

Deterministische parallele Verfahren zur numerischen Lösung der räumlich inhomogenen Boltzmann-Gleichung

Dissertation

zur Erlangung des Grades des Doktors der Naturwissenschaften
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultäten
der Universität des Saarlandes

von

Dipl.-Math. Markus Lambert

Arbeitsgruppe Prof. Dr. S. Rjasanow
Fachrichtung 6.1 Mathematik
Universität des Saarlandes

Saarbrücken 2004



Deutsche
Forschungsgemeinschaft

DFG

Tag des Kolloquiums: 01.07.2004

Dekan: Univ.-Prof. Dr. J. Eschmeier

Mitglieder des Prüfungsausschusses:

Vorsitzender des Prüfungsausschusses: Univ.-Prof. Dr. J. Weickert

1. Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. S. Rjasanow

2. Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. A. K. Louis

Wissenschaftlicher Assistent: Dr. T. Schuster

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität des Saarlandes in den Jahren 2001 bis 2004.

An dieser Stelle möchte ich mich vor allem bei Herrn Univ.-Prof. Dr. S. Rjasanow für die interessante Themenstellung und die Unterstützung durch zahlreiche Diskussionen bedanken.

Mein besonderer Dank gebührt meinem Kollegen und Freund Dipl.-Math. R. Kirsch für viele Diskussionen und Anregungen und nicht zuletzt für sein aufmerksames Korrekturlesen der Arbeit, aber auch für die Unterstützung und Motivation im wissenschaftlichen Kampf mit der Boltzmann-Gleichung, die sich oft als harter Gegner erwies.

Weiterer Dank gebührt der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die mich im Rahmen des Projektes „Effektive deterministische Numerik der Boltzmann-Gleichung“ unterstützte.

Abstract

This work was aimed at providing new deterministic numerical methods for the Boltzmann equation equipped with the following features: they should have a computational cost comparable with prevailing stochastic algorithms (Monte Carlo methods) while producing superior numerical results with respect to accuracy. A parallel scheme for the spatially non-homogeneous Boltzmann equation based on an operator splitting method is presented. The transport step is carried out using the well-known explicit and implicit upwind difference schemes and the Essentially Non-Oscillatory (ENO) or Weighted Essentially Non-Oscillatory schemes (WENO) in one or two space dimensions. The collision step is treated by efficient approximate computation of the collision integral on the uniform grid based on the representation of the collision integral developed in [32]. The spatial domain of simulation is bounded and deterministic numerical approximations of different types of boundary conditions, e.g. diffuse or specular reflection, are discussed. Furthermore, a new example for scattering kernels with adsorption time dependence is given. The operator splitting method allows an efficient parallelization and the numerical results obtained for the heat transfer problem between two parallel plates (in one and two space dimensions) in the case of Maxwell pseudo-molecules as well as for the simulation of shock profiles using the BGK collision model are presented.

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die Bereitstellung neuer numerischer Methoden für die Boltzmann-Gleichung, die die folgenden Merkmale besitzen: Sie sollten bezüglich der Rechenzeit in einem mit den zur Zeit dominierenden stochastischen Verfahren (Monte Carlo methods) vergleichbaren Rahmen liegen, aber eine wesentlich höhere Genauigkeit aufweisen. Ein paralleles Verfahren für die räumlich inhomogene Boltzmann-Gleichung, das auf einer Operator-Splitting-Technik basiert, wird vorgestellt. Die Transportphase wird durch die bekannten expliziten und impliziten Upwind-Differenzenverfahren und Essentially-Non-Oscillatory-(ENO)- bzw. Weighted-Essentially-Non-Oscillatory-(WENO)-Verfahren in ein und zwei Raumdimensionen modelliert. Der Kollisionsschritt wird mit einer effizienten numerischen Berechnung einer Approximation des Kollisionsintegrals auf einem gleichmäßigen Geschwindigkeitsgitter behandelt, welche auf einer Darstellung des Kollisionsintegrals beruht, die in [32] entwickelt wurde. Das Simulationsgebiet ist beschränkt und wir werden die deterministische numerische Approximation verschiedener Randbedingungen, wie z.B. diffuse Reflexion oder Spiegelreflexion, diskutieren. Weiter wird ein neues Beispiel für Streukerne mit Adsorptionszeitabhängigkeit gegeben. Die Operator-Splitting-Technik erlaubt eine effiziente Parallelisierung und die zugehörigen numerischen Ergebnisse, die wir für das Wärmeleitungsproblem zwischen parallelen Platten (in einer und zwei Raumdimensionen) im Falle des Maxwell-Pseudo-Molekül-Kollisionsmodells wie auch für die Simulation eines Schockprofils, wobei hier das BGK-Kollisionsmodell genutzt wird, erhalten, werden vorgestellt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Die Boltzmann-Gleichung	10
2.1	Eigenschaften des Kollisionsintegrals	12
2.2	Das H-Theorem	15
2.3	Die makroskopischen Erhaltungsgrößen	15
2.4	Die Randbedingung für die Boltzmann-Gleichung	18
2.5	Der Streukern	20
2.6	Abbildungseigenschaften des Randoperators	23
3	Hyperbolische Systeme von Erhaltungsgleichungen	25
3.1	Definition und Notationen	25
3.2	Schwache Lösungen	27
3.3	Entropiefunktionen	29
3.4	Die Methode der verschwindenden Viskosität	31
3.5	Hyperbolische Systeme mit konstanten Koeffizienten in 1D	33
3.6	Charakteristische Kurven	35
3.7	Randbedingungen für hyperbolische Systeme in 1D	36
3.8	Randbedingungen für lineare Systeme mit konstanten Koeffizienten in 1D	39
4	Verbindung zwischen der Boltzmann-Gleichung und hyperbolischen Systemen	41
4.1	Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes	41
4.2	Ein hyperbolisches System als Approximation an die Boltzmann-Gleichung	42
4.3	Diskretisierung der Randbedingungen für die Boltzmann-Gleichung in 1D	43
4.4	Eine Entropiefunktion für dieses System	45
5	Numerische Verfahren zur Modellierung der Boltzmann-Gleichung	46
5.1	Differenzenverfahren zur Modellierung der Freiflugphase	49
5.2	Essentially Non-Oscillatory (ENO) Rekonstruktion	51
5.3	Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) Rekonstruktion	56
5.4	Finite-Differenzen-ENO-Roe- und Finite-Differenzen-WENO-Roe-Verfahren	57
5.5	ENO-Roe- und WENO-Roe-Verfahren zur Modellierung der Freiflugphase	62
5.6	Verfahren zur Approximation des Kollisionsterms	64

6 Inhaltsverzeichnis

5.7	Verfahren zur Modellierung des Kollisionsschritts	68
5.8	Numerische Behandlung der Randbedingungen	69
5.9	Parallelisierung der numerischen Verfahren	73
6	Numerische Ergebnisse	74
6.1	Numerische Tests in 1D	74
6.2	Numerische Tests in 2D	84
7	Zusammenfassung	87
8	Ausblick	93
	Literaturverzeichnis	95

1 Einleitung

Ludwig Eduard Boltzmann (geb. 20.02.1844 in Wien, gest. 05.09.1906 in Duino bei Triest) formulierte 1872 im Rahmen seiner Tätigkeit als Professor für mathematische Physik an der Universität Graz in seiner Arbeit „Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen“ [11] erstmals die später nach ihm benannte Boltzmann-Gleichung. Er stellte damit eine der fundamentalsten Gleichungen der kinetischen Gastheorie auf, die Mathematiker und Physiker bis heute beschäftigt. Die Existenz von Lösungen und die damit zusammenhängenden Abbildungseigenschaften des Kollisionsoperators stellten schon immer eine Herausforderung dar und sind immer noch Gegenstand aktueller Forschung [29], [17], [39], [61], [63], [13], [19]. Die physikalischen Anwendungen der kinetischen Theorie reichen von der Luft- und Raumfahrttechnik (Modellierung der Umströmung von Raumflugkörpern, insbesondere die Wiedereintrittsphase in die Erdatmosphäre) über die Vakuumtechnologie und die Modellierung von Grenzschichten bis hin zur Halbleitertechnologie. Die numerische Behandlung der Boltzmann-Gleichung spielt dabei eine große Rolle.

Der Bereich der Numerik der Boltzmann-Gleichung ist aufgrund ihrer sehr hohen Komplexität von stochastischen Partikelverfahren dominiert. Das bekannteste unter ihnen ist die DSMC-Methode (Direct Simulation Monte Carlo). Sie wurde in den 1960er Jahren von G. A. Bird entwickelt [4]. Nanbu stellte 1980 [42] ein stochastisches Verfahren zur Simulation von Gasströmungen vor, das auf einer Approximation der Boltzmann-Gleichung beruht. Dieses wurde in [2] modifiziert. Das so entstandene Verfahren besitzt eine mit der DSMC vergleichbare Effektivität und wurde in den Arbeiten [43], [44] und [10] weiterentwickelt. Weitere Verfahren, die auf stochastischen Prozessen beruhen finden sich in [21], [33] und [40]. Verfahren, die auf gewichteten Partikeln beruhen, wurden in den Arbeiten [52], [53] und [54] vorgestellt.

Auch wenn stochastische Verfahren naturgemäß Probleme hoher Komplexität besser bewältigen als deterministische, haben sie Nachteile wie stochastische Fluktuationen. Die rasch steigende Rechenleistung moderner PCs ermöglicht es, deterministische Verfahren zur numerischen Lösung der Boltzmann-Gleichung einzusetzen. Die Entwicklung effizienter deterministischer Verfahren, die vertretbare Rechenzeiten aufweisen, gestaltet sich allerdings sehr schwierig. Im Fall der räumlich inhomogenen Boltzmann-Gleichung ist man daher auf Parallelrechner angewiesen.

Eine der ersten diskreten Versionen der Boltzmann-Gleichung wurde von J. E. Broadwell, D. Goldstein und B. Sturtevant [12] vorgestellt. In den folgenden Jahren wurden viele verschiedene Möglichkeiten untersucht, zu einer solchen diskreten Version der Boltzmann-Gleichung zu gelangen [45], [55], [6], [49], [46], [48], [47], [30]. Auf diesen Studien aufbauend wurden erste deterministische numerische Verfahren zur Lösung der Boltzmann-Gleichung

entwickelt. A. V. Bobylev und S. Rjasanow betrachteten ein deterministisches, auf der Fouriermethode basierendes numerisches Verfahren im Falle von Maxwellmolekülen [7],[9] und dem Hartkugel-Modell [8]. L. Pareschi und G. Russo [50], [51] studierten eine Spektralmethode für die Boltzmann-Gleichung. In [1] präsentierten K. Aoki, S. Kosuge und S. Takata ein Differenzschema für Gasgemische. Diese Arbeiten waren dabei auf die räumlich homogene oder zeitlich stationäre Boltzmann-Gleichung konzentriert. Der nächste natürliche Schritt ist die Kopplung der für die räumlich homogene Boltzmann-Gleichung entwickelten Verfahren durch die sogenannte Operator-Splitting Technik mit deterministischen Verfahren für den Transport. In [37] wurde dies für ein Upwind-Differenzschema zur numerischen Behandlung des Transports und das von A. V. Bobylev und R. Rjasanow in [9] entwickelte Verfahren für die Kollisionen getan. F. Filbet und G. Russo [23] kombinierten ein voll konservatives Schema [22] für den Transport und das von L. Pareschi und G. Russo in [50] und [51] entwickelte Verfahren für die Kollisionen und führten eine Parallelisierung des Algorithmus durch.

Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung von effizienten deterministischen Methoden und Algorithmen zur numerischen Lösung der räumlich inhomogenen Boltzmann-Gleichung. Sie entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als Projektbearbeiter des Projektes „Effektive deterministische Numerik der Boltzmann-Gleichung“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft an der Universität des Saarlandes in den Jahren 2001 bis 2004. Verfahren, die zum einen mit den oben genannten, zur Zeit dominierenden stochastischen Verfahren bezüglich der Rechenzeit in einem vergleichbaren Rahmen liegen, aber eine wesentlich höhere Genauigkeit aufweisen, galt es zu identifizieren bzw. neu zu entwickeln. Dabei spielte die Diskretisierung und computertechnische Umsetzung der verschiedenen, in der kinetischen Gastheorie üblichen Randbedingungen eine wesentliche Rolle. Bei der Identifizierung geeigneter Verfahren zur Lösung des Transportschritts erwiesen sich aufgrund der speziellen Struktur dieser Randbedingungen nur Verfahren als geeignet, die in den Randpunkten des Berechnungsgebietes nur Werte bzgl. der in das Berechnungsgebiet hineingehenden Charakteristiken benötigten. Die sehr effizienten Verfahren wie Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff und Beam-Warming, die auf einer Approximation der Ortsableitungen verschiedener Ordnung durch zentrale Differenzen beruhen, und die Centred-Essentially-Non-Oscillatory-(CENO)- und Centred-Weighted-ENO-(CWENO)-Verfahren erwiesen sich daher als ungeeignet, so daß ich mich auf Upwind-Verfahren wie Upwind-Differenzen- und ENO-Roe bzw. WENO-Roe-Methoden konzentrierte. Weiter war aufgrund der hohen Komplexität der Berechnung des Kollisionsschritts, gerade in bezug auf räumlich zweidimensionale Probleme mit vielen Ortszellen, in denen eine Kollision durchgeführt werden muß, eine Parallelisierung des Verfahrens unumgänglich.

Die vorliegende Arbeit hat den folgenden Aufbau. Zunächst stellen wir in Kapitel 2 die Boltzmann-Gleichung vor und diskutieren ihre wichtigsten Aspekte wie die Eigenschaften des Kollisionsintegrals, Maxwell-Verteilungen, Gleichgewichtslösungen und das H-Theorem. Wir besprechen die Randbedingungen für die Boltzmann-Gleichung, stellen

das ihnen zugrundeliegende Konzept des Streukerns vor, geben einige gängige Beispiele solcher Streukerne und diskutieren deren Eigenschaften. Anschließend geben wir ein Beispiel für neue Streukernmodelle, die im Gegensatz zu den zur Zeit verwendeten Beispielen eine Abhängigkeit von der sogenannten Adsorptionszeit besitzen. Schließlich diskutieren wir die Abbildungseigenschaften des Randoperators.

Im folgenden dritten Kapitel geben wir einen Überblick über die Theorie hyperbolischer Systeme partieller Differentialgleichungen und diskutieren in diesem Rahmen die Begriffe der klassischen und schwachen Lösung, sowie der Entropielösung solcher Systeme und das Verfahren der verschwindenden Viskosität. Im Speziellen betrachten wir dann Systeme mit konstanten Koeffizienten in einer Raumvariablen und klären den grundlegenden Begriff der charakteristischen Kurven. Wir betrachten dann Randbedingungen für hyperbolische Systeme und erläutern die Begriffe der Randentropieungleichung und des Raumes der möglichen Randzustände für den räumlich eindimensionalen Fall. Diese führen zu einem Konzept, solche Randbedingungen zu finden, die zu gut gestellten Anfangsrandwertaufgaben führen. Wir klären dann die gegebenen Begriffe am Beispiel von Systemen mit konstanten Koeffizienten.

Im Kapitel 4 approximieren wir mit Hilfe der Geschwindigkeitsraumdiskretisierung die Boltzmann-Gleichung durch ein hochdimensioniertes System hyperbolischer partieller Differentialgleichungen und zeigen, inwieweit die in Kapitel drei diskutierten Begriffe und Eigenschaften auf dieses System übertragbar sind. Wir machen einen Vorschlag für eine Entropiefunktion für dieses System, das auf dem Boltzmannschen H-Funktional basiert.

In Kapitel 5 stellen wir die klassische Operator-Splitting-Technik vor und erläutern eine Modifikation dieser Technik, die auf Strang zurückgeht. Im Anschluß besprechen wir die numerischen Verfahren zur Modellierung der Freiflugphase. Hierbei diskutieren wir zunächst die numerische Umsetzung klassischer Differenzenverfahren für dieses System. Anschließend stellen wir die Essentially Non-Oscillatory-(ENO)-Roe- und Weighted ENO-(WENO)-Roe-Verfahren vor. Schließlich diskutieren wir ihre Anwendung auf das System der Freiflugphase. Dann stellen wir das Verfahren zur numerischen Modellierung des Kollisionsschrittes vor, das von I. Ibragimov und S. Rjasanow in [32] entwickelt wurde und auf einer geschickten Darstellung des Gewinnterms des Kollisionsoperators beruht. Es erlaubt eine effiziente numerische Berechnung des Kollisionsterms. Wir besprechen schließlich die numerische Umsetzung der in der kinetischen Gastheorie üblichen Randbedingungen in einer und zwei Raumdimensionen und nehmen zuletzt eine Parallelisierung der Algorithmen vor.

Im sechsten Kapitel präsentieren wir die numerischen Ergebnisse in einer und zwei Raumdimensionen.

Zuletzt folgen in Kapitel 7 eine kurze Zusammenfassung der Arbeit und ihrer wichtigsten Ergebnisse und in Kapitel 8 ein Ausblick auf zukünftige Möglichkeiten, die sich aus dieser Arbeit ergeben.

2 Die Boltzmann-Gleichung

Die räumlich inhomogene Boltzmann-Gleichung [15], [14]

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f(t, x, v) \rangle = \frac{1}{\epsilon} Q(f, f)(t, x, v),$$

wobei $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das Standardskalarprodukt im \mathbb{R}^3 bezeichnet, beschreibt die zeitliche und räumliche Evolution der Massenverteilungsdichte

$$f : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \times \mathbb{R}_v^3 \rightarrow \mathbb{R}_0^+, (t, x, v) \rightarrow f(t, x, v)$$

eines verdünnten Gases, wobei $\Omega \subset \mathbb{R}_x^d$, $d = 1, 2, 3$ ein beschränktes Gebiet bezeichnet, dessen Rand so beschaffen ist, daß in jedem Punkt $x \in \partial\Omega$ eine eindeutige, in das Innere von Ω gerichtete Normale $\nu(x) \in \mathbb{R}_x^d$, $d = 1, 2, 3$ existiert. Weiter bezeichnet ϵ die sogenannte Knudsen-Zahl, welche proportional zur mittleren freien Weglänge zwischen Kollisionen ist. Sie ist eine Integro-Differential-Gleichung mit einem linearen Transportoperator auf der linken Seite, der auf die Ortsvariable x und die Zeit t wirkt, und einem quadratischen Integraloperator

$$Q(f, f)(v) = \int_{\mathbb{R}_{v_*}^3} \int_{S^2} B(v, v_*, e) (f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)) \, dedv_* \quad (2.1)$$

auf der rechten Seite, der ausschließlich auf die Geschwindigkeitsvariable v wirkt und die Variablen t, x nur als Parameter enthält. Dabei bezeichnen

- $v, v_* \in \mathbb{R}^3$ die Geschwindigkeiten vor einer Kollision,
- $e \in S^2 = \{ w \in \mathbb{R}^3 : |w| = 1 \} \subset \mathbb{R}^3$ einen Einheitsvektor,
- de das Oberflächenmaß und dv_* das Lebesgue-Maß bzgl. der jeweiligen Integrationsvariablen,
- $v', v'_* \in \mathbb{R}^3$ die Geschwindigkeiten

$$v' = \frac{1}{2}(v + v_* + |u|e), \quad v'_* = \frac{1}{2}(v + v_* - |u|e),$$

welche die Beziehungen

$$\begin{aligned} v + v_* &= v' + v'_* && \text{(Impulserhaltung) und} \\ |v|^2 + |v_*|^2 &= |v'|^2 + |v'_*|^2 && \text{(Energieerhaltung)} \end{aligned}$$

erfüllen,

- und $u = v - v_* \in \mathbb{R}^3$ die Relativgeschwindigkeit.
- Weiter bezeichnet $B(v, v_*, e)$ den Kollisionskern. Er hängt von dem jeweiligen Modell der Interaktion zwischen den Gasteilchen ab und hat für physikalisch relevante Modelle die Form

$$B(v, v_*, e) = |u| \sigma \left(|u|, \frac{\langle u, e \rangle}{|u|} \right), \quad (2.2)$$

wobei $\sigma : \mathbb{R}^+ \times [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+$ den sogenannten differentiellen Streuquerschnitt bezeichnet.

Durch Hinzunahme einer Anfangsbedingung

$$f(0, x, v) = f_0(x, v), \quad f_0 : \Omega \times \mathbb{R}_v^3 \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad (x, v) \rightarrow f_0(x, v)$$

und einer Randbedingung der Form

$$f(t, x, v) |\langle v, \nu(x) \rangle| = \int_{\{v' \in \mathbb{R}^3 : \langle v', \nu(x) \rangle < 0\}} \int_0^t R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) f(t - \tau, x, v') |\langle v', \nu(x) \rangle| d\tau dv',$$

$$x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle > 0,$$

erhalten wir ein Anfangsrandwertproblem, das wir in den nächsten Kapiteln näher untersuchen wollen.

Dabei beschreibt der sogenannte Streukern $R(t, \tau, x, v' \rightarrow v)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte eines Streueignisses am Rand. Seine Form hängt vom gewählten Gas-Rand-Interaktionsmodell ab. Weiter ist $\nu(x)$ die in das Innere von Ω gerichtete Normale an den Rand $\partial\Omega$ im Randpunkt x , τ die sogenannte Adsorptionszeit, v die Geschwindigkeit, mit der ein Teilchen aus dem Rand $\partial\Omega$ austritt, v' die Geschwindigkeit, mit der das Teilchen zuvor in den Rand $\partial\Omega$ eingetreten war, und dv' wieder das Lebesgue-Maß bzgl. der Integrationsvariablen v' .

Gehen wir davon aus, daß die Massenverteilungsdichte f nicht vom Ort abhängt, d.h. $f = f(t, v)$ gilt, so ist $\langle v, \nabla_x \rangle f(t, v) = 0$, und wir erhalten mit der Substitution $\tilde{t} = \epsilon t$ und Weglassen von \sim die räumlich homogene Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} f(t, v) = Q(f, f)(t, v).$$

Sie ist natürlich noch mit einer Anfangsbedingung der Form

$$f(0, v) = f_0(v), \quad f_0 : \mathbb{R}_v^3 \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad v \rightarrow f_0(v)$$

zu ergänzen.

Zunächst werden wir die wichtigsten Eigenschaften der Boltzmann-Gleichung wie die Kollisionsinvarianten, die Kollisionskerne zu unterschiedlichen Kollisionsmodellen, die Boltzmann-Ungleichung und Maxwell-Verteilungen vorstellen. Anschließend betrachten wir das sogenannte H-Theorem und werden die physikalisch relevanten makroskopischen Größen wie Dichte, Impuls, Energie usw. definieren und Erhaltungsgleichungen für diese formulieren. Dann werden wir die Randbedingungen für die Boltzmann-Gleichung diskutieren. Wir leiten sie dabei aus der Wahrscheinlichkeit eines Streueignisses am Rand des Berechnungsgebietes her. Anschließend diskutieren wir die Eigenschaften der Wahrscheinlichkeitsdichte dieser Streueignisse, des sogenannten Streukerns, geben einige Beispiele solcher Streukerne für verschiedene Gas-Wand-Interaktionsmodelle an und stellen kurz das Konzept der Akkomodationskoeffizienten vor. Der Streukern besitzt in seiner allgemeinen Definition eine Abhängigkeit von der sogenannten Adsorptionszeit. Diese bezeichnet die Zeit, die die Teilchen in der Wand, mit der sie interagieren, verbleiben und wird in der Regel mit τ bezeichnet. In der bisherigen Praxis werden nur solche Kerne verwendet, in denen τ vernachlässigbar klein gegenüber der für die Evolution des Gases relevanten Zeit ist, und man den Streukern als von ihr unabhängig betrachten kann. Es wird hier ein neues Beispiel für Streukerne mit τ -Abhängigkeit vorgestellt. Abschließend betrachten wir die Abbildungseigenschaften des die Randbedingung beschreibenden Operators und geben ein H-Theorem am Rand an.

2.1 Eigenschaften des Kollisionsintegrals

Eine der bemerkenswertesten Eigenschaften des Kollisionsintegrals ist die Existenz von Kollisionsinvarianten. Im folgenden geben wir ihre Definition und stellen ihre Eigenschaften vor.

Definition 2.1.1 (Kollisionsinvarianten)

Eine Funktion $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ heißt **Kollisionsinvariante** zum Kollisionsterm $Q(f, f)$, falls für jedes positive f , für das $Q(f, f)$ existiert und $Q(f, f)\phi$ integrierbar ist,

$$\phi(v) + \phi(v_*) = \phi(v') + \phi(v'_*).$$

fast überall im Geschwindigkeitsraum gilt.

Satz 2.1.2 (Kriterium für Kollisionsinvarianz)

Eine Funktion $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ ist Kollisionsinvariante zum Kollisionsterm $Q(f, f)$, falls für jedes positive f , für das $Q(f, f)$ existiert und $Q(f, f)\phi$ integrierbar ist, gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f, f)(v)\phi(v) dv = 0.$$

Der Beweis findet sich in [15], Seite 34-36.

Satz 2.1.3 (Die Gestalt der Kollisionsinvarianten)

Eine stetige Funktion $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ ist genau dann Kollisionsinvariante, wenn es $a, c \in \mathbb{R}$ und $b \in \mathbb{R}^3$ gibt mit

$$\phi(v) = a + \langle b, v \rangle + c|v|^2.$$

Dieser Beweis ist zum Beispiel in [3], Satz 2.20, Seite 48-50 zu finden.

Korollar 2.1.4 (Basiskollisionsinvarianten)

$\phi_0 = 1$, $\phi_j = v_j$, $j = 1, 2, 3$, $\phi_4 = |v|^2$ sind Kollisionsinvarianten.

Diese Sätze gelten für alle Kollisionskerne $B(v, v_*, e)$, die die Gestalt (2.2) besitzen. Diese sind je nach gewähltem Interaktionsmodell, das die Kollision zweier Teilchen beschreibt, d.h. je nach dem Potential der Interaktion, unterschiedlich. Wir wollen daher hier einige Beispiele für den Kollisionskern angeben.

Beispiel 2.1.5 (Kollisionskerne)

- **Hartkugelmodell:** Hier gehen wir von einem Gasteilchenmodell harter Kugeln mit gleicher Masse und gleichem Kugeldurchmesser d_K aus. Der Kollisionskern ist in diesem Fall durch

$$B(|u|, \mu) = \frac{d_K^2}{4}|u|, \quad d_K \text{ Durchmesser der Kugeln,}$$

gegeben.

- **$r^{-\alpha}$ -Potential:** Hier wird vorausgesetzt, daß das Interaktionspotential zweier Teilchen sich wie $r^{-\alpha}$, $\alpha > 1$, verhält, wobei r den Abstand der beiden interagierenden Teilchen bezeichnet. Der Kollisionskern hat dann die Gestalt

$$B(|u|, \mu) = |u|^{1-4/\alpha} g_\alpha(\mu)$$

mit $\alpha > 1$, $\mu = \cos(\theta) = \langle u, e \rangle / |u|$, und einer gegebenen Funktion g_α , welche eine nichtintegrierbare Singularität für $\mu \rightarrow 1$ der Ordnung

$$g_\alpha(\mu) = O((1 - \mu)^{-2/\alpha})$$

besitzt.

- **Abgeschnittenes $r^{-\alpha}$ -Potential:** Abschneiden der Funktion g_α , so daß

$$g_\alpha \in L^1([-1, 1])$$

gilt.

- **Maxwell-Pseudomoleküle:** Hier ist der Kollisionskern in der Form

$$B(|u|, \mu) = g_4(\mu)$$

gegeben.

- **VHS-Modell (Variable Hard Spheres):** Der Kollisionskern hat hier die Form

$$B(|u|, \mu) = C_\lambda |u|^\lambda, \quad -3 < \lambda \leq 1.$$

Dieses Modell beinhaltet das Hartkugelmodell für $\lambda = 1$ und die Maxwell-Pseudomoleküle für $\lambda = 0$.

Abschließend wollen wir untersuchen, für welche Funktionen der Kollisionsterm verschwindet, d.h wir suchen positive Massenverteilungsdichten mit

$$Q(f, f) = 0.$$

Eine Antwort auf diese Frage liefern die folgenden Sätze.

Satz 2.1.6 (Boltzmann-Ungleichung)

Sei f eine positive Funktion, so daß $\ln(f)Q(f, f)$ integrierbar ist. Dann gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \ln(f)Q(f, f) dv \leq 0. \quad (2.3)$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn $\ln(f)$ eine Kollisionsinvariante ist. Dies ist dann äquivalent zur Existenz von $a, c \in \mathbb{R}$ mit $c < 0$, da f in $L^1(\mathbb{R}^3)$ liegt, und $b \in \mathbb{R}^3$, so daß

$$f = \exp(a + \langle b, v \rangle + c|v|^2) \quad (2.4)$$

gilt.

Der Beweis wird in [15], Seite 42-43 durchgeführt.

Setzen wir dann $c = -\beta$, $\beta \in \mathbb{R}^+$ und $b = 2\beta\tilde{v}$ mit $\tilde{v} \in \mathbb{R}^3$ konstant, so können wir (2.4) umformen und erhalten mit einer Konstanten $A \in \mathbb{R}^+$

$$f = A \exp(-\beta|v - \tilde{v}|^2). \quad (2.5)$$

Eine Verteilungsfunktion mit der Gestalt (2.5) wird Maxwell-Verteilung genannt. Dies führt dann zu der Beantwortung unserer obigen Frage durch den Sachverhalt:

Satz 2.1.7

Seien die Voraussetzungen von Satz (2.1.6) erfüllt, dann gilt:

$$Q(f, f) = 0 \Leftrightarrow f \text{ ist eine Maxwell-Verteilung, d.h. } f = A \exp(-\beta|v - \tilde{v}|^2).$$

Der Beweis wird in [15], Seite 43 gegeben.

2.2 Das H-Theorem

Multiplizieren wir beide Seiten der Boltzmann-Gleichung für positives f mit $\ln(f)$ und integrieren anschließend in Bezug auf v über ganz \mathbb{R}^3 , so erhalten wir

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \langle \nabla_x, \mathcal{I} \rangle = \mathcal{S},$$

mit

$$\mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^3} f \ln(f) dv, \quad \mathcal{I} = \int_{\mathbb{R}^3} v f \ln(f) dv \quad \text{und} \quad \mathcal{S} = \frac{1}{\epsilon} \int_{\mathbb{R}^3} \ln(f) Q(f, f) dv.$$

Die Boltzmann-Ungleichung (2.3) impliziert:

$\mathcal{S} \leq 0$ und es gilt: $\mathcal{S} = 0$ genau dann, wenn f eine Maxwell-Verteilung ist,

womit sich das sogenannte H-Theorem im räumlich homogenen Fall beweisen läßt.

Satz 2.2.1 (Das H-Theorem im räumlich homogenen Fall)

Sei f eine Lösung der räumlich homogenen Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q(f, f).$$

Dann ist \mathcal{H} eine in der Zeit monoton fallende Größe, es sei denn f ist eine Maxwell-Verteilung.

Der Beweis ist in [15], Seite 49-51 zu finden.

2.3 Die makroskopischen Erhaltungsgrößen

Das Gas sei durch eine Massenverteilungsdichte f beschrieben. Dann ergeben sich die physikalisch relevanten makroskopischen Größen aus den ersten 13 Momenten von f und Kombinationen von ihnen. Diese Größen sind

- die Dichte:

$$\rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv,$$

- der Impuls:

$$m(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv,$$

- der Impulsfluß:

$$M(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} v v^T f(t, x, v) dv,$$

- der Energiefluß:

$$\gamma(t, x) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} v |v|^2 f(t, x, v) dv,$$

- die mittlere Geschwindigkeit:

$$V(t, x) = \frac{m(t, x)}{\rho(t, x)},$$

- die innere Energiedichte:

$$w(t, x) = \frac{1}{2\rho(t, x)} (\operatorname{tr} M(t, x) - \rho(t, x) |V(t, x)|^2),$$

- die Temperatur:

$$T(t, x) = \frac{2}{3} w(t, x),$$

- der Druck:

$$p(t, x) = \rho(t, x) T(t, x),$$

- der Spannungstensor:

$$P(t, x) = M(t, x) - \rho(t, x) V(t, x) V(t, x)^T,$$

- und der Wärmeflußvektor

$$q(t, x) = \gamma(t, x) - \left(M(t, x) + \left(\frac{1}{2} \operatorname{tr} M(t, x) - \rho(t, x) |V(t, x)|^2 \right) I \right) V(t, x).$$

Hierbei bezeichnet I die Einheitsmatrix.

Wenden wir die obigen Gleichungen auf eine Maxwell-Verteilung an, so zeigt sich, daß in (2.5)

$$\tilde{v} = V, \quad \beta = 1/(2T) \quad \text{und} \quad A = \rho/(2\pi T)^{\frac{3}{2}}$$

gilt.

Schließlich erhalten wir durch Multiplikation beider Seiten der Boltzmann-Gleichung mit einer der elementaren Kollisionsinvarianten, anschließender Integration bzgl. v über ganz \mathbb{R}^3 und Ausnutzen der Definitionen von ρ, v, P, q und w die folgenden Erhaltungsgleichungen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho V_i) = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho V_j) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho V_i V_j + P_{ij}) = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho |V|^2 + \rho w \right) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho V_i \left(\frac{1}{2} |V|^2 + w \right) + \sum_{j=1}^3 V_j P_{ij} + q_i \right) = 0. \quad (2.8)$$

Die 5 Gleichungen (2.6), (2.7) und (2.8) enthalten neben den 5 Unbekannten $\rho, V_j, j = 1, 2, 3$ und w die Unbekannten $P_{ij}, i, j = 1, 2, 3$ und $q_i, i = 1, 2, 3$ und stellen somit kein abgeschlossenes Gleichungssystem dar. Um sie zu lösen, brauchen wir Abschlußrelationen. Eine Möglichkeit, solche Abschlußrelationen zu finden, ist der Fall, in dem gezeigt werden kann, daß die Massenverteilungsdichte f in jedem Punkt x nahe an der entsprechenden Maxwell-Verteilung liegt, so daß q_i und der anisotrope Teil von P_{ij} vernachlässigt werden können. Durch näherungsweise Setzen von $q_i = 0$ und $P_{ij} = p \delta_{ij}$, wobei wie oben $p(t, x) = \rho(t, x) T(t, x)$ und $T(t, x) = \frac{2}{3} w(t, x)$ gilt, und wir demnach $p(t, x) = \frac{2}{3} \rho(t, x) w(t, x)$ bzw. $P_{ij} = \frac{2}{3} \rho(t, x) w(t, x) \delta_{ij}$ erhalten, ergeben sich die Eulergleichungen der Fluidynamik:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho V_i) = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho V_j) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho V_i V_j + \frac{2}{3} \rho(t, x) w(t, x) \delta_{ij} \right) = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho |V|^2 + \rho w \right) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho V_i \left(\frac{1}{2} |V|^2 + w \right) + \sum_{j=1}^3 V_j \frac{2}{3} \rho(t, x) w(t, x) \delta_{ij} \right) = 0. \quad (2.11)$$

Im räumlich homogenen Fall sind Dichte, Impuls und die Spur des Impulsflusses bzgl. der Zeit konstant und somit durch die Anfangsverteilung f_0 gegeben, woraus wiederum die Konstanz der Temperatur, der mittleren Geschwindigkeit, der inneren Energie und des Drucks folgt. Aus dem H-Theorem ergibt sich in diesem Fall der folgende Satz:

Satz 2.3.1 (Relaxation zu einer Maxwell-Verteilung)

Es sei f_M eine Maxwell-Verteilung, die zu jedem Zeitpunkt die gleiche Dichte, mittlere Geschwindigkeit und Temperatur wie die Anfangsverteilung besitzt. Dann gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{H} = \mathcal{H}_{f_M} = \int_{\mathbb{R}^3} f_M \ln(f_M) dv.$$

Weiter gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f = f_M.$$

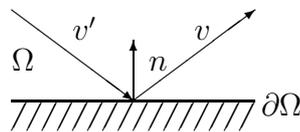
Der Beweis ist zum Beispiel in [15], Seite 50-51 zu finden und ist nicht trivial.

2.4 Die Randbedingung für die Boltzmann-Gleichung

Die mathematische Modellierung der Gas-Wand-Interaktion ist mit vielen Problemen wie Adsorption, chemischen Reaktionen, Ionisierung, Verschiebung oder Herausschlagung von Wandmolekülen, Kondensation usw. verbunden, so daß eine in physikalischem Sinne exakte Modellierung nicht möglich ist. Daher wird eine Modellierung im Sinne von Wahrscheinlichkeitsdichten angewendet. Alle mikroskopischen physikalischen Vorgänge der Interaktion werden so in einer Streuwahrscheinlichkeitsdichte zusammengefaßt, dem sogenannten Streukern

$$R(t, \tau, x, v' \rightarrow v).$$

Er bezeichnet die Wahrscheinlichkeitsdichte, daß ein Teilchen die Oberfläche $\partial\Omega$ am Ort x mit einer Geschwindigkeit v' zur Zeit t trifft und nach einer Adsorptionszeit τ am gleichen Punkt x mit einer Geschwindigkeit v aus der Oberfläche austritt.



Mit einigen Idealisierungen wie der Betrachtung eines monoatomaren Gases, das auf eine unbewegliche Interaktionsoberfläche trifft, können wir die Randbedingung wie folgt herleiten:

Wir setzen voraus, daß Ω ein zusammenhängendes Gebiet mit einem hinreichend glatten Rand ist, so daß in jedem Punkt $x \in \partial\Omega$ eine eindeutige in das Gebiet Ω hineingerichtete

Normale $\nu(x)$ existiert. Das Oberflächenelement in diesem Punkt x mit der Normalen $\nu(x)$ sei mit $dS(\nu(x))$ bezeichnet. Es sei dann

$$d\mu = f(t, x, v) |\langle v, \nu(x) \rangle| dt dS(\nu(x)) dv, \quad x \in \partial\Omega, \langle v, \nu \rangle > 0$$

die Massendichte der Teilchen, die mit einer Geschwindigkeit in einer Umgebung von v aus einem Oberflächenelement $dS(\nu(x))$ der Oberfläche $\partial\Omega$ im Zeitintervall $t + dt$ austreten. Analog sei

$$d\mu' = f(t - \tau, x, v') |\langle v', \nu(x) \rangle| dt dS(\nu(x)) dv', \quad x \in \partial\Omega, \langle v', \nu(x) \rangle < 0$$

die Massendichte der Teilchen, die in die Oberfläche durch das gleiche Oberflächenelement mit einer Geschwindigkeit in einer Umgebung von v' vor der Adsorptionszeit τ , d.h. im Zeitintervall $(t - \tau, t - \tau + dt)$, ($\tau > 0$), eingetreten sind. Dann gilt zum Zeitpunkt t :

$$d\mu = \int_{\{v' \in \mathbb{R}^3 : \langle v', \nu(x) \rangle < 0\}} \int_0^t R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) d\tau dv' d\mu', \quad x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle > 0.$$

Setzen wir $d\mu'$ und $d\mu$ ein, so ergibt sich:

$$f(t, x, v) |\langle v, \nu(x) \rangle| = \int_{\{v' \in \mathbb{R}^3 : \langle v', \nu(x) \rangle < 0\}} \int_0^t R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) f(t - \tau, x, v') |\langle v', \nu(x) \rangle| d\tau dv',$$

$$x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle > 0.$$

Mit der weiteren Idealisierung, daß die Streueignisse an der Oberfläche momentan und statistisch unabhängig sind, können wir $R(t, \tau, x, v' \rightarrow v)$ als von $f(t, x, v)$ unabhängig betrachten. Gilt weiter, daß τ sehr viel kleiner als die bzgl. der Entwicklung von f charakteristische Zeit ist, so gilt $f(t - \tau, x, v') \approx f(t, x, v')$. Mit

$$\mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) = \int_0^t R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) d\tau$$

gilt schließlich

$$f(t, x, v) |\langle v, \nu(x) \rangle| = \int_{\{v' \in \mathbb{R}^3 : \langle v', \nu(x) \rangle < 0\}} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) f(t, x, v') |\langle v', \nu(x) \rangle| dv',$$

$$x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle > 0.$$

Im Weiteren wollen wir die Integrale über den Halbraum

$$\{v' \in \mathbb{R}^3 : \langle v', \nu(x) \rangle < 0\} \text{ bzw. } \{v \in \mathbb{R}^3 : \langle v, \nu(x) \rangle > 0\}$$

einfach mit

$$\int_{\langle v', \nu(x) \rangle < 0} \dots dv' \text{ bzw. } \int_{\langle v, \nu(x) \rangle > 0} \dots dv$$

abkürzen. Wenn x nur als Parameter vorkommt, schreiben wir einfach

$$\int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \dots dv' \text{ bzw. } \int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \dots dv.$$

Die Randbedingung lautet dann, wenn wir die Variablen, die nur als Parameter vorkommen, auch in den beteiligten Funktionen weglassen,

$$f(t, v) |\langle v, \nu \rangle| = \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \int_0^t R(t, \tau, v' \rightarrow v) f(t - \tau, v') |\langle v', \nu \rangle| d\tau dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0$$

bzw., wenn zusätzlich auch t nur noch als Parameter vorkommt,

$$f(v) |\langle v, \nu \rangle| = \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(v' \rightarrow v) f(v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0.$$

2.5 Der Streukern

In diesem Abschnitt wollen wir die Eigenschaften des Streukerns R bzw. \mathcal{R} näher bestimmen, die zu physikalisch sinnvollen Eigenschaften des Gas-Wand-Interaktionsmodells führen.

Als erstes sollte, da es sich bei R bzw. \mathcal{R} um Wahrscheinlichkeitsdichten handelt, **Nichtnegativität** gefordert werden. Es soll demnach gelten:

$$R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) \geq 0 \Rightarrow \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) \geq 0. \quad (2.12)$$

Dann sollten auch alle Teilchen, die auf die Wand treffen, spätestens zum Zeitpunkt t wieder aus der Wand austreten. Dies führt zu der folgenden **Normierung**:

$$\int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \int_0^t R(t, \tau, v' \rightarrow v) d\tau dv = 1 \Rightarrow \int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \mathcal{R}(t, v' \rightarrow v) dv = 1. \quad (2.13)$$

Und schließlich sollte der Streuprozess mikroskopisch umkehrbar sein, d.h. es sollte gleichwahrscheinlich sein, daß ein Teilchen mit einer Geschwindigkeit v' am Ort x zur Zeit t auf die Oberfläche trifft und nach einer Adsorptionszeit τ am gleichen Punkt x mit einer Geschwindigkeit v wieder aus der Oberfläche austritt, oder daß ein Teilchen mit der

Geschwindigkeit $-v$ am Ort x zur Zeit t auf die Oberfläche trifft und nach einer Adsorptionszeit τ am gleichen Punkt x mit einer Geschwindigkeit $-v'$ wieder aus der Oberfläche austritt. Dies führt zur Forderung der **Reziprozität**. Es sei die Massenverteilungsdichte an der Wand durch die Maxwell-Verteilung

$$f_{M_w}(v) = \frac{C}{(2\pi T_w)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|v|^2}{2T_w}\right)$$

gegeben, wobei C ein Normierungsfaktor ist, der sich aus der Bedingung (2.13) berechnen läßt. Dann soll gelten:

$$\begin{aligned} |\langle v', \nu \rangle| f_{M_w}(v') R(t, \tau, v' \rightarrow v) &= | \langle -v, \nu \rangle | f_{M_w}(-v) R(t, \tau, -v \rightarrow -v') \\ \Rightarrow |\langle v', \nu \rangle| f_{M_w}(v') \mathcal{R}(t, v' \rightarrow v) &= | \langle -v, \nu \rangle | f_{M_w}(-v) \mathcal{R}(t, -v \rightarrow -v'). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Aus der Normierung und der Reziprozität folgt die Erhaltung des Gleichgewichts, d.h. es gilt:

$$\begin{aligned} f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| &= \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \int_0^t R(t, \tau, v' \rightarrow v) f_{M_w}(v') |\langle v', \nu \rangle| d\tau dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0 \\ \Rightarrow f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| &= \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(t, v' \rightarrow v) f_{M_w}(v') |\langle v', \nu \rangle| d\tau dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Beispiel 2.5.1 (Beispiele für Streukerne)

- *Diffuse Reflexion:*

$$\mathcal{R}(v' \rightarrow v) = f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle|$$

- *Spiegelreflexion:*

$$\mathcal{R}(v' \rightarrow v) = \delta(v - v' + 2\nu \langle v', \nu \rangle)$$

- *Konvexkombination der beiden:* Sei $0 \leq \alpha \leq 1$ der Akkommodationskoeffizient der Gas-Wand-Interaktion, dann gilt:

$$\mathcal{R}(v' \rightarrow v) = \alpha f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| + (1 - \alpha) \delta(v - v' + 2\nu \langle v', \nu \rangle).$$

- *Cercignani-Lampis Model:* $v_\nu = \langle v, \nu \rangle$, $v_t = \langle v, \vec{t} \rangle$, \vec{t} Tangentialvektor an die Oberfläche $\partial\Omega$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(v' \rightarrow v) &= \frac{2}{\pi} \alpha_n \alpha_t (2 - \alpha_t) \beta_w^2 v_\nu \cdot \\ &\cdot \exp\left(-\beta_w \left(\frac{v_\nu^2 + (1 - \alpha_\nu) v_\nu'^2}{\alpha_\nu} + \frac{|v_t - (1 - \alpha_t) v_t'|^2}{\alpha_t (2 - \alpha_t)}\right)\right) \cdot \\ &\cdot I_0\left(\beta_w \frac{2\sqrt{1 - \alpha_\nu} v_\nu v_\nu'}{\alpha_\nu}\right), \end{aligned}$$

mit $\beta_w = (2T_w)^{-1}$, T_w Wandtemperatur und

$$I_0(y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(y \cos(\phi)) d\phi$$

(modifizierte Besselfunktion erster Art und nullter Ordnung).

Hierbei bezeichnen α , α_ν und α_t die verschiedenen Akkommodationskoeffizienten.

Das Konzept der Akkommodationskoeffizienten ist eine Möglichkeit, Streukerne analytisch aus einem idealisierten Gas-Wand-Interaktionsmodell zu gewinnen. Sie hängen im allgemeinen von der Verteilungsfunktion f ab und sind nicht einfach zu berechnen. Wir wollen hier nur feststellen, daß die Akkommodationskoeffizienten die Anpassung einer physikalischen Größe an den Wandzustand angeben. Dabei bedeutet ein Wert eines Akkommodationskoeffizienten von 1 vollständige Anpassung an den Wandzustand und ein Wert von 0 eines Akkommodationskoeffizienten entsprechend keine Anpassung. So bezeichnet α_ν z.B. den Akkommodationskoeffizienten des Impulses in Normalenrichtung, α_t den Akkommodationskoeffizienten des Impulses in Tangentialrichtung und α den Akkommodationskoeffizienten der Dichte. Eine ausführliche Darstellung des Konzeptes der Akkommodationskoeffizienten findet sich in [15] in Kapitel 8.3.

Beispiel 2.5.2 (Neuer Typ: Streukerne mit Poisson-verteilter τ -Abhängigkeit)

Für $0 < \tau < t$ definieren wir

$$R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) := \frac{e^{-\tau}}{1 - e^{-t}} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v)$$

mit einem der Streukerne $\mathcal{R}(v' \rightarrow v)$ aus Beispiel 2.5.1. Dann gilt wegen

$$\int_0^t \frac{e^{-\tau}}{1 - e^{-t}} d\tau = 1, \quad e^{-\tau} > 0$$

die Nichtnegativität (2.12), Normierung (2.13) und Reziprozität (2.14), woraus die Erhaltung des Gleichgewichts folgt.

Eine Verallgemeinerung dieses Konzeptes bilden Streukerne mit einer maximalen Adsorptionszeit τ_{max} .

Sei $\tau \in (0, \tau_{max})$, dann definieren wir

$$R(t, \tau, x, v' \rightarrow v) := \begin{cases} \frac{e^{-\tau}}{(1 - e^{-\tau_{max}})} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) & 0 \leq t \leq \tau_{max} \\ 0 & t > \tau_{max} \end{cases} .$$

Wegen

$$\int_0^{\tau_{max}} \frac{e^{-\tau}}{(1 - e^{-\tau_{max}})} d\tau = 1$$

folgt auch hier die Nichtnegativität (2.12), Normierung (2.13) und Reziprozität (2.14), woraus wiederum die Erhaltung des Gleichgewichts folgt.

Betrachten wir hier den Fall, daß τ sehr viel kleiner als die bzgl. der Entwicklung von f charakteristische Zeit ist, so gilt $f(t - \tau, x, v') \approx f(t, x, v')$, und wir erhalten in beiden Fällen die vorherige Randbedingung ohne Adsorptionszeit τ .

Dieser Vorschlag für eine Einführung adsorptionszeitabhängiger Streukerne könnte Anwendung in der Modellierung von physikalischen Wand-Gas-Interaktionen finden, in denen die Teilchen zeitlich begrenzt an der Wand haften. Kennt man dann die durchschnittlichen Adsorptionszeiten durch Messungen oder theoretische Erwägungen, so könnte für τ_{max} dann das Maximum der gemessenen Adsorptionszeiten oder die durchschnittliche Adsorptionszeit gesetzt werden.

2.6 Abbildungseigenschaften des Randoperators

Betrachten wir wieder die Randbedingung ohne τ -Abhängigkeit

$$f(v)|\langle v, \nu \rangle| = \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(v' \rightarrow v) f(v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0$$

und erweitern den Term auf der rechten Seite mit $f_{M_w}(v) > 0$ bzw. den Term auf der linken Seite mit $f_{M_w}(v') > 0$, so ergibt sich

$$\frac{f(v)}{f_{M_w}(v)} f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| = \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(v' \rightarrow v) \frac{f(v')}{f_{M_w}(v')} f_{M_w}(v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0,$$

woraus durch Division durch $f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| > 0$ auf beiden Seiten

$$\frac{f(v)}{f_{M_w}(v)} = \frac{1}{f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle|} \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(v' \rightarrow v) \frac{f(v')}{f_{M_w}(v')} f_{M_w}(v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0$$

hervorgeht. Setzen wir

$$\phi^+(v) = \frac{f(v)}{f_{M_w}(v)}$$

und

$$\phi^-(v) = \frac{f(-v)}{f_{M_w}(v)},$$

so erhalten wir daraus durch die Substitution $v' \rightarrow -v'$

$$\phi^+(v) = \frac{1}{f_{M_w}(v)|\langle v, \nu \rangle|} \int_{\langle v', \nu \rangle > 0} \mathcal{R}(-v' \rightarrow v) \phi^-(v') f_{M_w}(v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \quad \langle v, \nu \rangle > 0.$$

Definieren wir schließlich den linearen **Randoperator**

$$\mathcal{B}[\phi](v) := \frac{1}{f_{M_w}(v)|\langle v, \nu \rangle|} \int_{\langle v', \nu \rangle > 0} \mathcal{R}(-v' \rightarrow v) \phi(v') f_{M_w}(v') |\langle v', \nu \rangle| dv',$$

so gilt bezüglich des Maßes

$$d\mu = f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| dv$$

nach [16] die folgende Abbildungseigenschaft des Randoperators \mathcal{B}

$$\|\mathcal{B}[\phi]\|_{L^p(\langle v, \nu \rangle > 0, d\mu)} = \|\phi\|_{L^p(\langle v, \nu \rangle > 0, d\mu)}, \quad p \geq 1.$$

Weiter gilt nach [15], Seite 233, die Symmetrie von \mathcal{B} bzgl. des Skalarproduktes

$$(\psi, \phi)_+ := \int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \psi(v) \phi(v) f_{M_w}(v) |\langle v, \nu \rangle| dv,$$

d.h.

$$(\psi, \mathcal{B}[\phi])_+ = (\mathcal{B}[\psi], \phi)_+$$

und die Ungleichung

$$(\mathcal{B}[\psi], \mathcal{B}[\psi])_+ \leq (\psi, \psi)_+,$$

wobei das Gleichheitszeichen gilt, falls \mathcal{R} eine Deltadistribution ist oder bei allgemeinem \mathcal{R} die Funktion ψ konstant ist. Letztlich wollen wir noch ein **\mathcal{H} -Theorem** am Rand vorstellen, das in [16] wie folgt formuliert wird:

$$\int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \phi^+ \ln(\phi^+) d\mu \leq \int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \phi^- \ln(\phi^-) d\mu.$$

3 Hyperbolische Systeme von Erhaltungsgleichungen

In diesem Kapitel wollen wir die theoretischen Grundlagen hyperbolischer Systeme partieller Differentialgleichungen bereitstellen. Nach deren Definition klären wir den Begriff der starken oder klassischen Lösung eines mit solchen Systemen verbundenen Anfangswertproblems. Die Problematik, daß solche klassischen Lösungen im allgemeinen nicht existieren, führt uns auf den grundlegenden Begriff der schwachen Lösung oder der Lösung im distributionellen Sinne. Dieser verallgemeinerte Lösungsbegriff solcher Anfangswertprobleme läßt auch Unstetigkeiten der Lösungsfunktion zu, wenn sie gewisse Bedingungen, die sogenannten Rankine-Hugoniot-Bedingungen, auf den Unstetigkeitsoberflächen erfüllt. Über die Uneindeutigkeit schwacher Lösungen werden wir den Begriff der Entropiefunktion und der Entropielösung kennenlernen, die wir durch die Methode der verschwindenden Viskosität finden können. Und wir werden sehen, wann eine stückweise stetig differenzierbare Funktion eine Entropielösung ist. Schließlich werden wir uns mit Systemen mit konstanten Koeffizienten beschäftigen und den Begriff der charakteristischen Kurven bzw. Charakteristiken kennenlernen. Wir werden Randbedingungen für hyperbolische partielle Differentialgleichungen betrachten. Nach der Definition des mit diesen Gleichungen verbundenen Anfangsrandwertproblems (ARWP) und der Definition klassischer und schwacher Lösungen werden wir über die sogenannte Randentropiegleichung die Verbindung der Randwerte und der sich wieder aus der Methode der verschwindenden Viskosität ergebenden schwachen Lösung herstellen. Wir werden den Raum der möglichen Randzustände, die zu einem im Hadamard'schen Sinne gut gestellten Anfangsrandwertproblem führen, definieren, anschließend für Systeme mit konstanten Koeffizienten in einer Raumdimension die in diesem Raum befindlichen Randzustände berechnen und zu einer in diesem Fall sehr einfachen Darstellung der Randbedingung gelangen.

3.1 Definition und Notationen

Es sei $k, p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^k$ offen, dann bezeichnen

- $C^1(\mathcal{M}) = \{u : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} : u \text{ stetig differenzierbar} \}$ und
- $C_0^1(\mathcal{M}) = \{u : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} : u \in C^1(\mathcal{M}) \wedge \text{supp } u \subset \mathcal{M} \text{ ist kompakt} \}$.
- Ist \mathcal{M} zusätzlich Lebesgue-meßbar bzgl. Lebesgue-Maßes μ so ist

$$L^\infty(\mathcal{M}) = \left\{ u : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} : u \text{ } \mu\text{-meßbar} \wedge \|u\|_{L^\infty(\mathcal{M})} := \text{ess sup}_{\mathcal{M}} |u| < \infty \right\} \text{ und}$$

- $L_{\text{loc}}^\infty(\mathcal{M}) = \{u : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}^p : u \text{ } \mu\text{-meßbar} \wedge \|u\|_{L^\infty(\mathcal{K})} < \infty, \forall \mathcal{K} \subset \mathcal{M} \text{ kompakt} \}$.

Definition 3.1.1 (hyperbolisches System)

Sei $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, $d = 1, 2, 3$ und $\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ eine vektorwertige Funktion in $(C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$. Weiter seien

$$\mathbf{f}_l, \mathbf{q} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^p, \quad 1 \leq l \leq d \text{ in } (C^1(\mathcal{D}))^p.$$

Das System

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, x) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{f}_l(\mathbf{u}(t, x)) = \mathbf{q}(\mathbf{u}(t, x)) \tag{3.1}$$

heißt **hyperbolisch**, falls gilt:

$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{D}, \forall w \in \mathbb{R}^d : w \neq 0$ hat die Jacobimatrix

$$D(\mathbf{u}, w) = \sum_{l=1}^d w_l D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}), \quad D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}) = \left(\frac{\partial(\mathbf{f}_l)_i}{\partial u_k} \right)_{1 \leq i, k \leq p}$$

p reelle Eigenwerte $\lambda_i(\mathbf{u}, w)$, $i = 1, \dots, p$ und p zu ihnen gehörende linear unabhängige Eigenvektoren $r_i(\mathbf{u}, w)$, $i = 1, \dots, p$.

Sind die Eigenwerte zusätzlich verschieden, so heißt das System **strikt hyperbolisch**.

Die Funktionen \mathbf{f}_l , $1 \leq l \leq d$ heißen **Flußfunktionen**, die rechte Seite \mathbf{q} wird **Source- oder Quellterm** genannt.

Dieses System wird mit einer Anfangsbedingung der folgenden Form ergänzt

$$\mathbf{u}(0, x) = \mathbf{u}_0(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \mathbf{u}_0 : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}. \tag{3.2}$$

Definition 3.1.2 (klassische Lösung)

Es seien die Voraussetzungen von Definition 3.1.1 erfüllt. Weiter sei das System (3.1) hyperbolisch. Eine Funktion $\mathbf{u} \in (C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$, die für gegebenes $\mathbf{u}_0 : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ das Anfangswertproblem (3.1), (3.2) punktweise erfüllt, heißt **klassische Lösung**.

Eine grundlegende Eigenschaft dieses Anfangswertproblems ist, daß außerhalb eines kleinen Zeitintervalls im allgemeinen keine klassische Lösung existiert, auch wenn die Anfangsverteilung \mathbf{u}_0 eine sehr glatte Funktion darstellt. Dieser Sachverhalt kann sehr leicht am Beispiel der skalaren hyperbolischen Gleichung in einer Raumdimension gezeigt werden. Für Details sei auf [27] verwiesen.

3.2 Schwache Lösungen

Es seien die Voraussetzungen von Definition 3.1.1 erfüllt und $\phi \in (C_0^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$, dann gilt mit Hilfe des Greenschen Satzes:

$$\begin{aligned}
0 &= \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, x) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{f}_l(\mathbf{u}(t, x)) - \mathbf{q}(\mathbf{u}(t, x)), \phi \right\rangle dx dt \\
&= - \int_{\mathbb{R}^d} \langle \mathbf{u}(0, x), \phi(0, x) \rangle dx - \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle \mathbf{u}, \frac{\partial}{\partial t} \phi \right\rangle dx dt \\
&\quad - \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{l=1}^d \left\langle \mathbf{f}_l, \frac{\partial}{\partial x_l} \phi \right\rangle dx dt - \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \langle \mathbf{q}, \phi \rangle dx dt \\
&= \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left(\left\langle \mathbf{u}, \frac{\partial}{\partial t} \phi \right\rangle + \sum_{l=1}^d \left\langle \mathbf{f}_l, \frac{\partial}{\partial x_l} \phi \right\rangle + \langle \mathbf{q}, \phi \rangle \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} \langle \mathbf{u}(0, x), \phi(0, x) \rangle dx \\
&= \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left(\left\langle \mathbf{u}, \frac{\partial}{\partial t} \phi \right\rangle + \sum_{l=1}^d \left\langle \mathbf{f}_l, \frac{\partial}{\partial x_l} \phi \right\rangle + \langle \mathbf{q}, \phi \rangle \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} \langle \mathbf{u}_0(x), \phi(0, x) \rangle dx.
\end{aligned}$$

Die letzte Form ist aber auch für $\mathbf{u} \in (L_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$ sinnvoll. Wir definieren demnach:

Definition 3.2.1 (schwache Lösung)

Es seien die Voraussetzungen von Definition 3.1.1 erfüllt, jetzt sei aber

$$\mathbf{u} \in (L_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$$

und das System (3.1) sei hyperbolisch. Ist $\mathbf{u}(t, x) \in \mathcal{D}$ fast überall erfüllt und gilt für gegebenes $\mathbf{u}_0 \in (L_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}^d))^p$ und für alle Testfunktionen $\phi \in (C_0^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left(\left\langle \mathbf{u}, \frac{\partial}{\partial t} \phi \right\rangle + \sum_{l=1}^d \left\langle \mathbf{f}_l, \frac{\partial}{\partial x_l} \phi \right\rangle + \langle \mathbf{q}, \phi \rangle \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} \langle \mathbf{u}_0(x), \phi(0, x) \rangle dx = 0,$$

dann heißt \mathbf{u} **schwache Lösung** des Anfangswertproblems (3.1), (3.2).

Bemerkung 3.2.2 Jede klassische Lösung ist nach obiger Konstruktion auch eine schwache Lösung.

Definition 3.2.3 (stückweise C^1 -Funktionen)

Sei $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, $d = 1, 2, 3$. Eine vektorwertige Funktion $\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ heißt

stückweise C^1 , falls folgendes gilt:

Es existiert eine endliche Anzahl $n \in \mathbb{N}$ von glatten orientierbaren Oberflächen

$$\Sigma_i \subset \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, n$$

im $d + 1$ dimensionalen (t, x) -Raum mit Normalen $\nu_i = ((\nu_i)_t, (\nu_i)_{x_1}, \dots, (\nu_i)_{x_d})^T$, $i = 1, \dots, n$ und den Eigenschaften:

1. $\mathbf{u} \in \left(C^1 \left((\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d) \setminus \bigcup_{i=1}^n \Sigma_i \right) \right)^p$,

2. $\forall i = 1, \dots, n$ hat \mathbf{u} eine Sprungunstetigkeit, d. h.

$$\exists \mathbf{u}_i^\pm(x, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0, \varepsilon > 0} \mathbf{u}((t, x) \pm \varepsilon \nu_i).$$

Satz 3.2.4 (schwache Lösungen und stückweise C^1 -Funktionen)

Sei $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, $d = 1, 2, 3$ und $\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ eine vektorwertige stückweise C^1 -Funktion. Dann ist \mathbf{u} genau dann eine schwache Lösung des Anfangswertproblems (3.1), (3.2), wenn gilt:

1. \mathbf{u} ist eine klassische Lösung von (3.1) in $(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d) \setminus \bigcup_{i=1}^n \Sigma_i$ und erfüllt fast überall (3.2)

2. $\forall i = 1, \dots, n$ gilt auf der Unstetigkeitsoberfläche Σ_i die **Rankine-Hugoniot-Bedingung**:

$$(\mathbf{u}_i^+ - \mathbf{u}_i^-)(\nu_i)_t + \sum_{l=1}^d (\mathbf{f}_l(\mathbf{u}_i^+) - \mathbf{f}_l(\mathbf{u}_i^-)) (\nu_i)_{x_l} = \mathbf{0}. \quad (3.3)$$

Der Beweis findet sich in [27], (Seite 16,17).

Bemerkung 3.2.5 Schwache Lösungen sind im allgemeinen nicht eindeutig.

Dies kann leicht am Beispiel der Burger-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} (u(t, x))^2 \right) = 0 \quad (3.4)$$

nachgeprüft werden. Setzen wir die Anfangsbedingung

$$u_0 = \begin{cases} u_l & x < 0 \\ u_r & x > 0 \end{cases}, \quad u_l \neq u_r,$$

erhalten wir eine schwache Lösung, wenn wir die Unstetigkeit sich mit einer Geschwindigkeit $s = \frac{1}{2}(u_l + u_r)$ ausbreiten lassen. Dies ergibt dann

$$u(t, x) = \begin{cases} u_l, & x < st \\ u_r, & x > st \end{cases} .$$

Eine einparametrische Familie von schwachen Lösungen, die die Rankine-Hugoniot-Bedingung erfüllen, ist in der folgenden Form gegeben: Sei $a \geq \max(u_l, -u_r)$ konstant, $s_1 = \frac{u_l - a}{2}$ und $s_2 = \frac{u_r + a}{2}$, dann ist

$$u(t, x) = \begin{cases} u_l, & x < s_1 t \\ -a, & s_1 t < x < 0 \\ a, & 0 < x < s_2 t \\ u_r, & x > s_2 t \end{cases}$$

eine schwache Lösung der Burger-Gleichung (3.4).

3.3 Entropiefunktionen

Betrachten wir nun die zusätzliche Erhaltungsgleichung für eine klassische Lösung \mathbf{u} von (3.1) der folgenden Form:

Für

$$U, F_l : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R} \in C^1(\mathcal{D}), \quad 1 \leq l \leq d, \quad d = 1, 2, 3$$

gelte

$$\frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{u}) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} F_l(\mathbf{u}) = \langle DU(\mathbf{u}), \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle . \tag{3.5}$$

Dies ist erfüllt, falls

$$DU^T(\mathbf{u}) D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}) = DF_l^T(\mathbf{u}), \quad 1 \leq l \leq d \tag{3.6}$$

gilt, wobei

$$DU = \left(\frac{\partial}{\partial u_i} U \right)_{1 \leq i \leq p}, \quad DF_l = \left(\frac{\partial}{\partial u_i} F_l \right)_{1 \leq i \leq p} \quad \text{und} \quad D\mathbf{f}_l = \left(\frac{\partial (\mathbf{f}_l)_i}{\partial u_k} \right)_{1 \leq i, k \leq p}$$

die ersten Ableitungen der jeweiligen Funktionen bezeichnen. Denn nehmen wir an, daß \mathbf{u} eine klassische Lösung von (3.1) ist und führen wir die Differentiation aus, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{u}) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} F_l(\mathbf{u}) &= \\ \left\langle DU(\mathbf{u}), \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} \right\rangle + \sum_{l=1}^d \left\langle DF_l(\mathbf{u}), \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u} \right\rangle &= \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left\langle DU(\mathbf{u}), \left(- \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{f}_l(\mathbf{u}) + \mathbf{q}(\mathbf{u}) \right) \right\rangle + \sum_{l=1}^d \left\langle DF_l(\mathbf{u}), \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u} \right\rangle = \\
& \left\langle DU(\mathbf{u}), \left(- \sum_{l=1}^d DF_l(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u} + \mathbf{q}(\mathbf{u}) \right) \right\rangle + \sum_{l=1}^d \left\langle DF_l(\mathbf{u}), \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u} \right\rangle = \\
& \langle DU, \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle + \left\langle \left(- \sum_{l=1}^d (DU^T(\mathbf{u}) D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}))^T + \sum_{l=1}^d DF_l(\mathbf{u}) \right), \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u} \right\rangle = \\
& \langle DU, \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle + \left\langle \sum_{l=1}^d \underbrace{\left(DF_l(\mathbf{u}) - (DU^T(\mathbf{u}) D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}))^T \right)}_0, \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u} \right\rangle = \\
& \qquad \qquad \qquad \langle DU(\mathbf{u}), \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle.
\end{aligned}$$

Dies führt zu der folgenden Definition:

Definition 3.3.1 (Entropiefunktion)

Sei $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$, $p \in \mathbb{N}$ offen, $d = 1, 2, 3$ und $\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ eine klassische Lösung von (3.1). Eine Funktion $U : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$, $U \in C^1(\mathcal{D})$ heißt Entropiefunktion des Systems von Erhaltungsgleichungen (3.1), falls Entropieflüsse

$$F_l : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}, F_l \in C^1(\mathcal{D}), 1 \leq l \leq d,$$

existieren, so daß die folgende Gleichung gilt:

$$DU^T(\mathbf{u}) D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}) = DF_l^T(\mathbf{u}), 1 \leq l \leq d.$$

Bemerkung 3.3.2

- Falls die Gleichung (3.6) gilt, erfüllt jede klassische Lösung die Gleichung (3.5).
- Für schwache Lösungen gilt dies im allgemeinen nicht. Eine stückweise C^1 -Funktion, die eine schwache Lösung ist, muß $\forall i = 1, \dots, n$ auf der Unstetigkeitsoberfläche Σ_i die Rankine-Hugoniot-Bedingung (3.3) erfüllen. Eine Lösung von (3.5) hingegen muß $\forall i = 1, \dots, n$ auf der Unstetigkeitsoberfläche Σ_i eine analoge Sprungbedingung der Form

$$(U(\mathbf{u}_i^+) - U(\mathbf{u}_i^-))(\nu_i)_t + \sum_{l=1}^d (F_l(\mathbf{u}_i^+) - F_l(\mathbf{u}_i^-)) (\nu_i)_{x_l} = 0 \quad (3.7)$$

erfüllen. Diese ist aber im allgemeinen nicht mit der Rankine-Hugoniot-Bedingung vereinbar. Dies kann durch Ersetzen der Gleichung (3.7) durch eine Ungleichung der Form

$$(U(\mathbf{u}_i^+) - U(\mathbf{u}_i^-))(\nu_i)_t + \sum_{l=1}^d (F_l(\mathbf{u}_i^+) - F_l(\mathbf{u}_i^-)) (\nu_i)_{x_l} \leq 0$$

behooben werden.

- Im skalaren Fall ($p = 1$) ist jede konvexe Funktion $U \in C^2(\mathcal{D})$ eine Entropiefunktion.

3.4 Die Methode der verschwindenden Viskosität

Es sei $m, k, p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^k$ offen und $\mathcal{N} \subset \mathbb{R}^m$ offen, dann bezeichne $(C^{1,2}(\mathcal{M} \times \mathcal{N}))^p$ den Raum der Funktionen, die bzgl. der ersten Variablen aus \mathcal{M} einmal und bzgl. der zweiten Variablen aus \mathcal{N} zweimal stetig differenzierbar sind mit Werten in \mathbb{R}^p .

Definition 3.4.1 (klassische Lösung des viskosen AWP)

Sei $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, $d = 1, 2, 3$, $\varepsilon > 0$ ein Parameter und $\mathbf{u}_\varepsilon : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ eine vektorwertige Funktion in $(C^{1,2}(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p$,

$$\mathbf{f}_l, \mathbf{q} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^p \in (C^1(\mathcal{D}))^p, \quad 1 \leq l \leq d$$

und das zugehörige System (3.1) hyperbolisch. Erfüllt \mathbf{u}_ε punktweise für gegebenes $\mathbf{u}_{0\varepsilon} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ das sich durch Erweiterung um einen Viskositätsterm $-\varepsilon\Delta\mathbf{u}_\varepsilon$ aus (3.1) ergebende parabolische Anfangswertproblem

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u}_\varepsilon + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l}\mathbf{f}_l(\mathbf{u}_\varepsilon) - \varepsilon\Delta\mathbf{u}_\varepsilon = \mathbf{q}(\mathbf{u}_\varepsilon) & x \in \mathbb{R}^d, t > 0 \\ \mathbf{u}_\varepsilon(0, x) = \mathbf{u}_{0\varepsilon}(x) & x \in \mathbb{R}^d, t = 0 \end{cases},$$

dann heißt \mathbf{u}_ε klassische Lösung des sich aus (3.1) ergebenden viskosen Anfangswertproblems zum Parameter ε .

Satz 3.4.2 (Methode der verschwindenden Viskosität)

Sei $d = 1, 2, 3$ und das System (3.1) hyperbolisch. Weiter besitze das System (3.1) eine konvexe Entropiefunktion $U : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R} \in C^2(\mathcal{D})$ mit Entropieflüssen

$F_l : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq l \leq d$. Für jedes $\varepsilon > 0$ sei \mathbf{u}_ε eine klassische Lösung des sich aus (3.1) ergebenden viskosen Anfangswertproblems zum Parameter ε , und diese Familie von Lösungen erfülle

$$\mathbf{u}_\varepsilon(0, x) = \mathbf{u}_{0\varepsilon}(x) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{u}_0(x)$$

regulär. Gilt

$$\|\mathbf{u}_\varepsilon\|_{(L^\infty(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d))^p} \leq C$$

und

$$\mathbf{u}_\varepsilon \rightarrow \mathbf{u} \text{ für } \varepsilon \rightarrow 0 \text{ f. ü. in } \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d$$

mit einer von ε unabhängigen konstanten $C > 0$, dann ist \mathbf{u}_ε eine schwache Lösung von (3.1) und erfüllt die Entropiebedingung

$$\frac{\partial}{\partial t}U(\mathbf{u}) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l}F_l(\mathbf{u}) \leq \langle DU(\mathbf{u}), \mathbf{q} \rangle$$

im distributionellen Sinne auf $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d$. Das heißt, es gilt:

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left(U(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial t} \phi + \sum_{l=1}^d F_l(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x_l} \phi + \langle DU(\mathbf{u}), \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle \phi \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} U(\mathbf{u}_0(x)) \phi(0, x) dx \geq 0,$$

$$\forall \phi \in C_0^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d), \phi \geq 0.$$

Der Beweis lässt sich auch hier analog zum Beweis in [27], (Seite 28), für Systeme ohne Sourceterm \mathbf{q} durchführen, wobei die auf Sourceterme verallgemeinerten Definitionen der klassischen und schwachen Lösungen verwendet werden.

Bemerkung 3.4.3

Für die Existenz solcher ausreichend glatter Lösungen (\mathbf{u}_ε) , $\varepsilon > 0$ sei auf [25] und [28] verwiesen.

Dies führt zu folgender Definition:

Definition 3.4.4 (Entropielösung)

Eine schwache Lösung \mathbf{u} von (3.1), (3.2) heißt Entropielösung, wenn \mathbf{u} für alle Entropiefunktionen von (3.1) und für alle Testfunktionen $\phi \in C_0^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$, $\phi \geq 0$ die folgende Ungleichung erfüllt:

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left(U(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \phi + \sum_{l=1}^d F_l(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial}{\partial x_l} \phi + \langle DU(\mathbf{u}), \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle \phi \right) dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} U(\mathbf{u}_0(x)) \phi(0, x) dx \geq 0.$$

Satz 3.4.5 (Entropielösung und stückweise C^1 -Funktionen)

Sei $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, $d = 1, 2, 3$ und $\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{D}$ eine vektorwertige stückweise C^1 -Funktion. Dann ist \mathbf{u} genau dann eine Entropielösung des Anfangswertproblems (3.1), (3.2), wenn gilt:

1. \mathbf{u} ist eine klassische Lösung von (3.1) in $(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d) \setminus \bigcup_{i=1}^n \Sigma_i$, wenn

$$\Sigma_i \subset \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, n, n \in \mathbb{N}$$

die zu \mathbf{u} gehörenden glatten orientierbaren Unstetigkeitsoberflächen bezeichnen und erfüllt fast überall (3.2).

2. $\forall i = 1, \dots, n$ gilt auf der Unstetigkeitsoberfläche Σ_i die **Rankine-Hugoniot-Bedingung**:

$$(\mathbf{u}_i^+ - \mathbf{u}_i^-)(\nu_i)_t + \sum_{l=1}^d (\mathbf{f}_l(\mathbf{u}_i^+) - \mathbf{f}_l(\mathbf{u}_i^-)) (\nu_i)_{x_l} = \mathbf{0}.$$

3. $\forall i = 1, \dots, n$ gilt auf der Unstetigkeitsoberfläche Σ_i die **Sprungbedingung**:

$$(U(\mathbf{u}_i^+) - U(\mathbf{u}_i^-))(\nu_i)_t + \sum_{l=1}^d (F_l(\mathbf{u}_i^+) - F_l(\mathbf{u}_i^-)) (\nu_i)_{x_l} \leq 0$$

für alle Entropiefunktionen von (3.1).

Die gleiche Argumentation wie im Beweis zum Satz (3.2.4), der sich in [27], (Seite 16,17) findet, wobei auch hier die um Sourceterme erweiterten Definitionen von klassischen, schwachen und Entropielösungen genutzt werden müssen, führt hier ebenfalls zum Ziel.

3.5 Hyperbolische Systeme mit konstanten Koeffizienten in 1D

Wir betrachten ein hyperbolisches System mit $d = 1$, $\mathbf{f} = \mathbf{A}$, wobei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ eine konstante Matrix ist, und $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Das heißt (3.1), (3.2) hat die Gestalt

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, x) + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{u}(t, x) = \mathbf{0} & t > 0, \forall x \in \mathbb{R} \\ \mathbf{u}(0, x) = \mathbf{u}_0(x) & \forall x \in \mathbb{R} \end{cases}. \quad (3.8)$$

Wir nehmen an, daß das System strikt hyperbolisch ist, d. h. \mathbf{A} hat p verschiedene reelle Eigenwerte

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_p.$$

Dann ist \mathbf{A} diagonalisierbar und es gibt p rechte Eigenvektoren

$$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_p$$

mit

$$\mathbf{A} \mathbf{r}_k = \lambda_k \mathbf{r}_k, \quad 1 \leq k \leq p$$

bzw. linke Eigenvektoren

$$\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2, \dots, \mathbf{l}_p$$

mit

$$\mathbf{l}_i^T \mathbf{A} = \lambda_i \mathbf{l}_i^T, \quad 1 \leq i \leq p.$$

Bezeichnen wir nun mit $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_p)$ die Matrix mit den rechten Eigenvektoren als Spaltenvektoren, so gilt für die Jacobimatrix

$$Df = \mathbf{A} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R} = \mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p),$$

wobei bekannterweise $\mathbf{R}^{-1} = (\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2 \dots \mathbf{l}_p)^T$ gilt. Da die Eigenwerte verschieden sind, bilden die $\{\mathbf{r}_i\}_{1 \leq i \leq p}$ eine Basis von \mathbb{R}^p und es gilt mit einer geeigneten Normierung und der Verwendung des Kronecker-Symbols $\mathbf{l}_i^T \mathbf{r}_k = \delta_{ik}$, $1 \leq i, k \leq p$. Setzen wir nun

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^p w_i \mathbf{r}_i, \quad w_i = \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}, \quad 1 \leq i \leq p,$$

so ergibt sich mit $\mathbf{w} = (w_i)_{1 \leq i \leq p} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{u}$ und $\mathbf{A} = \mathbf{R} \mathbf{\Lambda} \mathbf{R}^{-1}$ durch

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{u} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{w} = 0$$

ein entkoppeltes System, so daß wir eine explizite Darstellung der Lösung des Anfangswertproblems (3.8) herleiten können. Setzen wir $(\mathbf{w}_0)_i = \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}_0$, $1 \leq i \leq p$, so erhalten wir aus dem entkoppelten System

$$\mathbf{w}_i(t, x) = w_i(t, x) = (\mathbf{w}_0)_i (x - \lambda_i t) = \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}_0 (x - \lambda_i t), \quad 1 \leq i \leq p,$$

und somit ist die Lösung gegeben durch

$$\mathbf{u}(t, x) = \sum_{i=1}^p w_i(t, x) \mathbf{r}_i = \sum_{i=1}^p \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}_0 (x - \lambda_i t) \mathbf{r}_i.$$

Die Entropiefunktionen in diesem Fall liefert der folgende Satz:

Satz 3.5.1 *Für ein lineares strikt hyperbolisches System in 1D, d.h. $f(\mathbf{u}) = \mathbf{A} \mathbf{u}$ mit einer konstanten $(p \times p)$ -Matrix \mathbf{A} mit reellen verschiedenen Eigenwerten*

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m \leq 0 < \lambda_{m+1} < \dots < \lambda_p,$$

haben alle konvexen Entropiefunktionen bzw. deren Entropieflüsse die Form

$$U = \sum_{j=1}^p \phi_j(\alpha_j(\mathbf{u})), \quad F = F_0 + \sum_{j=1}^p \lambda_j \phi_j(\alpha_j(\mathbf{u}))$$

wobei \mathbf{u} die Zerlegung $\mathbf{u} = \sum_{j=1}^p \alpha_j(\mathbf{u}) \mathbf{r}_j$, $\alpha_j(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}$ besitzt, $F_0 \in \mathbb{R}$ eine Konstante ist und die ϕ_j , $1 \leq j \leq p$ beliebige konvexe Funktionen in $C^2(\mathbb{R})$ mit Werten in \mathbb{R} darstellen.

Der Beweis dieses Satzes ist in [18] zu finden.

3.6 Charakteristische Kurven

Definition 3.6.1 (Charakteristische Kurven im 1D-skalaren Fall)

Die charakteristischen Kurven einer hyperbolischen Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}u(t, x) + \frac{\partial}{\partial x}f(u(t, x)) = 0, \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (3.9)$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (3.10)$$

sind die Lösungen der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}x(t) = f'(t, u(x(t))),$$

wenn f' die Ableitung der Flußfunktion f und u eine klassische Lösung von (3.9) bezeichnet.

Satz 3.6.2 (Gestalt der Charakteristiken)

Es sei u eine klassische Lösung von (3.9), (3.10). Dann sind die charakteristischen Kurven von (3.9) Geraden in der (t, x) -Ebene, entlang derer u konstant ist.

Der Beweis dieses Satzes wird in [27], Seite 12f gegeben.

Im Falle von hyperbolischen Systemen mit konstanten Koeffizienten (3.8) hängt die Lösung

$$\mathbf{u}(t, x) = \sum_{i=1}^p w_i(t, x) \mathbf{r}_i = \sum_{i=1}^p \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}_0(x - \lambda_i t) \mathbf{r}_i$$

nur von den Anfangsdaten \mathbf{u}_0 in den p Punkten $x - \lambda_i t$, $1 \leq i \leq p$ ab. $\forall i = 1, \dots, p$ erfüllt die Gerade $x(t) = x_0 + \lambda_i t$ dabei

$$\frac{d}{dt}x(t) = \lambda_i = (D\mathbf{f}(\mathbf{w}(t, x(t))))_i,$$

wenn wir die i -te Gleichung des entkoppelten Systems

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{w} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{w} = 0$$

in den charakteristischen Variablen $\mathbf{w} = (w_i)_{1 \leq i \leq p} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}$ betrachten. Diese lautet dann

$$\frac{\partial}{\partial t}w_i + \lambda_i \frac{\partial}{\partial x}w_i = 0,$$

und es gilt $(\mathbf{f}(\mathbf{w}))_i = \lambda_i w_i$. Diese Kurven sind demnach jeweils die charakteristische Kurve der i -ten Gleichung des entkoppelten Systems. Dies führt zu der folgenden Definition:

Definition 3.6.3 (i-te Charakteristik)

Für $1 \leq i \leq p$ wird die Kurve $x(t) = x_0 + \lambda_i t$, mit λ_i i -ter Eigenwert der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ des strikt hyperbolischen Systems mit konstanten Koeffizienten in 1D (3.8), i -te Charakteristik genannt.

Auch hier gilt:

Satz 3.6.4

Es sei \mathbf{w} eine klassische Lösung des entkoppelten Systems (3.8). Dann sind die i -ten charakteristischen Kurven, $1 \leq i \leq p$, von (3.8) Geraden in der (t, x) -Ebene, entlang derer die Komponente w_i der charakteristischen Variablen konstant ist.

Diese Aussage ist eine direkte Folgerung aus Satz 3.6.2 und Definition 3.6.3.

Bemerkung 3.6.5

- Im Falle eines strikt hyperbolischen Systems verlaufen durch jeden Punkt der (t, x) -Ebene p verschiedene charakteristische Kurven.
- Die i -ten charakteristischen Kurven spielen eine wichtige Rolle bei der Formulierung von Randbedingungen für hyperbolische partielle Differentialgleichungen. Diesen Sachverhalt werden wir im nächsten Kapitel näher untersuchen.

3.7 Randbedingungen für hyperbolische Systeme in 1D

Definition 3.7.1 (klassische Lösung des homogenen viskosen ARWP in 1D)

Sei $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, $\varepsilon > 0$ ein Parameter, $\mathbf{u}_\varepsilon : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathcal{D}$ eine vektorwertige Funktion in $(C^{1,2}(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}_0^+))^p$, $\mathbf{f} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^p \in (C^1(\mathcal{D}))^p$, $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ und das zugehörige System (3.1) hyperbolisch. Erfüllt \mathbf{u}_ε punktweise für gegebenes

$$\mathbf{u}_{0\varepsilon} : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathcal{D},$$

das sich durch Erweiterung um einen Viskositätsterm

$$-\varepsilon \Delta \mathbf{u}_\varepsilon$$

aus (3.1) ergebende parabolische Anfangsrandwertproblem

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_\varepsilon + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}_\varepsilon) - \varepsilon \Delta \mathbf{u}_\varepsilon = \mathbf{0} & x > 0, t > 0 \\ \mathbf{u}_\varepsilon(0, x) = \mathbf{u}_{0\varepsilon}(x) & x > 0, t = 0 \\ \mathbf{u}_\varepsilon(t, 0) = \mathbf{g}_{0\varepsilon}(t) & t > 0 \end{array} \right. , \quad (3.11)$$

dann heißt \mathbf{u}_ε klassische Lösung des sich aus (3.1) ergebenden viskosen Anfangsrandwertproblems zum Parameter ε .

Die Verbindung zu dem nichtviskosen Anfangsrandwertproblem wird auch hier durch die Methode der verschwindenden Viskosität hergestellt.

Satz 3.7.2

Es sei $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, $d = 1$ und das System (3.1) hyperbolisch. Weiter besitze das System (3.1) eine konvexe Entropiefunktion $U \in C^2(\mathcal{D})$ mit Entropiefluß $F : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$. Für jedes $\varepsilon > 0$ sei \mathbf{u}_ε eine klassische Lösung des sich aus (3.1) ergebenden viskosen Anfangsrandwertproblems zum Parameter ε , und diese Familie von Lösungen erfülle

$$\mathbf{u}_\varepsilon(0, x) = \mathbf{u}_{0\varepsilon}(x) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{u}_0(x)$$

und

$$\mathbf{u}_\varepsilon(t, 0) = \mathbf{g}_{0\varepsilon}(t) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{g}_0(t)$$

regulär. Gilt

$$\|\mathbf{u}_\varepsilon\|_{(\mathcal{W}_{\text{loc}}^{1,1}(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+))^p} \leq C$$

mit einer von ε unabhängigen konstanten $C > 0$ und

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\mathbf{u}_\varepsilon - \mathbf{u}\|_{(L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+))^p} = 0,$$

dann ist \mathbf{u} eine schwache Lösung von

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, & x > 0, t > 0 \\ \mathbf{u}(0, x) = \mathbf{u}_0(x), & x > 0, t = 0 \end{cases}. \quad (3.12)$$

D.h. es gilt

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \left\langle \mathbf{u}, \frac{\partial}{\partial t} \phi \right\rangle + \left\langle \mathbf{f}, \frac{\partial}{\partial x} \phi \right\rangle dx dt + \int_0^\infty \langle \mathbf{u}_0(x), \phi(0, x) \rangle dx = 0,$$

$$\forall \phi \in (C_0^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^+))^p.$$

Weiter erfüllt \mathbf{u} die Entropiebedingung

$$\frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial x} F(\mathbf{u}) \leq 0$$

im distributionellen Sinne auf $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^+$. D.h. es gilt

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \left(U(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial t} \phi + F(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x_l} \phi \right) dx dt + \int_0^\infty U(\mathbf{u}_0(x)) \phi(0, x) dx \geq 0,$$

$$\forall \phi \in C_0^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^+), \phi \geq 0.$$

Diese Entropielösung erfüllt entlang von Unstetigkeitskurven in $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^+$ die dazugehörige Rankine-Hugoniot-Bedingung (3.3).

Der Beweis dieses Satzes ist in den Arbeiten [35],[38] und [59] zu finden.

Die Verbindung zwischen dem Randwert $\mathbf{u}(0^+, t)$ der schwachen Lösung \mathbf{u} von (3.12) aus Satz 3.7.2 und dem Randwert $\mathbf{g}_0(t)$ zeigt der folgende Satz:

Satz 3.7.3 (Randentropieungleichung in 1D)

Für jedes $t > 0$ ist der Randwert $\mathbf{u}(t, 0^+)$ der Grenzfunktion \mathbf{u} aus

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\mathbf{u}_\varepsilon - \mathbf{u}\|_{(L^1_{loc}(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+))^p} = 0$$

in Satz 3.7.2 mit dem Randwert $\mathbf{g}_0(t)$ durch die Randentropieungleichung

$$U(\mathbf{u}(t, 0^+)) - U(\mathbf{g}_0(t)) - DF(\mathbf{g}_0(t)) (f(\mathbf{u}(t, 0^+)) - f(\mathbf{g}_0(t))) \leq 0 \quad (3.13)$$

für alle Entropiefunktionen U mit jeweiligem Entropiefluß F von (3.1) verbunden.

Der Satz wird in (Ref.[18]) bewiesen.

Wir können demnach für die schwache Lösung \mathbf{u} von (3.12) aus Satz 3.7.2 am Rand nur solche Werte zulassen, die die Randentropieungleichung (3.13) für alle Entropiefunktionen U mit jeweiligem Entropiefluß F von (3.1) erfüllen. Dies führt auf die folgende Definition:

Definition 3.7.4 (Menge der möglichen Werte am Rand)

Für jeden Zustand \mathbf{g} in $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$, $p \in \mathbb{N}$ sei die Menge $\mathcal{E}(\mathbf{g})$ der möglichen Werte am Rand definiert als die Zustände \mathbf{u} in \mathcal{D} , für die

$$U(\mathbf{u}) - U(\mathbf{g}) - DF(\mathbf{g}) (f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{g})) \leq 0$$

für alle Entropiefunktionen U mit jeweiligem Entropiefluß F von (3.1) gilt.

So können wir die Randbedingung durch $\mathbf{u}(t, 0^+) \in \mathcal{E}(\mathbf{g}_0(t))$ ersetzen. Im Falle eines Intervalls, d.h. $x \in (0, 1)$, ergeben sich die Randbedingungen in $x = 1$ analog zu $\mathbf{u}(1^-, t) \in \mathcal{E}(\mathbf{g}_1(t))$. Ein gut gestelltes Anfangsrandwertproblem in 1D hat somit die Gestalt

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}(t, x)) & = \mathbf{0} \quad 0 < x < 1, t > 0 \\ \mathbf{u}(0, x) & = \mathbf{u}_0(x) \quad 0 < x < 1, t = 0 \\ \mathbf{u}(t, 0^+) & \in \mathcal{E}(\mathbf{g}_0(t)) \\ \mathbf{u}(t, 1^-) & \in \mathcal{E}(\mathbf{g}_1(t)) \end{array} \right. ,$$

für beliebige Zustände $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2 \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$, $p \in \mathbb{N}$ und den dazugehörigen Randentropieungleichungen

$$U(\mathbf{u}(t, 0^+)) - U(\mathbf{g}_0(t)) - DF(\mathbf{g}_0(t)) (f(\mathbf{u}(t, 0^+)) - f(\mathbf{g}_0(t))) \leq 0$$

bzw.

$$U(\mathbf{u}(t, 1^-)) - U(\mathbf{g}_1(t)) - DF(\mathbf{g}_1(t)) (f(\mathbf{u}(t, 1^-)) - f(\mathbf{g}_1(t))) \leq 0$$

für alle Entropiefunktionen U mit jeweiligem Entropiefluß F von (3.1).

3.8 Randbedingungen für lineare Systeme mit konstanten Koeffizienten in 1D

Der folgende Satz liefert in diesem Falle den bekannten Sachverhalt, daß Randbedingungen nur für die in das Gebiet hineingehenden Charakteristiken vorgeschrieben werden können.

Satz 3.8.1 *Wir betrachten ein lineares strikt hyperbolisches System in 1D auf dem Intervall $[0, 1]$, d.h. $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{A}\mathbf{u}$ mit einer konstanten $(p \times p)$ -Matrix \mathbf{A} . Die reellen verschiedenen Eigenwerte von \mathbf{A} seien durch*

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m \leq 0 < \lambda_{m+1} < \dots < \lambda_p$$

gegeben. Dann ist $\mathcal{E}(\mathbf{g}_0(t))$ durch den affinen Raum, der $\mathbf{g}_0(t)$ enthält und von den ersten m Eigenvektoren zu den nichtpositiven Eigenwerten aufgespannt wird, gegeben. D.h. es gilt

$$\mathcal{E}(\mathbf{g}_0(t)) = \left\{ \mathbf{g}_0(t) + \sum_{j=1}^m \alpha_j \mathbf{r}_j, \alpha_j \in \mathbb{R}, 1 \leq j \leq m \right\}.$$

Analog ist $\mathcal{E}(\mathbf{g}_1(t))$ durch den affinen Raum, der $\mathbf{g}_1(t)$ enthält und von den letzten $p - m$ Eigenvektoren zu den positiven Eigenwerten aufgespannt wird, gegeben. D.h. es gilt

$$\mathcal{E}(\mathbf{g}_1(t)) = \left\{ \mathbf{g}_1(t) + \sum_{j=m+1}^p \alpha_j \mathbf{r}_j, \alpha_j \in \mathbb{R}, m+1 \leq j \leq p \right\}.$$

Zum Beweis dieses Satzes sei auf [18] verwiesen.

Einen anderen Zugang liefert die Betrachtung des entkoppelten Systems in den charakteristischen Variablen $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_p)^T$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{w} = \mathbf{0}.$$

Wir sortieren durch

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda}^+ & 0 \\ 0 & \mathbf{\Lambda}^- \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}^- &= \text{diag} \{ \lambda_1, \dots, \lambda_m, \lambda_i \leq 0, i = 1, \dots, m \}, \\ \mathbf{\Lambda}^+ &= \text{diag} \{ \lambda_{m+1}, \dots, \lambda_p, \lambda_i > 0, i = m+1, \dots, p \} \end{aligned}$$

und

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}^+ \\ \mathbf{w}^- \end{pmatrix}$$

um, wobei \mathbf{w}^\pm die charakteristischen Variablen zu den positiven bzw. nichtpositiven Eigenwerten bezeichnen. Die Randbedingung ist dann nach [27], Seite 423ff, in der folgenden Form gegeben:

$$\begin{cases} \mathbf{w}^+(t, 0) = \mathbf{B}^+ \mathbf{w}^-(0, t) + \mathbf{g}^+(t) \\ \mathbf{w}^-(t, 1) = \mathbf{B}^- \mathbf{w}^+(1, t) + \mathbf{g}^-(t) \end{cases}, \quad (3.14)$$

wobei $\mathbf{B}^+ \in \mathbb{R}^{((p-m) \times m)}$ und $\mathbf{B}^- \in \mathbb{R}^{(m \times (p-m))}$ gilt. Setzen wir $(\mathbf{w}^-)_i = \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}$, $1 \leq i \leq m$, $(\mathbf{w}^+)_i = \mathbf{l}_i^T \mathbf{u}$, $m+1 \leq i \leq p$, $\mathbf{R}^- = (\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_m)$ und $\mathbf{R}^+ = (\mathbf{r}_{m+1} \dots \mathbf{r}_p)$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^-(1, t) &= \mathbf{B}^- \mathbf{w}^+(1, t) + \mathbf{g}^-(t) \\ \Leftrightarrow \mathbf{R}^- \mathbf{w}^-(1, t) &= \mathbf{R}^- \mathbf{B}^- \mathbf{w}^+(1, t) + \mathbf{R}^- \mathbf{g}^-(t) \\ \Leftrightarrow \mathbf{R}^- \mathbf{w}^-(1, t) + \mathbf{R}^+ \mathbf{w}^+(1, t) &= \mathbf{R}^- \mathbf{B}^- \mathbf{w}^+(1, t) + \mathbf{R}^- \mathbf{g}^-(t) + \mathbf{R}^+ \mathbf{w}^+(1, t) \\ \Leftrightarrow \mathbf{u} &= \mathbf{R}^- \mathbf{B}^- \mathbf{w}^+(1, t) + \mathbf{R}^- \mathbf{g}^-(t) + \mathbf{R}^+ \mathbf{w}^+(1, t) \\ \mathbf{u} &= \mathbf{g}_1(t) + \mathbf{R}^+ \mathbf{w}^+(1, t) \\ \mathbf{u} &= \mathbf{g}_1(t) + \sum_{j=m+1}^p \alpha_j \mathbf{r}_j, \quad \alpha_j = (\mathbf{w}^+)_j, \end{aligned}$$

und somit gilt:

$$\mathbf{u}(t, 1) \in \mathcal{E}(\mathbf{g}_1(t)), \quad \mathbf{g}_1(t) = \mathbf{R}^- \mathbf{B}^- \mathbf{w}^+(1, t) + \mathbf{R}^- \mathbf{g}^-(t)$$

bzw. analog

$$\mathbf{u}(t, 0) \in \mathcal{E}(\mathbf{g}_0(t)), \quad \mathbf{g}_0(t) = \mathbf{R}^+ \mathbf{B}^+ \mathbf{w}^-(t, 0) + \mathbf{R}^+ \mathbf{g}^+(t).$$

Bemerkung 3.8.2

Die Behandlung von Randbedingungen im Falle eines linearen hyperbolischen Systems in zwei Raumdimensionen ist sehr viel komplexer. Deren Analyse erfolgt über die sogenannten "normal modes". Diese sind Elementarwellen

$$\mathbf{u}(t, x_1, x_2) = \phi(x_1) e^{i\eta x_2 - st}, \quad \eta \in \mathbb{R}, \quad s \in \mathbb{C}, \quad \mathbf{i}^2 = -1,$$

die durch Anwendung einer Fourier-Transformation in x_2 und einer Laplace-Transformation in t ($\operatorname{Re}(s) < 0$) auf das betrachtete hyperbolische System eingeführt werden. Diese Betrachtungen führen letztlich auf die „uniform Kreiss condition“ als notwendige und hinreichende Bedingung dafür, daß das Problem im Hadamard'schen Sinne korrekt gestellt ist. Eine kurze Darstellung der Konzepte und Ideen finden sich in [27]. Für eine ausführliche Darstellung sei auf [31] und [41] verwiesen.

4 Verbindung zwischen der Boltzmann-Gleichung und hyperbolischen Systemen

In diesem Kapitel zeigen wir, wie durch die Geschwindigkeitsraumdiskretisierung der Boltzmann-Gleichung ein hochdimensionales hyperbolisches System partieller Differentialgleichungen entsteht. Wir diskretisieren auch die Randbedingung für die Boltzmann-Gleichung und zeigen, daß sie in 1D die aus der Theorie der hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen geforderte Struktur einer Randbedingung aufweist. Schließlich geben wir noch eine Entropiefunktion, die auf dem Boltzmannschen H-Funktional basiert, und den dazugehörigen Entropiefluß für dieses System an.

4.1 Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes

Zur numerischen Lösung der Boltzmann-Gleichung wählen wir zunächst eine Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes. Die Verteilungsfunktion

$$f : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \times \mathbb{R}_v^3 \rightarrow \mathbb{R}_0^+, \quad (t, x, v) \rightarrow f(t, x, v),$$

wobei $\Omega \subset \mathbb{R}_x^d$, $d = 1, 2, 3$ ein beschränktes Gebiet bezeichnet, dessen Rand so beschaffen ist, daß in jedem Punkt $x \in \partial\Omega$ eine eindeutige, in das Innere von Ω gerichtete Normale $\nu(x) \in \mathbb{R}_x^d$, $d = 1, 2, 3$ existiert, hat im allgemeinen keinen kompakten Träger, ist aber gewöhnlich außerhalb einer Kugel

$$B_L(V) = \{v \in \mathbb{R}^3 : |v - V| \leq L\}$$

vernachlässigbar klein. Zur numerischen Behandlung wollen wir daher annehmen, daß

$$\text{supp } f(t, x, \cdot) = B_L(V), \quad t \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}^3,$$

$$V = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} V_0(x) dx, \quad V_0(x) = \int_{\mathbb{R}^3} v f_0(x, v) dv \left(\int_{\mathbb{R}^3} f_0(x, v) dv \right)^{-1}$$

gilt. Wir können uns dann bei Integrationen über den Geschwindigkeitsraum auf die Kugel $B_L(V)$ beschränken. Es ist allerdings von großem Vorteil den Würfel

$$C_L(V) = \{v \in \mathbb{R}^3 : |v_j - V_j| \leq L, \quad j = 1, 2, 3\}$$

statt der Kugel $B_L(V) \subset C_L(V)$ zu betrachten. Es sei nun $n_v \in \mathbb{N}$ eine gerade natürliche Zahl, dann bezeichne C_{n_v} die folgende Menge dreidimensionaler Indizes

$$C_{n_v} = \left\{ k \in \mathbb{Z}^3 : -\frac{n_v}{2} \leq k_m \leq \frac{n_v}{2}, m = 1, 2, 3 \right\}. \quad (4.1)$$

Wir führen die Schrittweite $h_v = 2L/n_v$ im Geschwindigkeitsraum ein und betrachten die folgende Menge diskreter Geschwindigkeiten

$$C_v(V) = \{v_j = V + h_v j, j \in C_{n_v}\} \subset C_L(V). \quad (4.2)$$

4.2 Ein hyperbolisches System als Approximation an die Boltzmann-Gleichung

Die im vorherigen Abschnitt gegebene Geschwindigkeitsraumdiskretisierung überführt die in der Geschwindigkeitsvariablen $v \in \mathbb{R}^3$ kontinuierliche Boltzmann-Gleichung in ein gekoppeltes System von partiellen Differentialgleichungen in t und x der Form:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_j(t, x) + \langle v_j, \nabla_x f_j(t, x) \rangle = \frac{1}{\epsilon} (Q_h((f)_{j \in C_{n_v}}, (f)_{j \in C_{n_v}}))_j, j \in C_{n_v},$$

wenn wir mit $(f)_{j \in C_{n_v}}$; $f_j(t, x) \approx f(t, x, v_j)$, $j \in C_{n_v}$ eine Approximation an die Verteilungsfunktion f und mit $(Q_h)_{j \in C_{n_v}}$ eine Approximation an den Kollisionsterm $Q(f, f)$ auf dem Gitter $C_v(V)$ bezeichnen. Verwenden wir mit Hilfe der bijektiven Indextransformation

$$\begin{aligned} \sigma : C_{n_v} &\rightarrow \{1, 2, \dots, (n_v + 1)^3\}, j = (j_1, j_2, j_3)^T \rightarrow \sigma(j), \\ \sigma(j) = i &= \left(j_3 + \frac{n_v}{2}\right) + (n_v + 1) \left(\left(j_2 + \frac{n_v}{2}\right) + (n_v + 1) \left(j_1 + \frac{n_v}{2}\right)\right) \end{aligned}$$

folgende Bezeichnungen mit $p = (n_v + 1)^3$:

$$\mathbf{u}(t, x) = (u_1(t, x), u_2(t, x), \dots, u_p(t, x))^T = (f_1(t, x), f_2(t, x), \dots, f_p(t, x))^T \in \mathbb{R}^p$$

und

$$\mathbf{q}(\mathbf{u}) = \frac{1}{\epsilon} Q_h(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \frac{1}{\epsilon} ((Q_h(\mathbf{u}, \mathbf{u}))_1, (Q_h(\mathbf{u}, \mathbf{u}))_2, \dots, (Q_h(\mathbf{u}, \mathbf{u}))_p)^T \in \mathbb{R}^p,$$

erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_i(t, x) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} ((v_l)_i \mathbf{u}_i(t, x)) = \mathbf{q}_i(\mathbf{u}), i = 1, \dots, p, \quad (4.3)$$

bzw. mit

$$\mathbf{f}_l(\mathbf{u}) = ((v_l)_i \mathbf{u}_i(t, x), \dots, (v_l)_p \mathbf{u}_p(t, x))^T = ((v_l)_i f_i(t, x), \dots, (v_l)_p f_p(t, x))^T$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, x) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{f}_l(\mathbf{u}) = \mathbf{q}(\mathbf{u}).$$

Das System ist hyperbolisch, da die $(v_i)_l \in \mathbb{R}$, $1 \leq i \leq p$ sind und für die Jacobimatrix folgendes gilt:

$$D(\mathbf{u}, w) = \sum_{l=1}^d w_l D\mathbf{f}_l(\mathbf{u}) = \text{diag} \left(\sum_{l=1}^d w_l (v_1)_l, \dots, \sum_{l=1}^d w_l (v_p)_l \right).$$

Die Eigenwerte sind dann

$$\lambda_i(\mathbf{u}, w) = \sum_{l=1}^d w_l (v_i)_l, \quad i = 1, \dots, p$$

und somit $\forall \mathbf{u} \in \mathcal{D}$ und $\forall w \in \mathbb{R}^d : w \neq 0$ reell. Die zugehörigen Eigenvektoren sind $r_i(\mathbf{u}, w) = \mathbf{e}_i$, $i = 1, \dots, p$ und somit linear unabhängig. Da die $(v_i)_{i=1, \dots, p}$ nicht paarweise verschieden sein müssen, ist das System im allgemeinen nicht strikt hyperbolisch.

4.3 Diskretisierung der Randbedingungen für die Boltzmann-Gleichung in 1D

Die Randbedingung

$$f(t, x, v) |\langle v, \nu(x) \rangle| = \int_{\langle v', \nu(x) \rangle < 0} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) f(t, x, v') |\langle v', \nu(x) \rangle| dv'$$

$$x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle > 0$$

geht durch eine Approximation auf dem Gitter $C_v(V)$ in die folgende Form über:

$$f_j(t, x) = \frac{1}{|\langle v_j, \nu(x) \rangle|} h_v^3 \sum_{j' \in C_{n_v}, \langle v_{j'}, \nu(x) \rangle < 0} \omega_{j'} (\mathcal{R}_h)_{jj'} f_{j'}(t, x) |\langle v_{j'}, \nu(x) \rangle|$$

$$x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle > 0.$$

Hierbei bezeichnet $((\mathcal{R}_h)_{jj'})_{j, j' \in C_{n_v}}$ eine Approximation an den Streukern $\mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v)$ auf dem Gitter $C_v(V)$ und die $\omega_{j'}$ Gewichte einer 3D-Quadratur. Sei nun $x \in [0, 1] \subset \mathbb{R}$. Wir setzen mit $p = (n_v + 1)^3$ wie vorher

$$\mathbf{u}(t, x) = (u_1(t, x), u_2(t, x), \dots, u_p(t, x))^T = (f_1(t, x), f_2(t, x), \dots, f_p(t, x))^T \in \mathbb{R}^p$$

mit der bijektiven Indextransformation

$$\sigma : C_{n_v} \rightarrow \{1, \dots, (n_v + 1)^3\}, \quad j = (j_1, j_2, j_3)^T \rightarrow \sigma(j)$$

$$\sigma(j) = i = \left(j_3 + \frac{n_v}{2}\right) + (n_v + 1) \left(\left(j_2 + \frac{n_v}{2}\right) + (n_v + 1) \left(j_1 + \frac{n_v}{2}\right)\right)$$

und berücksichtigen, daß das System (4.3) bereits diagonalisiert ist, d.h. $R = I$ gilt. Weiter bezeichne

$$\mathbf{u}^-(t, x) = \mathbf{w}^-(t, x) = (u_1(t, x), u_2(t, x), \dots, u_m(t, x))^T = (f_1(t, x), f_2(t, x), \dots, f_m(t, x))^T$$

bzw.

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^+(t, x) = \mathbf{w}^+(t, x) &= (u_{m+1}(t, x), u_{m+2}(t, x), \dots, u_p(t, x))^T \\ &= (f_{m+1}(t, x), f_{m+2}(t, x), \dots, f_p(t, x))^T \end{aligned}$$

die zu $(v_i)_1 \leq 0$, $1 \leq i \leq m$ bzw. $(v_i)_1 > 0$, $m+1 \leq i \leq p$ gehörigen Komponenten von \mathbf{u} . Sortieren wir die Komponenten von \mathbf{u} gemäß

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^+ \\ \mathbf{u}^- \end{pmatrix},$$

so ist die Randbedingung in 1D durch

$$u_i(t, 0) = \frac{1}{|(v_i)_1|} h_v^3 \sum_{i': (v_{i'})_1 < 0} \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} u_{i'}(t, 0) |(v_{i'})_1|, \quad i : (v_i)_1 > 0$$

bzw.

$$u_i(t, 1) = \frac{1}{|(v_i)_1|} h_v^3 \sum_{i': (v_{i'})_1 > 0} \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} u_{i'}(t, 1) |(v_{i'})_1|, \quad i : (v_i)_1 \leq 0$$

oder

$$u_i^+(t, 0) = \frac{1}{|(v_i)_1|} h_v^3 \sum_{i'=1}^m \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} u_{i'}^-(t, 0) |(v_{i'})_1|, \quad i = m+1, \dots, p$$

bzw.

$$u_i^-(t, 1) = \frac{1}{|(v_i)_1|} h_v^3 \sum_{i'=m+1}^p \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} u_{i'}^+(t, 1) |(v_{i'})_1|, \quad i = 1, \dots, m$$

gegeben. Setzen wir schließlich

$$\mathbf{B}^- = \left(\frac{1}{|(v_i)_1|} h_v^3 \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} |(v_{i'})_1| \right)_{m+1 \leq i' \leq p, 1 \leq i \leq m}$$

und

$$\mathbf{B}^+ = \left(\frac{1}{|(v_i)_1|} h_v^3 \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} |(v_{i'})_1| \right)_{1 \leq i' \leq m, m+1 \leq i \leq p},$$

so sehen wir, daß dies die geforderte Randbedingung (3.14) für hyperbolische lineare Systeme in 1D mit $\mathbf{g}(t, 0) = \mathbf{g}(t, 1) = 0$ ist.

4.4 Eine Entropiefunktion für dieses System

Setzen wir als Entropiefunktion für $u_i > 0, \forall i \in \{1, \dots, p\}$

$$U(\mathbf{u}) = h_v^3 \sum_{i=1}^p \omega_i u_i \ln(u_i)$$

als numerische Approximation des Boltzmannschen H-Funktional $\mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^3} f \ln(f) dv$ auf dem Gitter $C_v(V)$ und als Entropieflüsse

$$F_l(\mathbf{u}) = h_v^3 \sum_{i=1}^p \omega_i (v_i)_l u_i \ln(u_i), \quad l = 1, 2, 3,$$

als numerische Approximation der Flüsse

$$\mathcal{J}_l = \int_{\mathbb{R}^3} v_l f \ln(f) dv, \quad l = 1, 2, 3,$$

wobei die $\omega_i, 1 \leq i \leq p$ wieder Gewichte einer Quadratur bezeichnen, dann ist U eine Entropiefunktion mit Entropiefluß F . Denn es gilt:

$$\begin{aligned} DU(\mathbf{u})^T DF_l(\mathbf{u}) &= h_v^3 (\omega_1 (\ln(u_1) + 1), \dots, \omega_p (\ln(u_p) + 1)) \text{diag}((v_1)_l, \dots, (v_p)_l) = \\ &h_v^3 ((\omega_1 (\ln(u_1) + 1)(v_1)_l), \dots, (\omega_p (\ln(u_p) + 1)(v_p)_l)) = DF_l(\mathbf{u})^T \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} U(\mathbf{u}) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} F_l(\mathbf{u}) = \\ &\frac{\partial}{\partial t} \left(h_v^3 \sum_{i=1}^p \omega_i u_i \ln(u_i) \right) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} \left(h_v^3 \sum_{i=1}^p \omega_i (v_i)_l u_i \ln(u_i) \right) = \\ &\sum_{i=1}^p h_v^3 \omega_i (\ln(u_i) + 1) \frac{\partial}{\partial t} u_i + \sum_{l=1}^d \sum_{i=1}^p h_v^3 \omega_i (v_i)_l (\ln(u_i) + 1) \frac{\partial}{\partial x_l} u_i = \\ &\sum_{i=1}^p h_v^3 \omega_i (\ln(u_i) + 1) \frac{\partial}{\partial t} u_i + \sum_{i=1}^p h_v^3 \omega_i (\ln(u_i) + 1) \sum_{l=1}^d (v_i)_l \frac{\partial}{\partial x_l} u_i = \\ &\sum_{i=1}^p h_v^3 \omega_i (\ln(u_i) + 1) \left(\frac{\partial}{\partial t} u_i + \sum_{l=1}^d (v_i)_l \frac{\partial}{\partial x_l} u_i \right) = \\ &\left\langle h_v^3 (\omega_i (\ln(u_i) + 1))_{1 \leq i \leq p}, \left(\frac{\partial}{\partial t} u_i + \sum_{l=1}^d (v_i)_l \frac{\partial}{\partial x_l} u_i \right)_{1 \leq i \leq p} \right\rangle = \langle DU(\mathbf{u}), \mathbf{q}(\mathbf{u}) \rangle. \end{aligned}$$

5 Numerische Verfahren zur Modellierung der Boltzmann-Gleichung

Wir wollen zur numerischen Lösung der Boltzmann-Gleichung das bekannte Verfahren des Operator-Splittings anwenden. Dies kann in der folgenden Form dargestellt werden.

Wir setzen zunächst die Anfangsbedingung

$$f(t_0, x, v) = f(0, x, v) = f_0(x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3,$$

dann führen wir in der Zeitdiskretisierung auf dem Zeitintervall $[0, T]$, $T \in \mathbb{R}^+$,

$$t_n = nh_t, \quad n = 0, \dots, N_t, \quad h_t = \frac{T}{N_t}, \quad N_t \in \mathbb{N},$$

für $n = 0$ bis $n = N_t$ jeweils die folgenden Schritte aus:

1. **Freiflugphase:** Wir lösen das folgende Anfangsrandwertproblem im Zeitintervall $(t_n, t_{n+1}]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} f^{trans}(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f^{trans}(t, x, v) \rangle = 0, \quad t \in (t_n, t_{n+1}], \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{trans}(t_n, x, v) = f(t_n, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{trans}(t, x, v) = \frac{1}{|\langle v, \nu \rangle|} \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) f^{trans}(t, x, v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \\ t \in (t_n, t_{n+1}], \quad x \in \partial\Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 : \langle v, \nu \rangle > 0 \end{array} \right. .$$

2. **Kollisionsphase:** Dann lösen wir für jedes x im Innern von Ω das Anfangswertproblem im gleichen Zeitintervall $(t_n, t_{n+1}]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} f^{col}(t, x, v) = \frac{1}{\epsilon} Q(f^{col}(t, x, v), f^{col}(t, x, v)), \quad t \in (t_n, t_{n+1}], \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{col}(t_n, x, v) = f^{trans}(t_{n+1}, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \end{array} \right.$$

und setzen

$$f(t_{n+1}, x, v) = f^{col}(t_{n+1}, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3.$$

Wir spalten demnach jeden Zeitschritt in zwei unabhängige Teile auf; die Freiflugphase und die Kollisionsphase. Die numerischen Verfahren zur Modellierung der einzelnen Phasen wollen wir in den folgenden Abschnitten vorstellen.

Dieses Operator-Splitting ist nach [5] von der Ordnung 1 in der Genauigkeit, da die Operatoren der einzelnen Schritte nicht kommutieren. Wollen wir eine höhere Ordnung erreichen, so können wir diesen Algorithmus nach dem von Strang [60] vorgeschlagenen Splitting-Verfahren modifizieren, das nach [5] eine Ordnung von 2 in der Genauigkeit besitzt. Dieses Strang-Splitting-Schema hat die Gestalt:

Wir setzen zunächst wieder die Anfangsbedingung

$$f(t_0, x, v) = f(0, x, v) = f_0(x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3,$$

dann führen wir für $n = 0$ bis $n = N_t$ jeweils die folgenden Schritte aus:

1. **Freiflugphase mit halber Zeitschrittweite:** Wir lösen das folgende Anfangswertproblem im Zeitintervall $(t_n, t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{1}{2}h_t]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} f^{trans}(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f^{trans}(t, x, v) \rangle = 0, \quad t \in (t_n, t_{n+\frac{1}{2}}], \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{trans}(t_n, x, v) = f(t_n, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{trans}(t, x, v) = \frac{1}{|\langle v, \nu \rangle|} \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) f^{trans}(t, x, v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \\ t \in (t_n, t_{n+\frac{1}{2}}], \quad x \in \partial\Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 : \langle v, \nu \rangle > 0 \end{array} \right. .$$

2. **Kollisionsphase:** Dann lösen wir für jedes x im Innern von Ω das Anfangswertproblem im Zeitintervall $(t_n, t_{n+1}]$, d.h mit ganzer Zeitschrittweite ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} f^{col}(t, x, v) = \frac{1}{\epsilon} Q(f^{col}(t, x, v), f^{col}(t, x, v)), \quad t \in (t_n, t_{n+1}], \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{col}(t_n, x, v) = f^{trans}(t_{n+\frac{1}{2}}, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \end{array} \right. .$$

3. **Freiflugphase mit halber Zeitschrittweite:** Wir lösen das folgende Anfangswertproblem im Zeitintervall $(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}]$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} f^{trans}(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f^{trans}(t, x, v) \rangle = 0, \quad t \in (t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}], \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{trans}(t_n, x, v) = f^{col}(t_{n+1}, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 \\ f^{trans}(t, x, v) = \frac{1}{|\langle v, \nu \rangle|} \int_{\langle v', \nu \rangle < 0} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) f^{trans}(t, x, v') |\langle v', \nu \rangle| dv', \\ t \in (t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}], \quad x \in \partial\Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3 : \langle v, \nu \rangle > 0 \end{array} \right.$$

und setzen

$$f(t_{n+1}, x, v) = f^{trans}(t_{n+1}, x, v), \quad x \in \Omega, \quad v \in \mathbb{R}^3.$$

Zur numerischen Behandlung der Freiflugphase betrachten wir die Gleichung

$$\partial_t f_j(t, x) + \langle v_j, \nabla_x f_j(t, x) \rangle = 0, \quad j \in C_{n_v}$$

als Approximation an den Transportoperator der Boltzmann-Gleichung auf dem Gitter $C_v(V)$. In einer Raumdimension hat sie die Gestalt

$$\partial_t f_j(t, x) + (v_j)_1 \partial_x f_j(t, x) = 0, \quad j \in C_{n_v}.$$

Wir bezeichnen mit

$$f_{j,i}^n \approx f_j(t_n, x_i)$$

die Approximation an $f_j(t, x)$ in der Zeitdiskretisierung auf dem Zeitintervall $[0, T]$, $T \in \mathbb{R}^+$

$$t_n = nh_t, \quad n = 0, \dots, N_t, \quad h_t = \frac{T}{N_t}, \quad N_t \in \mathbb{N}$$

und der Ortsdiskretisierung auf dem Intervall $[0, 1]$

$$0 = x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{N_x+1} = 1, \quad h_{x_i} = x_{i+1} - x_i, \quad i = 1, \dots, N_x, \quad N_x \in \mathbb{N}.$$

In zwei Raumdimensionen ergibt sich mit $x = (x_1, x_2)^T$ analog

$$\partial_t f_j(t, x_1, x_2) + (v_j)_1 \partial_{x_1} f_j(t, x_1, x_2) + (v_j)_2 \partial_{x_2} f_j(t, x_1, x_2) = 0, \quad j \in C_{n_v}$$

und wir bezeichnen mit

$$f_{j,i,k}^n \approx f_j(t_n, x_{1i}, x_{2k})$$

wieder die Approximation an $f_j(t, x)$ in der Zeitdiskretisierung auf dem Zeitintervall $[0, T]$, $T \in \mathbb{R}^+$

$$t_n = nh_t, \quad n = 0, \dots, N_t, \quad h_t = \frac{T}{N_t}, \quad N_t \in \mathbb{N}$$

und der Ortsdiskretisierung auf dem Rechteck $[a, b] \times [c, d] \subset \mathbb{R}^2$

$$a = x_{11} \leq x_{12} \leq \dots \leq x_{1N_{x_1}+1} = b, \quad h_{x_{1i}} = x_{1i+1} - x_{1i}, \quad i = 1, \dots, N_{x_1}, \quad N_{x_1} \in \mathbb{N},$$

$$c = x_{21} \leq x_{22} \leq \dots \leq x_{2N_{x_2}+1} = d, \quad h_{x_{2k}} = x_{2k+1} - x_{2k}, \quad k = 1, \dots, N_{x_2}, \quad N_{x_2} \in \mathbb{N}.$$

Wir werden in diesem Kapitel zunächst das bekannte σ -Schema für das Upwind-Differenzenverfahren in 1D und 2D vorstellen. Anschließend wollen wir die Essentially-Non-Oscillatory-(ENO)- und Weighted-Essentially-Non-Oscillatory-(WENO)-Verfahren und deren Anwendung auf die obige Approximation des Transportoperators besprechen. Wir beschränken uns dabei auf räumlich ein- und zweidimensionale Betrachtungen, aber die

Aussagen, die wir vorstellen werden, gelten analog auch in drei Raumdimensionen. Wir stellen dann das Verfahren zur Modellierung des Kollisionsschritts vor. Dieses basiert auf einer Darstellung des Gewinnterms des Kollisionsoperators, wodurch dieser sehr effizient zu berechnen ist. Sie findet schließlich in einem Eulerverfahren bzw., um bessere Genauigkeiten zu erreichen, in einem Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung zur numerischen Behandlung des Kollisionsschrittes Anwendung. Wir werden anschließend die numerische Behandlung der Randbedingungen der Boltzmann-Gleichung diskutieren. Wir überführen dabei die in der Variablen v kontinuierliche Randbedingung durch die Diskretisierung im Geschwindigkeitsraum in eine diskrete Randbedingung auf dem Geschwindigkeitsgitter $C_v(V)$ aus (4.2). Kern dieser Diskretisierung bildet die Approximation der für verschiedene Gas-Wandinteraktionsmodelle gegebenen Streukerne auf $C_v(V)$. Zuletzt besprechen wir die Möglichkeiten die numerischen Verfahren zu parallelisieren.

5.1 Differenzenverfahren zur Modellierung der Freiflugphase

Als erstes Verfahren wollen wir das klassische σ -Schema für das Upwind-Differenzenverfahren vorstellen und auf den Transportoperator in 1D anwenden. Dieses besitzt für $j \in C_{n_v}$ aus 4.1 die Form:

Für $i = 1, \dots, N_x + 1$ führen wir den folgende Schritte aus:

1. Gilt $(v_j)_1 < 0$ berechnen wir

1.1. falls $i \leq N_x$ ist:

$$\frac{f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n}{h_t} = (v_j)_1 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i+1}^{n+1} - f_{j,i}^{n+1}}{h_{x_i}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i+1}^n - f_{j,i}^n}{h_{x_i}} \right).$$

2. Gilt $(v_j)_1 > 0$ berechnen wir,

2.1. falls $i \geq 2$ ist:

$$\frac{f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i}^n}{h_t} = (v_j)_1 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i}^{n+1} - f_{j,i-1}^{n+1}}{h_{x_{i-1}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i}^n - f_{j,i-1}^n}{h_{x_{i-1}}} \right).$$

Mit den bidiagonalen Matrizen

$$A_j^- = (a_{ik}^{j-})_{1 \leq i, k \leq N_x + 1} = \begin{cases} 1 - (v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_i}} \sigma & k = i, i \neq N_x + 1 \\ 1 & k = i = N_x + 1 \\ (v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_i}} \sigma & k = i + 1, i \neq N_x + 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad 1 \leq i, k \leq N_x + 1,$$

$$A_j^+ = (a_{ik}^{j+})_{1 \leq i, k \leq N_x+1} = \begin{cases} 1 & k = i = 1 \\ 1 + (v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_{i-1}}} \sigma & k = i, i \neq 1 \\ -(v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_{i-1}}} \sigma & k = i - 1, i \neq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad 1 \leq i, k \leq N_x + 1,$$

$$B_j^- = (b_{ik}^{j-})_{1 \leq i, k \leq N_x+1} = \begin{cases} 1 + (v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_i}} (1 - \sigma) & k = i, i \neq N_x + 1 \\ 1 & k = i = N_x + 1 \\ -(v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_i}} (1 - \sigma) & k = i + 1, i \neq N_x + 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad 1 \leq i, k \leq N_x + 1,$$

$$B_j^+ = (b_{ik}^{j+})_{1 \leq i, k \leq N_x+1} = \begin{cases} 1 & k = i = 1 \\ (v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_{i-1}}} (1 - \sigma) & k = i, i \neq 1 \\ 1 - (v_j)_1 \frac{h_t}{h_{x_{i-1}}} (1 - \sigma) & k = i - 1, i \neq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad 1 \leq i, k \leq N_x + 1,$$

sowie

$$f_j^n = (f_{j,i}^n)_{i=1, \dots, N_x+1}$$

können wir den Algorithmus auch in der Matrixschreibweise

$$\begin{Bmatrix} A_j^- \\ A_j^+ \end{Bmatrix} f_j^{n+1} = \begin{Bmatrix} B_j^- \\ B_j^+ \end{Bmatrix} f_j^n, \quad \begin{cases} (v_j)_1 < 0 \\ (v_j)_1 > 0 \end{cases}, \quad j \in C_{n_v},$$

darstellen.

In zwei Raumdimensionen hat es für $j \in C_{n_v}$ aus 4.1 die folgende Gestalt:

Für $i = 1, \dots, N_{x_1} + 1$ führen wir die folgenden Schritte aus:

1. Für $k = 1, \dots, N_{x_2} + 1$ führen wir die folgenden Schritte aus:

1.1. Gilt $(v_j)_1 < 0$, berechnen wir, falls $i \leq N_{x_1}$ ist:

1.1.1. Gilt $(v_j)_2 < 0$, berechnen wir, falls $k \leq N_{x_2}$ ist:

$$\begin{aligned}
 \frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i,k}^n}{h_t} &= (v_j)_1 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i+1,k}^{n+1} - f_{j,i,k}^{n+1}}{h_{x_1 i}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i+1,k}^n - f_{j,i,k}^n}{h_{x_1 i}} \right) \\
 &+ (v_j)_2 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i,k+1}^{n+1} - f_{j,i,k}^{n+1}}{h_{x_2 k}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i,k+1}^n - f_{j,i,k}^n}{h_{x_2 k}} \right).
 \end{aligned}$$

1.1.2. Gilt $(v_j)_2 > 0$, berechnen wir, falls $k \geq 2$ ist:

$$\begin{aligned} \frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i,k}^n}{h_t} &= (v_j)_1 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i+1,k}^{n+1} - f_{j,i,k}^{n+1}}{h_{x_{1i}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i+1,k}^n - f_{j,i,k}^n}{h_{x_{1i}}} \right) \\ &+ (v_j)_2 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i,k-1}^{n+1}}{h_{x_{2k-1}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i,k}^n - f_{j,i,k-1}^n}{h_{x_{2k-1}}} \right). \end{aligned}$$

1.2. Gilt $(v_j)_1 > 0$, berechnen wir, falls $i \geq 2$ ist:

1.2.1. Gilt $(v_j)_2 < 0$, berechnen wir, falls $k \leq N_{x_2}$ ist:

$$\begin{aligned} \frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i,k}^n}{h_t} &= (v_j)_1 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i-1,k}^{n+1}}{h_{x_{1i-1}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i,k}^n - f_{j,i-1,k}^n}{h_{x_{1i-1}}} \right) \\ &+ (v_j)_2 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i,k+1}^{n+1} - f_{j,i,k}^{n+1}}{h_{x_{2k}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i,k+1}^n - f_{j,i,k}^n}{h_{x_{2k}}} \right). \end{aligned}$$

1.2.2. Gilt $(v_j)_2 > 0$, berechnen wir, falls $k \geq 2$ ist:

$$\begin{aligned} \frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i,k}^n}{h_t} &= (v_j)_1 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i-1,k}^{n+1}}{h_{x_{1i-1}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i,k}^n - f_{j,i-1,k}^n}{h_{x_{1i-1}}} \right) \\ &+ (v_j)_2 \cdot \sigma \left(\frac{f_{j,i,k}^{n+1} - f_{j,i,k-1}^{n+1}}{h_{x_{2k-1}}} \right) + (1 - \sigma) \left(\frac{f_{j,i,k}^n - f_{j,i,k-1}^n}{h_{x_{2k-1}}} \right). \end{aligned}$$

Das Schema ist für $\sigma = 0$ rein explizit und für $\sigma = 1$ rein implizit.

5.2 Essentially Non-Oscillatory (ENO) Rekonstruktion

Gegeben sei ein Gitter in 1D der Form

$$a = x_{\frac{1}{2}}, x_{\frac{3}{2}}, \dots, x_{N-\frac{1}{2}}, x_{N+\frac{1}{2}} = b, \quad I_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}], \quad i = 1, \dots, N$$

mit Zellmittelpunkten

$$x_i = \frac{1}{2}(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}), \quad i = 1, \dots, N,$$

Schrittweiten

$$\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}, \quad i = 1, \dots, N$$

und der maximalen Schrittweite von

$$\Delta x = \max_{1 \leq i \leq N} \Delta x_i.$$

Weiter seien die Zellmittelwerte

$$\bar{g}(x_i) = \bar{g}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(\xi) d\xi, \quad i = 1, \dots, N$$

einer Funktion $g(x)$ gegeben. Gesucht werden die Werte von g an den Intervallgrenzen, d.h die Werte $g(x_{i-\frac{1}{2}})$ und $g(x_{i+\frac{1}{2}})$, $i = 1, \dots, N$. Um diese zu bestimmen, nehmen wir an, daß g integrierbar ist und betrachten eine Stammfunktion

$$G(x) = \int_{x_{\frac{1}{2}}}^x g(\xi) d\xi$$

von g , wobei wir den linken Randpunkt des Ortsgitters als untere Grenze wählen. Wir können den Wert der Stammfunktion an den rechten Intervallgrenzen $G(x_{i+\frac{1}{2}})$ durch die Zellmittelwerte ausdrücken. Es gilt

$$G(x_{i+\frac{1}{2}}) = \sum_{j=1}^i \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} g(\xi) d\xi = \sum_{j=1}^i \bar{g}_j \Delta x_j, \quad i = 1, \dots, N.$$

Da wir die Zellmittelwerte von g kennen, kennen wir auch die Stammfunktion G an den Zellrändern exakt. Die Idee ist, die Stammfunktion G von g durch ein Polynom k -ten Grades zu interpolieren und dieses anschließend zu differenzieren, um eine Approximation k -ter Ordnung in der Genauigkeit von g auf dem Intervall $I_i, i \in \{1 \dots N\}$ zu erhalten und somit die gesuchten Werte von g mit der gleichen Ordnung k in der Genauigkeit zu approximieren. Sei $i \in \{1 \dots N\}$ gegeben, dann gehen wir folgendermaßen vor: Die Interpolation bzgl. einer Zelle I_i wird auf einer Schablone, die aus r Zellen links und s Zellen rechts der Zelle I_i besteht, durchgeführt, wobei dann $k - 1 = s + r$ gelten muß. Sie sei durch

$$S(i) = \{I_{i-r}, \dots, I_i, \dots, I_{i+s}\}$$

bezeichnet. Bezeichnen wir weiter das eindeutige Polynom vom Grad höchstens k , das G an den $k + 1$ Punkten

$$x_{i-r-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+s+\frac{1}{2}}$$

interpoliert mit $P_i(x)$ und dessen Ableitung mit $p_i(x)$, so gilt

$$\frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} p_i(\xi) d\xi = \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} P_i'(\xi) dx =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\Delta x_j} \left(P_i(x_{j+\frac{1}{2}}) - P_i(x_{j-\frac{1}{2}}) \right) \\
 &= \frac{1}{\Delta x_j} \left(G(x_{j+\frac{1}{2}}) - G(x_{j-\frac{1}{2}}) \right) \\
 &= \frac{1}{\Delta x_j} \left(\int_{x_{\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} g(\xi) d\xi - \int_{x_{\frac{1}{2}}}^{x_{j-\frac{1}{2}}} g(\xi) d\xi \right) \\
 &= \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} g(\xi) d\xi \\
 &= \bar{g}_j \\
 &\quad j = i - r, \dots, i + s.
 \end{aligned}$$

Somit ist p_i ein eindeutiges Polynom höchstens vom Grad $k - 1 = s + r$ mit

$$\frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} p_i(\xi) d\xi = \bar{g}_j, \quad j = i - r, \dots, i + s,$$

und wir erhalten

$$p_i(x) = g(x) + \mathcal{O}(\Delta x^k), \quad x \in I_j, \quad j = i - r, \dots, i + s,$$

da nach den bekannten Resultaten aus der Approximationstheorie

$$P'_i(x) = G'(x) + \mathcal{O}(\Delta x^k), \quad x \in I_j, \quad j = i - r, \dots, i + s$$

gilt. Setzen wir nun $g_{i+\frac{1}{2}}^- = p_i(x_{i+\frac{1}{2}})$ und $g_{i-\frac{1}{2}}^+ = p_i(x_{i-\frac{1}{2}})$, so haben wir die gesuchten Werte bzgl. der Zelle I_i gefunden und es gilt

$$g(x_{i+\frac{1}{2}}) = g_{i+\frac{1}{2}}^- + \mathcal{O}(\Delta x^k) \quad \text{bzw.} \quad g(x_{i-\frac{1}{2}}) = g_{i-\frac{1}{2}}^+ + \mathcal{O}(\Delta x^k).$$

Die Werte von $p_i(x)$ in den Intervallrändern ergeben sich aus der Lagrange-Form des Interpolationspolynoms

$$P_i(x) = \sum_{m=0}^k G(x_{i-r+m-\frac{1}{2}}) \prod_{l=0, l \neq m}^k \frac{x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}{x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}.$$

Ziehen wir auf beiden Seiten die Konstante $G(x_{i-r-\frac{1}{2}})$ ab, verwenden die Identität

$$\sum_{m=0}^k \prod_{l=0, l \neq m}^k \frac{x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}}{x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}} = 1,$$

leiten auf beiden Seiten ab und beachten

$$G(x_{i-r+m-\frac{1}{2}}) - G(x_{i-r-\frac{1}{2}}) = \sum_{j=0}^{m-1} \bar{g}_{i-r+j} \Delta x_{i-r+j},$$

so ergibt sich

$$p(x_{i+\frac{1}{2}}) = \sum_{j=0}^{k-1} c_j(r, S(i), k) \bar{g}_{i-r+j}, \text{ bzw. } p(x_{i-\frac{1}{2}}) = \sum_{j=0}^{k-1} c_j(r-1, S(i), k) \bar{g}_{i-r+j},$$

wobei

$$c_j(r, S(i), k) = \sum_{m=j+1}^k \frac{\sum_{l=0, l \neq m}^k \prod_{q=0, q \neq m, l}^k (x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-r+q-\frac{1}{2}})}{\prod_{l=0, l \neq m}^k (x_{i-r+m-\frac{1}{2}} - x_{i-r+l-\frac{1}{2}})}$$

gilt.

Schließlich ist die Schablone $S(i)$ zu suchen. Hier wollen wir die Schablone so wählen, daß g auf ihr möglichst glatt ist. Dazu betrachten wir die Newton-Form des Interpolationspolynoms

$$P_i(x) = \sum_{j=0}^k G[x_{i-r-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i-r+j-\frac{1}{2}}] \prod_{m=0}^{j-1} (x - x_{i-r+m-\frac{1}{2}}),$$

wobei

$$G[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] = \frac{G[x_{i+\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] - G[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{3}{2}}]}{x_{i+j+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}},$$

$$G[x_{i-\frac{1}{2}}] = G(x_{i-\frac{1}{2}})$$

die dividierten Differenzen von G bezeichnen und bilden die Ableitung, um $p_i(x)$ zu erhalten:

$$p_i(x) = \sum_{j=1}^k G[x_{i-r-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i-r+j-\frac{1}{2}}] \sum_{m=0}^{j-1} \prod_{l=0, l \neq m}^{j-1} (x - x_{i-r+l-\frac{1}{2}}).$$

Aufgrund der Eigenschaften

$$G[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] = \frac{G^{(j)}(\xi)}{j!}$$

für ein ξ in der Schablone mit $x_{i-\frac{1}{2}} < \xi < x_{i+j-\frac{1}{2}}$, falls G glatt ist, und

$$G[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta x^j}\right),$$

falls G eine Unstetigkeit auf der Schablone besitzt, bilden die dividierten Differenzen ein Maß für die Glattheit der Funktion G bzw. deren Ableitung g auf der Schablone. Die Idee der Essentially Non-Oscillatory Rekonstruktion ist die eines adaptiven Schablonenaufbaus um so diejenige Schablone zu identifizieren, auf der die Funktion G bzw. deren Ableitung am glattesten ist.

Dies liefert den folgenden Algorithmus:

Wir beginnen mit der Schablone

$$S_2(i) = \{I_i\} = \{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\}.$$

Jetzt gibt es zwei Möglichkeiten, entweder nehmen wir I_{i-1} , d.h. den Punkt $x_{i-\frac{3}{2}}$, oder I_{i+1} , d.h. den Punkt $x_{i+\frac{3}{2}}$, zu $S_2(i)$ hinzu. Wir wählen den Punkt für den die dividierte Differenz

$$G[x_{i-\frac{3}{2}}, x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$$

bzw.

$$G[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{3}{2}}]$$

den kleineren absoluten Wert hat, d.h. auf der die Funktion glatter ist. So erhalten wir die Schablone

$$S_3(i) = \{I_i, I_{i+1}\} = \{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{3}{2}}\}$$

oder

$$S_3(i) = \{I_{i-1}, I_i\} = \{x_{i-\frac{3}{2}}, x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\}.$$

Diese Prozedur wiederholen wir, wobei pro Schritt jeweils ein Punkt in Abhängigkeit der Relation der Beträge der dividierten Differenzen zur Schablone hinzugenommen wird, bis die benötigte Anzahl von Punkten in der Schablone erreicht ist. Haben wir so das Gitter gefunden, nutzen wir die Lagrange-Form des Interpolationspolynoms um die gesuchten Werte $g_{i+\frac{1}{2}}^-$ bzw. $g_{i-\frac{1}{2}}^+$ zu berechnen.

Wegen der Eigenschaft

$$G[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] = \bar{g}_i,$$

und da in der Darstellung von $p(x)$ nur dividierte Differenzen der Stufe 1 und höher vorkommen, können wir die dividierten Differenzen der Stammfunktion G auch ohne ihre Kenntnis mit Hilfe der dividierten Differenzen von \bar{g} in der Form

$$\bar{g}[x_i, \dots, x_{i+j}] = \frac{\bar{g}[x_{i+1}, \dots, x_{i+j}] - \bar{g}[x_i, \dots, x_{i+j-1}]}{x_{i+j} - x_i}$$

$$\bar{g}[x_i] = \bar{g}_i$$

berechnen.

Es bleibt noch zu bemerken, daß es vorkommen kann, daß wir am linken bzw. rechten Rand des Gitters, bei der Rekonstruktion in randnahen Punkten, wie auch in den Rändern $x_{\frac{1}{2}}$ bzw. $x_{N+\frac{1}{2}}$ selbst, Mittelwerte der zu konstruierenden Funktion g für Mittelpunkte x_i , $i < 1$ bzw. x_i , $i > N$ benötigen. Dort werden dann sogenannte virtuelle Mittelpunkte mit den Mittelwerten von g in den Randpunkten gesetzt, d.h wir setzen

$$\bar{g}(x_i) = \bar{g}_i = \bar{g}_1, \quad i < 1 \quad \text{bzw.} \quad \bar{g}(x_i) = \bar{g}_i = \bar{g}_N, \quad i > N.$$

5.3 Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO) Rekonstruktion

Bei der Weighted ENO Rekonstruktion ist die Idee, nicht nur eine Rekonstruktion auf einer der möglichen Schablonen zu nutzen, sondern eine Konvexkombination mit geeigneten Gewichten von allen Rekonstruktionen auf allen Schablonen. Sei wieder $i \in \{1, \dots, N\}$ gegeben, dann berechnen wir

$$g_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = \sum_{j=0}^{k-1} c_j(r, S(i), k) \bar{g}_{i-r+j}, \quad r = 0, \dots, k-1$$

und bilden

$$g_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r g_{i+\frac{1}{2}}^{(r)}.$$

Die Kunst ist hierbei natürlich, die Gewichte ω_r , $r = 0, \dots, k-1$ richtig zu wählen. Sie müssen zunächst offensichtlich die Bedingungen

$$\omega_r \geq 0, \quad r = 0, \dots, k-1, \quad \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r = 1$$

erfüllen. Ist die Funktion g auf allen Schablonen glatt, können wir die Gewichte genau bestimmen, denn dann gibt es genau r Konstanten mit

$$g_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r g_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = g(x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta x^{2k-1})$$

und wir erhalten mit

$$\omega_r = d_r + \mathcal{O}(\Delta x^{k-1}), \quad r = 0, \dots, k-1$$

die gewünschte Genauigkeit. Hat g aber Unstetigkeiten, so sollen die Gewichte auf den Schablonen, auf denen diese liegen, möglichst klein, am besten sogar Null sein. Ein weiteres Kriterium ist, daß sie möglichst effizient numerisch berechnet werden können. Dies führt zu der folgenden Wahl von Gewichten:

$$\omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s}, \quad r = 0, \dots, k-1$$

mit

$$\alpha_r = \frac{d_r}{(\epsilon + \beta_r)^2}, \quad r = 0, \dots, k-1,$$

wobei $\epsilon > 0$ gilt, um eine Division durch Null zu vermeiden, und β_r der sogenannte Glattheitsindikator der Schablone $S_r(i)$ ist. Ist g auf $S_r(i)$ glatt, so gilt $\beta_r = \mathcal{O}(\Delta x^2)$, hat g aber eine Unstetigkeit auf $S_r(i)$, so gilt $\beta_r = \mathcal{O}(1)$. Dies bedeutet dann übertragen auf die Gewichte: $\omega_r = \mathcal{O}(1)$, falls g glatt ist auf $S_r(i)$, und $\omega_r = \mathcal{O}(\Delta x^4)$, falls g eine Unstetigkeitsstelle auf $S_r(i)$ besitzt. Eine mögliche Art der Glattheitsmessung bildet die folgende Wahl von Indikatoren:

$$\beta_r = \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{\partial^l p_r(x)}{\partial x^l} \right)^2 dx.$$

Dies stellt die Summe von skalierten L^2 -Normen der Ableitungen des Interpolationspolynoms $p_r(x)$ über dem Intervall $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$ dar. Der Faktor Δx^{2l-1} wurde dabei zur Entfernung jeder Δx -Abhängigkeit der Ableitungen eingeführt.

5.4 Finite-Differenzen-ENO-Roe- und Finite-Differenzen-WENO-Roe-Verfahren

Zur Anwendung dieser Rekonstruktion auf eine hyperbolische partielle Differentialgleichung betrachten wir in 1D die skalare Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} f(u(t, x)) = 0,$$

wobei

$$u : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \rightarrow \mathcal{D}, \quad (t, x) \rightarrow u(t, x)$$

eine Funktion, mit $\Omega \subset \mathbb{R}$ ein Gebiet und $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}$ offen, bezeichnet, und

$$f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$$

glatt ist. Wir wollen auf diese Gleichung ein Finite-Differenzen-Verfahren der Form

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{h_t} + \frac{1}{h_{x_i}} \left(\hat{f}_{i-\frac{1}{2}}^n - \hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^n \right) = 0, \quad i = 1, \dots, N$$

anwenden. Hierbei bezeichne, für $i = 1, \dots, N$, $u_i^n \approx u(t_n, x_i)$ eine Approximation an $u(t_n, x_i)$ und $h_{x_i} = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$ die Ortsschrittweite. Weiter sei, für $i = 0, \dots, N$,

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^n \approx \hat{f}(u_{i-r}^n, \dots, u_{i+s}^n)$$

eine Approximation an den numerischen Fluß \hat{f} zum Zeitpunkt $t = t_n$, wobei dieser Lipschitz-stetig und konsistent mit dem physikalischen Fluß f ist, d.h. es gilt

$$\hat{f}(u, \dots, u) = f(u).$$

Wir sehen hier, daß wir eventuell u_i^n für $i < 1$ bzw. für $i > N$ benötigen. Dies wird mit der Einführung virtueller Mittelpunkte x_i , $i < 1$ bzw. $x_i, i > N$ gelöst; wir setzen dann jeweils $u_i^n = u_1^n, i < 1$ bzw. $u_i^n = u_N^n, i > N$. Für $i = 0, \dots, N$ erhalten wir $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^n$ durch eine ENO- bzw. WENO-Rekonstruktion mit

$$\bar{g}(x_i) = f(u(t^n, x_i)), \quad i = 1, \dots, N.$$

Um Stabilität zu gewährleisten brauchen wir ein Upwind-Verfahren. Daher berechnen wir für $i = 0, \dots, N$ die sogenannte Roe-Geschwindigkeit

$$\bar{a}_{i+\frac{1}{2}}^n := \frac{f(u_{i+1}^n) - f(u_i^n)}{u_{i+1}^n - u_i^n}.$$

Ist $u_{i+1}^n = u_i^n$, so gilt $f(u_{i+1}^n) = f(u_i^n)$, und wir setzen $\bar{a}_{i+\frac{1}{2}}^n = 0$. Auch hier ist es notwendig zur Berechnung der Roe-Geschwindigkeit in den Randpunkten des Ortsgitters auf die Werte von u_0 bzw. u_{N+1} in den virtuellen Mittelpunkten x_0 bzw. x_{N+1} zurückzugreifen. Gilt, für $i = 0, \dots, N$, $\bar{a}_{i+\frac{1}{2}}^n \geq 0$, so setzen wir $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^n = g_{i+\frac{1}{2}}^-$, andernfalls setzen wir

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^n = g_{i+\frac{1}{2}}^+.$$

Im Falle von linearen Systemen mit konstanten Koeffizienten der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{u}(t, x)) = 0,$$

wobei

$$\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \rightarrow \mathcal{D}, \quad (t, x) \rightarrow \mathbf{u}(t, x) = (u_1(t, x), \dots, u_p(t, x))$$

eine vektorwertige Funktion, mit $\Omega \subset \mathbb{R}$ ein Gebiet, $p \in \mathbb{N}$ und $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen, bezeichnet, und

$$\mathbf{f} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^p, \quad \mathbf{u}(t, x) \rightarrow \mathbf{A}\mathbf{u}(t, x), \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times p}$$

gilt, gehen wir folgendermaßen vor: Wir berechnen die Eigenwerte, sowie die rechten und linken Eigenvektoren der Jacobimatrix $D\mathbf{f} = \mathbf{A}$ und gehen zum System in den charakteristischen Variablen über. Dies ergibt dann mit

$$\mathbf{R}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R} = \mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{w} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{w} = 0$$

$$\text{mit } \mathbf{w} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{u}.$$

Auf dieses entkoppelte System können wir den obigen Algorithmus des skalaren Falles komponentenweise anwenden. Dabei wird die Roe-Geschwindigkeit durch den Eigenwert

λ_l der Jacobimatrix $D\mathbf{f} = \mathbf{A}$ ersetzt, wobei l die l -te Komponente in den charakteristischen Variablen \mathbf{w}_l , $1 \leq l \leq p$ bezeichnet.

Im zweidimensionalen Fall betrachten wir die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) + \frac{\partial}{\partial x_1} f_1(u(t, x)) + \frac{\partial}{\partial x_2} f_2(u(t, x)) = 0,$$

wobei

$$u : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \rightarrow \mathcal{D}, (t, x) \rightarrow u(t, x)$$

eine Funktion, mit $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein Gebiet, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}$ offen und $x = (x_1, x_2)^T$, bezeichnet, und

$$f_l : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}, l = 1, 2$$

glatt ist. Das Finite-Differenzen-Verfahren hat dann die Form

$$\frac{u_{i,k}^{n+1} - u_{i,k}^n}{h_t} + \frac{1}{h_{x_{1i}}} \left(\hat{f}_{i-\frac{1}{2},k}^n - \hat{f}_{i+\frac{1}{2},k}^n \right) + \frac{1}{h_{x_{2k}}} \left(\hat{f}_{i,k-\frac{1}{2}}^n - \hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}}^n \right) = 0, \quad i = 1 \dots N_1, \quad k = 1 \dots N_2.$$

Hierbei bezeichne für $i = 1, \dots, N_1$ und $k = 1, \dots, N_2$ $u_{i,k}^n \approx u(t_n, x_{1i}, x_{2k})$ eine Approximation an $u(t_n, x_{1i}, x_{2k})$ auf dem Ortsgitter

$$a = x_{1\frac{1}{2}}, x_{1\frac{3}{2}}, \dots, x_{1N_1-\frac{1}{2}}, x_{1N_1+\frac{1}{2}} = b, \quad c = x_{2\frac{1}{2}}, x_{2\frac{3}{2}}, \dots, x_{2N_2-\frac{1}{2}}, x_{2N_2+\frac{1}{2}} = d$$

mit Zellmittelpunkten

$$x_{1i} = \frac{1}{2}(x_{1i-\frac{1}{2}} + x_{1i+\frac{1}{2}}), \quad i = 1, \dots, N_1, \quad x_{2k} = \frac{1}{2}(x_{2k-\frac{1}{2}} + x_{2k+\frac{1}{2}}), \quad k = 1, \dots, N_2$$

und den jeweiligen Ortsschrittweiten in x_1 - bzw. x_2 -Richtung

$$h_{x_{1i}} = x_{1i+\frac{1}{2}} - x_{1i-\frac{1}{2}}, \quad i = 1, \dots, N_1, \quad h_{x_{2k}} = x_{2k+\frac{1}{2}} - x_{2k-\frac{1}{2}}, \quad k = 1, \dots, N_2.$$

Weiter sei für $i = 0, \dots, N_1$ und $k = 0, \dots, N_2$

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k} \approx \hat{f}_1(u_{i-r_1,k}^n, \dots, u_{i+s_1,k}^n)$$

bzw.

$$\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}} \approx \hat{f}_2(u_{i,k-r_2}^n, \dots, u_{i,k+s_2}^n)$$

eine Approximation an die numerischen Flüsse \hat{f}_l , $l = 1, 2$ zum Zeitpunkt $t = t_n$, wobei diese Lipschitz-stetig und konsistent sind, d.h. es gilt $\hat{f}_l(u, \dots, u) = f_l(u)$. Auch in zwei Dimensionen brauchen wir eventuell $u_{i,k}^n$ für $i < 1$ oder $k < 1$ bzw. für $i > N_1$ oder $k > N_2$. Wir setzen analog zu einer Dimension in den virtuellen Zellmittelpunkten x_{1i} , $i < 1$ oder x_{2k} , $k < 1$ bzw. x_{1i} , $i > N_1$ oder x_{2k} , $k > N_2$ jeweils $u_{i,k}^n = u_{1,k}^n$, $i < 1$ oder $u_{i,k}^n = u_{i,1}^n$, $k < 1$

bzw. $u_{i,k}^n = u_{N_1,k}^n, i > N_1$ oder $u_{i,k}^n = u_{i,N_2}^n, k > N_2$.

Für $i = 0, \dots, N_1$ und $k = 0, \dots, N_2$ erhalten wir $\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k}^n$ durch eine ENO- bzw. WENO-Rekonstruktion mit

$$\bar{g}(x_i) = f_1(u(t^n, x_{1i}, x_{2k})), \quad i = 1, \dots, N_1$$

und $\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}}^n$ analog durch eine ENO- bzw. WENO-Rekonstruktion mit

$$\bar{g}(x_k) = f_2(u(t^n, x_{1i}, x_{2k})), \quad k = 1, \dots, N_2.$$

Um Stabilität zu gewährleisten, brauchen wir wieder ein Upwind-Verfahren. Daher berechnen wir $i = 0, \dots, N_1$ und $k = 0, \dots, N_2$ die Roe-Geschwindigkeiten in x_1 - bzw. x_2 -Richtung

$$\bar{a}_{i+\frac{1}{2},k}^n := \frac{f_1(u_{i+1,k}^n) - f_1(u_{i,k}^n)}{u_{i+1,k}^n - u_{i,k}^n}$$

bzw.

$$\bar{a}_{i,k+\frac{1}{2}}^n := \frac{f_2(u_{i,k+1}^n) - f_2(u_{i,k}^n)}{u_{i,k+1}^n - u_{i,k}^n}.$$

Ist $u_{i+1,k}^n = u_{i,k}^n$ bzw. $u_{i,k+1}^n = u_{i,k}^n$, setzen wir wieder $\bar{a}_{i+\frac{1}{2},k}^n = 0$ bzw. $\bar{a}_{i,k+\frac{1}{2}}^n = 0$. Auch hier ist es notwendig, zur Berechnung der Roe-Geschwindigkeiten auf die Werte

$$u_{0,k}, u_{N_1+1,k}, \quad k = 0, \dots, N_2 + 1 \quad \text{bzw.} \quad u_{i,0}, u_{i,N_2+1} \quad i = 0, \dots, N_1 + 1$$

in den virtuellen Zellmittelpunkten

$$(x_{10}, x_{2k}), (x_{1N_1+1}, x_{2k}), \quad k = 0, \dots, N_2 + 1 \quad \text{bzw.} \quad (x_{1i}, x_{20}), (x_{1i}, x_{2N_2+1}), \quad i = 0, \dots, N_1 + 1$$

zurückzugreifen. Gilt für $i = 0, \dots, N_{x_1}$, $\bar{a}_{i+\frac{1}{2},k}^n \geq 0$, so setzen wir $\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k} = g_{i+\frac{1}{2},k}^-$, andernfalls setzen wir $\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k} = g_{i+\frac{1}{2},k}^+$. Gilt analog für $k = 0, \dots, N_{x_2}$, $\bar{a}_{i,k+\frac{1}{2}}^n \geq 0$, so setzen wir $\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}} = g_{i,k+\frac{1}{2}}^-$, andernfalls setzen wir $\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}} = g_{i,k+\frac{1}{2}}^+$.

Im Falle von linearen Systemen mit konstanten Koeffizienten der Form

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

wobei

$$\mathbf{u} : \mathbb{R}_0^+ \times \Omega \rightarrow \mathcal{D}, \quad (t, x) \rightarrow \mathbf{u}(t, x) = (u_1(t, x), \dots, u_p(t, x))$$

eine vektorwertige Funktion, mit $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein Gebiet, $p \in \mathbb{N}$, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^p$ offen und $x = (x_1, x_2)^T$, bezeichnet, und

$$\mathbf{f}_l : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^p, \quad \mathbf{u}(t, x) \rightarrow \mathbf{A}_l \mathbf{u}(t, x), \quad \mathbf{A}_l \in \mathbb{R}^{p \times p}, \quad l = 1, 2$$

gilt, führen wir ein sogenanntes Dimensions-Splitting durch. Das heißt, wir rekonstruieren zuerst komponentenweise den Fluß $\mathbf{A}_1 \mathbf{u}$ mittels des oben genannten Verfahrens für Systeme in 1D in den charakteristischen Variablen bzgl. \mathbf{A}_1 . Wir führen komponentenweise eine ENO- bzw. WENO-Rekonstruktion des Flusses

$$\mathbf{g}_1 = \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{A}_1 \mathbf{u} = \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{A}_1 \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{u} = \mathbf{\Lambda}_1 \mathbf{w}_1$$

mit

$$\mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{A}_1 \mathbf{R}_1 = \mathbf{\Lambda}_1 = \text{diag}(\lambda_1^{(1)}, \dots, \lambda_p^{(1)})$$

und

$$\mathbf{w}_1(t, x_1, x_2) = \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{u}(t, x_1, x_2)$$

durch, wobei $\lambda_l^{(1)}$, $1 \leq l \leq p$ die Eigenwerte von \mathbf{A}_1 bezeichnen. Gemäß des oben diskutierten ENO- bzw. WENO-Roe-Verfahrens erhalten wir so $\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},k}^{(\mathbf{w}_1)}$, $i = 0, \dots, N_1$, $k = 1, \dots, N_2$ in den charakteristischen Variablen von \mathbf{A}_1 . Anschließend transformieren wir mittels

$$\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},k} = \mathbf{R}_1 \hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},k}^{(\mathbf{w}_1)}, \quad i = 0, \dots, N_1, \quad k = 1, \dots, N_2$$

zurück. Dann führen wir analog komponentenweise eine ENO- bzw. WENO-Rekostruktion des Flusses

$$\mathbf{g}_2 = \mathbf{R}_2^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{u} = \mathbf{R}_2^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_2^{-1} \mathbf{u} = \mathbf{\Lambda}_2 \mathbf{w}_2$$

mit

$$\mathbf{R}_2^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{R}_2 = \mathbf{\Lambda}_2 = \text{diag}(\lambda_1^{(2)}, \dots, \lambda_p^{(2)})$$

und

$$\mathbf{w}_2(t, x_1, x_2) = \mathbf{R}_2^{-1} \mathbf{u}(t, x_1, x_2)$$

durch, wobei $\lambda_l^{(2)}$, $1 \leq l \leq p$ die Eigenwerte von \mathbf{A}_2 bezeichnen. Wir erhalten analog durch Verwendung des obigen ENO- WENO-Roe-Verfahrens $\hat{\mathbf{f}}_{i,k+\frac{1}{2}}^{(\mathbf{w}_2)}$, $i = 1, \dots, N_1$, $k = 0, \dots, N_2$ in den charakteristischen Variablen von \mathbf{A}_2 und transformieren mittels

$$\hat{\mathbf{f}}_{i,k+\frac{1}{2}} = \mathbf{R}_2 \hat{\mathbf{f}}_{i,k+\frac{1}{2}}^{(\mathbf{w}_2)}, \quad i = 1, \dots, N_1, \quad k = 0, \dots, N_2$$

zurück. So erhalten wir die Flußrekonstruktionen $\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},k}$, $i = 0, \dots, N_1$, $k = 1, \dots, N_2$ und $\hat{\mathbf{f}}_{i,k+\frac{1}{2}}$, $i = 1, \dots, N_1$, $k = 0, \dots, N_2$ und können das Verfahren

$$\frac{\mathbf{u}_{i,k}^{n+1} - \mathbf{u}_{i,k}^n}{h_t} + \frac{1}{h_{x_1 i}} \left(\hat{\mathbf{f}}_{i-\frac{1}{2},k} - \hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},k} \right) + \frac{1}{h_{x_2 k}} \left(\hat{\mathbf{f}}_{i,k-\frac{1}{2}} - \hat{\mathbf{f}}_{i,k+\frac{1}{2}} \right) = 0, \quad i = 1, \dots, N_1, \quad k = 1, \dots, N_2$$

bilden.

5.5 ENO-Roe- und WENO-Roe-Verfahren zur Modellierung der Freiflugphase

Im Falle einer Raumdimension ist das System der Freiflugphase durch

$$\partial_t f_j(t, x) + (v_j)_1 \partial_x f_j(t, x) = 0, \quad 1 \leq j \leq p$$

gegeben, und es gilt

$$\mathbf{f} = ((v_j)_1 f_j(t, x))_{1 \leq j \leq p},$$

und somit ist die Jacobi-Matrix

$$D\mathbf{f} = \text{diag}((v_j)_1, \quad 1 \leq j \leq p)$$

schon diagonalisiert. Wir setzen demnach für

$$\bar{g}(x_i) = (v_j)_1 f_{j,i}^n, \quad i = 1, \dots, N_x + 1$$

und führen eine Rekonstruktion mit ENO- oder WENO-Verfahren durch, um $g_{i+\frac{1}{2}}^-$ bzw. $g_{i+\frac{1}{2}}^+$ für $i = 1, \dots, N_x + 1$ zu erhalten. Gemäß den Vorgaben des Roe-Verfahrens gehen wir für $i = 0, \dots, N_x + 1$ wie folgt vor:

Gilt $(v_j)_1 > 0$, so setzen wir

$$\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2}}^n = g_{i+\frac{1}{2}}^-,$$

andernfalls, d.h. $(v_j)_1 < 0$, setzen wir

$$\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2}}^n = g_{i+\frac{1}{2}}^+.$$

Gilt $(v_j)_1 = 0$, so ist $\bar{g}(x_i) = 0$, somit $g_{i+\frac{1}{2}}^- = 0$ und $g_{i+\frac{1}{2}}^+ = 0$ und somit $\hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2}}^n = 0$. Abschließend berechnen wir den Upwind-Schritt

$$f_{j,i}^{n+1} = f_{j,i}^n + \frac{h_t}{h_{x_i}} \left(\hat{\mathbf{f}}_{i-\frac{1}{2}}^n - \hat{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2}}^n \right), \quad i = 1, \dots, N_x + 1.$$

In zwei Raumdimensionen ist das System der Freiflugphase durch

$$\partial_t f_j(t, x_1, x_2) + (v_j)_1 \partial_{x_1} f_j(t, x_1, x_2) + (v_j)_2 \partial_{x_2} f_j(t, x_1, x_2) = 0, \quad 1 \leq j \leq p$$

gegeben. Die Flüsse

$$\mathbf{f}_1 = ((v_j)_1 f_j(t, x_1, x_2))_{1 \leq j \leq p} \text{ bzw. } \mathbf{f}_2 = ((v_j)_2 f_j(t, x_1, x_2))_{1 \leq j \leq p}$$

haben mit

$$D\mathbf{f}_1 = \text{diag}((v_j)_1, 1 \leq j \leq p) \text{ bzw. } D\mathbf{f}_2 = \text{diag}((v_j)_2, 1 \leq j \leq p)$$

auch schon diagonalisierte Jacobi-Matrizen. Wir setzen zunächst jeweils für ein $k \in \{1, \dots, N_{x_2} + 1\}$

$$\bar{g}(x_i) = (v_j)_1 f_{j,i,k}^n, \quad i = 1, \dots, N_{x_1} + 1$$

auf dem 1D-Gitter

$$x_i = x_{1i}, \quad i = 1, \dots, N_{x_1} + 1$$

und rekonstruieren in 1D mit ENO- oder WENO-Verfahren, um $g_{i+\frac{1}{2}}^-$ bzw. $g_{i+\frac{1}{2}}^+$ für $i = 0, \dots, N_{x_1} + 1$ zu erhalten. Dann setzen wir für $i = 0, \dots, N_{x_1} + 1$ wieder gemäß dem Roe-Verfahren

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k}^n = g_{i+\frac{1}{2}}^-,$$

falls $(v_j)_1 > 0$ gilt, andernfalls, d.h. $(v_j)_1 < 0$, setzen wir

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k}^n = g_{i+\frac{1}{2}}^+.$$

Gilt $(v_j)_1 = 0$, so ist $\bar{g}(x_i) = 0$, somit $g_{i+\frac{1}{2}}^- = 0$ und $g_{i+\frac{1}{2}}^+ = 0$ und somit $\hat{f}_{i+\frac{1}{2},k}^n = 0$.

Anschließend wird

$$\bar{g}(x_k) = (v_j)_2 f_{j,i,k}^n$$

jeweils für ein $i \in \{1, \dots, N_{x_1} + 1\}$ auf dem 1D-Gitter

$$x_k = x_{2k}, \quad k = 1, \dots, N_{x_2} + 1$$

gewählt und wiederum mit ENO- oder WENO-Verfahren in 1D rekonstruiert. Wir erhalten analog $g_{k+\frac{1}{2}}^-$ bzw. $g_{k+\frac{1}{2}}^+$ für $k = 1, \dots, N_{x_2} + 1$. Gilt hier dann analog für $k = 1, \dots, N_{x_2} + 1$ $(v_j)_2 > 0$, so wählen wir

$$\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}}^n = g_{k+\frac{1}{2}}^-,$$

andernfalls d.h. $(v_j)_2 < 0$, fällt die Wahl auf

$$\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}}^n = g_{k+\frac{1}{2}}^+.$$

Gilt $(v_j)_2 = 0$, so ist $\bar{g}(x_k) = 0$, somit $g_{k+\frac{1}{2}}^- = 0$ und $g_{k+\frac{1}{2}}^+ = 0$ und somit $\hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}}^n = 0$.

Abschließend berechnen wir den Upwind-Schritt in zwei Raumdimensionen

$$f_{j,i,k}^{n+1} = f_{j,i,k}^n + \frac{h_t}{h_{x_1 i}} \left(\hat{f}_{i-\frac{1}{2},k} - \hat{f}_{i+\frac{1}{2},k} \right) + \frac{h_t}{h_{x_2 k}} \left(\hat{f}_{i,k-\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i,k+\frac{1}{2}} \right),$$

$$i = 1, \dots, N_{x_1} + 1, \quad k = 1, \dots, N_{x_2} + 1.$$

5.6 Verfahren zur Approximation des Kollisionsterms

Das in den numerischen Berechnungen des Kollisionsterms zur Anwendung kommende Verfahren wurde in [32] entwickelt und basiert auf der Aufspaltung des Kollisionsterms in der Form

$$Q(f, f) = Q^+(f, f) - Q^-(f, f)$$

und der getrennten numerischen Berechnung der beiden Teile.

Bei der Berechnung von $Q^+(f, f)$ spielt die folgende Darstellung die entscheidende Rolle. Es gilt

$$Q^+(f, f)(v) = \mathcal{F}_{y \rightarrow v} \left[\int_{\mathbb{R}^3} T(u, y) \mathcal{F}_{z \rightarrow y}^{-1} [f(z - u) f(z + u)](u, y) du \right] (v), \quad (5.1)$$

wobei

$$\hat{\phi}(\xi) = \mathcal{F}_{v \rightarrow \xi} [\phi(v)](\xi) = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) e^{i\langle v, \xi \rangle} dv$$

die Fouriertransformation und

$$\mathcal{F}_{\xi \rightarrow v}^{-1} [\hat{\phi}(\xi)](v) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\phi}(\xi) e^{-i\langle v, \xi \rangle} d\xi$$

die inverse Fouriertransformation bezeichnet. Der Kern $T(u, y)$ ist mit

$$T(u, y) = 8 \int_{S^2} B(2|u|, \mu) e^{-i|u|\langle y, e \rangle} de, \quad \mu = \cos(\theta) = \frac{\langle u, e \rangle}{|u|}$$

gegeben, wobei B den Kollisionskern bezeichnet. Diese Darstellung enthält zwar eine neunfache Integration statt einer fünffachen Integration in der ursprünglichen Form (2.1), aber es ist keine Integration über die Einheitssphäre einbezogen. Der Kern T hängt nicht von f ab und kann daher je nach Geschwindigkeitsdiskretisierung und Kollisionsmodell in einem Preprocessing-Schritt berechnet und abgespeichert werden. Die beiden Fouriertransformationen sind durch die Verwendung der „Fast Fourier Transform (FFT)“ sehr effizient berechenbar. Der Kern $T(u, y)$ hängt nicht wirklich von sechs Variablen ab. Selbst im allgemeinsten Interaktionsmodell des $r^{-\alpha}$ -Potentials ist er nur von $|u|$, $|y|$ und $\langle u, y \rangle$ abhängig. Der Kollisionskern ist in diesem Fall in der Form

$$B(|u|, \mu) = |u|^{1-\frac{4}{\alpha}} g_{\alpha}(\mu), \quad \alpha > 1$$

gegeben, wobei g_{α} eine gegebene Funktion des Streuwinkels bezeichnet. Im Falle des variablen Hartkugelmodells ist er sogar durch

$$T(u, y) = 2^{5+\lambda} \pi C_{\lambda} |u|^{\lambda} \text{sinc}(|u||y|)$$

gegeben, wobei

$$\text{sinc}(z) = \sin z/z, \quad z \in \mathbb{R}$$

gilt, und in diesem Modell der Kollisionskern die Gestalt

$$B(|u|, \mu) = C_\lambda |u|^\lambda, \quad -3 < \lambda \leq 1$$

hat. Das heißt, er hängt dann nur noch von zwei skalaren Größen $|u|$ und $|y|$ ab. Dies ermöglicht eine sehr viel effizientere Berechnung als im vorhergehenden Fall.

Definieren wir die folgenden Funktionen:

$$g^{(1)}(u, z) = f(z - u)f(z + u)$$

und

$$g^{(2)}(u, y) = \mathcal{F}_{z \rightarrow y}^{-1} [g^{(1)}(u, z)](u, y),$$

so gilt

$$\text{supp } g^{(1)}(u, \cdot) = B_L(V - u) \cap B_L(V + u)$$

mit $B_L(V) = \{v \in \mathbb{R}^3 : |v - V| \leq L\}$. Daraus folgt

$$\text{supp } g^{(1)}(u, \cdot) = \emptyset, \quad |u| > L$$

und somit gilt schließlich

$$\text{supp } g^{(2)}(u, \cdot) = \emptyset, \quad |u| > L.$$

Die Integration bzgl. u über \mathbb{R}^3 in (5.1) kann demnach auf die Kugel $B_L(0)$ bzw. vorteilhafter auf den Würfel $C_L(0) = \{v \in \mathbb{R}^3 : |v_j| \leq L, \quad j = 1, 2, 3\}$ beschränkt werden. Die zugehörige Menge diskreter Geschwindigkeiten sei auch hier mit

$$C_u(0) = \{u_j = h_v j, \quad j \in C_{n_v}\}$$

gewählt. Die Diskretisierung des Integrationsbereichs der Fouriertransformation sei mit

$$C_y = \{y_j = h_y j, \quad j \in C'_{n_v}\}$$

gewählt, wobei C'_{n_v} für die Menge dreidimensionaler Indizes

$$C'_{n_v} = \left\{ k \in \mathbb{Z}^3 : -\frac{n_v}{2} < k_m \leq \frac{n_v}{2}, \quad m = 1, 2, 3 \right\}$$

steht. Es soll die Beziehung

$$h_v h_y = \frac{2\pi}{n_v} \quad \text{d. h.} \quad h_y = \frac{\pi}{L}$$

gelten. Die Berechnung des Gewinnterms $Q^+(f, f)(v)$ besteht schließlich aus der Integration von $g^{(2)}(u, y)$ über $C_L(0)$ bzgl. u

$$g^{(3)}(y) = \int_{C_L(0)} T(u, y) g^{(2)}(u, y) du$$

und einer abschließenden Fouriertransformation

$$Q^+(f, f)(v) = \mathcal{F}_{z \rightarrow y} [g^{(3)}(y)](v).$$

Diese Berechnung kann mit dem folgenden Algorithmus realisiert werden: Sei $C_v(V)$ die Menge der diskreten Geschwindigkeiten aus (4.2)

1. für alle $y_j \in C_y$

1.1. setze $g^{(3)}(y_j) = 0$

1.2. für alle $u_k \in C_u(0)$

1.2.1. für alle $z_l \in C_v(V)$ setze

$$g^{(1)}(u_k, z_l) = f(z_l - u_k) f(z_l + u_k)$$

1.2.2. berechne

$$g^{(2)}(u_k, y_j) = \frac{h_y^3}{(2\pi)^3} \sum_{z_l \in C_v(V)} \omega_l e^{-i\langle y_j, z_l \rangle} g^{(1)}(u_k, z_l)$$

1.2.3. berechne

$$g^{(3)}(y_j) := g^{(3)}(y_j) + \omega_k T(u_k, y_j) g^{(2)}(u_k, y_j)$$

2. für alle $v_k \in C_v(V)$ berechne

$$Q^+(f, f)(v_k) := h_y^3 \sum_{y_j \in C_y} \omega_j e^{i\langle v_k, y_j \rangle} g^{(3)}(y_j).$$

Die ω_k , $k \in C_{n_v}$, C_{n_v} Indexmenge aus (4.1), in 1.2.2., 1.2.3. und 2. stehen für die Gewichte einer Quadraturformel auf den gleichmäßigen Gittern $C_v(V)$, $C_u(0)$ und C_y . In unseren Tests wurde die Trapezregel benutzt, welche die formale Genauigkeit von $O(n_v^{-2})$ besitzt und sehr leicht zu implementieren ist. Eine Wahl von genaueren Quadraturen wie der Simpsonregel würde weder den numerischen Aufwand noch die praktische Realisierung des Algorithmus tangieren.

Der Schritt 1.2.1. kann sehr effizient ausgeführt werden, da die punktweise Multiplikation nur für Punkte $z_l \in \text{supp } g^{(1)}(u_k, \cdot)$ berechnet werden muß.

Der aufwendigste Schritt des ganzen Algorithmus ist 1.2.2.. Er kann auch in der Form

$$g^{(2)}(u_k, y_j) = \frac{1}{(2L)^3} e^{-i\langle y_j, V \rangle} \sum_{l \in C'_{n_v}} \omega_l e^{-i\frac{2\pi}{n_v} \langle j, l \rangle} g^{(1)}(u_k, z_l), \quad y_j \in C_y$$

geschrieben werden, so daß dieser Schritt für jedes u_k eine FFT und eine Multiplikation mit der Diagonalmatrix

$$D = \text{diag} \{ e^{-i\langle y_j, V \rangle}, j \in C'_{n_v} \}$$

erfordert.

Die Realisierung von 1.2.3. ist offensichtlich, die Werte von $T(u_k, y_j)$ können vorher berechnet und gespeichert werden.

Der letzte Schritt des Algorithmus kann in der Form

$$Q^+(f, f)(v_k) := h_y^3 e^{i\langle v_k, V \rangle} \sum_{j \in C'_{n_v}} \omega_j e^{i\frac{2\pi}{n_v} \langle k, j \rangle} g^{(3)}(y_j)$$

geschrieben werden. Dies erfordert demnach eine FFT und eine Multiplikation mit der Diagonalmatrix D^* . Der numerische Aufwand ist dann im Vergleich mit den vorherigen Schritten vernachlässigbar.

Im Falle des Variable Hard Sphere (VHS) Modells, in dem $T(u, y)$ durch

$$T(u, y) = 2^{5+\lambda} \pi C_\lambda |u|^\lambda \text{sinc}(|u||y|)$$

gegeben ist, läßt sich der Algorithmus sehr viel effizienter gestalten. $T(u, y)$ hängt hier nur noch von den Beträgen $|u|$ und $|y|$ der Variablen ab. Auf dem Gitter $C_u(0) \times C_v(V)$ besitzt er die Darstellung

$$T(u_k, y_j) = T_{k,j} = 2^{5+\lambda} \pi C_\lambda h_v^\lambda |k|^\lambda \text{sinc}\left(\frac{2\pi}{n_v} |k||j|\right).$$

Wir betrachten die geschickte Speicherung von T in der Form

$$T_{k,j} = \tilde{T}_{|k|^2, |j|^2}.$$

Anschließend zerlegen wir die Indexmenge C_{n_v} in Klassen der Form

$$C_{n_v} = \bigcup_{m=0}^{\frac{3}{4}n_v^2} Cl_m, \quad Cl_m = \{k \in \mathbb{Z}^3 : |k|^2 = m\},$$

wobei die Klasse $Cl_{7 \bmod 8}$ leer ist, da die Gleichung $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = 7 \bmod 8$ in \mathbb{Z}^3 laut Zahlentheorie keine Lösung besitzt. Durch eine Modifizierung des Algorithmus, um diese

Klassenstruktur ausnutzen zu können, erreichen wir eine Reduktion des numerischen Aufwands. Details zu den notwendigen Modifikationen und der dadurch gewonnenen Effizienz finden sich in [32]

Der Verlustterm $Q^-(f, f)(v)$ besitzt die Darstellung

$$Q^-(f, f)(v) = f(v) \int_{\mathbb{R}^3} B_{tot}(|v - v_*|) f(v_*) dv_*$$

mit

$$B_{tot}(|u|) = \int_{S^2} B(|u|, \mu) de.$$

Auch hier kann die Integration auf den Würfel $C_L(V)$ beschränkt werden. Wir berechnen zunächst den linearen Integraloperator vom Faltungstyp

$$g(v) = \int_{C_L(V)} B_{tot}(|v - v_*|) f(v_*) dv_*$$

und multiplizieren punktweise $f(v)$ mit $g(v)$ auf dem Gitter $C_v(V)$. Die gleiche Diskretisierung wie vorher liefert

$$g(v_k) = h_v^3 \sum_{v_{*j} \in C_v(V)} \omega_j B_{tot}(h_v |k - j|) f(v_{*j}),$$

so daß hier eine Multiplikation einer dreistufigen Block-Toeplitz-Matrix mit den Elementen

$$h_v^3 B_{tot}(h_v |k - j|), \quad k, j \in C_{n_v}$$

mit dem Vector $(\omega_j f(v_{*j}))_{j \in C_{n_v}}$ durchgeführt werden muß. Zuletzt bilden wir noch

$$Q^-(f, f)(v_k) = f(v_k) g(v_k), \quad k \in C_{n_v}.$$

Der numerische Aufwand fällt hierbei im Vergleich zu dem der Berechnung von $Q^+(f, f)$ nicht ins Gewicht.

5.7 Verfahren zur Modellierung des Kollisionsschritts

Wir wollen hier mit

$$f_C^n \in (\mathbb{R}_0^+)^p, \quad p = (n_v + 1)^3$$

die Approximation der Verteilungsfunktion f auf dem Gitter $C_v(V)$ in einer inneren Zelle der Ortsdiskretisierung zum Zeitpunkt $t = t_n$ bezeichnen. In 1D wäre dies

$$(f_{j,i}^n)_{1 \leq j \leq p} \text{ für ein } i \text{ mit } 1 < i < N_x + 1$$

und in 2D

$$(f_{j,i,k}^n)_{1 \leq j \leq p} \text{ für ein Paar } i, k$$

mit der Eigenschaft, daß die Zelle der Ortsdiskretisierung mit Mittelpunkt (x_{1i}, x_{2k}) nicht zum Rand des Berechnungsgebietes Ω gehört. Das einfachste Verfahren zur Berechnung des Kollisionsschritts ist das explizite Eulerverfahren der Form:

in jeder inneren Ortszelle führen wir folgende Schritte durch:

$$\begin{aligned} f^n &= f_C^n \\ \tilde{f}^{n+1} &= f^n + \frac{h_t}{\epsilon} Q(f^n, f^n) \\ f^{n+1} &= \text{Conserve}(\tilde{f}^{n+1}) \\ f_C^n &= f^{n+1}, \end{aligned}$$

wobei h_t die Zeitschrittweite bezeichnet. *Conserve* steht für den in [7], [8] und [9] entwickelten und getesteten Momenterhaltungsalgorithmus, der auf der Fouriertransformation basiert und eine notwendige Korrektur am Vektor f^n zur numerischen Erhaltung der Momente von f^n vornimmt. Die formale Genauigkeit dieses Verfahrens liegt bei $\mathcal{O}(h_t)$; diese ist im Vergleich zu der Genauigkeit der Berechnung von $Q(f, f)$, welche $\mathcal{O}(n_v^{-2})$ beträgt, nicht ausreichend. Die numerischen Tests zeigen, daß die Konvergenz von $\mathcal{O}(h_t)$ dominiert ist. Es ist demnach sinnvoll, eine Diskretisierung in der Zeit von zweiter Genauigkeitsordnung zu wählen, wie z.B. ein Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung in der Form:

in jeder inneren Ortszelle führen wir folgende Schritte durch:

$$\begin{aligned} f^n &= f_C^n \\ \tilde{f}^{n+\frac{1}{2}} &= f^n + \frac{h_t}{2\epsilon} Q(f^n, f^n) \\ \tilde{f}^{n+1} &= f^n + \frac{h_t}{\epsilon} Q(\tilde{f}^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{f}^{n+\frac{1}{2}}) \\ f^{n+1} &= \text{Conserve}(\tilde{f}^{n+1}) \\ f_C^n &= f^{n+1}. \end{aligned}$$

5.8 Numerische Behandlung der Randbedingungen

Wir wollen die Randbedingung

$$\begin{aligned} f(t, x, v) |\langle v, \nu(x) \rangle| &= \int_{\langle v', \nu(x) \rangle < 0} \mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v) f(t, x, v') |\langle v', \nu(x) \rangle| dv' \\ x \in \partial\Omega, \langle v, \nu(x) \rangle &> 0 \end{aligned}$$

in ihrer diskreten Form

$$f_j(t, x) = \frac{1}{|\langle v_j, \nu(x) \rangle|} h_v^3 \sum_{j' \in C_{n_v}, \langle v_{j'}, \nu(x) \rangle < 0} \omega_{j'}(\mathcal{R}_h)_{jj'} f_{j'}(t, x) |\langle v_{j'}, \nu(x) \rangle|,$$

$$x \in \partial\Omega, \langle v_j, \nu(x) \rangle > 0$$

auf dem Gitter $C_v(V)$ aus (4.2) betrachten. Hierbei bezeichnet (\mathcal{R}_h) wieder die Approximation an den Streukern $\mathcal{R}(t, x, v' \rightarrow v)$ auf dem Gitter $C_v(V)$, und die $\omega_{j'}$ die Gewichte der Simpson-Quadratur in 3D. Wir gehen wieder von den dreidimensionalen Indizes $j' \in C_{n_v}$ aus (4.1) zu den eindimensionalen Indizes $i = 1, \dots, p = (n_v + 1)^3$ über und setzen wieder

$$\mathbf{u}(t, x) = (u_1(t, x), u_2(t, x), \dots, u_p(t, x))^T = (f_1(t, x), f_2(t, x), \dots, f_p(t, x))^T \in \mathbb{R}^p.$$

Der Übergang erfolgt wieder mit der bijektiven Indextransformation

$$\sigma : C_{n_v} \rightarrow \{1, \dots, (n_v + 1)^3\}, \quad j = (j_1, j_2, j_3)^T \rightarrow \sigma(j)$$

$$\sigma(j) = i = \left(j_3 + \frac{n_v}{2}\right) + (n_v + 1) \left(\left(j_2 + \frac{n_v}{2}\right) + (n_v + 1) \left(j_1 + \frac{n_v}{2}\right)\right).$$

Die Randbedingung ergibt sich dann zu

$$u_i(t, x) = \frac{1}{|\langle v_i, \nu(x) \rangle|} h_v^3 \sum_{i': \langle v_{i'}, \nu(x) \rangle < 0} \omega_{i'}(\mathcal{R}_h)_{ii'} u_{i'}(t, x) |\langle v_{i'}, \nu(x) \rangle|, \quad i : \langle v_i, \nu(x) \rangle > 0, \quad x \in \partial\Omega.$$

Die verschiedenen Randbedingungen sind dann, wobei wir x und t weglassen, da sie nur als Parameter vorkommen:

- **Spiegelreflexion:**

Analytisch ergibt sich durch Einsetzen des Streukerns

$$\mathcal{R}(v' \rightarrow v) = \delta(v - v' + 2\nu\langle v', \nu \rangle)$$

die Randbedingung zu

$$f(v) = f(v' = v - 2\nu\langle v, \nu \rangle), \quad \langle v, \nu \rangle > 0.$$

Daraus ergäbe sich formal die diskrete Randbedingung zu

$$f_j = f_{j': v_{j'} = v_j - 2\nu\langle v_j, \nu \rangle}, \quad \langle v_j, \nu \rangle > 0.$$

Hier zeigt sich folgendes Problem: Wir brauchen den Index j' , der zu der Geschwindigkeit

$$v_{j'} = v_j - 2\nu\langle v_j, \nu \rangle$$

gehört; aber

$$v_j - 2\nu\langle v_j, \nu \rangle$$

muß nicht wieder auf dem Geschwindigkeitsgitter $C_v(V)$ liegen. Dieses Problem können wir wie folgt beheben. Wir bilden um jeden Geschwindigkeitspunkt v_j in $C_v(V)$ den Würfel

$$C_{v_j} = \left\{ v \in \mathbb{R}^3 : v_{j_m} - \frac{1}{2}h_v < v_m \leq v_{j_m} + \frac{1}{2}h_v, m = 1, 2, 3 \right\}, \forall j \in C_{n_v}.$$

Gilt dann für $v' = v_j - 2\nu\langle v_j, \nu \rangle$

$$v' \in \bigcup_{j \in C_{n_v}} C_{v_j},$$

so folgt aus der Disjunktheit der C_{v_j}

$$v' \in C_{v_{\tilde{j}}} \text{ für ein } \tilde{j}.$$

Wir erhalten die diskrete Randbedingung in der folgenden Form:

$$f_j = f_{\tilde{j}},$$

oder mit Hilfe der Indexttransformation σ in der Form:

$$u_{\sigma(j)} = u_{\sigma(\tilde{j})}.$$

Wir permutieren demnach die Einträge von \mathbf{u} unter der Berücksichtigung des oben beschriebenen Verfahrens. Gilt aber

$$v' \notin \bigcup_{j \in C_{n_v}} C_{v_j},$$

so setzen wir

$$f_j = 0$$

bzw.

$$u_{\sigma(j)} = 0.$$

Dies ist zulässig, da wir den Träger der Massenverteilungsdichte f als Teilmenge von $C_v(V)$ angenommen haben. Die diskrete Randbedingung lautet demnach

$$u_i = \begin{cases} u_{i'=\sigma(\tilde{j})} & \text{falls } \exists \tilde{j} : v_{\sigma^{-1}(i)} - 2\nu\langle v_{\sigma^{-1}(i)}, \nu \rangle \in C_{v_{\tilde{j}}} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad i : \langle v_i, \nu \rangle > 0.$$

- **Diffuse Reflexion:**

$$(\mathcal{R}_h)_{ii'} = \mathcal{R}(v_{i'} \rightarrow v_i) = f_{M_w}(v_i) |\langle v_i, \nu \rangle|$$

mit

$$f_{M_w}(v) = \frac{C}{(2\pi T_w)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|v_i|^2}{2T_w}\right),$$

wobei C ein Faktor ist, den wir aus der Normierung

$$\int_{\langle v, \nu \rangle > 0} \mathcal{R}(v' \rightarrow v) dv = 1$$

berechnen müssen. Mit

$$C = \frac{1}{\frac{h_v^3}{(2\pi T_w)^{\frac{3}{2}}} \sum_{i: \langle v_i, \nu \rangle > 0} \omega_i \exp\left(-\frac{|v_i|^2}{2T_w}\right) |\langle v_i, \nu \rangle|}$$

ist die diskrete Randbedingung dann

$$u_i = \frac{1}{|\langle v_i, \nu \rangle|} h_v^3 \frac{C}{(2\pi T_w)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|v_i|^2}{2T_w}\right) \sum_{i': \langle v_{i'}, \nu \rangle < 0} \omega_{i'} u_{i'} |\langle v_{i'}, \nu \rangle|, \quad i : \langle v_i, \nu \rangle > 0.$$

- **Konvexkombination zwischen Spiegelreflexion und diffuser Reflexion:**

Hier ist die diskrete Randbedingung, für $0 \leq \alpha \leq 1$, gegeben durch

$$u_i = \alpha \frac{1}{|\langle v_i, \nu \rangle|} h_v^3 \frac{C}{(2\pi T_w)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|v_i|^2}{2T_w}\right) \sum_{i': \langle v_{i'}, \nu \rangle < 0} \omega_{i'} u_{i'} |\langle v_{i'}, \nu \rangle|$$

$$+ (1 - \alpha) \begin{cases} u_{i'=\sigma(\tilde{j})} & \text{falls } \exists \tilde{j} : v_{\sigma^{-1}(i)} - 2\nu \langle v_{\sigma^{-1}(i)}, \nu \rangle \in C_{v_{\tilde{j}}} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$i : \langle v_i, \nu \rangle > 0.$$

- **Absorption:**

$$(\mathcal{R}_h)_{ii'} = \mathcal{R}(t, x, v_{i'} \rightarrow v_i) = 0$$

$$u_i = 0, \quad i : \langle v_i, \nu \rangle > 0$$

- **Inflow:**

Schließlich wollen wir noch einen Einfluß in $x \in \partial\Omega$ numerisch modellieren. Wir setzen dazu die diskrete Randbedingung in $x \in \partial\Omega$ in der folgenden Form:

$$u_i = \frac{\rho_{\text{in}}}{(2\pi T_{\text{in}})^{\frac{3}{2}}} e^{\left(\frac{|v_i - V_{\text{in}}|^2}{2T_{\text{in}}}\right)}, \quad i : \langle v_i, \nu \rangle > 0,$$

wobei ρ_{in} , T_{in} und V_{in} die Dichte, die Temperatur und die mittlere Geschwindigkeit des einströmenden Gases darstellen.

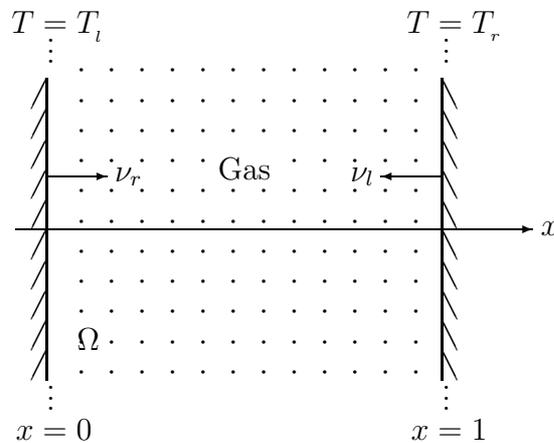
5.9 Parallelisierung der numerischen Verfahren

Durch die Ortsdiskretisierung haben wir das Berechnungsgebiet in 1D in $N_x + 1$ Ortszellen bzw. in 2D in $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ Ortszellen zerlegt. Während zur Modellierung der Freiflugphase eine Verknüpfung der Verteilungsfunktion f in den einzelnen Ortszellen nötig ist, gilt dies für den Kollisionsschritt nicht. Ihn können wir völlig unabhängig in jeder Ortszelle separat durchführen, ohne eine Kenntnis der Verteilungsfunktion in allen anderen Ortszellen zu haben. Darin liegt der grundlegende Ansatz der Parallelisierung. Wir ordnen jeweils jeder Ortszelle einen Prozessor des Parallelrechners zu, vorausgesetzt es sind mindestens so viele Prozessoren wie Ortszellen vorhanden. Andernfalls müssen wir die Berechnung in mehreren Teilen auf den jeweils zur Verfügung stehenden Prozessoren durchführen, wodurch dann die Berechnungszeit dementsprechend vergrößert wird. Gehen wir von einem PC-Cluster aus, bei dem jeder Prozessor über einen eigenen Arbeitsspeicher verfügt, können wir den folgenden parallelen Algorithmus durchführen. Zu Anfang erzeugen wir im Arbeitsspeicher jeden Prozessors die Anfangsverteilung in jeder Ortszelle in Form eines in 1D zweidimensionalen Feldes $f_{j,i}$ bzw. in 2D dreidimensionalen Feldes $f_{j,i,k}$. Dabei soll j für die Geschwindigkeitsdiskretisierung und i bzw. i, k für die Ortsdiskretisierung stehen. Jeder Prozessor verfügt so über alle Daten aller Ortszellen. Den Rechenschritt der Freiflugphase sowie den Randbedingungsschritt führen wir dann auf allen Prozessoren aus. Der Kollisionsschritt wird nur in der dem Prozessor zugeordneten Ortszelle ausgeführt, während die Daten der Verteilungsfunktion f der anderen Ortszellen unverändert bleiben. Nach Beendigung der Berechnungen dieses einen Kollisionsschritts sendet die Prozessoreinheit die neuen Daten an alle anderen Prozessoren und überschreibt dort jeweils die von diesen unangetasteten Daten der Verteilungsfunktion dieser Ortszelle. Danach verfügt jede Prozessoreinheit über die neuen Daten aller Verteilungsfunktionen nach dem Kollisionsschritt in allen Ortszellen, und wir können mit dem Rechenschritt der Freiflugphase und dem Randbedingungsschritt fortfahren, die wir wieder auf allen Prozessoreinheiten ausführen. Haben wir demnach so viele Prozessoren wie Ortszellen zur Verfügung, benötigen wir theoretisch nur die Zeit eines Kollisionsschrittes eines Single-Prozessor-Rechners zur Durchführung aller Kollisionsschritte aller Ortszellen. Dies wird in der Praxis nicht ganz erreicht, da bei großen Dimensionen der auftretenden Felder das Senden der Daten einige Zeit in Anspruch nimmt. Aufgrund des extrem höheren Aufwands des Kollisionsschritts auch gegenüber dem Rechenschritt der Freiflugphase, wirkt sich eine Parallelisierung der ENO- bzw. WENO-Rekonstruktion nur maginal aus, so daß wir den Rechenschritt der Freiflugphase nicht parallelisieren und auf allen Prozessoren ausführen. Laufzeitmessungen bzgl. der Beschleunigung durch die Parallelisierung werden wir in den numerischen Ergebnissen diskutieren.

6 Numerische Ergebnisse

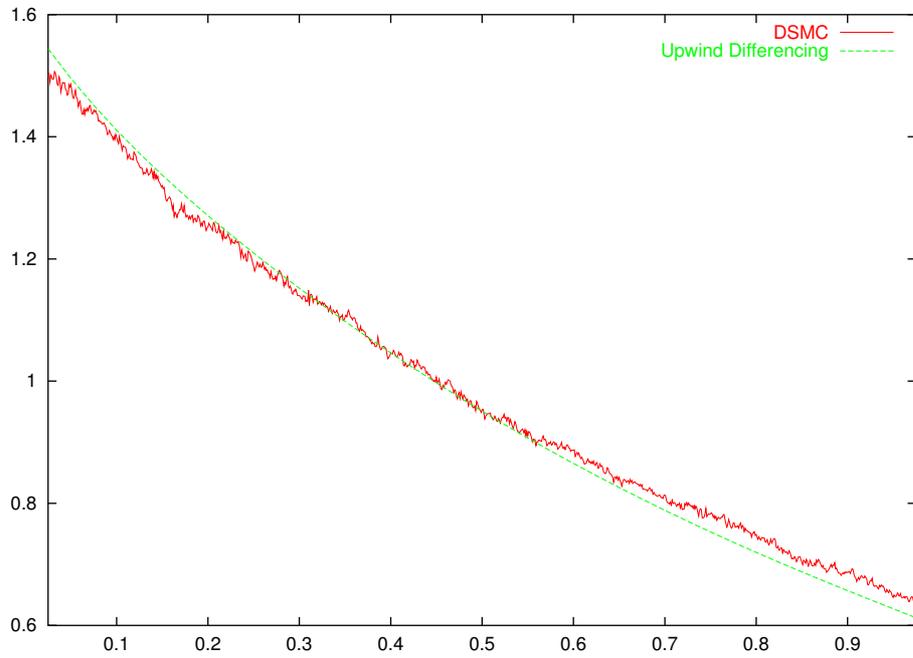
6.1 Numerische Tests in 1D

Das erste numerische Beispiel, das wir modellieren wollen, ist das eindimensionale Wärmeübergangsproblem.

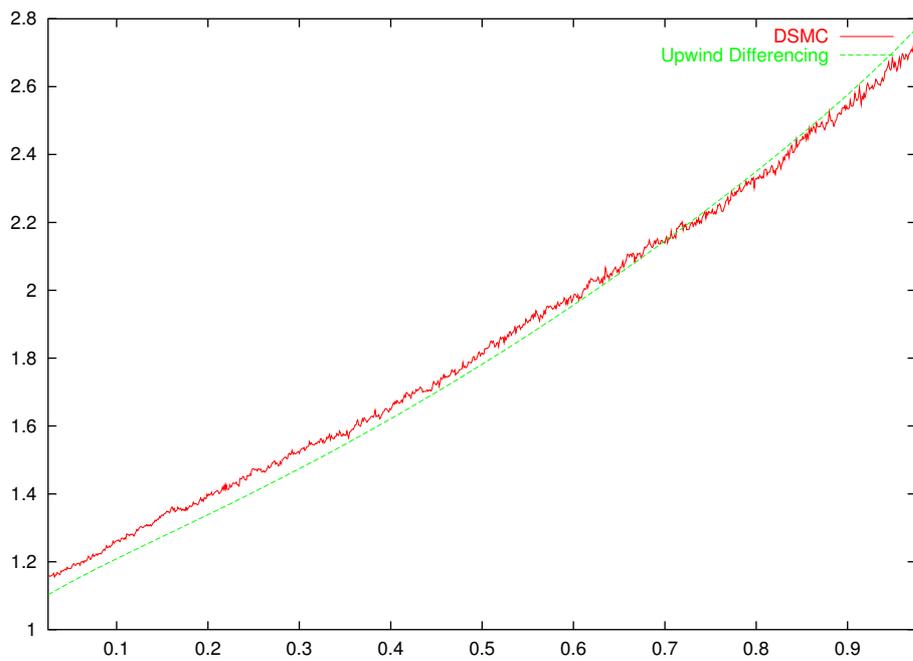


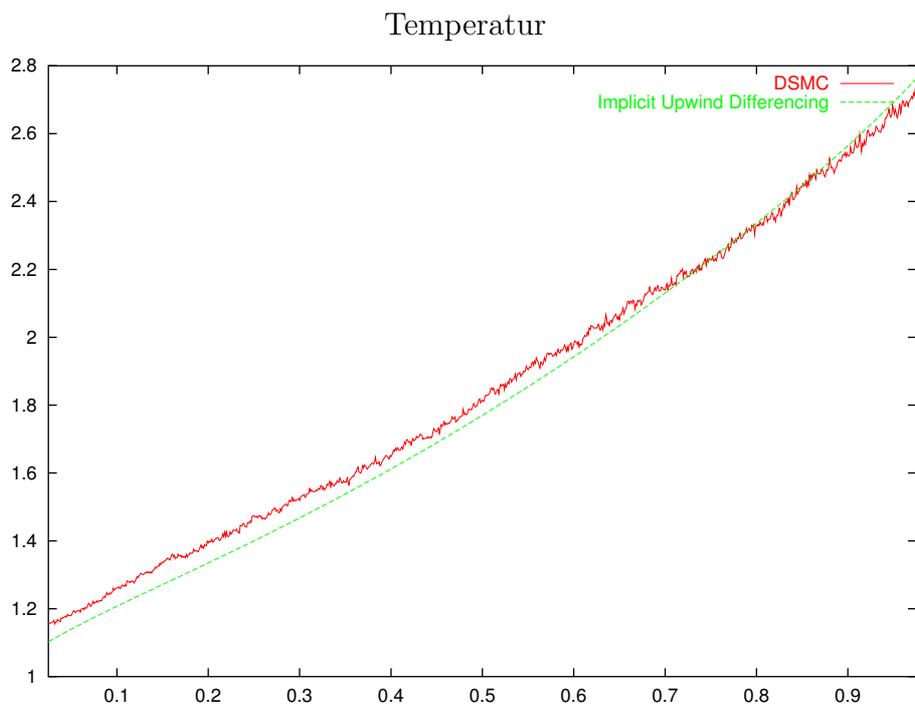
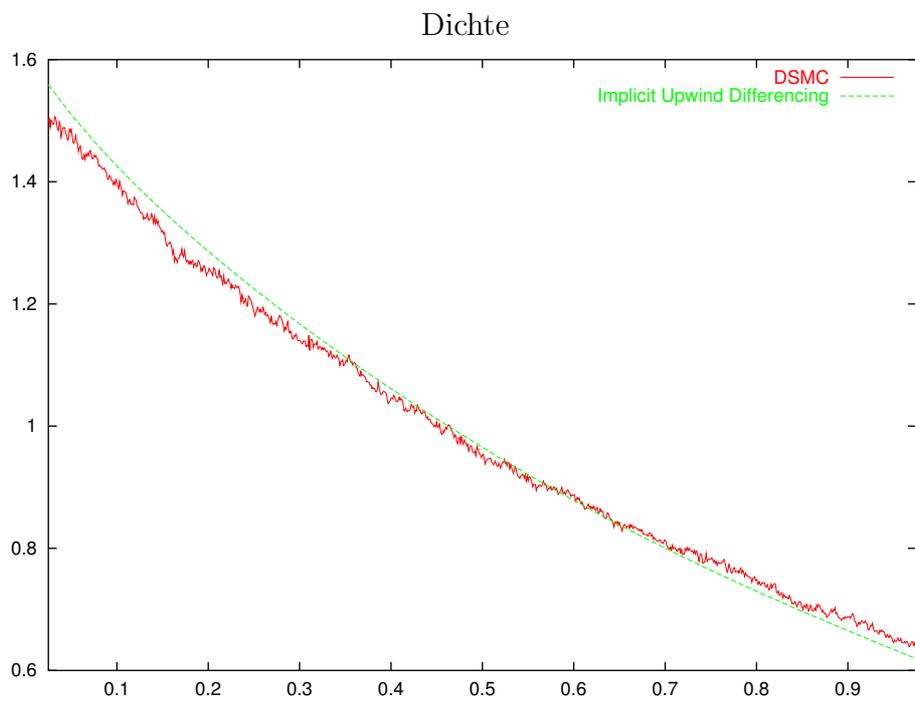
Auf den folgenden Seiten sind die numerischen Ergebnisse der verschiedenen von uns diskutierten Verfahren wie das explizite Upwind-Differenzenverfahren, das implizite Upwind-Differenzenverfahren, das ENO-Roe- und das WENO-Roe-Verfahren abgebildet. Als Methode zur Behandlung des Kollisionsschritts wurde das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung eingesetzt. Es wurde der Kollisionskern des VHS-Modells mit $\lambda = 0$, d.h. des Maxwell-Pseudomolekül-Modells verwendet. Die Kopplung erfolgte mit dem einfachen Operator-Splitting. Die Berechnungen wurden jeweils mit 41 Ortszellen und 16 Geschwindigkeitspunkten in einer Dimension des Geschwindigkeitsgitters durchgeführt. Als Randbedingung in den Punkten $x = 0$ bzw. $x = 1$ wurde eine diffuse Reflexion gewählt mit einer Wandtemperatur von $T_l = 1.0$ bzw. $T_r = 3.0$. Als Anfangsverteilung wurde im ganzen Berechnungsgebiet eine Maxwell-Verteilung mit der Dichte $\rho(0, x) = \rho_0 = 1.0$, $x \in [0, 1]$, der Temperatur $T(0, x) = T_0 = 2.0$, $x \in [0, 1]$ und einer mittleren Geschwindigkeit $V(0, x) = V_0 = (0, 0, 0)^T$, $x \in [0, 1]$ gesetzt. Die Abbildungen zeigen den berechneten Verlauf von Dichte und Temperatur im Vergleich zur DSMC. Einen Vergleich der zur Stabilität jeweils benötigten Zeitschrittweiten und der Zeitschritte zur Erreichung des stationären Zustandes, sowie ein Vergleich der Rechenzeiten der Verfahren untereinander und ein Vergleich der Rechenzeiten in Bezug auf Einprozessor- bzw. parallele Mehrprozessorenrechnung finden sich in Tabelle (6.1).

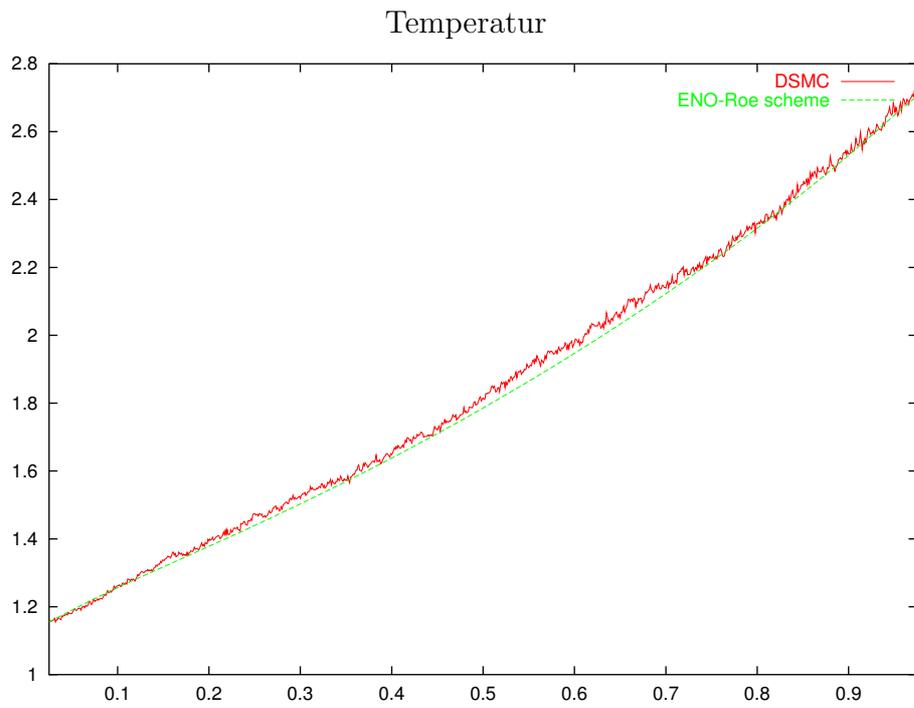
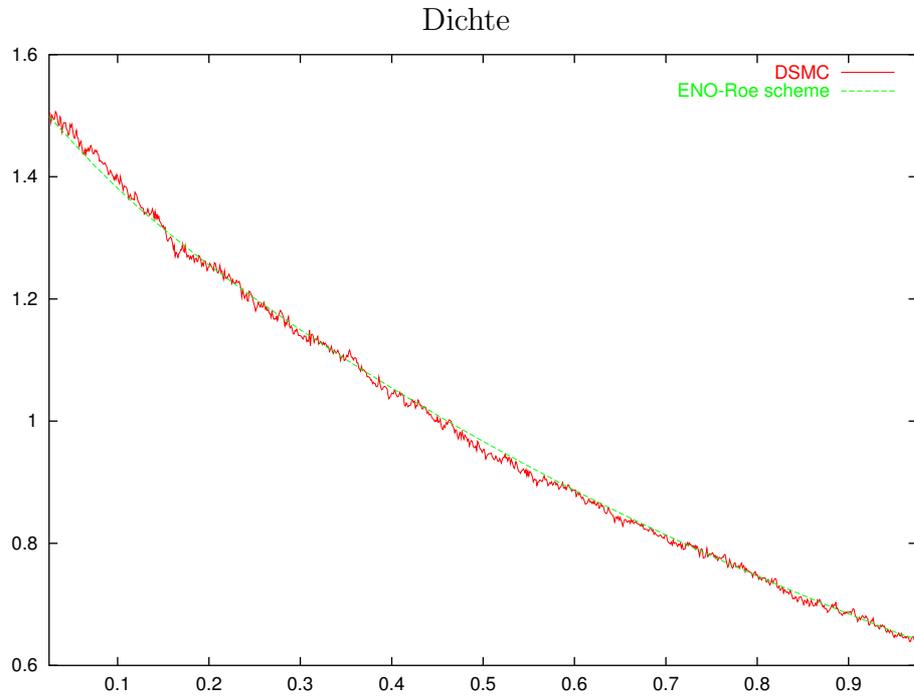
Dichte

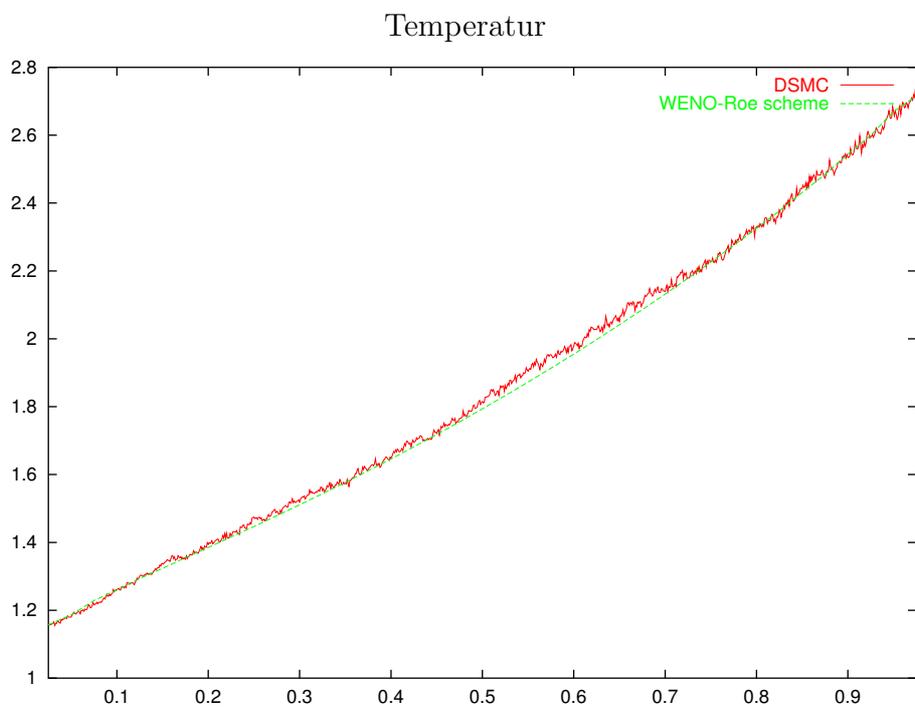
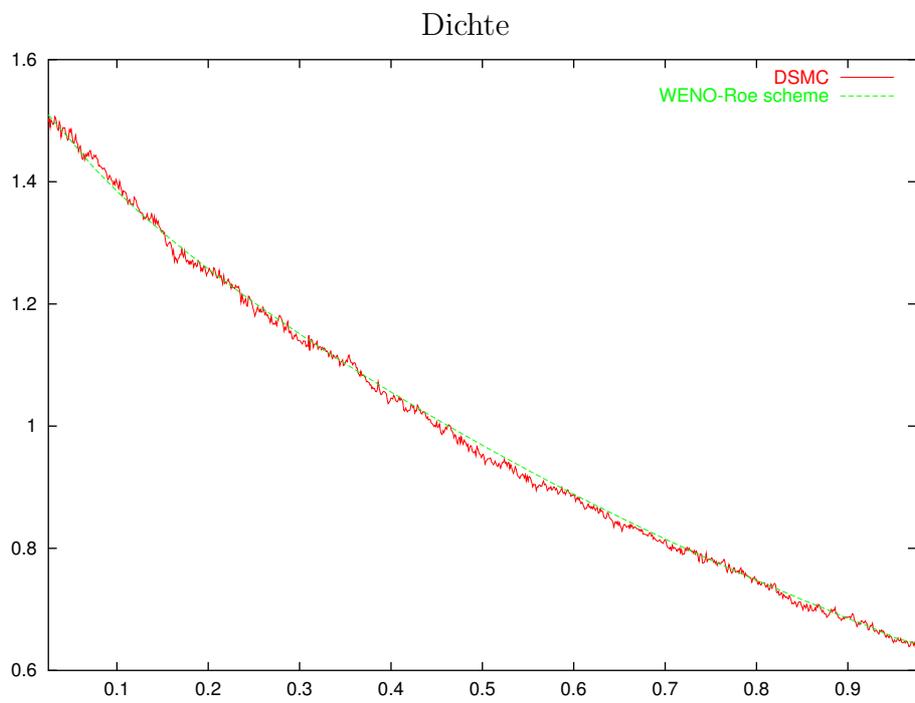


Temperatur

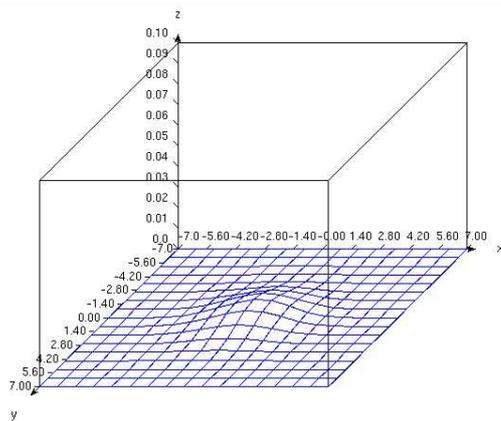
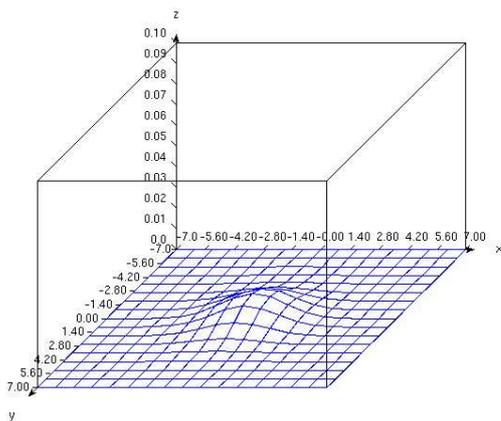
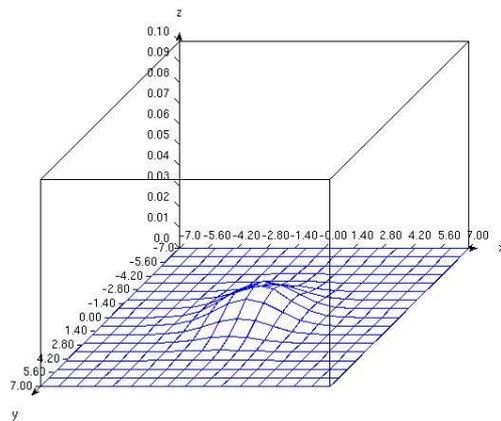
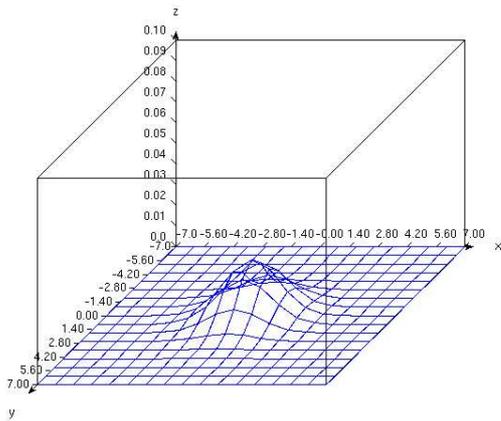
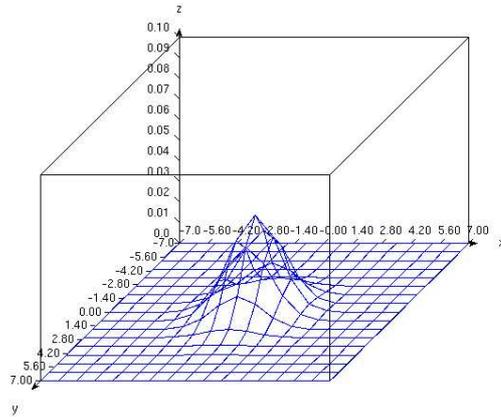
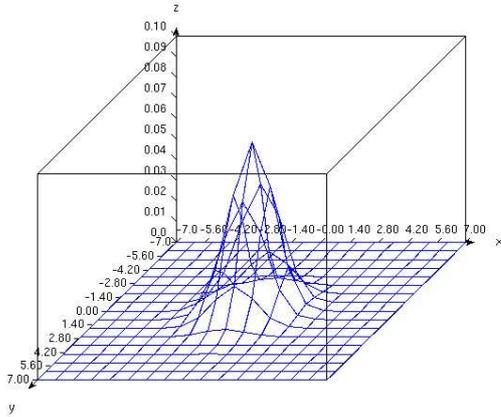








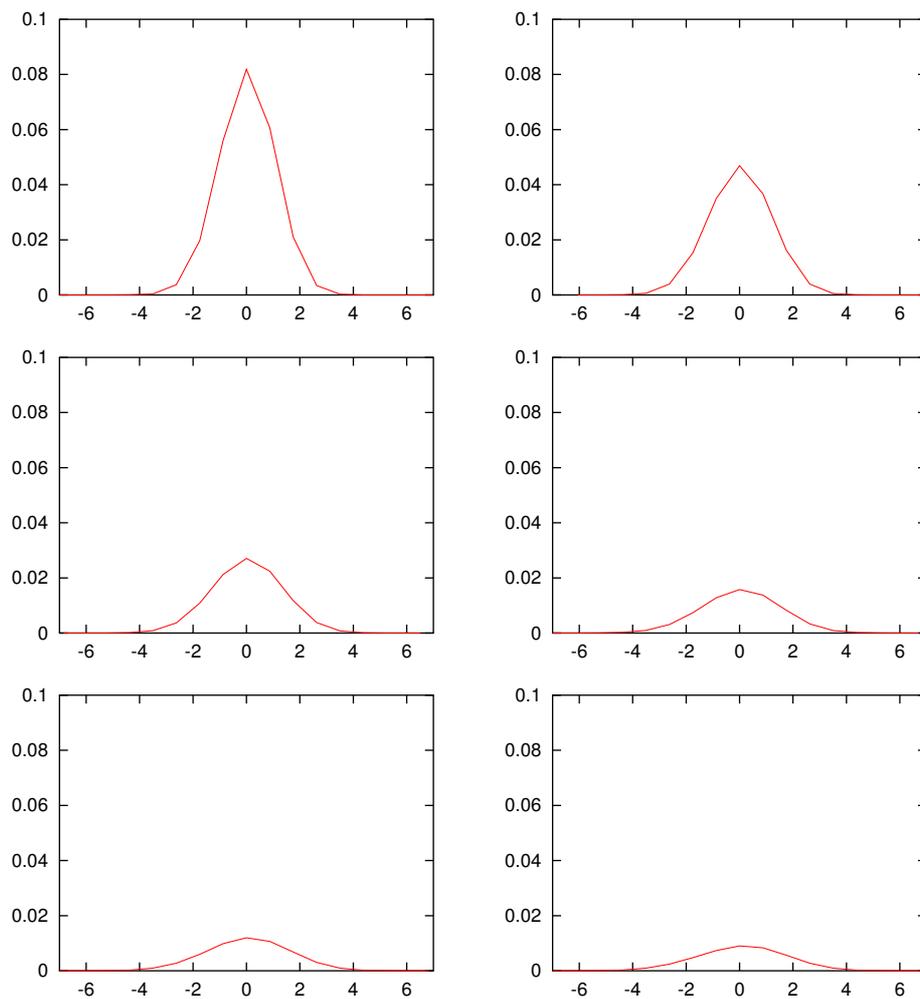
Verteilungsfunktion in $x = 0.025, 0.225, 0.475, 0.725, 0.85, 0.975$ für das ENO-ROE-Verfahren:



Querschnitt der Verteilungsfunktion in der $(v_1, 0, 0)$ Ebene in den Punkten

$$x = 0.025, 0.225, 0.475, 0.725, 0.85, 0.975$$

für das ENO-ROE-Verfahren:



Hier zeigt sich die Asymmetrie zur Achse $v_1 = 0$, die sich aus dem Wärmestrom zwischen den beiden Platten ergibt.

scheme	$N_x - 1$	procs	h_t	timesteps	time
Upw. Diff.	39	39	1/2000	40000	413 m 44 s
Upw. Diff.	39	1	1/2000	40000	7940 m 9 s
Impl. Upw. Diff.	39	39	1/1500	30000	448 m 43 s
Impl. Upw. Diff.	39	1	1/1500	30000	4697 m 15 s
ENO Roe	39	39	1/600	12000	83 m 5 s
ENO Roe	39	1	1/600	12000	747 m 53 s
WENO Roe	39	39	1/300	6000	71 m 51 s
WENO Roe	39	1	1/300	6000	498 m 52 s
DSMC	1000	1	–	–	81 m 30 s

Tabelle 6.1: Vergleich der Rechenzeiten der verschiedenen numerischen Verfahren

Hierbei bezeichnen die einzelnen Spalten

- $N_x - 1$: Anzahl der inneren Ortszellen der Raumdiskretisierung, in denen eine Kollision durchgeführt wird
- procs: Anzahl der verwendeten Prozessoren
- h_t : Zeitschrittweite
- timesteps: Anzahl der benötigten Zeitschritte zur Erreichung des stationären Zustandes
- time: benötigte Rechenzeit

Das Upwind-Differenzenverfahren, das 40000 Zeitschritte und somit 40000 Kollisionsschritte benötigt, hat die größte Beschleunigung durch die Parallelisierung. Dies bedeutet, daß in diesem Fall der Kollisionsschritt die Rechenzeit dominiert. Diese Dominanz fällt bei den anderen Verfahren, die mehr Rechenzeit zur Durchführung des Rechenschritts der Feiflugphase benötigen weniger stark aus, was sich in der Beschleunigung durch die Parallelisierung niederschlägt. Insgesamt benötigen aber die wesentlich stabileren ENO-Roe bzw. WENO-Roe-Verfahren, da sie eine viel größere Zeitschrittweite zulassen, eine signifikant kleinere Rechenzeit und liefern eine bessere Übereinstimmung mit den Ergebnissen der DSMC. Weiter macht sich die Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren bemerkbar.

Ein weiterer numerischer Test ist die Modellierung einer Schockwelle, hier werden wir das BGK-Modell heranziehen. Wir betrachten hierbei folgende Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f(t, x, v) \rangle = C_f (f_M[f(t, x, v)] - f(t, x, v)),$$

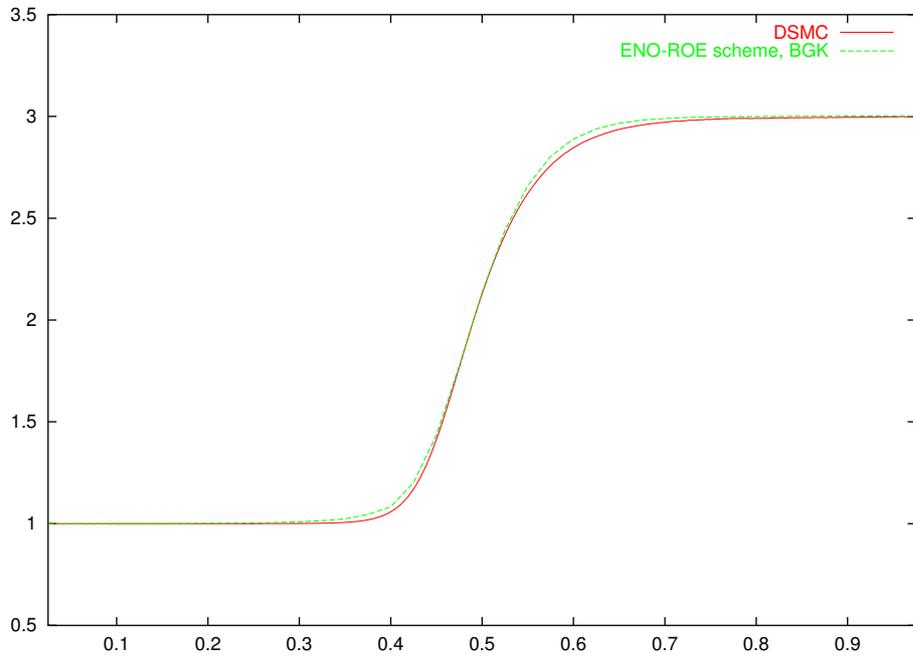
wobei $f_M[f(t, x, v)]$ die Maxwell-Verteilung mit der Dichte, Temperatur und mittleren Geschwindigkeit bezeichnet, die sich aus den Momenten von $f(t, x, v)$ ergeben. C_f ist die Kollisionsfrequenz, sie ist durch

$$C_f = c\rho T^{1-\delta}$$

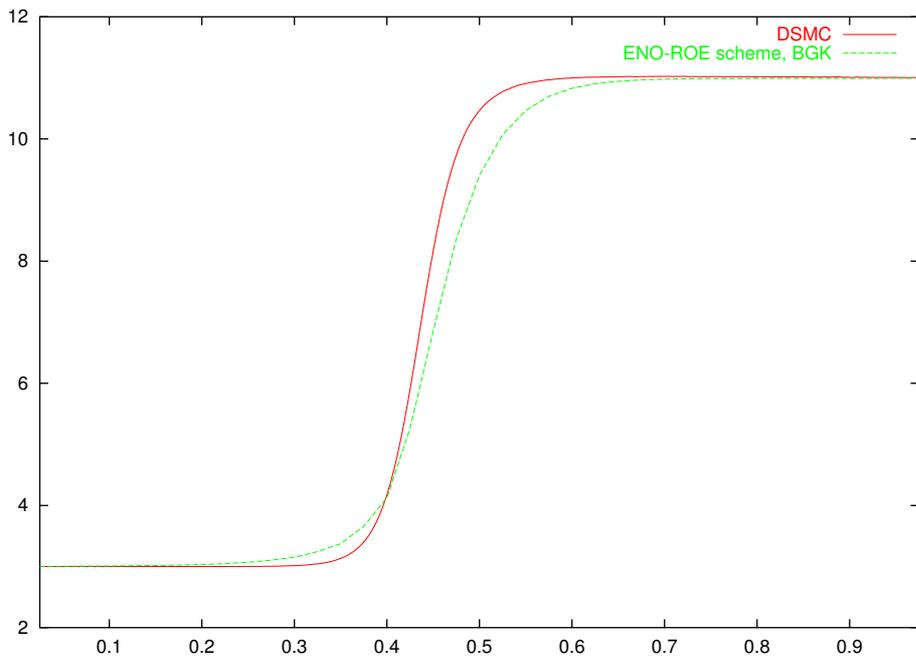
gegeben, wobei ρ die Dichte und T die Temperatur ist, die sich aus den Momenten von $f(t, x, v)$ ergibt. δ ist der Exponent aus dem Viskositätsgesetz des Gases, es gilt zum Beispiel $\delta = 0.5$ im Hartkugelmodell und $\delta = 1$ im Maxwell-Pseudomolekül-Modell. Die Konstante c hängt vom gewählten Gas ab und ist ein physikalischer Parameter.

Der numerische Test wurde für das Hartkugelmodell, d.h. $\delta = 0.5$, durchgeführt. Die Konstante c wurde mit $c = 62.83$ gewählt. Für die Berechnungen wurde das Strang-Splitting verwendet. Die Freiflugphase wurde mit dem ENO-Roe-Verfahren modelliert. Als Randbedingung haben wir in $x = 0$ einen Inflow mit der Dichte $\rho_l = 1.0$, einer Temperatur von $T_l = 3.0$ und einer mittleren Geschwindigkeit von $V_l = (3\sqrt{5}, 0, 0)^T$ vorgegeben. Daraus ergeben sich die Werte des Inflow in $x = 1$ aus den Rankine-Hugoniot-Bedingungen zu $\rho_r = 3.0$, $T_r = 11.0$ und $V_r = (\sqrt{5}, 0, 0)^T$. Als Anfangsbedingung setzen wir eine Maxwell-Verteilung mit ρ_l, T_l und V_l in der linken Hälfte des Berechnungsgebietes, d.h. für $x \leq 0.5$ und eine Maxwell-Verteilung mit ρ_r, T_r und V_r in der rechten Hälfte des Berechnungsgebietes, d.h. für $x > 0.5$. Die Berechnungen wurden jeweils mit 41 Ortszellen und 32 Geschwindigkeitspunkten in einer Dimension des Geschwindigkeitsgitters durchgeführt. Als Zeitschrittweite wurde $h_t = 1/4000$ gewählt. Zur Erreichung eines stationären Zustandes waren 63000 Zeitschritte nötig. Die Abbildungen zeigen den berechneten Verlauf von Dichte und Temperatur im Vergleich zur DSMC.

Dichte



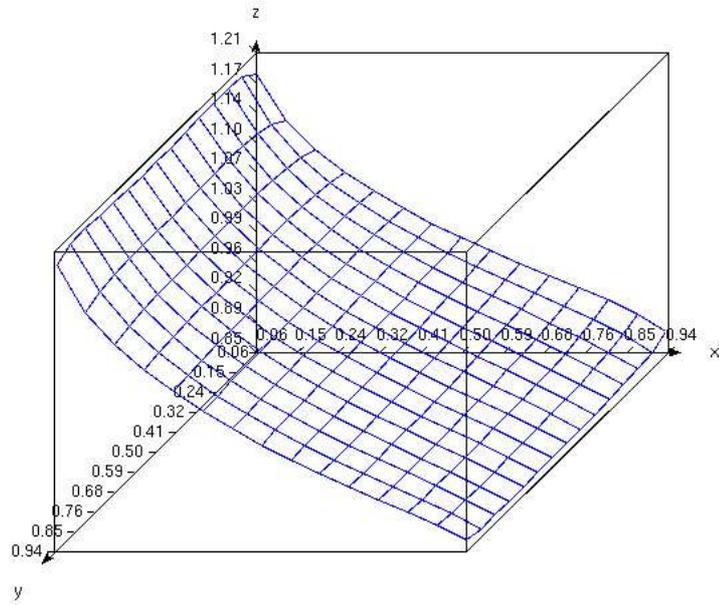
Temperatur



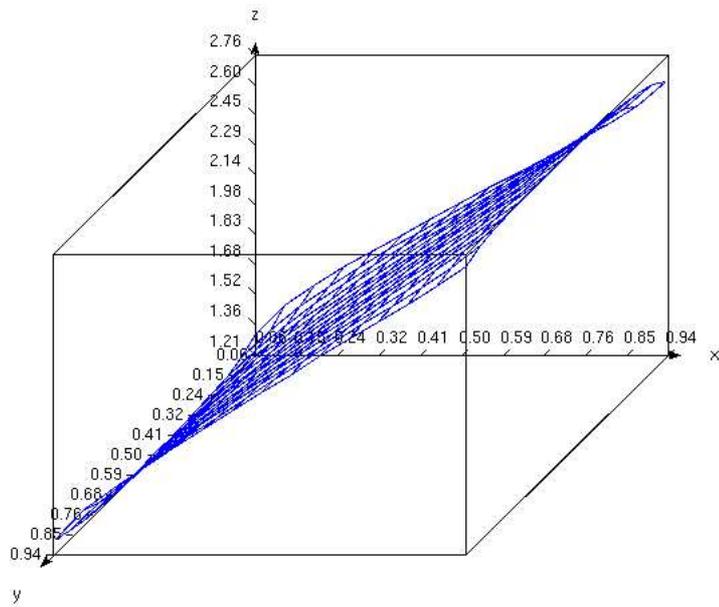
6.2 Numerische Tests in 2D

Hier haben wir zwei numerische Tests durchgeführt. Betrachtet wurde auch hier das Wärmeleitungsproblem im Quadrat $(0, 1)^2$. Im ersten Test wurde auf der Kante $x = 0$ bzw. $x = 1$ eine diffuse Reflexion mit einer Wandtemperatur von $T(0, y) = 1.0$, $y \in (0, 1)$ bzw. $T(1, y) = 3.0$, $y \in (0, 1)$ vorgegeben. Auf der Kante $y = 0$ bzw. $y = 1$ wurde eine Spiegelreflexion als Randbedingung gesetzt. Im zweiten Test wurde auf der Kante $x = 0$ bzw. $x = 1$ eine diffuse Reflexion mit der Wandtemperatur $T(0, y) = \sin(2\pi y) + 2$, $y \in (0, 1)$ bzw. $T(1, y) = \sin(2\pi y) + 2$, $y \in (0, 1)$ gewählt. Auf der Kante $y = 0$ bzw. $y = 1$ wurde wie im ersten Test eine Spiegelreflexion vorgegeben. Als Anfangsverteilung wurde in beiden Tests im ganzen Berechnungsgebiet eine Maxwell-Verteilung mit der Dichte $\rho(0, x, y) = \rho_0 = 1.0$, $(x, y) \in [0, 1]^2$, der Temperatur $T(0, x, y) = T_0 = 2.0$, $(x, y) \in [0, 1]^2$ und einer mittleren Geschwindigkeit $V(0, x, y) = V_0 = (0, 0, 0)^T$, $(x, y) \in [0, 1]^2$ gesetzt. Als Methode zur Behandlung des Kollisionsschritts wurde in beiden Tests das Euler-Verfahren eingesetzt. Es wurde jeweils der Kollisionskern des VHS Modells mit $\lambda = 0$, d.h. des Maxwell-Pseudomolekül-Modells verwendet. Die Kopplung erfolgte beidemal mit dem einfachen Operator-Splitting. Die Berechnungen wurden jeweils mit 16 Ortszellen in jeder Raumrichtung und 16 Geschwindigkeitspunkten in einer Dimension des Geschwindigkeitsgitters durchgeführt. Die Abbildungen zeigen den berechneten Verlauf von Dichte und Temperatur.

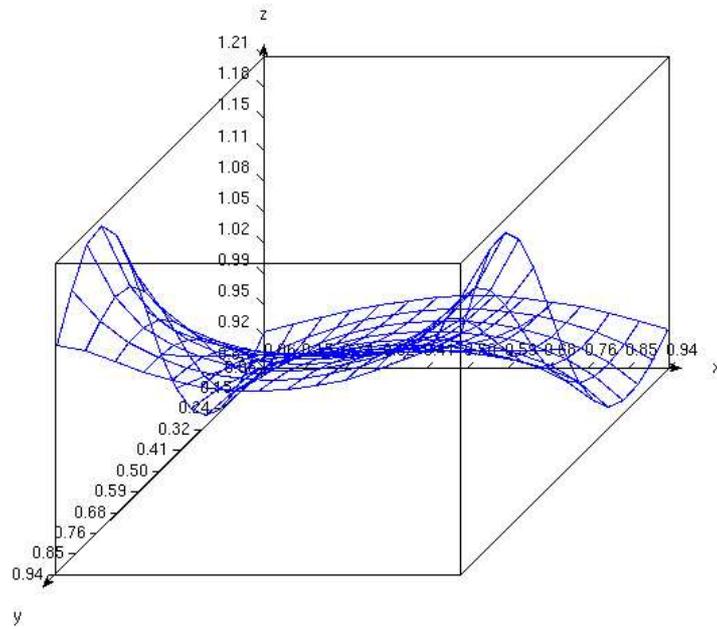
Dichte



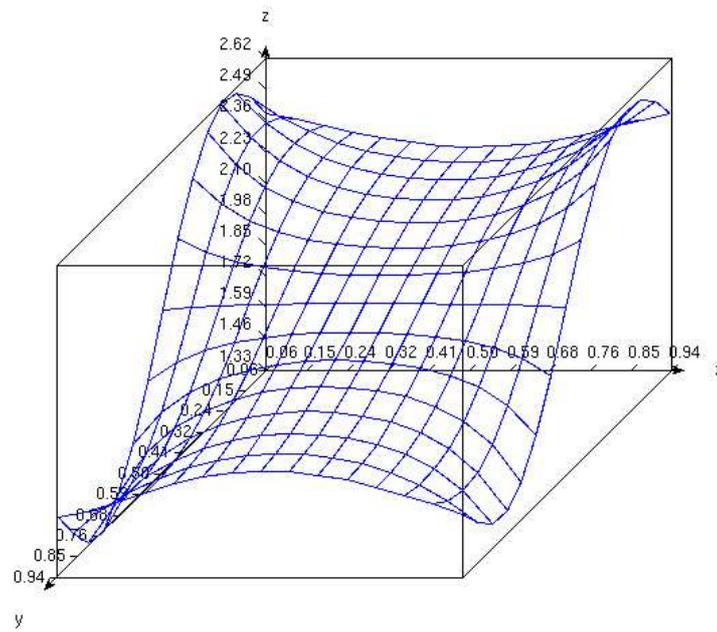
Temperatur



Dichte



Temperatur



7 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die in der Geschwindigkeitsvariablen kontinuierliche räumlich inhomogene Boltzmann-Gleichung mittels einer äquidistanten Geschwindigkeitsraumdiskretisierung durch ein groß dimensioniertes hyperbolisches System partieller Differentialgleichungen in der Ortsvariablen x und der Zeitvariablen t mit konstanten Koeffizienten approximiert.

Eine auf dem Boltzmannschen H-Funktional basierende Entropiefunktion für dieses System wurde vorgestellt.

Die in der kinetischen Gastheorie üblichen Randbedingungen wurden auf dem oben genannten Geschwindigkeitsgitter diskretisiert und es wurde gezeigt, daß sie in einer Raumdimension die in der Theorie der hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen übliche Struktur besitzen. Die Probleme, die sich bei Spiegelreflexionen aus der Äquidistanz des Geschwindigkeitsgitters ergeben, wurden diskutiert und eine Lösung dieser Probleme vorgeschlagen. Zudem wurde, im Gegensatz zu den bisher verwendeten Streukernen, ein Beispiel für adsorptionszeitabhängige Streukerne der Randbedingung für die Boltzmann-Gleichung gegeben.

Auf einer Operator-Splitting-Technik beruhend, wurden verschiedene, aus der Numerik der hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen bekannte Methoden auf ihre Anwendbarkeit auf das oben genannte hochdimensionierte System partieller Differentialgleichungen untersucht. Dabei erwiesen sich nur sogenannte Upwind-Verfahren aufgrund der spezifischen Randbedingung der Boltzmann-Gleichung als geeignet. Es wurden daher das σ -Schema, das für $\sigma = 1$ ein rein explizites und für $\sigma = 0$ ein rein implizites Upwind-Differenzen Verfahren liefert, die Essentially Non-Oscillatory (ENO)-Roe- und Weighted ENO-Roe-Verfahren zur Modellierung der Freiflugphase auf die hier gegebene Situation in der Numerik der Boltzmann-Gleichung übertragen und angewendet.

Diese wurden dann durch die einfache Operator-Splitting-Technik sowie durch das Operator-Splitting nach Strang [60] mit dem von I. Ibragimov und S. Rjasanow [32] entwickelten Verfahren zur Modellierung des Kollisionsschritts gekoppelt.

Die neu entstandenen deterministischen Verfahren zur numerischen Lösung der räumlich inhomogenen Boltzmann-Gleichung wurden parallelisiert und auf einem PC-Cluster mit insgesamt 48 Prozessoren für Standardbeispiele der kinetischen Gastheorie in ein und zwei Raumdimensionen getestet.

Im Rahmen der Arbeit entstand eine vielseitige Software, die es erlaubt, verschiedene Kollisionsmodelle, Gas-Wand-Interaktionsmodelle und Transportverfahren auf Einprozessorsystemen wie auch auf Mehrfachprozessorsystemen mit parallelen Rechenalgorithmen

zu testen. Es ist zudem eine flexible Arbeitsumgebung mit vielseitigen graphischen Ein- und Ausgabemöglichkeiten entstanden. In ihr kann man bequem per Mausklick verschiedene Kollisionsmodelle, Randbedingungen, numerische Verfahren zur Lösung des Transports und der Kollision und im Parallelmodus die Anzahl der gewünschten Prozessoren auswählen. Eine graphische Ausgabe der makroskopischen Größen wie Dichte und Temperatur in ein und zwei Raumdimensionen zur Überwachung während der Rechnung steht ebenfalls zur Verfügung wie auch ein Plotter zum Vergleich der Daten in ein und zwei Raumdimensionen (siehe Abbildungen 7.1, 7.2, 7.3, 7.4, 7.5, 7.6 und 7.7).

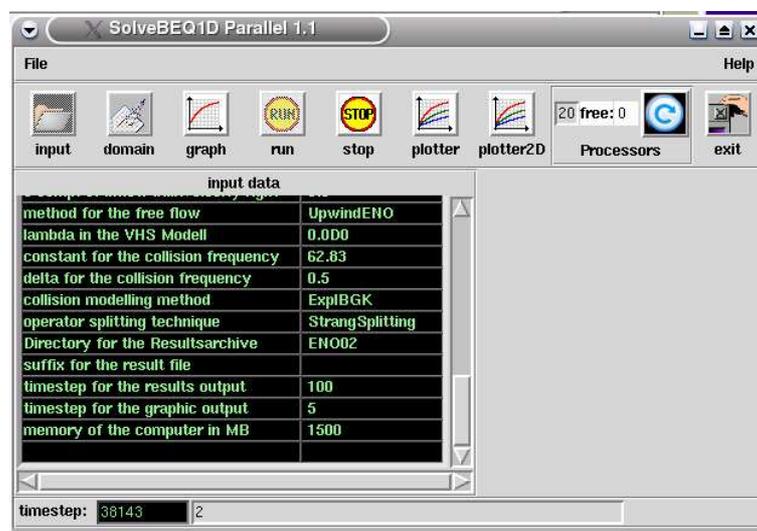


Abbildung 7.1: Hauptbedienungsfenster in 1D

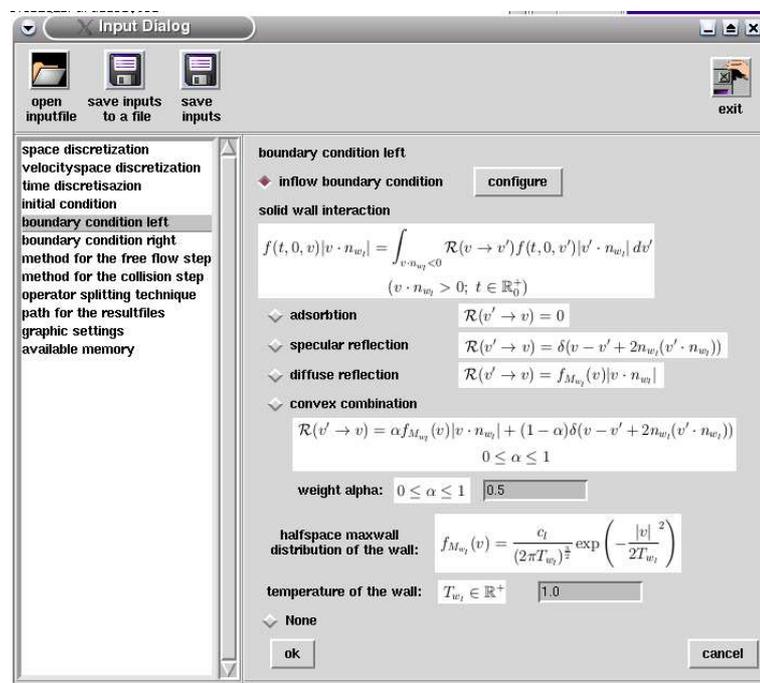


Abbildung 7.2: Eingabefenster für verschiedene Parameter; hier die der Randbedingung am linken Rand des Berechnungsgebietes in 1D

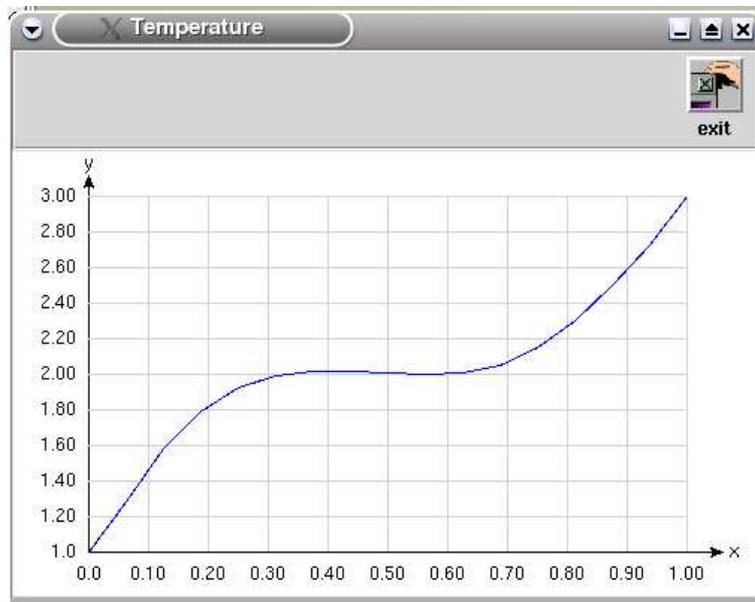


Abbildung 7.3: Graphische Ausgabe der Temperatur zur Überwachung während der Rechnung in 1D

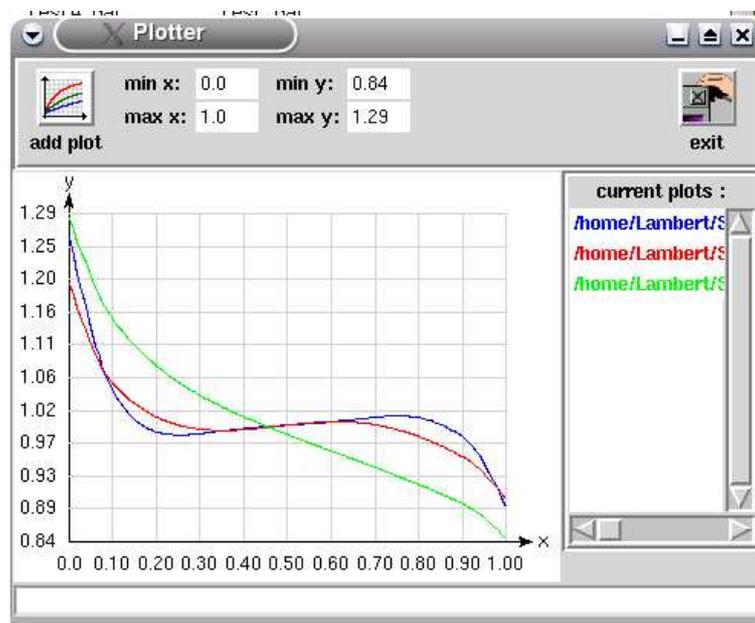


Abbildung 7.4: Plotter zur Darstellung interessierender Daten zum Vergleich verschiedener Ergebnisse in 1D

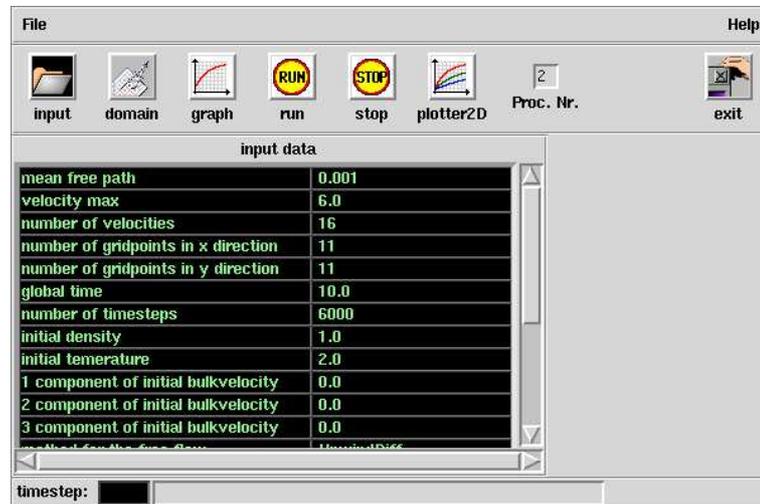


Abbildung 7.5: Hauptbedienungsfenster in 2D

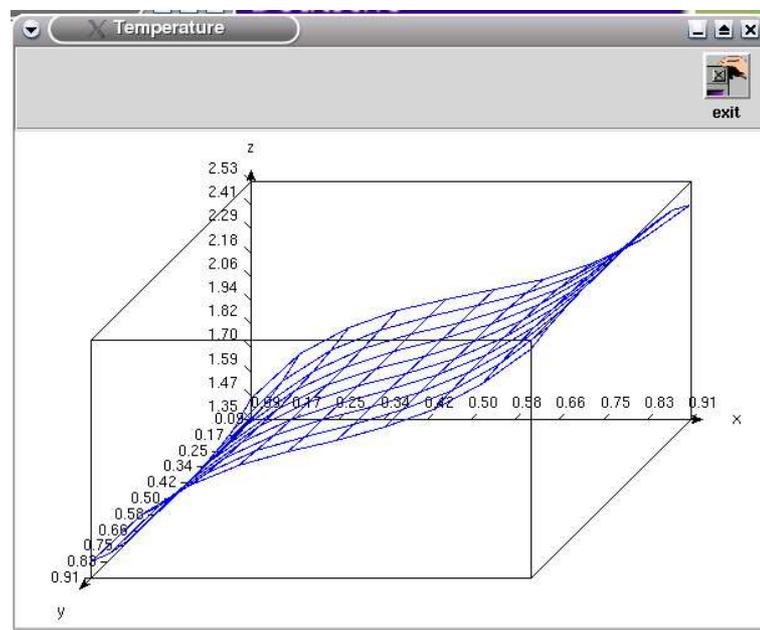


Abbildung 7.6: Graphische Ausgabe der Temperatur zur Überwachung während der Rechnung in 2D

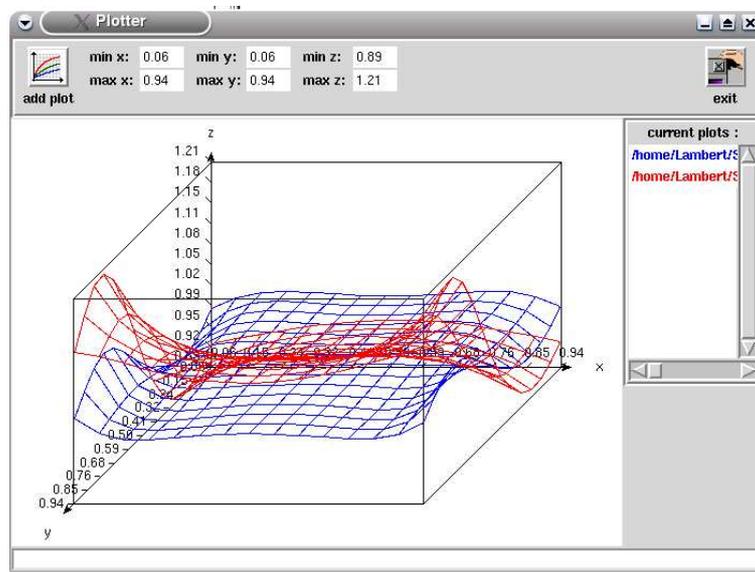


Abbildung 7.7: Plotter zur Darstellung interessierender Daten zum Vergleich verschiedener Ergebnisse in 2D

8 Ausblick

In dem betrachteten hyperbolischen System (4.3)

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_i(t, x) + \sum_{l=1}^d \frac{\partial}{\partial x_l} ((v_i)_l \mathbf{u}_i(t, x)) = \mathbf{q}_i(\mathbf{u}), \quad i = 1, \dots, p, \quad p = (n_v + 1)^3, \quad n_v \in \mathbb{N}, \text{ gerade}$$

sind die im Transportterm enthaltenen Matrizen

$$\mathbf{f}_i(\mathbf{u}) = ((v_1)_l \mathbf{u}_1(t, x), \dots, (v_p)_l \mathbf{u}_p(t, x))^T = ((v_1)_l f_1(t, x), \dots, (v_p)_l f_p(t, x))^T$$

bereits diagonalisiert, und damit liegt das System bereits in der Form der charakteristischen Variablen vor. Die in dieser Arbeit entwickelten Algorithmen wären auch in der Anwendung auf einen allgemeineren Fall mit konstanten Matrizen denkbar, z. B. im Fall eines Galerkin-Petrov-Verfahrens. Wir machen den folgenden Ansatz für $f \in \mathbb{V}$, wobei \mathbb{V} einen Funktionenraum bezeichnet:

$$f(t, x, v) = f_h(t, x, v) = \sum_{j \in J} f_j(t, x) \phi_j(v)$$

mit einer endlichen oder auch unendlichen Indexmenge J . Anschließend betrachten wir den von den $\phi_j(v)$, $j \in J$ aufgespannten Funktionenraum $\mathbb{V}_h = \{\phi_j(v), j \in J\}$ und verlangen, daß er die Approximationseigenschaft

$$\inf_{f_h \in \mathbb{V}_h} \|f - f_h\|_{\mathbb{V}} \longrightarrow 0, \quad \text{für } h \longrightarrow 0, \quad \forall f \in \mathbb{V}$$

besitzt. Schließlich bilden wir das Residuum des obigen Ansatzes bezüglich der Boltzmann-Gleichung

$$Res_h(t, x, v) = \frac{\partial}{\partial t} f_h(t, x, v) + \langle v, \nabla_x \rangle f_h(t, x, v) - \frac{1}{\epsilon} Q(f_h(t, x, v), f_h(t, x, v)) \in \mathbb{W},$$

wobei \mathbb{W} einen Funktionenraum bezeichnet, und berechnen das Dualitätsprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'}$ mit sogenannten Testfunktionen $\psi_i \in \mathbb{W}'$, $\forall i \in J$. Verlangen wir Orthogonalität bezüglich dieses Dualitätsprodukts, so ergibt sich das folgende System partieller Differentialgleichungen.

$$\begin{aligned} \sum_{j \in J} \langle \phi_j, \psi_i \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'} \frac{\partial}{\partial t} f_j(x, t) + \sum_{j \in J} \langle \langle v \phi_j, \psi_i \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'}, \nabla_x \rangle f_j(x, t) &= \\ = \sum_{j \in J} \sum_{k \in J} \langle Q(\phi_j, \phi_k), \psi_i \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'} f_j(x, t) f_k(x, t) &\quad \forall i \in J \end{aligned} \quad (8.1)$$

Führen wir die Bezeichnungen

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= (a_{i,j})_{i \in J, j \in J} = (\langle \phi_j, \psi_i \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'})_{i \in J, j \in J} \\ \mathbf{T}_l &= (T_{l,i,j})_{i \in J, j \in J} = (\langle v_l \phi_j, \psi_i \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'})_{i \in J, j \in J}, \quad l = 1, 2, 3 \\ \mathbf{C}_i &= (\langle Q(\phi_j, \phi_k), \psi_i \rangle_{\mathbb{W} \times \mathbb{W}'})_{j \in J, k \in J}, \quad \forall i \in J \\ \mathbf{f} &= (f_j)_{j \in J} \\ \mathbf{q}(\mathbf{f}) &= (q_i(\mathbf{f}))_{i \in J} = (\mathbf{f}^T \mathbf{C}_i \mathbf{f})_{i \in J}\end{aligned}$$

ein, so erhalten wir für (8.1)

$$\mathbf{A} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(x, t) + \sum_{l=1}^3 \mathbf{T}_l \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{f}(x, t) = \mathbf{q}(\mathbf{f}).$$

Ist J endlich, und können wir durch geeignete Wahl der ϕ_j , $j \in J$ und ψ_i , $i \in J$ gewährleisten, daß \mathbf{A} invertierbar ist und die Flußmatrizen $\mathbf{T}_l \mathbf{A}^{-1}$ nur reelle Eigenwerte besitzen, so würden wir durch die Variablentransformation $\mathbf{u} = \mathbf{A} \mathbf{f}$ ein hyperbolisches partielles Differentialgleichungssystem in x und t mit konstanten Koeffizienten erhalten. Es würde dann

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} \mathbf{f}(x, t) + \sum_{l=1}^3 \mathbf{T}_l \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{f}(x, t) &= \mathbf{q}(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{f}) \\ \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(x, t) + \sum_{l=1}^3 \mathbf{T}_l \mathbf{A}^{-1} \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{u}(x, t) &= (\mathbf{u}^T (\mathbf{A}^{-1})^T \mathbf{C}_i \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u})_{i \in J}\end{aligned} \quad (8.2)$$

gelten, und wir könnten auf (8.2) die in dieser Arbeit entwickelten Verfahren anwenden. Die hier auftretenden Matrizen hängen nur von der Geschwindigkeit v ab, sie könnten analytisch oder numerisch für einmal gewählte Ansatz- und Testfunktionen in einem Preprocessing-Schritt berechnet und abgespeichert werden. Da für die ENO-Roe- und WENO-Roe-Verfahren die Eigenwerte von $\mathbf{T}_l \mathbf{A}^{-1}$ benötigt werden, müßten auch diese zuvor berechnet werden. Es sind demnach solche Ansatz- und Testfunktionen zu wählen, die die Berechnung dieser Eigenwerte analytisch oder numerisch zulassen. Natürlich müßte auch die Anfangsbedingung und die Randbedingung noch in derselben Form bezüglich des Dualitätsproduktes derselben Ansatz- und Testfunktionen geschrieben werden. Der Hauptvorteil eines solchen Algorithmus wäre, daß kein Operator-Splitting benötigt würde, und die aufwendigen Berechnungen des Kollisionsintegrals numerisch für jede Kombination von Ansatz- und Testfunktionen nur einmal berechnet werden müßten und dann gespeichert werden könnten. Mit einer Datenbank für verschiedene Wahl von Ansatz- und Testfunktionen und Dimension des Problems könnten die benötigten Werte, einmal berechnet, immer wieder aus dieser ausgelesen werden. Dies würde eine erhebliche Beschleunigung der Berechnungen bewirken.

Literaturverzeichnis

- [1] K. Aoki, S. Kosuge, S. Takata "Shock-wave structure for a binary gas mixture: Finite-difference analysis of the Boltzmann equation for hard sphere molecules", *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 20: 87-126, 2001.
 - [2] H. Babovsky "On a simulation scheme for the Boltzmann equation", *Math. Methods Appl. Sci.*, 8:223-233, 1986.
 - [3] H. Babovsky "Die Boltzmann-Gleichung; Modellbildung - Numerik - Anwendungen", *B. G. Teubner Stuttgart Leipzig* 1998
 - [4] G. A. Bird "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows", *Clarendon Press, Oxford*, 1994.
 - [5] A. V. Bobylev, T. Ohwada "The Error of the Splitting Scheme for Solving Evolutionary Equations", *Applied Mathematics Letters* 14, 45-48, 2001.
 - [6] A. V. Bobylev, A. Palczewski, J. Schneider "On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models", *C. R. Acad. Sci Paris*, 320: 639-644, 1995.
 - [7] A. V. Bobylev, S. Rjasanow "Difference scheme for the Boltzmann equation based on Fast Fourier Transform", *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 16(2): 293-306, 1997.
 - [8] A. V. Bobylev, S. Rjasanow "Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres", *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 18(5): 869-887, 1999.
 - [9] A. V. Bobylev, S. Rjasanow "Numerical solution of the Boltzmann equation using fully conservative difference scheme based on the Fast Fourier Transform", *Transport Theory Statist. Phys.*, 29(3-5): 289-310, 2000.
 - [10] A. V. Bobylev, J. Struckmeier "Numerical simulation of the stationary one-dimensional Boltzmann equation by particle methodes", *European J. Mech. B/Fluids*, 15(1): 103-118, 1996.
 - [11] L. E. Boltzmann "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen", *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften, Wien*, **66**: 275-370, 1872.
-

- [12] J. E. Broadwell, D. Goldstein, B. Sturtevant "Investigation of the motion of discrete-velocity gases", *E. P. Muntz, D. P. Weaver and D. H. Campell editors, Rarefied Gas Dynamics: Theoretical and computational techniques, 100-117. Progress in Astronomics and Aeronautics 118, 1989.*
 - [13] F. Bouchut and L. Desvillettes. "A proof of the smoothing properties of the positive part of Boltzmann's kernel.", *Rev. Mat. Iberoamericana, 14(1): 47-61, 1998.*
 - [14] C. Cercignani "Rarefied Gas Dynamics. From Basic Concepts to Actual Calculations", *Cambridge University Press, Cambridge, 2000.*
 - [15] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti "The Mathematical Theorie of Dilute Gases", *Springer Applied Mathematical Sciences 106, 1994.*
 - [16] C. Cercignani, M. Lampis "Kinetic models for gas-surface interactions", *Transport Theory and Stat. Physics 1(2): 101-114, 1971.*
 - [17] R. DiPerna, P. L. Lions "On the Cauchy problem for the Boltzmann equations: Global existence and weak stability", *Annals of Mathematics 130(2): 312-360, 1989.*
 - [18] F. Dubois, P. Le Floch "Boundary Conditions for Nonlinear Hyperbolic Systems of Conservation Laws", *J. Diff. Equations 71: 93-122, 1988.*
 - [19] R. Duduchava and S. Rjasanow. "Mapping properties of the Boltzmann collision operator", *Preprint No. 32 University of Saarland, 2002.*
 - [20] W. Duke "Hyperbolic distribution problems and half-integer weight Maass forms", *Inv. Math., 92:73-90, 1988*
 - [21] S. M. Ermakov, V. V. Nekrutkin, A. S. Sipin. "Random Processes for Classical Equations of Mathematical Physics", *Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 1989. In Russian: Nauka, Moskva 1984.*
 - [22] F. Filbet, E. Sonnendrücker, P. Bertrand "Conservative Numerical Schemes for the Vlasov Equation", *J. Comput. Physics, 172: 166-187, 2001.*
 - [23] F. Filbet, G. Russo "High order numerical methods for the space non-homogeneous Boltzmann equation", *J. Comput. Phys. 186(2): 457-480, 2003.*
 - [24] M. Gisclon "Étude des conditions aux limites pour des système strictement hyperboliques, via l'approximation parabolique", *J. Math. Pures et Appl. 75: 485-508, 1996.*
 - [25] M. Gisclon, D. Serre "Étude des conditions aux limites pour un système strictement hyperboliques, via l'approximation parabolique", *C. R. Acad. Sci. Paris 319, Série I: 377-382, 1994*
-

- [26] E. Godlewski, P. A. Raviart "Hyperbolic systems of conservation laws, Mathematics and Applications", *Ellipses, Paris, 1991*.
 - [27] E. Godlewski, P. A. Raviart "Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws", *Springer Applied Mathematical Sciences 118, 1996*.
 - [28] J. B. Goodman, Z. Xin "Viscous limits for piecewise smooth solutions to systems of conservation laws", *Arch. Rat. Mech. Anal. 121: 235-265, 1992*.
 - [29] T. Gustafsson "Global L^p -properties for the spatially homogeneous Boltzmann equation", *Arch. of Rat. Mech. and Analysis, 103: 1-38, 1988*.
 - [30] A. G. Heintz, V. A. Panferov "A new consistent discrete-velocity model for the Boltzmann equation", *Math. Methods Appl. Sci., 25(7): 571-593, 2002*.
 - [31] R. L. Higdon "Initial-boundary value problems for linear hyperbolic systems", *SIAM REV. 28: 177-217, 1986*.
 - [32] I. Ibragimov, S. Rjasanow "Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid", *Computing 69(2):163-186, 2002*.
 - [33] M. S. Ivanov, S. V. Rogasinsky "Analysis of numerical techniques of the direct simulation Monte Carlo method in the rarefied gas dynamics", *Soviet J. Numer. Anal. Math. Modelling, 3(6): 453-465, 1988. Translated from the Russian*.
 - [34] H. Iwaniec "Fourier coefficients of modular forms of half integral weight" *Inv. Math., 87: 385-401, 1987*.
 - [35] S. Kruzkov "First order quasilinear equations in several independent variables", *Mat. Sb. 123: 228-255, 1970. English translation in Math. USSR. SB. 10: 217-243, 1970*.
 - [36] O. A. Ladyzenskaya, N. N. Uralceva "Boundary problems for linear and quasilinear parabolic equations", *Amer. Math. soc. Transl. (2) 47: 217-299, 1965*
 - [37] M. Lambert "Differenzenverfahren für die eindimensionale räumlich inhomogene Boltzmann-Gleichung", *Master thesis, Universität des Saarlandes Saarbrücken, 1999*
 - [38] P. D. Lax "Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves", *SIAM, Philadelphia, 1973*.
 - [39] P. L. Lions. "Compactness in Boltzmann's equation via Fourier integral operators and applications I", *J. Math. Kyoto Univ. 34(2): 391-427, 1994*.
 - [40] A. V. Lukshin, S. N. Smirnov "An efficient stochastic algorithm for solving the Boltzmann equation", *Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz., 29(1): 118-124, 159, 1989*.
-

- [41] A. Majda, S. Osher "Initial-boundary value problems for hyperbolic equations with uniformly characteristic boundary", *Comm. Pure Appl. Math.* 28: 607-675, 1975.
 - [42] K. Nanbu "Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I. Monocomponent gases.", *J. Phys. Soc. Japan*, 49(5): 2042-2049, 1980.
 - [43] H. Neunzert, F. Gropengiesser, J. Struckmeier "Computational methods for the Boltzmann equation", *In Applied and Industrial mathematics (Venice, 1989): 111-140. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1991.*
 - [44] H. Neunzert, J. Struckmeier "The finite pointset method for hypersonic flows in the rarefied gas regime", *In Advances in hypersonics, Vol. 3 (Colorado Springs CO, 1989, Aachen 1990): 342-370. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 1992.*
 - [45] T. Ohwada "Structure of normal shock waves: direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules", *Phys. Fluids A*, 5(1): 217-234, 1993.
 - [46] T. Ohwada "Higher order Approximation Methods for the Boltzmann equation", *J. Comput. Phys.*, 139(1): 1-14, 1998.
 - [47] A. Palczewski, J. Schneider "Existence, stability and convergence of solutions of discrete velocity models to the Boltzmann equation", *J. Statist. Phys.* 91(1-2): 307-326, 1998.
 - [48] V. Panferov "Convergence of discrete-velocity models to the Boltzmann equation", *Preprint 22, Chalmers University of Technology, Göteborg, 1997.*
 - [49] L. Pareschi, B. Perthame "A Fourier spectral method for the homogeneous Boltzmann equation", *Transport Theory Statist. Phys.* 25: 369-382, 1996.
 - [50] L. Pareschi, G. Russo "Numerical solution of the Boltzmann equation I. Spectrally accurate approximation of the collision operator", *SIAM J. Numer. Anal.* 37(4): 1217-1245 (electronic), 2000.
 - [51] L. Pareschi, G. Russo "On the stability of spectral methods for the homogeneous Boltzmann equation", *In Proceedings of the Fifth International Workshop on Mathematical Aspects of Fluid and Plasma Dynamics (Maui, HI, 1998) 29: 431-447, 2000.*
 - [52] S. Rjasanow, W. Wagner "A Stochastic Weighted Particle method for the Boltzmann equation", *J. Comp. Phys.* 124: 243-353, 1996.
 - [53] S. Rjasanow, T. Schreiber, W. Wagner "Reduction of the number of particles in the Stochastic Weighted Particle Method for the Boltzmann equation", *J. Comp. Phys.*, 145(1): 382-405, 1998.
-

- [54] S. Rjasanow and W. Wagner. "Simulation of rare events by the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation", *Math. Comput. Modelling* 33: 907–926, 2001.
 - [55] F. Rogier, J. Schneider "A direct method for solving the Boltzmann equation", *Transport Theory Statist. Phys.* 23(1-3): 313-338, 1994.
 - [56] A. A. Samarskij "Theorie der Differenzenverfahren", *Akademische Verlagsgesellschaft Geest&Portig K.-G. Leipzig* 1984.
 - [57] C. W. Shu "Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", *ICASE Report No. 97-65*, 1997.
 - [58] C. L. Siegel "Über die Klassenzahl quadratischer Zahlkörper", *Acta Arith.* 1: 83-86, 1935
 - [59] J. Smoller "Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations", *Springer-Verlag, New York* 1983.
 - [60] G. Strang "On the construction and comparison of difference schemes", *SIAM J. Numer. Anal.* 5: 506-517, 1968.
 - [61] J. Struckmeier "Some estimates on the Boltzmann collision operator", *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 7(7): 1023-1033, 1997.
 - [62] S. Tiwari "Domain Decomposition in Particle Methods for the Boltzmann and Euler equations", *Shaker-Verlag Aachen* 1998.
 - [63] B. Wennberg. "Regularity in the Boltzmann equation and the Radon transform", *Comm. Partial Differential Equations* 19 (11/12): 2057-2074, 1994.
-