-Splines hat man für eindimensionale Probleme die in Abbildung 5.1 dargestellten Situationen für Übergänge zwischen zwei Stufen bei den

angegebenen Gürtelbreiten. Auf den Feingittern ist jeweils der maximale Bereich, auf dem sich durch die Werteberechnung Daten geändert haben können, für die nächste Verfeinerung markiert. Damit ist der ungünstigste Fall angegeben. Wir können daran ablesen, daß eine Mindestgürtelbreite von 1 notwendig

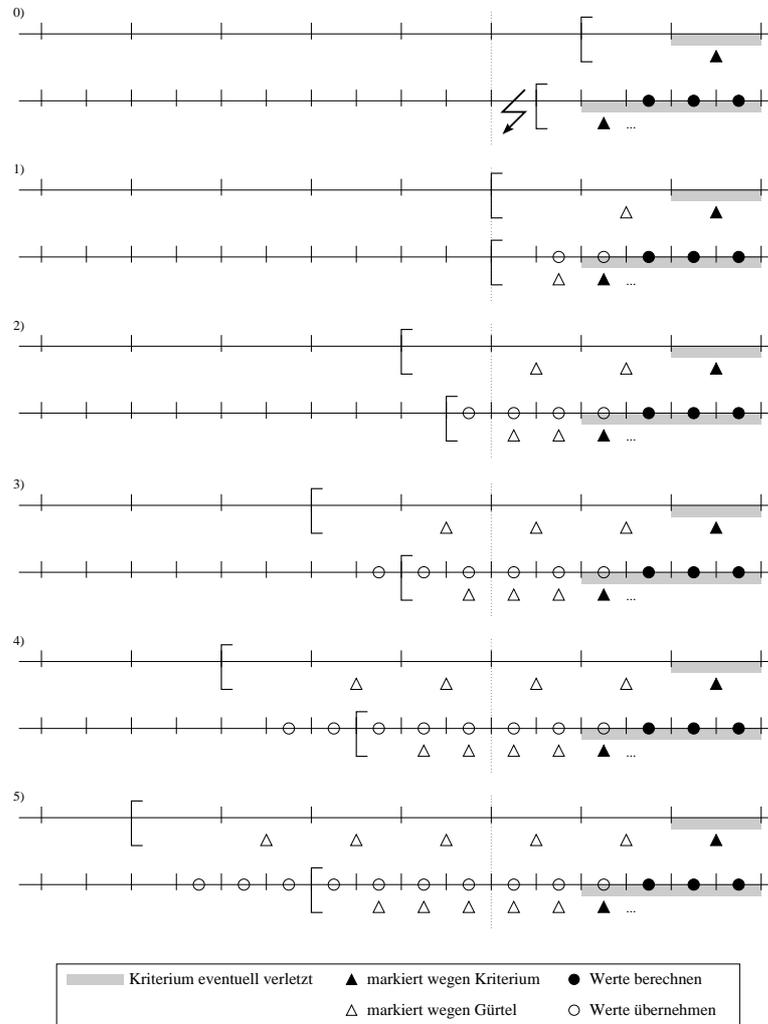


Abbildung 5.1: Übergangssituation bei unterschiedlicher Gürtelbreite für eindimensionale quadratische B-Splines.

ist, um dieses Schema auf mehrere Stufenübergänge anzuwenden, denn nur dann sind alle benötigten Teilchen vorhanden. Da sich der eingefärbte Bereich des Feingitters ändert, müßte prinzipiell das mit schwarzem Dreieck markierte Feingitter-Teilchen zur Verfeinerung zur Verfügung stehen, und auch die mit weißen Dreiecken markierten Gürtelteilchen. Bei Gürtelbreite 0 steht das mit schwarzem Dreieck markierte Feingitter-Teilchen nicht zur Verfügung, also ist das Schema dann nicht durchführbar.

Ab Breite 2 ist die in [Kra98] verwendete Übergangsbedingung, die einen direkten Übergang zwischen mehr als zwei Stufen untersagt, erfüllt. Man kann

einsehen, daß ab Breite 3 die Positivitätsproblematik dadurch entschärft ist, daß berechnete Werte keinerlei Grobgitterbeiträge — auch nicht solche höherer Stufen — zu berücksichtigen haben. Theoretisch ist interessant, daß wir den Überdeckungsgrad auch unabhängig von der Stufenanzahl beschränken können. Die maximale Anzahl lokal vorhandener Stufen ist nämlich ab Gürtelbreite 4 auf 3, ab 5 sogar auf 2 beschränkt. Exemplarisch wollen wir uns die Aussage für Gürtelbreite 5 verdeutlichen. Der Träger der nicht zu verfeinernden Grobgitter-Teilchen umfaßt nur Bereiche, die disjunkt zum Träger der potentiell zu verfeinernden Feingitter-Teilchen sind, die mit Dreiecken markiert sind.

Die selben Überlegungen lassen sich anhand von Abbildung 5.2 auch für kubische B-Splines durchführen. Analog erhalten wir für die Anwendbarkeit des Schemas eine Mindestgürtelbreite von 1. Ab einer Breite 2 ist die zitierte Übergangsbedingung der einzelnen Stufen erfüllt. Die für die Positivität wichtige Unmöglichkeit von Grobgitterbeiträgen gilt hier ab einer Breite von 4. Für die Beschränkung der lokal vorhandenen Stufen auf 3 benötigen wir 5 Schalen, 7 Schalen garantieren die Schranke 2.

Durch die Verwendung der Gürtel wird es durchaus vorkommen, daß Bereiche, die zur Verfeinerung markiert sind, zusammenwachsen. Es wäre nicht sinnvoll, an diesen inneren Gürtelgebieten jeweils den Bereichsübergang durch Wertübertragung durchzuführen, wenn ohne Mehraufwand hier eine bessere Approximation bestimmt werden kann. Man überlegt sich, daß die Übergangsbedingung, die von den Gürteln garantiert wird, für unser Verfahren nur am Rand zwischen aktiven und inaktiven Teilchen notwendig ist. Deshalb verwenden wir im weiteren das

2. Bereichsübergangsparadigma: Eine Approximationsberechnung wird für die Feingitter-Teilchen durchgeführt, die einen genügend großen Abstand zu inaktiven Teilchen dieses Gitters haben. Für restlichen Teilchen des Gürtels wird der Wert aus Anteilsübertragungen herausgenommener Grobgitter-Teilchen ermittelt.

Der Abstand ist in den Abbildungen 5.1 und 5.2 ersichtlich und beträgt für quadratische B-Splines die doppelte Gürtelbreite, für kubische B-Splines diesen Wert um 1 erhöht.

Dieses Vorgehen ist allerdings nur dann möglich, wenn *innere Ränder* ausgeschlossen werden können. Das sind Stellen, an denen die Feinbereiche keine Ränder haben, wohl aber die Grobbereiche. Ein Beispiel ist in Abbildung 5.3 angegeben. Die Forderung zur Vermeidung solcher Situationen hängt mit der gewünschten linearen Unabhängigkeit einer Teilchenmenge zusammen. Allein durch die angegebene Gürtelbildung können innere Ränder nicht ausgeschlossen werden; hier sind Erweiterungen des Vorgehens notwendig, die im nächsten Unterabschnitt auch thematisiert werden.

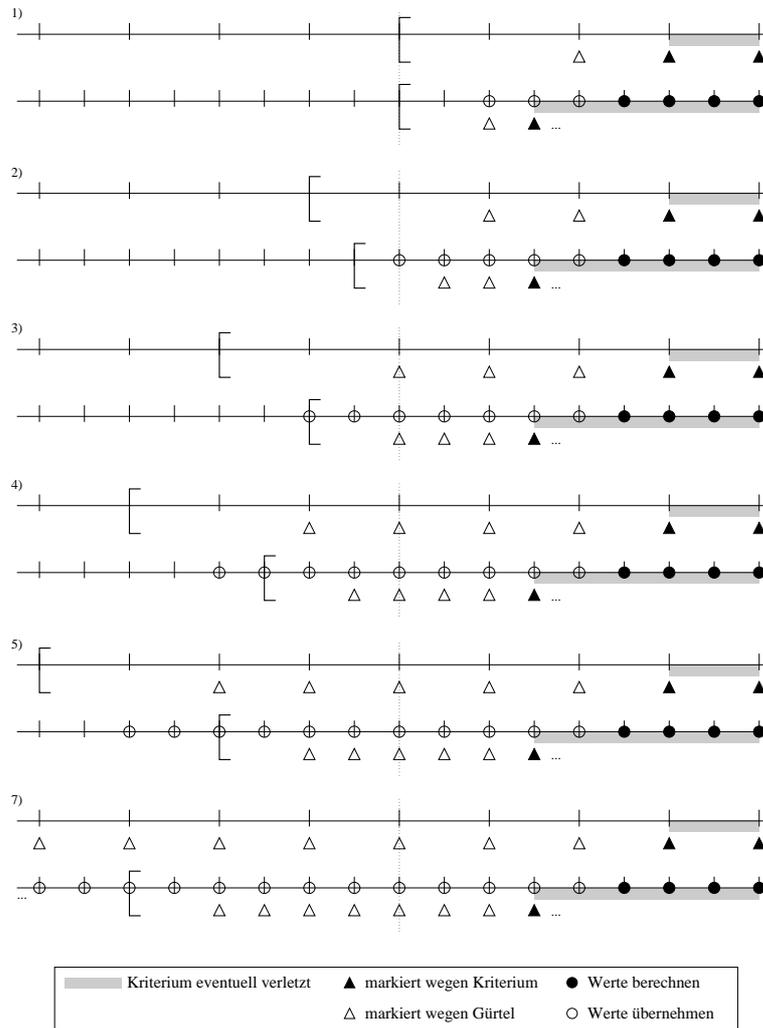


Abbildung 5.2: Übergangssituation bei unterschiedlicher Gürtelbreite für eindimensionale kubische B-Splines.

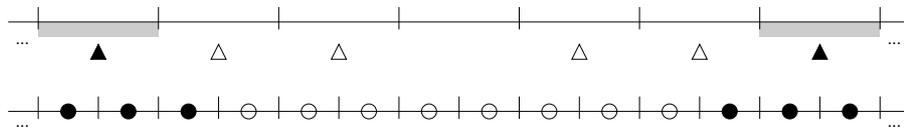


Abbildung 5.3: Beispiel für einen inneren Rand.

5.3.2 Schließbedingungen

Um die zur Verfeinerung ausgewählten Gebiete weiter zu homogenisieren, kann ein Prozeß verwendet werden, der ein Aufblähen und anschließend ein Schrumpfen der Verfeinerungsbereiche als Aufblähen der komplementären Bereiche beinhaltet. Wir bezeichnen ihn als *Growing-and-Shrinking-Algorithmus*, kurz GS-Algorithmus. Konkret werden zunächst Schalen direkter Nachbarn um die zu

verfeinernden Teilchen gelegt. Nochmals sei darauf hingewiesen, daß auch alle Teilchen, deren Träger einen Schnitt mit dem Gebietskomplement haben, insbesondere also die unzulässigen Teilchen, zur Verfeinerung markiert sind. Anschließend wird das zugehörige Komplementärgebiet wieder um dieselbe Anzahl von Schalen erweitert. Die jetzt noch übrigen zur Verfeinerung markierten Teilchen werden tatsächlich verfeinert. Der generelle Effekt ist, daß damit kleine Löcher und schmale Kerben geschlossen werden, wie das Beispiel in Abbildung 5.4 zeigt. Für die Anwendbarkeit als Bereichshomogenisierung in unserem

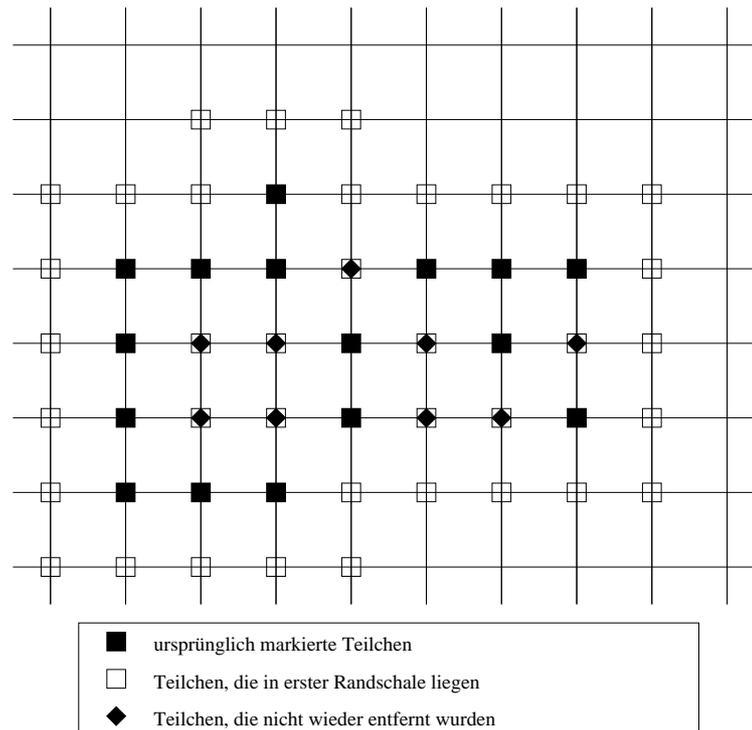


Abbildung 5.4: Beispiel für die Anwendung des einstufigen GS-Algorithmus.

Verfeinerungsschema sind vor allem zwei Eigenschaften von großer Bedeutung. Wenn der ermittelte Bereich nicht schrumpfen kann, so werden alle beabsichtigten Verfeinerungsbereiche entsprechend aufgelöst. Ferner darf ein zu unmäßiges Wachstum des Verfeinerungsbereichs in der Menge der aktiven Teilchen, so daß dort die Übergangsbedingungen nicht mehr erfüllt sind, nicht möglich sein. Damit ist insbesondere garantiert, daß nie inaktive Teilchen zur Verfeinerung markiert werden.

Wir benötigen nun einen gewissen Formalismus, um die geforderten Aussagen nachzuweisen. Zur Beschreibung der angegebenen Homogenisierungen machen wir die folgende Definition und zeigen anschließend elementare Eigenschaften.

Definition 5.1 (Nachbarmengen und Operator GS_n)

Jeder Teilmenge A einer Grundmenge M wird durch

$$N^+(A) := \{x \in M \mid \text{dist}(x, A) \leq 1\}$$

die Teilmenge, die auch die direkten Nachbarn enthält, zugeordnet. Der um eine Schale von Nachbarn reduzierte Bereich ist

$$N^-(A) := \mathcal{C}(N^+(\mathcal{C}(A))) ,$$

wenn \mathcal{C} die Komplementbildung bezeichnet. Damit definieren wir den n -stufigen GS-Operator durch

$$GS_n(A) := [N^-]^n[N^+]^n(A) .$$

So kommen zum Beispiel bei Anwendung von GS_1 genau die Elemente hinzu, die zur ersten Nachbarschaftschale gehören, aber keine Nachbarn in der zweiten Schale besitzen.

Lemma 5.2 (elementare Eigenschaften von N^- und N^+)

Es gilt für beliebige Teilmengen $A, B \subseteq M$

$$A \subseteq B \quad \Rightarrow \quad N^+(A) \subseteq N^+(B) \quad (5.1)$$

$$A \subseteq [N^-]^n([N^+]^n(A)) \quad (5.2)$$

$$A \supseteq [N^+]^n([N^-]^n(A)) \quad (5.3)$$

$$[N^+]^n[N^-]^n[N^+]^n(A) = [N^+]^n(A) \quad (5.4)$$

$$[N^-]^n[N^+]^n[N^-]^n(A) = [N^-]^n(A) \quad (5.5)$$

Beweis: Die Eigenschaft (5.1) ist eine direkte Folge der Definition.

Die Behauptung (5.2) zeigen wir induktiv. Zunächst ist

$$\begin{aligned} N^+(\mathcal{C}(N^+(A))) &= N^+(\mathcal{C}(\{x \in M \mid \text{dist}(x, A) \leq 1\})) \\ &= N^+(\{x \in M \mid \text{dist}(x, A) > 1\}) \\ &\subseteq \{x \in M \mid \text{dist}(x, A) > 0\} = \mathcal{C}(A) \end{aligned}$$

und deshalb

$$N^-(N^+(A)) = \mathcal{C}(N^+(\mathcal{C}(N^+(A)))) \supseteq A .$$

Damit ist im Induktionsschritt

$$\begin{aligned} [N^-]^n([N^+]^n(A)) &= [N^-]^{n-1}[N^-N^+]([N^+]^{n-1}(A)) \\ &\supseteq [N^-]^{n-1}([N^+]^{n-1}(A)) \supseteq A . \end{aligned}$$

Analog argumentiert man für (5.3) mit den Komplementen für die umgekehrte Reihenfolge der Operatoren, verwendet $[N^-]^n = [\mathcal{C}N^+\mathcal{C}]^n = \mathcal{C}[N^+]^n\mathcal{C}$ und erhält

$$\begin{aligned} [N^+]^n[N^-]^n(A) &= \mathcal{C}\mathcal{C}[N^+]^n\mathcal{C}[N^+]^n\mathcal{C}(A) \\ &= \mathcal{C}[N^-]^n[N^+]^n\mathcal{C}(A) \subseteq \mathcal{C}\mathcal{C}(A) = A . \end{aligned}$$

Die Aussage (5.4) ergibt sich daraus wegen

$$[N^+]^n A \subseteq [N^+]^n [[N^-]^n [N^+]^n] (A) = [[N^+]^n [N^-]^n] [N^+]^n (A) \subseteq [N^+]^n A$$

unmittelbar. Völlig analog folgt (5.5). \square

Lemma 5.3 (Eigenschaften von GS_n)

Es gelten die folgenden Eigenschaften.

1. Das Ergebnis des GS-Algorithmus ist ein Bereich, der den Ausgangsbereich enthält.
2. GS_n ist eine Projektion.
3. Es gilt $GS_m(A) \subseteq GS_n(A)$ für $m \leq n$.
4. Bei Verwendung von GS_n mit $n \geq 1$ als Homogenisierungsverfahren der Verfeinerungsgebiete können für quadratische und kubische B-Splines keine inneren Ränder auftreten.

Beweis: zu 1.) Das ist die Aussage von (5.2).

zu 2.) Diese Behauptung folgt sofort mit (5.4).

zu 3.) Für $m < n$ gilt

$$GS_n(A) = [N^-]^m(GS_{n-m}[N^+]^m(A)) \supseteq [N^-]^m[N^+]^m(A) = GS_m(A) .$$

zu 4.) Wir führen diesen Beweis zweidimensional, um die Darstellung zu vereinfachen, aber er kann aber auf offensichtliche Weise auf höherdimensionale Situationen übertragen werden.

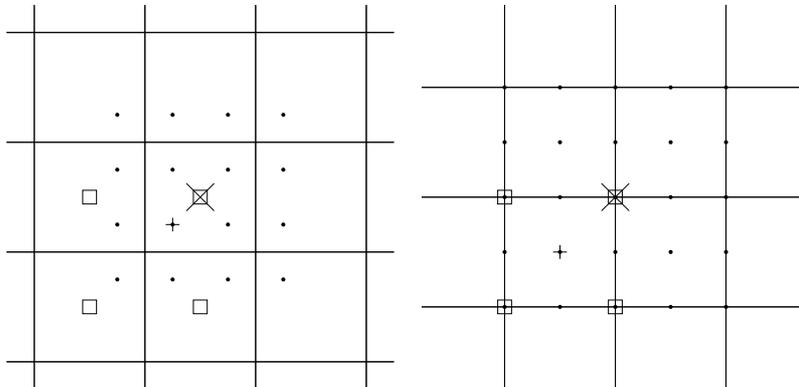


Abbildung 5.5: Situation im Beweis zu Punkt 4 in Lemma 5.3 links für quadratische und rechts kubische B-Splines.

Wir betrachten die Abbildung 5.5. Als Voraussetzung seien alle notwendigen Feingitter-Teilchen (\cdot) eines Grobgitter-Teilchens \times als Söhne von Grobgitter-Teilchen einer Menge A vorhanden. Wir zeigen jetzt, daß dann das Teilchen \times in $GS_1(A) \subseteq GS_n(A)$ liegt. Da alle Söhne von \times vorhanden sind, ist insbesondere das mit $+$ markierte Feingitter-Teilchen vorhanden. Die einzigen möglichen Grobgitter-Teilchen, die es erzeugen könnten, sind mit \square markiert. In der N^+ -Menge des entsprechenden Teilchens liegen damit sicher alle mit \square markierten Teilchen. Analoges gilt für die entsprechenden Punkte der anderen Quadranten,

so daß generell das Teilchen \times und seine acht Grobgitternachbarn in $N^+(A)$ liegen. Insbesondere bleibt damit in deren N^- -Menge das mit \times markierte Teilchen übrig, was zu zeigen war. \square

Mit der Verwendung des mindestens einstufigen GS-Algorithmus wird das Problem innerer Ränder also gelöst, die Voraussetzung zur Anwendbarkeit des zweiten Bereichübergangsparadigma ist somit erfüllt. Es werden alle die Grobgitter-Teilchen automatisch verfeinert, für die alle zugehörigen Feingitter-Teilchen aktiv sind. Damit haben wir auch die lineare Unabhängigkeit der aktiven B-Splines.

Kümmern wir uns nun um die zweite Eigenschaft. Für unsere Anwendung ist es wichtig, daß die homogenisierten Bereiche geschachtelt liegen. Es darf also kein Verfeinerungsbereich so erweitert werden, daß die Menge der inaktiven Teilchen erreicht wird. Genauer verlangen wir sogar die entsprechenden Abstandsbedingungen aus den Abbildungen 5.1 und 5.2, damit die dort vorgestellten Konsequenzen weiterhin gelten. Als Beispiel, daß diese Art von Problemen tatsächlich auftreten kann, betrachten wir die Abbildung 5.6, die einen Ausschnitt aus einer möglichen Situation für kubische B-Splines bei einer Gürtelbreite von 1 oder 2 und einer Anwendung von GS_2 zeigt. Zumindest das mittlere hinzukommende

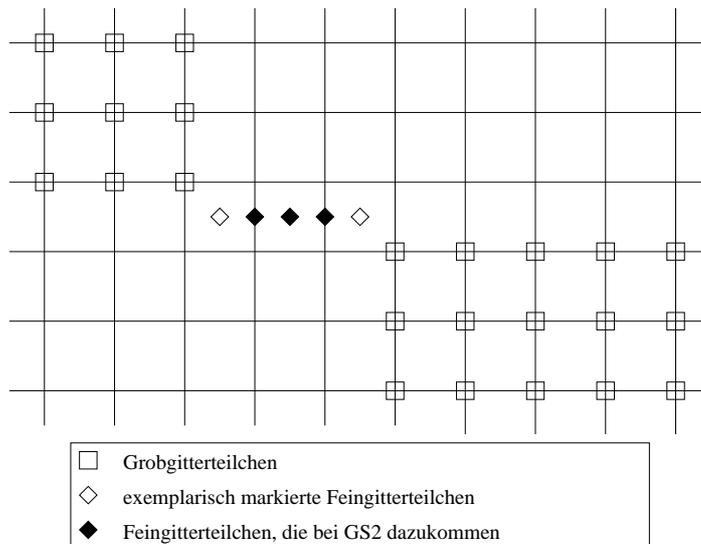


Abbildung 5.6: Beispiel für zu großes Wachstum auf feineren Stufen.

Teilchen kommt von keinem der Grobgitter-Teilchen.

Um diesem Problem Herr zu werden, könnte man zwar eine nachträgliche Durchschnittsbildung verwenden, dann ist aber der Ausschluß innerer Ränder nicht mehr garantiert. Durch Überlegungen, die mit der Gürtelbreite zusammenhängen, können wir diese Probleme in wichtigen Fällen ausschließen.

Lemma 5.4 (mehrere Stufenübergänge)

Für quadratische und kubische B-Splines gibt es Mindestgürtelbreiten, ab denen

gilt: Wenn der zur Verfeinerung markierte Bereich auf dem Grobgitter mit dem GS-Algorithmus homogenisiert wurde, liegt die Homogenisierung des zur Verfeinerung markierten Feingitterbereiches im Bereich aktiver Feingitter-Teilchen mit dem notwendigen Abstand zu inaktiven Teilchen. Diese Mindestgürtelbreite beträgt für quadratische B-Splines 2 und für kubische B-Splines 3.

Beweis: Zunächst zeigen wir für alle $m, n \in \mathbb{N}$ die Hilfsbehauptung

$$GS_m[N^-]^n(A) \subseteq [N^-]^n GS_m(A) . \quad (5.6)$$

Ist $n \geq m$, so folgt diese Aussage unmittelbar aus

$$\begin{aligned} GS_m[N^-]^n(A) &\subseteq GS_n[N^-]^n(A) = [N^-]^n [N^+]^n [N^-]^n(A) \\ &= [N^-]^n(A) \subseteq [N^-]^n GS_m(A) . \end{aligned}$$

Im andern Fall, für $n < m$, gilt

$$\begin{aligned} GS_m[N^-]^n(A) &= [N^-]^m [N^+]^m [N^-]^n(A) \\ &= [N^-]^n [N^-]^{m-n} [N^+]^{m-n} [N^+]^n [N^-]^n(A) \\ &\subseteq [N^-]^n GS_{m-n}(A) \subseteq [N^-]^n GS_m(A) . \end{aligned}$$

Als Argument für die Aussage dieses Lemmas betrachten wir die Grobgittersituation auf der Feingitterstufe. Dazu benötigen wir zunächst sinnvolle Übertragungsmechanismen.

Wenden wir uns zuerst den quadratischen B-Splines zu. Hier ist es sinnvoll, nicht Gitter zu betrachten, auf denen Teilchenmittelpunkte liegen, denn ihre Übertragung auf die feinere Stufe ergibt eine ausgedünnte Situation. Stattdessen betrachten wir das Gitter, in dessen Zellenmittelpunkten die Mittelpunkte der Teilchen liegen und identifizieren Teilchen statt mit ihren Mittelpunkten mit den entsprechenden Zellen. Diese Sichtweise ist ein Übergang zu Voronoi-Diagrammen, die in dieser regulären Situation die zu den Mittelpunkt-Gittern dualen Gitter sind und die Verwendung der Zellen statt der Punkte. So ist offensichtlich, wie eine Übertragung von der groben auf die feine Stufe zu verstehen ist. Den zugehörigen Operator nennen wir F .

Nun ist es entscheidend, sich klar zu machen, daß die Schalenoperation N^+ oder N^- auf dem Grobgitter in der auf das feine Gitter übertragenen Situation durch doppelte Anwendung derselben Operation durchgeführt werden kann. Das hat zur Folge, daß für den Übertrag $F(A^g)$ einer Menge von Grobgitterzellen A^g insbesondere

$$F(GS_n(A^g)) = GS_{2n}(F(A^g))$$

gilt. Wir verwenden für die Mengen der zur Verfeinerung markierten Teilchen nach der Gürtelrechnung die Bezeichnungen B^g und B^f und für die homogenisierten Mengen die Bezeichnungen \bar{B}^g und \bar{B}^f .

Die Voraussetzung unserer Überlegung ist, daß die markierte Feingittermenge einen bestimmten inneren Abstand zur Grobgittermenge hat. Es gelte

$$B^f \subseteq [N^-]^k F(\bar{B}^g)$$

mit $k \geq 0$. Das ist für quadratische B-Splines für Gürtel mit Breiten ab 2 erfüllt, wie aus der Abbildung 5.1 ersichtlich ist. Damit ist dann

$$\begin{aligned} \bar{B}^f &= GS_n(B^f) \subseteq GS_n([N^-]^k F(\bar{B}^g)) \subseteq [N^-]^k GS_n(F(\bar{B}^g)) \\ &\subseteq [N^-]^k GS_{2n}(F(\bar{B}^g)) = [N^-]^k (F(GS_n(\bar{B}^g))) = [N^-]^k (F(\bar{B}^g)) . \end{aligned}$$

Für kubische B-Splines argumentiert man analog und benutzt auch hier, um den Gitterübergang zu meistern, die Zellen der zu den Mittelpunktgittern dualen Gitter. Da jetzt aber Grob- und Feingitter nicht mehr korrespondieren, vgl. Abbildung 5.2, benötigen wir ein zusätzliches Hilfsgitter der halben Maschenweite des Feingitters. Auf ihm können wir wieder völlig analoge Überlegungen durchführen, wenn wir beachten, daß Grobgitteroperationen der vierfachen Menge und Feingitteroperationen der doppelten Menge an Hilfsgitteroperationen entsprechen.

Betrachten wir Gürtelbreiten ab 3, so gilt mit dem Übertragungsoperator auf das Hilfsgitter $H(\cdot)$ hier, wie in Abbildung 5.2 ersichtlich ist, $H(B^f) \subseteq [N^-]^k H(\bar{B}^g)$ mit $k \geq 0$. Damit gilt diese Inklusion auch für die homogenisierte Menge \bar{B}^f , denn es ist

$$\begin{aligned} H(\bar{B}^f) &= H(GS_n(B^f)) = GS_{2n}(H(B^f)) \subseteq GS_{2n}([N^-]^k (H(\bar{B}^g))) \\ &\subseteq GS_{4n}([N^-]^k (H(\bar{B}^g))) \subseteq [N^-]^k GS_{4n}(H(\bar{B}^g)) \\ &= [N^-]^k (H(GS_n(\bar{B}^g))) = [N^-]^k (H(\bar{B}^g)) . \end{aligned}$$

□

Für quadratische und kubische B-Splines lassen sich schon für GS_1 Gegenbeispiele angeben, wie Abbildung 5.7 für die Gürtelbreite 1 zeigt.

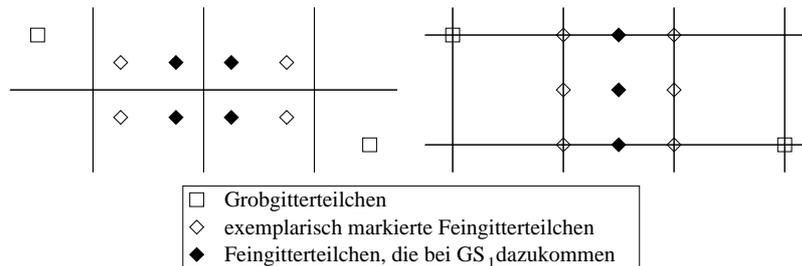


Abbildung 5.7: Gegenbeispiele zur Inklusion homogenisierter Verfeinerungsmengen des Feingitters in der entsprechenden Menge aktiver Teilchen für quadratische und kubische B-Splines.

Für kubische B-Splines, einer Gürtelbreite von 2 und mit GS_1 als Bereichshomogenisierungsverfahren sind die Randübergänge noch garantiert, denn die

zunächst markierte Verfeinerungsmenge B hat zur Menge der inaktiven Teilchen U einen Abstand von mindestens 2 nach Voraussetzung, vgl. Abbildung 5.2. Damit gilt für die homogenisierte Verfeinerungsmenge \bar{B} die Inklusion

$$\bar{B} = GS_1(B) \subseteq GS_1(\mathcal{CN}^+(U)) = N^-N^+N^-(\mathcal{CU}) = N^-(\mathcal{CU}) = \mathcal{CN}^+(U) ,$$

womit sie den Randabstand erfüllt.

5.4 Das konkrete Verfahren für Dichten

5.4.1 Schemadarstellung

Die potentielle Teilchenmenge, also die Menge aller Teilchen auf allen Gittern zerfällt in drei Mengen. Die unzulässigen Teilchen sind diejenigen, die zwar auf den Gittern liegen, für unsere Approximation aber keine Rolle spielen können, da sie nach dem entsprechenden Paradigma nicht ausreichend im Rechengebiet liegen. Zulässige Teilchen sind aktiv oder inaktiv, je nachdem, ob sie zu der Teilchenmenge zählen, die für die Approximation verwendet wird. Um Verfeinerungen zu markieren, benötigen wir ein Flag, das auch auf unzulässige Teilchen anwendbar sein muß, damit unser Vorgehen für den Gebietsrand funktioniert. Für die neuen Feingitter-Teilchen ist es wichtig zu wissen, ob die Werte übertragen oder berechnet werden sollen. Das wird durch einen Mindestabstand zu inaktiven Teilchen entschieden.

Nach der Berechnung sämtlicher Teilchen ist das in Unterabschnitt 3.3.2 dargestellte Vorgehen angebracht. Die Entfernung von unbedeutenden Teilchen, basierend auf einer Schranke für die lokalen Teilchendichten, bewährt sich auch hier. Insgesamt erhalten wir das Schema 5.2.

Gemäß den Überlegungen des vorigen Abschnittes benutzen wir für quadratische B-Splines mindestens eine Gürtelbreite von 2 und den mindestens einstufigen GS-Algorithmus. Für kubische B-Splines ist für Gürtelbreite 2 der einstufige GS-Algorithmus notwendig, für breitere Gürtel ist GS_k mit $k \geq 1$ erlaubt.

5.4.2 Bemerkungen zur Implementierung

Schalenberechnungen

Sowohl die Bestimmung der Abstände von aktiven zu den inaktiven Teilchen für die Entscheidung, welche Teilchenparameter zu berechnen sind, als auch die Gürtelberechnungen und die Durchführung des GS-Algorithmus zur Markierung der zu verfeinernden Teilchen sind im Prinzip Schalenberechnungen. Das entspricht algorithmisch einer Breitensuche, die effizient mit einer *Queue* implementiert werden kann, vgl. [Sed91].

Initialisierung: Bestimme die unzulässigen Teilchen, setze die anderen, die zu Stufe 0 gehören auf aktiv, den Rest auf inaktiv.

Berechne die Parameter für die aktiven Teilchen.

Randmarkierung: Markiere die Teilchen aller Stufen, deren Träger einen Schnitt mit dem Außengebiet haben, zur Verfeinerung.

Berechnungsdurchlauf (Top-Down) über alle Stufen $j = 0, \dots, J$:

- (a) Wähle auf der aktuellen Stufe zusätzlich alle die Teilchen zur Verfeinerung aus, die zu den Zellen gehören, die durch das Verfeinerungskriterium ausgewählt werden.
- (b) Erweitere die bisher markierten Bereiche um entsprechende Gürtel.
- (c) Homogenisiere die nun markierten Bereiche mit dem GS-Algorithmus
- (d) Aktiviere die zulässigen Teilchen des feineren Gitters, die bei der Verfeinerung gebraucht werden.
- (e) Berechne für die aktiven Feingitter-Teilchen die Abstände zu inaktiven Feingitter-Teilchen. Über einen Mindestabstand wird festgelegt, welche Feingitter-Teilchen berechnete Werte erhalten (\bullet); der Rest erhält übertragene Werte (\circ).
- (f) Deaktiviere die zur Verfeinerung markierten Grobgitter-Teilchen und übertrage deren Koeffizienten anteilsweise auf die entsprechenden \circ -Feingitter-Teilchen.
- (g) Berechne die Koeffizienten der \bullet -Feingitter-Teilchen und korrigiere sie, falls notwendig, um die Anteile noch vorhandener Teilchen höherer Stufen.

Postprocessing: Entferne alle Teilchen mit zu geringer lokaler Masendichte.

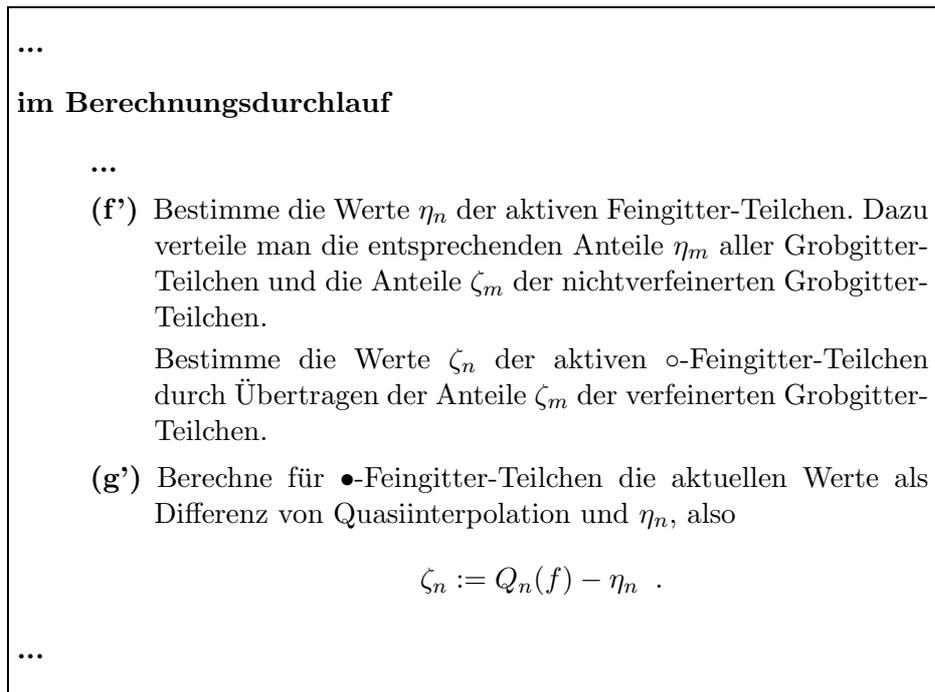
Schema 5.2: Algorithmus für die adaptive Dichtebestimmung

Flags

Zur konkreten Umsetzung ist es beispielsweise sinnvoll, die Teilchen durch einen Wert D_R zu den drei Klassen zuzuordnen: unzulässig mit $D_R = -1$; inaktiv mit $D_R = 0$; aktiv mit $D_R > 0$, wobei der letzte Wert mit dem tatsächlichen Abstand zu den inaktiven Teilchen besetzt werden kann und für die Schalenberechnung eine wichtige Hilfsgröße ist. Er ist vor allem für die Entscheidung, welche Werte bei der Verfeinerung übernommen und welche berechnet werden sollen, von Bedeutung.

Berechnung der Teilchenparameter

Wenn nicht aufgrund der Gürtelbreite ausgeschlossen werden kann, daß Grobgitteranteile als Korrektur für berechnete Teilchenparameter berücksichtigt werden müssen, ist es sinnvoll, die Vorfahren-Werte über die Stufen durchzureichen. Dazu werden neben den aktuellen Teilchenwerten ζ_n auch die Kummulationen der Anteile von Teilchen darüberliegender Stufen gespeichert; wir benutzen die Bezeichnung η_n . Die Konkretisierung unseres Vorgehens ist in Schema 5.3 angegeben.



Schema 5.3: Konkretisierung der Koeffizientenbestimmung für Dichten

Bereichsrandverfeinerung

Anstatt der theoretisch betrachteten Verfeinerung aller Teilchen, deren Träger einen Schnitt mit dem Außengebiet hat, gehen wir für die Umsetzung zurück auf einen Streifen um den Rand. Die anderen unzulässigen Teilchen brauchen im Prinzip nicht berücksichtigt werden. Eine Implementierung der Randbedingung ist schon dadurch gegeben, daß alle die Zellen zur Verfeinerung markiert werden, die Randbereiche, also sowohl Punkte im als auch außerhalb des Gebietes, enthalten. Dabei rechnen wir auch die Punkte auf den jeweiligen Zellenrändern zu den Zellen. Dann führen die obigen Charakterisierungen derjenigen Teilchen, die berechnete Parameter erhalten, zum gewünschten Ergebnis, denn inaktive Teilchen liegen nur im Gebietsinneren.

5.4.3 Approximation von Massen- und Entropiedichte

Es ist für das angegebene Verfahren kein Problem, zwei skalare Größen gleichzeitig zu approximieren. Die einzig notwendige Änderung im angegebenen Algorithmus ist das Verfeinerungskriterium, das nun aus einer ODER-Bedingung besteht.

Wenden wir uns den Eigenheiten der Felder zu. Auf die Positivität der Masendichte sind wir oben bereits eingegangen. Für die Entropiedichte stellt sich dieses Problem nicht, aber eine andere Überlegung ist für uns interessant. Wir können nämlich als Verfeinerungskriterium auch eine abgeleitete Größe verwenden, wenn es ausgeschlossen ist, daß beim Übergang zu feineren Gittern ohne Änderung der Werte eine Verfeinerung anders beurteilt wird. Insbesondere eignet sich die Maximumnorm des Druckes, da eigentlich der Druck das Verhalten des Fluids bestimmt.

Normalerweise sind flache Teilchen, die große Offsetanteile haben, kritische Kandidaten für eine Approximation, denn so können sehr kleine Dichtewerte auf nicht unbedeutende Entropiedichten treffen und zu sehr hohen spezifischen Entropien führen. Hier sind solche Probleme mit extrem großen spezifischen Entropien von Teilchen an Stufenübergängen nicht zu befürchten. An Gitterübergängen, an denen solche flachen Teilchen üblich sind, werden nämlich die Werte nicht berechnet, sondern übertragen.

5.5 Hinzunahme der Geschwindigkeitsapproximation

Rekapitulieren wir Abschnitt 3.6, so stellen wir fest, daß unser Konzept der Geschwindigkeitsapproximation schon das Vorhandensein mehrerer Hierarchiestufen zuläßt. Die lokalen Approximationen benötigen keine Uniformität der Teilchen und auch die globale Abschätzung schließt nichtuniforme Situationen mit ein. Also kümmern wir uns um eine sinnvolle Integration in das obige Schema. Wie schon bei der Dichteapproximation sind wir auch hier an einem Schema interessiert, dessen Ergebnis lokal entweder eine bestimmte Toleranz einhält oder die Auflösung der feinsten Stufe liefert.

5.5.1 Verfeinerungskriterium

Die Beurteilung der Genauigkeit erfolgt auch hier in der Maximumnorm, um beim Übergang zu den Teilchen des feineren Gitters bereits eingehaltene Schranken der Grobgittersituation nicht zu verlieren. Allerdings wird diese Norm nur auf den Punkten berechnet, die zum Rechengebiet gehören. Da aber Teilchen, die das Außengebiet schneiden, generell verfeinert werden, ist das Verfeinerungskriterium der Geschwindigkeit an diesen Stellen nicht von Bedeutung.

Eine Möglichkeit besteht darin, auf jeder Zelle des potentiellen Verfeinerungsbereiches zu prüfen, ob dort die globale Geschwindigkeit ausreichend genau ist.

Falls dieses Kriterium verletzt ist, müßten geeignete Teilchen, beispielsweise alle überdeckenden oder die direkt angrenzenden, verfeinert werden. Abgesehen von algorithmischen Schwierigkeiten, die damit zusammenhängen, daß die globale Geschwindigkeit auch von den lokalen Massenanteilen abhängt, hat dieser Zugang eher die Charakteristika der globalen Approximation, von der wir uns in Kapitel 3 distanziert haben. Deshalb bevorzugen wir einen anderen Ansatz. Wenn für jedes Teilchen die lokale Approximation eine bestimmte Güte aufweist, dann gibt es auch Abschätzungen für die Gesamtgeschwindigkeit, die sich ja als Konvexkombination ergibt. Damit ist folgendes Kriterium naheliegend.

Das lokale Verfeinerungskriterium für die Geschwindigkeit: Ist für ein Teilchen einer gegebenen Stufe die lokale Geschwindigkeitsapproximation nicht ausreichend genau, so verfeinere dieses.

Allerdings werden die Fehler bei diesem Ansatz zumeist überschätzt, denn außer an den Teilchenrändern sind die Beiträge allermeist wesentlich geringer als der für die Abschätzung verwendete Wert 1.

5.5.2 Werteberechnung

Für uniforme Gitter ist das Vorgehen bereits in Abschnitt 3.6 beschrieben. Um nun die Geschwindigkeitsberechnung in das vorhandene Schema zu integrieren, müssen wir in erster Linie klären, wie wir die Übergangsbedingungen zwischen den verschiedenen verfeinerten Bereichen garantieren wollen.

Eine erste Überlegung bildet das Vorgehen der Dichte nach und berechnet auf einem entsprechenden Randstreifen keine Werte, sondern überträgt sie von herausgenommenen Teilchen, wobei globale Felder nicht verändert werden. Ein sinnvoller Übertrag funktioniert dadurch, daß zunächst jedes entsprechende Grobgitter-Teilchen verlustfrei in kleine Teilchen zerlegt wird. Dort sind sowohl Masse als auch Geschwindigkeit gegeben. Nun werden aufeinanderliegende Feingitter-Teilchen zusammengefaßt, wobei sich, wie immer, die Masse durch Superposition und die Geschwindigkeit durch Konvexkombination ergibt. Dadurch wird insbesondere die neue Geschwindigkeit das Kriterium erfüllen, wenn die beitragenden Grobgitter-Teilchen im Toleranzbereich waren. Also ist zu garantieren, daß nie Teilchen, die aufgrund des Geschwindigkeitskriteriums verfeinert wurden, Beiträge liefern dürfen. Diese Forderung läßt sich im obigen Verfahren verwirklichen. Bei quadratischen B-Splines kann man einfach das Kriterium für die Geschwindigkeitsverfeinerung mit den anderen Kriterien gemeinsam anwenden und genau an den eingetragenen Stellen die Werte berechnen, anstatt sie zu übertragen. Das funktioniert hier, da nur diese Stellen Söhne von Teilchen, die aufgrund von Fehlerkriterien markiert wurden, sind. Für kubische B-Splines ist dieses Vorgehen leicht zu modifizieren. Zu den zur Werteberechnung markierten Teilchen muß für Geschwindigkeitsberechnungen eine weitere Schale hinzugenommen werden. Das ändert aber am restlichen Algorithmus deswegen nichts, weil die Geschwindigkeitskriterien rein lokal sind und deshalb

maximal diese hinzugenommene Schale betreffen, die innerhalb der möglichen Änderungsbereiche für die Dichtegrößen liegt. Abbildung 5.8 verdeutlicht diese Situation. Das Dichteapproximationsverfahren müßte um die Schritte in Sche-

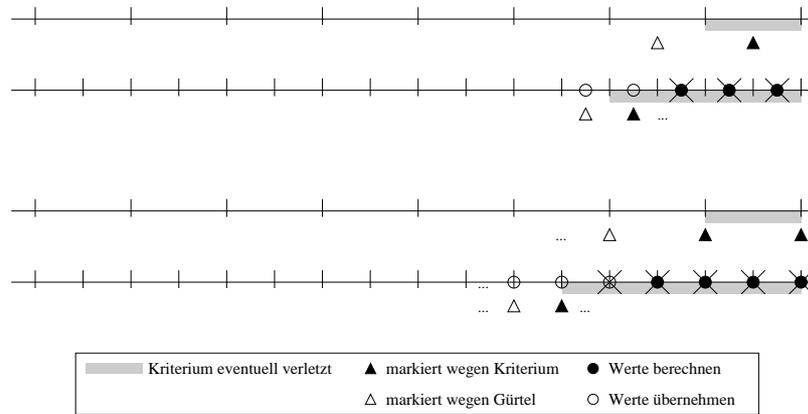


Abbildung 5.8: Übergangsbedingung bei der Übertragung von Geschwindigkeitswerten für quadratische und kubische B-Splines. Die mit \times markierten Teilchen erhalten berechnete Geschwindigkeitswerte, nur sie sind durch die lokalen Geschwindigkeitskriterien wieder zur weiteren Verfeinerung markierbar und liegen in dem Bereich, der auch aufgrund der Dichtekriterien markiert werden könnte.

ma 5.4 erweitert werden.

im Berechnungsdurchlauf

- zu (a) Wähle zusätzlich alle die Teilchen aus, die in der Maximum-Norm eine zu schlechte Geschwindigkeitsapproximation besitzen.
- zu (f) Übertrage für alle Feingitter-Teilchen, die keine \times -Markierung tragen, die Geschwindigkeitswerte von den herausgenommenen Grobgitter-Teilchen.
- zu (g) Berechne für alle Feingitter-Teilchen mit einer \times -Markierung die aktuellen Geschwindigkeitswerte als Least-Squares-Approximation.

Schema 5.4: Erweiterung des Schemas um die Geschwindigkeitsbestimmung durch teilweise Übertragung, mit Fehlerkontrolle.

Dennoch ist dieser Ansatz nicht ganz kritiklos zu betrachten. Die Übertragung von Grobgittergeschwindigkeiten auf Feingitter-Teilchen ist wieder ein Vorgehen, das in erster Linie globale Approximationen garantiert. Wir könnten statt der Übertragung auch für jedes erzeugte Feingitter-Teilchen die lokale Geschwindigkeit berechnen. Heuristisch ergibt dieses Vorgehen sicherlich auch in den Übergangsbereichen gute Werte, denn wenn bereits Approximationen

mit geringen Auflösungen zufriedenstellend waren, so sind höhere Auflösungen nicht unbefriedigend. Obwohl diese Argumentation sich weitestgehend mit praktischen Erfahrungen deckt, sind dennoch Situationen denkbar, in denen bei einer Verfeinerung solcher Gürtelbereiche die Fehler wieder über gewisse Schranken wachsen und dort eine weitere Verfeinerung nach sich ziehen würden. Eine künstliche Einschränkung der Gültigkeitsbereiche des Geschwindigkeitskriteriums ist eine algorithmische Lösung, garantiert aber keine Fehlerschranken mehr. In diesem Fall müßte das Dichteapproximationsverfahren um das Vorgehen in Schema 5.5 erweitert werden.

im Berechnungsdurchlauf

- zu (a)** Wähle zusätzlich alle die Teilchen aus, die in der Maximum-Norm eine zu schlechte Geschwindigkeitsapproximation besitzen, wenn sie genügend Abstand zu inaktiven Teilchen dieser Stufe besitzen.
- zu (g)** Berechne für alle aktiven Feingitter-Teilchen die Geschwindigkeitswerte als Least-Squares-Approximation.

Schema 5.5: *Erweiterung des Schemas um die Geschwindigkeitsbestimmung mit Berechnung aller Werte, aber ohne Fehlerkontrolle.*

Wenn wir bereits a priori, also vor der Durchführung des Algorithmus, alle notwendigen Informationen besitzen, um lokale Geschwindigkeiten zu berechnen, können wir dieses Problem bewältigen. Dies ist der Fall, wenn nur bekannte Informationen wie beispielsweise die Gestalt der Formfunktion oder alte Dichtewerte, nicht aber aktuelle Masseanteile oder ähnliches, benötigt werden. Dann ist es nämlich möglich, in der Gitterhierarchie von unten her alle die Teilchen zu markieren, bei denen die obige Heuristik versagt. Das sind die Stellen, die eventuell auf einer groben Stufe als befriedigend betrachtet werden, die aber Nachfahren haben, deren Geschwindigkeitsapproximation als ungenügend gilt. Da sie nun zur Verfeinerung eingetragen werden, kann es nicht vorkommen, daß solche Stellen in Gürteln liegen und für die angesprochenen Probleme sorgen. Das Verfahren müßte nach der Randmarkierung um den Block, der in Schema 5.6 angegeben ist, erweitert werden.

Der höhere Aufwand, der dadurch entsteht, daß mindestens die Geschwindigkeitsapproximationen der zweitfeinsten Stufe zu berechnen sind, ist im Vergleich zur Strömungsrechnung mit der Methode der Finiten Massen kaum nennenswert.

5.5.3 Bemerkungen zu den Konvergenzresultaten in Abschnitt 3.6

Auch für die Geschwindigkeit können wir lediglich erwarten, daß wir eine Approximationsgüte erreichen, die von der Schranke, die die Verfeinerung steuert,

...

Randmarkierung ...

Geschwindigkeitsmarkierung (Bottom Up):
 Durchlaufe die Stufen $j = [J - 1], \dots, 0$ und betrachte jedes Teilchen:

- (a) Verfeinerungskriterium: Wenn das Teilchen noch nicht zur Verfeinerung markiert ist, dann berechne die lokale Geschwindigkeitsapproximation und speichere diesen Wert. Wenn diese lokale Geschwindigkeit nicht ausreichend genau ist, so markiere es zur Verfeinerung.
- (b) Wenn das Teilchen zur Verfeinerung markiert ist, so markiere das nächste darüberliegende Grobgitter-Teilchen. Gibt es mehrere mit dieser minimalen Entfernung, so markiere sie alle.

...

Schema 5.6: *Erweiterung des Schemas um die Geschwindigkeitsbestimmung mit Berechnung aller Werte und mit Fehlerkontrolle.*

und der Güte einer uniformen Situation auf dem feinsten Gitter abhängt.

Wenn das Verfeinerungskriterium der Geschwindigkeit keine weitere Verfeinerung nahelegt, so erfüllt die aktuelle Approximation — die für diese Aussage nicht notwendigerweise aus einer Least-Squares-Berechnung zu stammen braucht — die Voraussetzungen von Lemma 3.10 mit der vorgegebenen Schranke. Die verwendeten Feingitter-Teilchen liefern eine Teilmenge der Beiträge, die bei einer uniform feinen Situation entstehen würden, denn sie werden auf die selbe Art berechnet. Sie sind damit sicher nicht schlechter als deren Maximum. Auch ein nachträgliches Entfernen einiger Teilchen hat keinen nachteiligen Einfluß auf die bisherigen Argumente.

5.6 Beispielrechnung: Stoßrohr

Nun wollen wir anhand der Beispiele aus dem vorigen Kapitel darstellen, daß durch diese Adaptivität keine Verluste bei der Approximation der globalen Felder entstehen. Wir benutzen dieselben Ansatzfunktionen und dieselben Parameter wie in Abschnitt 4.7, haben aber über dem dortigen uniformen Gitter zwei Vergrößerungsstufen zur Verfügung. In den Abbildungen 5.9 und 5.10 sind die kontinuierlichen Größen Massendichte, Druck und Geschwindigkeit zum Endzeitpunkt angegeben, die analytischen Lösungen zum Vergleich gepunktet daruntergelegt. Um die Adaptivität zu verdeutlichen, dient die Abbildung 5.11, in der eine typische Verteilung von Teilchen nach einem Restart angegeben ist.

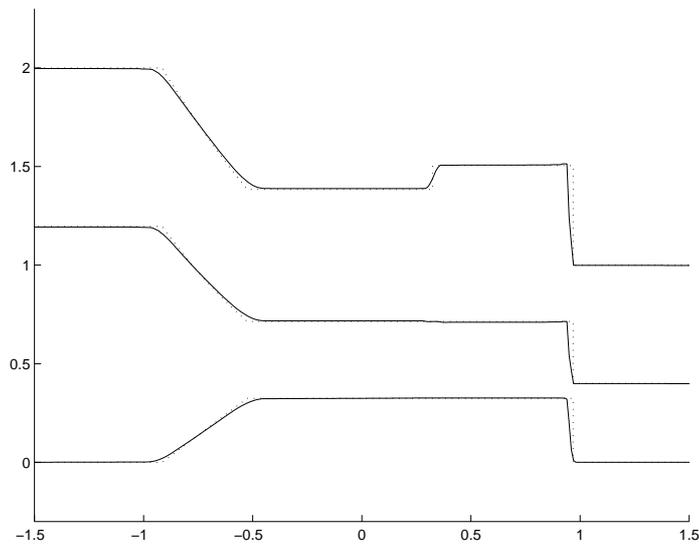


Abbildung 5.9: Globale Größen einer Rechnung zu Stoßrohr A mit 10 Restarts auf einem dreistufigen Gitter.

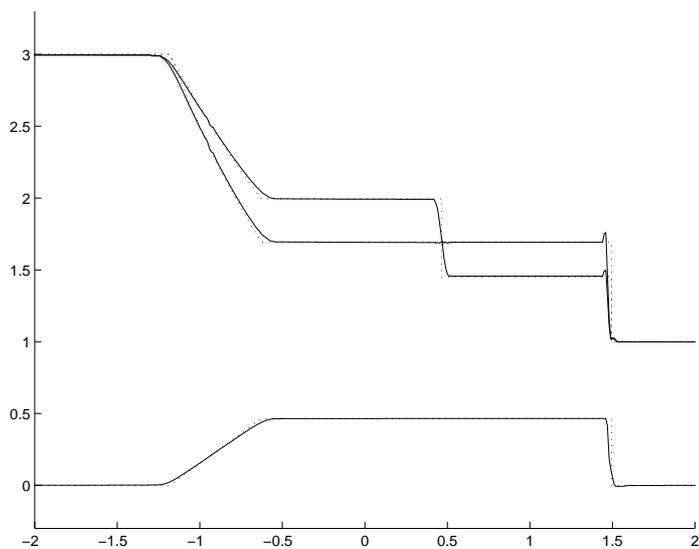


Abbildung 5.10: Globale Größen einer Rechnung zu Stoßrohr B mit 10 Restarts auf einem dreistufigen Gitter.

Einerseits die Positionen der aktiven Teilchen der drei Stufen durch Kreise markiert, andererseits geben die Punkte die entsprechenden Approximationswerte an, so daß ein Eindruck der Stufenübergänge für Dichtewerte gegeben ist.

In Abbildung 5.12 sind Dichtedifferenzen der Restart-Rechnung zum uniform feinen Gitter und der mit adaptiv vergrößertem Gitter dargestellt. Es gibt nur marginale Unterschiede, so daß hier die adaptiven Gitter keine Nachteile im Ergebnis liefern, obwohl deutlich weniger Teilchen benötigt werden. Oft sind

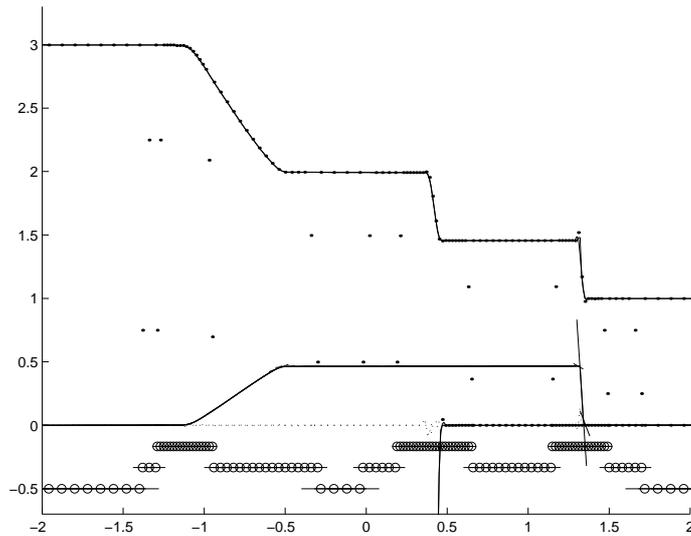


Abbildung 5.11: Positionen und Werte der aktiven Teilchen bei Rechnung zu Stoßrohr B mit 10 Restarts auf dreistufigem Gittern zu Beginn des letzten Zeitintervalls der Rechnung.

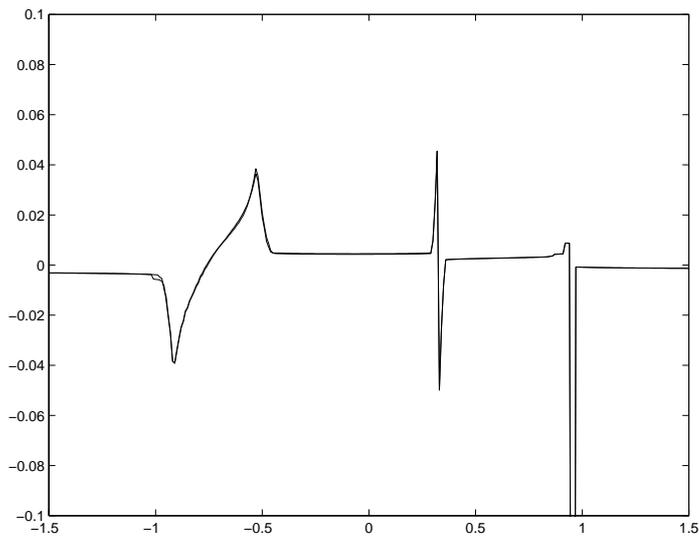


Abbildung 5.12: Übereinandergelegte Dichtedifferenzen der uniform feinen Rechnung und der adaptiven Rechnung mit zusätzlich zwei größeren Gittern zur Zeit 1.

mit adaptiven Verfahren kompliziertere Datenstrukturen und damit Effizienz- einbußen bei der Programmausführung verbunden. Im vorliegenden Fall trifft dieses Argument nicht zu, denn der Restart ist quasi ein Preprocessing-Schritt, der in den Algorithmus der Methode der Finiten Massen nicht eingreift. Im Vergleich mit der Strömungssimulation ist der zusätzliche Aufwand für den adaptiven Programmteil des Restarts sehr billig und fällt damit nicht ins Gewicht.

5.7 Ein verwandtes Schema von Preußer und Rumpf

In der Arbeit [PR99] von Preußer und Rumpf wird in den Abschnitten 1 bis 4 ein Verfahren vorgestellt, das für Hutfunktionen, also lineare B-Splines, zumindest für Dichteapproximationen etliche der Überlegungen der Kapitel 4 und 5 dieser Arbeit kombiniert und gemeinsam löst. Sie soll deshalb hier überblickartig beschrieben und mit unserer Situation in Zusammenhang gebracht werden.

Der zentrale Gedanke besteht darin, für skalare Felder über zwei- und dreidimensionalen Gebieten eine hierarchische Darstellung zu gewinnen, die mit einer Regularisierung der Daten einhergeht. Konkret kommen die Beispiele aus der Bilddatenverarbeitung, und es geht darum, wichtige Daten wie Kanten scharf zu erhalten und andere Details, wie Rauschen, zu entfernen, während eine Datenreduktion vorgenommen wird. Die Autoren verwenden eine nichtlineare Diffusionsgleichung und lösen sie mit einem Finite-Element-Ansatz mit stückweise bi- oder trilinearen Ansatzfunktionen. Dabei ist in geeigneten Zeitabständen eine Vergrößerung der Darstellung möglich. Da Kanten ihre Position nicht ändern und die Funktion in der Zeitentwicklung glatter wird, ist es bei der Lösung der betrachteten Gleichungen nicht notwendig, grobe Bereiche wieder zu verfeinern.

Eine wesentliche Idee im betrachteten Artikel ist die, daß sich die adaptiven Ansatzfunktionen aus gewissen Kriterien in der Durchquerungsstrategie der Baumstruktur der Gitterhierarchie ergeben und alle wesentlichen Operatoren, wie beispielsweise Matrix-Vektor-Produkte, prozedural auf der hierarchischen Datenstruktur der Knotenwerte umgesetzt werden. So ist es nicht notwendig, die Steifigkeitsmatrizen explizit vorzuhalten und mit ihnen zu operieren, vgl. auch [DLY89] und [Lei95].

5.7.1 Die verwendeten Gleichungen

Die Autoren benutzen zur Regularisierung die Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} v - \operatorname{div}(\kappa(|\nabla v_\epsilon|) \nabla v) = f(v) \quad \text{in } \mathbb{R}^+ \times \Omega, \quad (5.7)$$

$$v(0, \cdot) = v_0 \quad \text{auf } \Omega, \quad (5.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial \nu} v = 0 \quad \text{auf } \mathbb{R}^+ \times \partial\Omega. \quad (5.9)$$

Dabei ist v_ϵ eine Glättung von v mit Hilfe eines Glättungskerns und $\kappa : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ eine nichtnegative monoton fallende Funktion, die für große Argumente gegen 0 geht. Ein Beispiel ist $\kappa(x) := (1 + x^2)^{-1}$. Für fortschreitende Zeit ist hier eine zunehmende Regularisierung von v_0 gegeben. Es besteht ein enger Zusammenhang zu den in Kapitel 4 zur Regularisierung verwendeten Ansätzen. Mit Unterabschnitt 4.3.4 erhält man für die TV_β -Tychonoff-Regularisierung die Gateaux-Ableitung

$$F'(v, w) = \int 2[v - z]w + \alpha \frac{\nabla v \nabla w}{\sqrt{|\nabla v|^2 + \beta^2}} \, dx$$

und damit, wenn partiell integriert werden kann und die resultierende Funktion in L_2 liegt, als Gradienten die Funktion

$$g(v) = 2[v - z] - \alpha \operatorname{div} \frac{\nabla v}{\sqrt{|\nabla v|^2 + \beta^2}} .$$

Die Zeitentwicklung

$$\frac{\partial}{\partial t} v = -g(v)$$

ist ein Abstiegsverfahren und führt auf das gesuchte Minimum. Diese Gleichung entspricht genau (5.7) mit den dort angegebenen Spezialisierungen, wenn statt v_ϵ die nichtregularisierte Größe v verwendet, statt dem angegebenen κ die skalierte Funktion $\kappa(x) = \alpha[\beta^2 + x^2]^{-1/2}$ benutzt und als rechte Seite $2[z - v]$ gewählt wird. Auch Rand- und Anfangsbedingungen können passend gewählt werden.

5.7.2 Der Lösungsansatz

In der zitierten Arbeit wird ein bi- bzw. trilinearer konformer Finite-Element-Ansatz auf einem nichtuniformen Tensorproduktgitter vorgeschlagen und die gewöhnlichen Differentialgleichungen werden mit einem halbimpliziten Euler-Schema zweiter Ordnung gelöst. Zur Lösung der linearen Gleichungen wird das Verfahren der Konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung benutzt, wobei als Vorkonditionierer das Schema von Bramble, Pasciak und Xu verwendet wird. Dieses kann direkt auf der verwendeten Datenstruktur, die aus einer Gitterhierarchie besteht, aufsetzen. Insbesondere muß es bei diesem Ansatz möglich sein, die Wirkung der Massematrix und der Steifigkeitsmatrix auf einen Vektor, der die Koeffizienten der Finite-Element-Basisfunktionen beinhaltet, zu bestimmen. Das ist im vorliegenden Fall möglich, ohne diese Matrizen selbst aufbauen zu müssen. Dazu werden Prozeduren zur Verfügung gestellt, die den Durchlauf durch den maximalen Baum jeweils an geeigneten früheren Stellen abbrechen und dabei entsprechende Operationen auf den Vektorkomponenten, die in den entsprechenden Knoten liegen, durchführen.

5.7.3 Adaptive Gitter mit Fehlerindikatoren

Auch hier haben wir es mit einem adaptiven Schema zu tun, das im vorstehenden Kontext als Vergrößerungsschema zu sehen ist. Es existiert eine Hierarchie von uniformen Tensorprodukt-Gittern, wobei jeweils das nächstfeinere durch Unterteilung all seiner Zellen in solche der halben Kantenlänge hervorgeht. Auf dem feinsten Gitter sind Ausgangsdaten gegeben. Je nach Raumdimension sind bi- oder trilineare Finite-Element-Ansatzfunktionen auf jedem Gitter gegeben.

Adaptive Gitter sind solche, in denen die rekursive Unterteilung von Zellen lokal auf unterschiedlichen Gitterstufen angehalten wird. Alle in einem adaptiven

Gitter vorhandenen Knoten werden eingeteilt in reguläre und hängende Knoten. Reguläre Knoten sind für alle angrenzenden Zellen Eckpunkte, während ein hängender Knoten in der Mitte einer Seite oder Kante mindestens einer angrenzenden Zelle liegt. Der zu einem adaptiven Gitter zugehörige Funktionenraum besteht nun aus den linearen B-Splines der regelmäßigen Gitter, die zu den regulären Knoten gehören. Die zugehörige Stufe ist durch das Minimum der Stufen der direkt angrenzenden Zellen gegeben. Wenn Werte an hängenden Knoten interessieren, ergeben sie sich aufgrund der Linearität der Ansatzfunktionen durch entsprechende Mittelwerte der Ecken der Seite oder der Kante derjenigen Zelle, die für die Einordnung als hängender Knoten verantwortlich war.

Die Unterteilung jeder Zelle wird über Fehlerindikatoren gesteuert. Dazu werden punktweise Gradienten der Funktion v mit einer Schranke verglichen, auf Zellen akkumuliert und über eine Sättigungsbedingung wird Information von den feinen auf die gröberen Zellen übertragen, um keine Details zu übersehen.

5.7.4 Bemerkungen zur Übertragbarkeit auf die Restart-Berechnung

Eine Anwendung dieses Ansatzes auf die Restart-Rechnung stößt allerdings auf mehrere Schwierigkeiten. Zunächst besteht ein Repräsentationsproblem. Anders als im Fall stückweise multilinearer Ansatzfunktionen ist für Tensorprodukte von quadratischen und kubischen B-Splines die Zuordnung von Feingitterwerten zu den Ansatzfunktionskoeffizienten nicht kanonisch. Bei Verwendung der Mittelpunkte zur Repräsentation der Koeffizienten sind für quadratische B-Splines versetzte Gitter notwendig, um mehrstufige Teilchenpositionen zu erfassen, vgl. Abbildung 5.1. Bei kubischen B-Splines können die Mittelpunkte notwendiger Ansatzfunktionen verschiedener Stufen direkt übereinanderliegen, wie in Abbildung 5.2 deutlich wird. Auch ist es schwierig, hier eine Anfangsapproximation zur Verfügung zu stellen, da die Koeffizienten jeder Ansatzfunktion auch die Werte in den benachbarten Mittelpunkten beeinflussen.

Die Tatsache, daß für die Teilchen nicht nur eine skalare Funktion zu approximieren ist, bereitet keine prinzipiellen Probleme, aber wenn solche Funktionen nur auf einem Teilgebiet definiert sind, passen sie nicht direkt in das betrachtete Schema.

Das Hauptproblem besteht aber wohl darin, daß das Vergrößerungskriterium nicht übertragbar ist. Bei linearen B-Splines wird durch eine Darstellung mit hierarchischen Basen klar, daß Vergrößerungen durch rein lokale Kriterien entscheidbar sind. Für quadratische und kubische B-Splines ist ein solches Kriterium nicht möglich, Auswirkungen von Vergrößerungen bleiben nicht lokal.

Anhang A

Bezeichnungen

In diesem Anhang werden die wichtigsten Bezeichnungen überblickartig zusammengefaßt. Sie sind überall dort gültig, wo sie nicht lokal undefiniert sind. Symbole, die lediglich in einzelnen Abschnitten Verwendung finden und dort definiert sind, werden hier zumeist nicht aufgeführt.

A.1 Generelle Schreibweisen

Um die Darstellungen an vielen Stellen klarer zu machen, werden insbesondere Bezugs- und Argumentklammern konsequent durch verschiedene Bezeichnungen unterschieden. Klammern haben in dieser Arbeit die folgenden Bedeutungen:

[]	Bezugsklammern
()	Argumentklammern
{ }	Mengenklammern

Die Klammern [] werden zusätzlich für Intervalle benutzt, während () auch bei der Bezeichnung von Vektoren und Matrizen Verwendung finden. Vektoren werden mit kleinen fettgesetzten Buchstaben, Matrizen mit großen fettgesetzten Buchstaben abgekürzt. Dabei sind die Abkürzungen \mathbf{i} und \mathbf{k} für Tupel ganzzahliger Werte vorbehalten.

Der Betrag $|\cdot|$ wird auch zur Bezeichnung der 2-Norm für Vektoren und der Frobeniusnorm für Matrizen benutzt. Die zugehörigen Produkte sind das Vektorprodukt, das mit „ \times “ symbolisiert wird, und das Kronecker-Matrix-Produkt, für das wir die Bezeichnung „ \otimes “ verwenden.

Ortsableitungen werden oftmals durch ∇ abgekürzt, während die Zeitableitung einer Funktion f gelegentlich mit f' oder \dot{f} bezeichnet wird. Aber auch die Gateaux-Ableitung eines Funktionals F wird mit F' bezeichnet, erhält aber dann als zusätzliches Argument die Richtung der Ableitung.

A.2 Allgemeine Symbole

χ_A	Charakteristische Funktion einer Teilmenge A
d	Raumdimension

A.3 Referenzsituation der Teilchen

ψ	normierte Formfunktion
B_s	eindimensionaler Referenz-B-Spline der Ordnung s
J	Trägheit der Verformung der Referenzformfunktion
$\mathbf{a}_\nu, \alpha_\nu$	Stützstellen und Gewichte der Quadraturformel des Referenz-Teilchens

A.4 Größen der Teilchen

n	Teilchennummer
m_n	Teilchenmasse
S_n	spezifische Entropie eines Teilchens
\mathbf{q}_n	Teilchenschwerpunkt
\mathbf{H}_n	Formmatrix eines Teilchens
ψ_n	transformierte Formfunktion
χ_n	Funktion des Massenanteils
θ_n	Teilchentemperatur
E_n	Bewegungsenergie eines Teilchens
\mathbf{F}_n	Positionskraft
\mathbf{M}_n	Größenänderungskraft
δQ_n	Wärmezuwachs
Ω_n	Teilchenträger

A.5 Globale Größen

Ω	Träger aller Teilchen, masseerfülltes Gebiet
λ	diskretes Maß für die Methode der Finiten Massen

A.5.1 Felder

ρ	Massendichte
\mathbf{v}	Geschwindigkeit
\mathbf{j}	Massenfluß
s	Entropiedichte
π	Druck
θ	Temperatur
ε	innere Energiedichte
$\tilde{\varepsilon}$	spezifische innere Energie
U	Potential der externen Kraft
\mathbf{D}	Symmetrischer Anteil des Geschwindigkeitsgradienten
\mathbf{T}	Spannungstensor
\mathbf{k}	Wärmefluß
q	Fluktuationsenergiedichte

A.5.2 Energien

V	innere thermodynamische Energie als potentielle Energie
V^D	integralkretisierte innere Energie
E	gesamte kinetische Energie
\bar{E}	mittlere kinetische Energie
$\bar{\bar{E}}$	Fluktuationsenergie
\mathcal{E}	Gesamtenergie des Systems
\mathcal{E}^D	integralkretisierte Gesamtenergie
\mathcal{L}	Lagrange-Funktional

A.5.3 Koeffizienten

R	Reibungskoeffizient
η, ζ	Koeffizienten des viskosen Anteils des Spannungstensors für Newtonsche Fluide
κ	Koeffizient des Wärme flußes im Fourierschen Gesetz
γ	Adiabatexponent für ideales Gas

A.6 Symbole bei der Approximation globaler Felder mit Teilchen

\mathbf{M}	Interpolationsmatrix für quaderangeordnete Teilchen
$\check{\mathbf{M}}$	Interpolationsmatrix einer in einen Quader eingebetteten Situation
Q	Quasiinterpolationsabbildung
Q_n	Koeffizientenfunktional der Quasiinterpolation
$\mathbf{a}_r^n, \alpha_r^n$	Stützstellen und Koeffizienten eines QI-Koeffizientenfunctionals
μ	lokales Maß für skalares Feld
$\mathbf{x}_l, \bar{\mu}_l$	Stützstellen und Gewichte eines diskreten lokalen Maßes
$R^{(d)}$	Punktrestriktionsabbildung eines Funktionenraums auf die Stützstellen $(\mathbf{x}_l)_l$
Π	Raum der linearen Polynome
$\Pi^{(d)}$	$= R^{(d)}(\Pi)$
LS_μ	Least-Squares-Operator
$LS_\mu^{(d)}$	diskreter Least-Squares-Operator

A.7 Bezeichnungen bei der Regularisierung

F	zu minimierendes Zielfunktional der Regularisierung
F^D	diskretes Zielfunktional
J	Strafterm in F
ϕ	Funktion zur allgemeinen Definition von J
J_{TV}	Strafterm der Totalen Variation
J_β	Strafterm der regularisierten Totalen Variation
J_β^D	diskretisierte regularisierte Totale Variation als Strafterm
α	Gewichtungsfaktor des Straftermes
β	Regularisierungsparameter der regularisierten Totalen Variation
\mathcal{V}	Testfunktionenraum zur Definition von J_{TV} und J_β
v	mögliches Argument des Zielfunctionals F
u	Lösung der Regularisierungsaufgabe
$ \cdot _\beta$	Funktional, das einer Glättung der 2-Norm im \mathbb{R}^d entspricht
$\nabla_{\vec{i}}^D$	diskreter Gradient als Differenzenquotient an der Stelle \vec{i}
$\Omega_{\vec{i}}$	Zelle des Tensorproduktgitters

A.8 Symbole für die mehrstufige Approximation

N^+	Wachstumsoperator für Graphen
N^-	Schrumpfungoperator für Graphen
GS_n	Operator des n-stufigen Growing-and-Shrinking-Algorithmus
ζ_n, η_n	Teilchenkoeffizienten bei mehrstufiger Approximation eines skalaren Feldes

Literaturverzeichnis

- [AV94] Acar R., Vogel C.R.: *Analysis of bounded variation penalty methods for ill-posed problems*. Inverse Problems, Vol. 10, 1994, 1217-1229.
- [Bey00] Bey J.: *Simplicial grid refinement: on Freudenthal's algorithm and the optimal number of congruence classes*. Numer. Math. 85, 2000, 1-29.
- [Bla98] Blatter C.: *Wavelets — eine Einführung*. Vieweg, Braunschweig Wiesbaden, 1998.
- [Blu72] Blum E.K.: *Numerical analysis and computation theory and practice*. Addison-Wesley, Reading Massachusetts, 1972.
- [BS88] Bennet C., Sharpley R.: *Interpolation of Operators*. Pure and applied mathematics, Vol. 129, Academic Press, Inc., London, 1988.
- [CCZ95] Chan R.H., Chan T.F., Zhou H.M.: *Continuation method for Total Variation Denoising Problems*. in Advanced Signal Processing Algorithms, F.T. Luk ed., SPIE - the International Society for Optical Engrg. Proceedings 2563, SPIE, Washington DC, 1995, 314-325.
- [CGM96] Chan T.F., Golub G.H., Mulet P.: *A nonlinear primal-dual method for total variation-based image restoration*. in ICAOS'96, 12th Int'l Conf. on Analysis and Optimization of systems: Images, wavelets and PDE's, Paris, June 26-28, 1996, Hrsg. M.Berger, R. Deriche, I. Herlin, J.Jaffre, and J. Morel, Nr. 219 in Lecture Notes in Control and Information Science, 1996, 241-252.
- [CF48] Courant R., Friedrichs K.O.: *Supersonic flow and shock waves*. Interscience Publishers, New York, 1948.
- [CH68] Courant R., Hilbert D.: *Methoden der Mathematischen Physik I*. dritte Auflage, Springer, Berlin Heidelberg New York, 1968.
- [CM93] Chorin A.J., Marsden J.E.: *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer, Berlin Heidelberg New York, 1993.
- [CM96] Chan T.F., Mulet P.: *Iterative Methods for Total Variation Image Restoration*. Report CAM-96-38, University of California Los Angeles, 1996.

- [CM99] Chan T.F., Mulet P.: *On the convergence of the lagged diffusivity fixed point method in total variation image restoration*. Siam J. Numer. Anal. 36 (2), 1999, 354-367.
- [dBHR93] de Boor C., Höllig K., Riemenschneider S.: *Box splines*. Applied Mathematical Science 98, Springer, New York Heidelberg Berlin, 1993.
- [dBo73] de Boor C.: *The quasi-interpolant as a tool in elementary polynomial spline theory*. in Approximation Theory, Hrsg. G.G. Lorentz, C.K. Chui and L.L. Schumaker, Academic Press, Inc., New York San Fransisco London, 1973, 269-276.
- [dBo90] de Boor C.: *Splinefunktionen*. Lectures in Mathematics, ETH Zürich, Birkhäuser Verlag, Basel Boston Berlin, 1990.
- [DeV98] DeVore R.A.: *Nonlinear Approximation*. Acta Numerica, 1998, 51-150.
- [DeVL93] DeVore R.A., Lorentz G.G.: *Constructive Approximation*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1993.
- [DGM98] Dahmen W., Gottschlich-Müller B., Müller S.: *Multiresolution Schemes for Conservation Laws*. IGPM-Report 159, RWTH Aachen, 1998.
- [DLY89] Deuffhard P., Leinen P., Yserentant H.: *Concepts of an adaptive hierarchical finite element code*. IMPACT of Computing in Science and Engineering 1, 1989, 3-35.
- [DV97] Dobson C., Vogel C.R.: *Convergence of an iterative method for total variation denoising*. SIAM J. Numer. Anal. 34 (5), 1997, 1779-1791.
- [ES91] Evans L.C., Spruck J.: *Motion Of Level Sets By Mean Curvature I*. J. Diff. Geom. 33, 1991, 635-681.
- [Fle87] Fletcher R.: *Practical Methods of Optimization*. zweite Auflage, John Wiley & Sons, Chichester New York Brisbane Toronto Singapore, 1987.
- [Giu84] Giusti E.: *Minimal Surfaces and Functions of Bounded Variation*. Birkhäuser, Boston, 1984.
- [GLT81] Glowinski R., Lions J.L., Trémolières R.: *Numerical analysis of variational inequalities*. North Holland, Amsterdam New York Oxford, 1981.
- [GLY00] Gauger C., Leinen P., Yserentant H.: *The Finite Mass Method*. SIAM J. Numer. Anal. 37 (6), 2000, 1768-1799.
- [GDN99] Griebel M., Dornseifer T., Neunhoffer T.: *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Vieweg, Braunschweig Wiesbaden, 1995.

- [Hac91] Hackbusch W.: *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. Teubner Studienbücher Mathematik, Teubner, Stuttgart, 1991.
- [Har95] Harten A.: *Multiresolution Algorithms for the Numerical Solution of Hyperbolic Conservation Laws*. Comm. Pure Appl. Math. 48 (12), 1995, 1305-1342.
- [HI00] Huisken G., Ilmannen T.: *The Inverse Mean Curvature Flow and the Riemannian Penrose Inequality*. erscheint in J. Diff. Geom.
- [HL97] Hochbruck M., Lubich C.: *On Krylow Subspace Approximations to the Matrix Exponential Operator*. SIAM J. Numer. Anal. 34 (5), 1997, 1911-1925.
- [HL00] Hairer E., Lubich C.: *Asymptotic expansions and backward analysis for numerical integrators*. in Dynamics of Algorithms, Hrsg. R. de la Llave, L.R. Petzold, J. Lorenz, Springer IMA, Vol. 118, 2000, 91-106.
- [HNW91] Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G.: *Solving Ordinary Differential Equations I – Nonstiff Problems*. 2. Auflage, Springer, Berlin Heidelberg, 1991.
- [HSS00] Hietel D., Steiner K., Struckmeier J.: *A Finite-Volume Particle Method for Compressible Flows*. erscheint in Math. Models Methods Appl. Sci.
- [Hut95] Hutter K.: *Fluid- und Thermodynamik*. Springer, Berlin Heidelberg, 1995.
- [Kra98] Kraft R.: *Adaptive und linear unabhängige B-Splines und ihre Anwendungen*. Dissertation, Mathematische Fakultät, Universität Stuttgart, 1998.
- [Krö97] Kröner D.: *Numerical Schemes for Conservation Laws*. Wiley Teubner, Chichester New York Brisbane Toronto Singapore Stuttgart Leipzig, 1997.
- [Lei95] Leinen P.: *Data Structures and Concepts for Adaptive Finite Element Methods*. Computing 55, 1995, 325-354.
- [LeV92] LeVeque R.J.: *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser, Basel Boston Berlin, 1992.
- [LL91] Landau L.D., Lifschitz E.M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI: Hydrodynamik*. Akademie-Verlag, Berlin, 1991.
- [Mon92] Monaghan J.J.: *Smoothed Particle Hydrodynamics*. Ann. Rev. Astron. Astrophys. 30, 1992, 543-574.
- [MS98] Meister A., Sonar T.: *Finite-volume schemes for compressible fluid flow.*, Surv. Math. Ind. 8 (1), 1998, 1-36.

- [Ott95] Ott F.: *Smoothed Particle Hydrodynamics, Grundlagen und Test eines speziellen Ansatzes für viskose Wechselwirkungen*. Diplomarbeit, Institut für Astronomie und Astrophysik, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, 1995.
- [Par80] Parlet B.N.: *The Symmetric Eigenvalue Problem*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs New Jersey, 1980.
- [Pas98] Pasch E.: *Numerische Verfahren zur Berechnung von Krümmungsflüssen*. Dissertation, Mathematische Fakultät, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, 1998.
- [PM90] Perona P., Malik J.: *Scale space and edge detection using anisotropic diffusion*. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence 12 (7), 1990, 629-639.
- [PR99] Preußner T., Rumpf M.: *An Adaptive Finite Element Method for Large Scale Image Processing*. erscheint in Journal of Visual Comp. and Image Repres.
- [ROF92] Rudin L.I., Osher S., Fatemi E.: *Nonlinear total variation based noise removal algorithms*. Phys. D 60, 1992, 259-268.
- [RW96] Rjasanov S., Wagner W.: *A Stochastic Weighted Particle Method for the Boltzmann Equation*. J. Comp. Phys. 124, 1996, 243-253.
- [Sed91] Sedgewick R.: *Algorithmen*. Addison-Wesley, Bonn München Reading (Mass) u.a., 1991.
- [Smo83] Smoller J.: *Shock Waves and Reaction Diffusion Equations*. Springer, New York Heidelberg Berlin, 1983.
- [Spe98] Speith R.: *Untersuchung von Smoothed Particle Hydrodynamics anhand astrophysikalischer Beispiele*. Dissertation, Institut für Astronomie und Astrophysik, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, 1998.
- [VO95] Vogel C.R., Oman M.E.: *Fast total variation-based image reconstruction*. Proceedings of the 1995 ASME Design Engineering Conferences, Vol. 3, part C, 1009-1015.
- [VO96] Vogel C.R., Oman M.E.: *Iterative Methods for Total Variation Denoising*. SIAM J. Sci. Comput. 17 (1), 1996, 227-238.
- [Vog95] Vogel C.R.: *A multigrid method for total variation-based image denoising*. Computation and Control IV, Hrsg. K. Bowers, J. Lund, Progress in Systems and Control Theory, Vol. 20, Birkhäuser, 1995.
- [Vog97] Vogel C.R.: *Nonsmooth regularisation*. Inverse Problems in Geophysical Applications, Hrsg. H.W. Engl, A.K. Luis, W. Rundell, SIAM, 1997, 1-11.

- [Wei98] Weikert J.: *Anisotropic diffusion in image processing*. Teubner, Stuttgart, 1998.
- [Wer92a] Werner J.: *Numerische Mathematik 1*. Vieweg, Braunschweig Wiesbaden, 1992.
- [Wer92b] Werner J.: *Numerische Mathematik 2*. Vieweg, Braunschweig Wiesbaden, 1992.
- [Ys97] Yserentant H.: *A particle model of compressible fluids*. Numer. Math. 76, 1997, 111-142.
- [Ys99a] Yserentant H.: *Particles of variable size*. Numer. Math. 82, 1999, 143-159.
- [Ys99b] Yserentant H.: *Entropy generation and shock resolution in the particle model of compressible fluids*. Numer. Math. 82, 1999, 161-177.
- [Ys00a] Yserentant H.: *A convergence analysis for the finite mass method for flows in external force and velocity fields*. SFB-Report Nr. 136, SFB 382, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, 2000.
- [Ys00b] Yserentant H.: *The propagation of sound in particle models of compressible fluids*. erscheint in Numer. Math.

Lebenslauf

CHRISTOPH JOACHIM GAUGER

10.4.1970	geboren in Tübingen als Sohn von Hermann Gauger und Elisabeth Gauger, geborene Sohmer
1976 - 1980	Besuch der Grundschule Onstmettingen
1980 - 1986	Besuch des Progynasiums Tailfingen
1986 - 1989	Besuch des Gymnasiums Ebingen
April 1989	Abitur
1989 - 1990	Wehrdienst bei der Luftwaffe
1990 - 1996	Studium der Mathematik mit Nebenfach Informatik an der Eberhard-Karls-Universität Tübingen
Mai 1996	Diplom der Mathematik mit Nebenfach Informatik
seit Juni 1996	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Sonderforschungsbereich 382 „Numerische Verfahren und Algorithmen zur Simulation physikalischer Prozesse auf Höchstleistungsrechnern“ im Arbeitsbereich Numerik des Mathematischen Instituts der Universität Tübingen bei Prof. Dr. Harry Yserentant