

# **Vorlesung**

# **MoSim - Modellierung und Simulation**

**Wintersemester 2017**

Vorlesung: Jun.-Prof. Dr. Christian Mendl

Mitschrift: Jonas Hippold

10. April 2018

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung Modellierung und Simulation</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Modellierungsbeispiel: Basketball-Freiwurf</b>	<b>5</b>
2.1	Erstes Modell: Der beste Abwurfwinkel . . . . .	5
2.1.1	Analyse des Anwendungsproblems . . . . .	5
2.1.2	Herleitung eines (ersten) mathematischen Modells . . . . .	6
2.2	Zweites Modell: beste Wurfbahn . . . . .	8
2.2.1	Analyse des Anwendungsproblems . . . . .	8
2.2.2	Mathematisches Modell: Mehrzieloptimierung . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Methodik der mathematischen Modellierung</b>	<b>10</b>
3.1	Modellierungszyklus . . . . .	10
3.2	Mathematisches Modell . . . . .	11
3.3	Dimensionsanalyse und Skalierung . . . . .	11
3.4	Entdimensionalisierung . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Strömungssimulation mit der Lattice-Boltzmann-Methode</b>	<b>18</b>
4.1	Kinetische Theorie und Boltzmann-Gleichung . . . . .	18
4.2	Kollisionsinvarianten und Erhaltungssätze . . . . .	21
4.3	Thermisches Gleichgewicht und H-Theorem . . . . .	23
4.4	Übergang zu makroskopischen Kontinuitätsgleichungen . . . . .	26
4.5	Euler-Gleichungen der Strömungsmechanik . . . . .	30
4.6	Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	31
4.7	Die Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	33
4.8	Randbedingungen für Hindernisse . . . . .	38
4.9	Image-Inpainting als Navier-Stokes-Gleichung . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Informationssuche im Web: Google's PageRank</b>	<b>42</b>
5.1	Grobes Modell einer Suchmaschine . . . . .	42
5.2	Von der Link-Struktur zum PageRank . . . . .	43
5.3	Diskrete Markov-Ketten . . . . .	44
5.4	Stochastische Interpretation (Zufallssurfer) . . . . .	48
5.5	Berechnung des PageRank-Vektors . . . . .	51
5.6	Sensitivitätsanalyse des PageRank-Vektors . . . . .	53
5.7	Ausblick: Verfeinerung und Verbesserung der Google-Suche . . . . .	55
<b>6</b>	<b>Diskretisierung partieller Differentialgleichungen</b>	<b>57</b>
6.1	Exemplarische Beispiele partieller Differentialgleichungen . . . . .	57
6.2	Typische Schritte der numerischen Lösung . . . . .	59
6.3	Diskretisierungsprinzipien . . . . .	59
6.4	Finite Differenzen . . . . .	60
6.4.1	Modellproblem Poisson-Gleichung . . . . .	61

6.4.2	Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems $L_h u_h = f_h$	63
6.5	Finite Volumen	63
6.5.1	Modellproblem: Poisson-Gleichung	64
6.5.2	Hyperbolische Erhaltungsgleichungen in 1D	64
6.6	Finite Elemente	66
6.6.1	Formulierung als Variationsgleichung	66
6.6.2	Abstrakte Variationsgleichung: Mathematische Grundlagen	67
6.6.3	Diskretisierung	68
6.7	Diskussion der drei Diskretisierungsprinzipien	69

## **Zusammenfassung**

**70**

# 1 Einführung Modellierung und Simulation

Siehe Folien:

[https://tu-dresden.de/mn/math/wir/mendl/ressourcen/dateien/mosim\\_2017\\_wise/mosim\\_2017\\_intro\\_slides.pdf](https://tu-dresden.de/mn/math/wir/mendl/ressourcen/dateien/mosim_2017_wise/mosim_2017_intro_slides.pdf)

## 2 Modellierungsbeispiel: Basketball-Freiwurf

Trefferquote:

- Dirk Nowitzki: 89 %
- Shaquille O'Neal: 54,4 %

Fragestellung (noch unpräzise): “Beste Art einen Freiwurf zu werfen?”

Anwendungsproblem: “Wie sollte ein Basketballspieler einer bestimmten Größe beim Freiwurf den Ball werfen, damit eine größtmögliche Abweichung beim Abwurf noch zu einem Treffer führt?”

### 2.1 Erstes Modell: Der beste Abwurfwinkel

#### 2.1.1 Analyse des Anwendungsproblems

Beobachtung: Nach Verlassen der Wurfhand wird die Flugbahn lediglich durch physikalische Gesetzmäßigkeiten (Bewegungsgleichungen) bestimmt.

- Abwurfposition, Anfangsgeschwindigkeit und -richtung, Drehimpuls
- Luftwiderstand
- Verschiedene Arten, ins Netz zu gehen

↪ “exakte” Beschreibung sehr aufwendig bzw. kompliziert.

Vereinfachte Annahmen:

1. Nur “nearly nothing but net”-Würfe, entweder direkt ins Netz oder Ball trifft Hinterkante des Rings und geht dann ins Netz.
2. Vernachlässigung des Luftwiderstands.
3. Vernachlässigung des Spins.
4. Kein seitlicher Fehler beim Abwurf (2D-Betrachtung statt 3D).
5. Kein Fehler in der Abwurfgeschwindigkeit (zunächst nur Winkel untersuchen).
6. Idealer Wurf geht durch das Zentrum des Rings (legt “ideale” Geschwindigkeit fest).

Präzisierte Problemstellung: Mit welchem Abwurfwinkel sollte ein Spieler den Ball werfen, sodass eine größtmögliche Abweichung vom Winkel immer noch zu einem Treffer führt?

## 2.1.2 Herleitung eines (ersten) mathematischen Modells

### Systemparameter

(hier Geometrie)

Relevante Maße: (Regelwerk NBA) Foot [ft], bzw. Inch [in] ( $1 \text{ in} = 2,54 \text{ cm}$ ,  $1 \text{ ft} = 12 \text{ in} = 0,3048 \text{ m}$ )

$$l = 13,5 \text{ ft} = 4,1148 \text{ m}, \quad h = 10 \text{ ft} - \frac{5}{4} \cdot h_P, \quad g = 9,807 \text{ m s}^{-2}.$$

$h_P$  ... Spielergröße

### Variablen zur Zustandsbeschreibung

(Mittelpunkt des Balls)

Ort:

$$s(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$$

wegen Annahme 4.

Geschwindigkeit:  $v(t)$

Newtonsche Bewegungsgleichungen (Flugbahn)

$$\begin{aligned} v_x(t) &= v_x^0 = \text{const.} \\ \dot{v}_y(t) &= \frac{d}{dt} v_y(t) = -g \\ v_y(t) &= v_y^0 - g \cdot t \end{aligned}$$

Abwurfwinkel:  $\vartheta^0$

$$\begin{pmatrix} v_x^0 \\ v_y^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v^0 \cdot \cos \vartheta^0 \\ v^0 \cdot \sin \vartheta^0 \end{pmatrix}$$

$v^0$ : Betrag der Abwurfgeschwindigkeit.

Idealer Wurf durch Zentrum des Rings zum Zeitpunkt  $T$ :

$$s(t) = \int_0^t v(\bar{t}) d\bar{t} = \begin{pmatrix} v_x^0 t \\ v_y^0 t - \frac{1}{2} g t^2 \end{pmatrix}, \quad t \geq 0.$$

Forderung:

$$\begin{aligned} l &\stackrel{!}{=} x(T) = v^0 \cdot \cos(\vartheta^0) \cdot T \\ h &\stackrel{!}{=} y(T) = v^0 \cdot \sin(\vartheta^0) \cdot T - \frac{1}{2} g T^2 \end{aligned} \quad (\circ)$$

Die erste Gleichung nach  $T$  umstellen, in die zweite einsetzen:

$$l \cdot \tan(\vartheta^0) - h = \frac{1}{2} g \left( \frac{l}{v^0 \cos(\vartheta^0)} \right)^2$$

und damit folgt

$$v^0 = \frac{l}{\cos(\vartheta^0)} \sqrt{\frac{g}{2(l \tan(\vartheta^0) - h)}}.$$

Eine physikalische Lösung existiert nur für  $(l \tan(\vartheta^0) - h) > 0$ , also muss

$$\arctan\left(\frac{h}{l}\right) < \vartheta^0 < \frac{\pi}{2}$$

gelten.

### **Erlaubte Abweichung vom Abwurfwinkel?**

(bei festgehaltenem  $v^0$ )

$\tilde{T}$  Zeitpunkt des Erreichens der Höhe  $h$ , Abwurfwinkel  $\vartheta$ .

$$\begin{aligned} x(\tilde{T}) \tan \vartheta - h &= \frac{1}{2} g \left( \frac{x(\tilde{T})}{v^0 \cos \vartheta} \right)^2 \\ &= \frac{(v^0 \cos \vartheta)^2}{g} \left( \tan \vartheta + \sqrt{(\tan \vartheta)^2 - \frac{2gh}{(v^0 \cos \vartheta)^2}} \right). \end{aligned}$$

Anmerkung: Auflösen von (o) liefert

$$\tilde{T} = \frac{1}{g} \left( v_y^0 + \sqrt{(v_y^0)^2 - 2gh} \right)$$

### **Rekapitulation**

Bewegungsgleichung:

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -g \end{pmatrix}$$

Randbedingung:

$$\begin{pmatrix} x(0) \\ y(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l \\ h \end{pmatrix}.$$

Flugzeit  $T$  ist freier Parameter.

Bedingung für “Ball geht ins Netz”:

1. Wurf darf nicht zu lang sein:

$$x(\tilde{T}) + R_b \leq l + R_r,$$

$R_b$  ... Radius des Balls,  $R_r$  ... Radius des Korbrings.

2. Wurf darf nicht zu kurz sein

$$x(\tilde{T}) - R_b \leq l - R_r.$$

3. Ball darf Vorderseite des Rings nicht berühren:

$$a(t) := \left\| \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} l - R_r \\ h \end{pmatrix} \right\|_2 > R_b.$$

Anmerkung: Es reicht, das Zeitintervall  $[t_0, \tilde{T}]$  mit  $t_0 = \frac{1}{v_x}(l - R_r - R_b)$  zu überprüfen.

$\vartheta_{\min}, \vartheta_{\max}$ : Kleinster bzw. größter Winkel, bei dem der Ball gerade noch in den Korb geht (gegen Referenzwinkel  $\vartheta^0$ ).

$$e(\vartheta^0) := \min\{v_{\max} - \vartheta^0, \vartheta^0 - \vartheta_{\min}\}.$$

Zielfunktional (soll maximiert werden):

$$\vartheta_{\text{opt}}^0 = \arg \max_{\vartheta^0} e(\vartheta^0).$$

Zur Implementierung und Simulation siehe die Python-Beispiele im Netz:

[https://tu-dresden.de/mn/math/wir/mendl/studium/courses/mosim\\_2017\\_wise](https://tu-dresden.de/mn/math/wir/mendl/studium/courses/mosim_2017_wise)

Bis jetzt: Sehr viele Annahmen, um ein relativ einfach zu lösendes Modell zu erhalten (insbesondere Annahme 5: kein Fehler in der Abwurfgeschwindigkeit).

## 2.2 Zweites Modell: beste Wurfbahn

### Beste Wurfbahn

Annahmen 1, 2, 3 und 4 wie bisher, aber jetzt ohne Annahmen 5 und 6. Variiere das Tupel  $(v^0, \vartheta^0)$  (anstatt  $v^0$  fest zu halten).

Problemformulierung: “Bestimme diejenige Wurfbahn (festgelegt durch  $(v^0, \vartheta^0)$ ), die die größtmögliche Abweichung erlaubt, sodass der Ball immer noch in den Korb geht.”

### 2.2.1 Analyse des Anwendungsproblems

Zu gegebenem  $\vartheta^0$  bestimme:

$$v_{\text{front}}^0, v_{\text{back}}^0,$$

$v_{\text{front}}^0$  ... Ball berührt Korbring vorne (und geht ins Netz),

$v_{\text{back}}^0$  ... Ball berührt Korbring hinten (und geht ins Netz).

### Berechnung von $v_{\text{back}}^0$

Wir definieren  $\bar{T}$  als den Zeitpunkt, zu dem gilt:

$$x(\bar{T}) = l + R_r - R_b, \quad y(\bar{T}) = h.$$

Nach analoger Rechnung wie zuvor (mit  $x(\bar{T})$  statt  $l$ ) erhalten wir

$$v_{\text{back}}^0 = \frac{l + R_r - R_b}{\cos \vartheta^0} \sqrt{\frac{g}{2((l + R_r - R_b) \tan \vartheta^0 - h)}}.$$



### Berechnung von $v_{\text{front}}^0$

Betrachte  $a(t)$ : Abstand des Ballmittelpunkts von der Vorderseite des Rings

$$a_{\min} = \min_{t \in [0, \bar{T}]} \{a(t)\}, \quad v_{\text{front}}^0 := \arg \min_{v^0} |a_{\min}(v^0, \vartheta^0) - R_b|.$$

Ball berührt Vorderseite, falls Zielfunktion den Minimalwert 0 erreicht.

Nebenbedingung:  $x(\bar{T}) \geq l - R_r$  (Ball fliegt über Vorderseite hinweg).

Berücksichtigung der Nebenbedingung im Zielfunktional? Idee: Addiere sie als “Strafterm” hinzu.

$$v_{\text{front}}^0 := \arg \min_{v^0} |a_{\min}(v^0, \vartheta^0) - R_b| + \max\{0, l - R_r - x(\bar{T})\}.$$

Der Strafterm verschwindet, falls die Nebenbedingung erfüllt wird.

## 2.2.2 Mathematisches Modell: Mehrzieloptimierung

Relative Abweichungen (sonst nicht vergleichbar)

$$e_{\vartheta}(v^0, \vartheta^0) := \min \left( \frac{\vartheta_{\max}(\vartheta^0) - \vartheta^0}{\vartheta^0}, \frac{\vartheta^0 - \vartheta_{\min}(\vartheta^0)}{\vartheta^0} \right)$$
$$e_v(v^0, \vartheta^0) := \min \left( \frac{v_{\text{back}}(v^0) - v^0}{v^0}, \frac{v^0 - v_{\text{front}}(v^0)}{v^0} \right)$$

Visualisierung ergibt: Erlaubte Abweichung im Winkel ist größer ( $\sim 10\%$ ) als erlaubte Abweichung in Geschwindigkeit ( $\sim 1\%$ ).

Wie sollen  $e_{\vartheta}$  und  $e_v$  gleichzeitig optimiert werden? “Mehrzieloptimierung”

$$e(v^0, \vartheta^0) := \min\{e_{\vartheta}(v^0, \vartheta^0), w \cdot e_v(v^0, \vartheta^0)\}$$

mit Gewichtungsfaktor  $w$ .

Mathematisches Optimierungsproblem:

$$(v_{\text{opt}}^0, \vartheta_{\text{opt}}^0) = \arg \max_{(v^0, \vartheta^0)} e(v^0, \vartheta^0).$$

### Auswertung und Interpretation

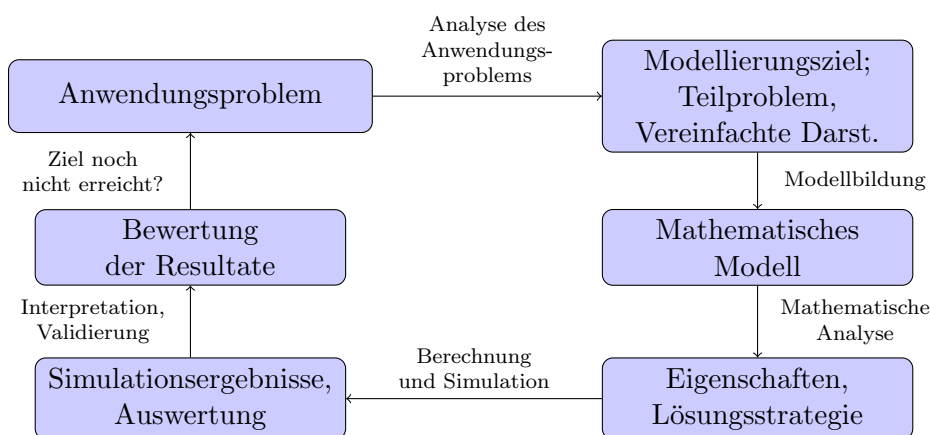
Für 2,13 m Spielergröße,  $w = 5$ :

$$v_{\text{opt}}^0 = 6,7 \text{ m s}^{-1}, \quad \vartheta_{\text{opt}}^0 = 52,5^\circ.$$

# 3 Methodik der mathematischen Modellierung

## 3.1 Modellierungszyklus

Mathematische Modellierung ist ein iterativer Prozess.



Beispiel Basketball-Freiwurf: Zweifaches Durchlaufen des Zyklus.

Analyse des Anwendungsproblems: Beschränkung auf Wurftrajektorie, vereinfachende Annahmen, Flugbahn nach Abwurf festgelegt durch Bewegungsgleichungen.

Modellbildung: Bewegungsgleichungen, geometrische Bedingungen an Flugbahn.

Mathematisches Modell: Flugbahn

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} v_x(t) \\ v_y(t) \end{pmatrix}.$$

Optimierungsproblem (erstes Modell):

$$\vartheta_{\text{opt}}^0 = \arg \max_{\vartheta^0} e(\vartheta^0).$$

Mathematische Analyse: Zielfunktional  $e(\vartheta^0)$  ist nicht stetig differenzierbar  $\rightsquigarrow$  Optimierung ohne Verwendung von Gradienten.

Interpretation und Validierung: Vergleich mit experimentellen Daten.

## 3.2 Mathematisches Modell

**Definition.** Ein *mathematisches Modell* stellt formale Zusammenhänge zwischen (physikalischen bzw. Modell-) Größen her. Eine solche Größe ist eine quantitative Eigenschaft eines physikalischen Objektes, Zustands oder Prozesses. Man unterscheidet zwischen Parametern und Variablen.

Aus der Analyse bzw. Simulation eines mathematischen Modells sollen Erkenntnisse über das reale (physikalische) System gewonnen werden.

### Parameter

- Systemparameter (z.B. Korbhöhe beim Basketball-Freiwurf)
- Modellparameter (z.B. Schrittweite beim diskreten Modell)

### (Zustands-) Variablen

(z.B. Trajektorie  $\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} v_x(t) \\ v_y(t) \end{pmatrix}$ ) bei Berücksichtigung der Drehung eines (starren) Körpers zusätzlich Rotation, beschrieben typischerweise durch Quaternionen)

### Mathematische Analyse eines Modells

- Dimensionsanalyse und Skalierung
- Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung
- Untersuchung von Sonderfällen
- Falls explizite Lösung angegeben werden kann: Validierung der numerischen Lösung
- Vereinfachung, Linearisierung; Störungstheorie
- Untersuchung von qualitativen Eigenschaften, etwa asymptotisches Verhalten
- Sensitivitätsanalyse: Wie wirken sich Störungen von Parametern auf die Lösung aus?
- Auswahl von numerischen Verfahren

## 3.3 Dimensionsanalyse und Skalierung

Größe  $X$ , Dimension  $[X]$ , z.B:

$$[l] = \text{Länge}, \quad [t] = \text{Zeit}, \quad [v] = \text{Geschwindigkeit} = \frac{\text{Länge}}{\text{Zeit}}.$$

Internationales Einheitensystem SI

## Basiseinheiten

Dimensionsname	Größensymbol	Dimensionssymbol	Einheit	Zeichen
Länge	$l$	$L$	Meter	m
Masse	$m$	$M$	Kilogramm	kg
Zeit	$t$	$T$	Sekunde	s
Stromstärke	$I$	$I$	Ampere	A
Temperatur	$T$	$\Theta$	Kelven	K
Stoffmenge	$n$	$N$	Mol	mol
Lichtstärke	$I_r$	$J$	Candela	cd

Abgeleitete Größen und Einheiten, zum Beispiel:

Geschwindigkeit	$v$	$\frac{L}{T}$	$\frac{\text{Meter}}{\text{Sekunde}}$	$\text{m s}^{-1}$
Kraft	$F$	$M \cdot \frac{L}{T^2}$	Newton	$\text{N} = \text{kg m s}^{-2}$
Energie/Arbeit	$E$	$M \cdot \frac{L^2}{T^2}$	Joule	$\text{J} = \text{N m} = \text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$
Leistung	$P$	$M \cdot \frac{L^2}{T^3}$	Watt	$\text{J s}^{-1} = \text{kg m}^2 \text{s}^{-3}$
Elektrische Leistung	$Q$	$J \cdot T$	Coulomb	$\text{C} = \text{A s}$

Grundlegende Eigenschaften und Regeln:

- Multiplikation, Potenzieren, Division von dimensionsbehafteten Größen überträgt sich auf Dimensionen.

Beispiel:

Volumen eines Kubus

$$V = (\text{Kantenlänge } a)^3, \quad [V] = L^3.$$

Geschwindigkeit

$$\left[ \frac{d}{dt} x(t) \right] = \left[ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \right] = \frac{L}{T}.$$

Beschleunigung

$$\left[ \frac{d^2}{dt^2} x(t) \right] = \frac{L}{T^2}.$$

- Nur Größen gleicher Dimension dürfen addiert, subtrahiert und verglichen werden.

Beispiel: Zweites Newtonsches Gesetz, “Kraft = zeitliche Änderung des Impulses”

$$F = \frac{d}{dt} p(t), \quad p = m \cdot v,$$

$$[F] = \frac{[p]}{[t]} = \frac{M \cdot L/T}{T} = M \cdot \frac{L}{T^2}.$$

- Argumente von Funktionen<sup>1</sup> müssen dimensionslos sein. Zum Beispiel ist  $\exp(x)$  mit  $[x] = L$  *nicht* zulässig, da

$$\exp(x) = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots,$$

das ergibt keinen Sinn. Zulässig ist aber

$$\exp(k \cdot x) \quad \text{mit} \quad [k] = \frac{1}{L}, [x] = L.$$

Dann ist  $k \cdot x$  wieder dimensionslos.

$$F(t) = F_0 \cdot \sin(\omega t), \quad [t] = T, \quad [\omega] = \frac{1}{T}.$$

### 3.4 Entdimensionalisierung

Beobachtung: Mathematische Aussagen über ein mathematisches (physikalisches) Modell können nicht von der Wahl der Einheiten der jeweiligen Größen abhängen.  $\rightsquigarrow$  Transformation auf eine dimensionslose Form.

Beispiel: senkrechter Wurf, Gravitationskraft auf einen geworfenen Ball. Gravitationsgesetz:

$$F = \gamma \frac{m_1 m_2}{r^2}.$$

$\gamma = 6,674 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2} \dots$  Gravitationskonstante.  $[\gamma] = \frac{L^3}{MT^2}$ .

Berücksichtige den Erdradius  $R$ :

$$F = -\gamma \frac{m \cdot m_E}{(x(t) + R)^2}$$

Anwendung des zweiten Newtonschen Gesetzes:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \underbrace{m\dot{x}(t)}_{\text{Impuls}} &= F \\ m\ddot{x}(t) &= -\gamma \frac{m \cdot m_E}{(x(t) + R)^2} \end{aligned}$$

Speziell für die Erde:

$$R = 6371 \text{ km}, \quad m_E = 5,9722 \cdot 10^{24} \text{ kg}, \quad g = \frac{\gamma \cdot m_E}{R^2} = 9,81 \text{ m s}^{-2}$$

Einsetzen:

$$\ddot{x}(t) = -g \frac{R^2}{(x(t) + R)^2}$$

Anfangsbedingungen  $x(0) = 0, \dot{x}(0) = \bar{v}$ .

---

<sup>1</sup>Ausnahme: Monome. Das sind Polynome, die nur aus einem Glied bestehen. Ein Monom ist ein Produkt, bestehend aus einem Koeffizienten und einer Potenz einer Variablen.

## Entdimensionalisierung

Referenzlänge  $\ell_0$ ,  $[\ell_0] = L$

Referenzzeit  $\tau_0$ ,  $[\tau_0] = T$

Neue dimensionslose Variablen:

$$\hat{x} = \frac{x}{\ell_0}, \quad \hat{t} = \frac{t}{\tau_0} \quad \Rightarrow \quad \hat{x}(\hat{t}) = \frac{1}{\ell_0} x(\tau_0 \hat{t}).$$

Also folgt

$$\frac{d}{d\hat{t}} \hat{x}(\hat{t}) = \frac{\tau_0}{\ell_0} \dot{x}(\tau_0 \hat{t}), \quad \frac{d^2}{d\hat{t}^2} \hat{x}(\hat{t}) = \frac{\tau_0^2}{\ell_0} \ddot{x}(\tau_0 \hat{t}).$$

Einsetzen:

$$\frac{d^2}{d\hat{t}^2} \hat{x}(\hat{t}) = -\frac{\tau_0^2}{\ell_0} g \frac{1}{\left(\frac{\ell_0}{R} \hat{x}(\hat{t}) + 1\right)^2}.$$

Anfangsbedingungen  $\hat{x}(0) = 0$ ,  $\frac{d}{d\hat{t}} \hat{x}(0) = \frac{\tau_0}{\ell_0} \bar{v}$ .

Wir bezeichnen:

$$\Pi_1 := \frac{\tau_0^2}{\ell_0} g, \quad \Pi_2 := \frac{\ell_0}{R}, \quad \Pi_3 := \frac{\tau_0}{\ell_0} \bar{v}.$$

$\Pi_1$ ,  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  sind drei Gruppen von Parametern. Wir können  $\ell_0$  und  $\tau_0$  so wählen, dass zwei der drei  $\Pi$ -Terme gleich 1 sind.

Beobachtung: Für realistische Wurfhöhe  $h \ll R$  gilt  $\Pi_2 \ll 1$

$$\left. \begin{array}{l} \Pi_1 = 1 : \ell_0 = g \cdot \tau_0^2 \\ \Pi_2 = 1 : \ell_0 = \bar{v} \tau_0 \end{array} \right\} \quad \tau_0 = \frac{\bar{v}}{g}, \quad \ell_0 = \frac{\bar{v}^2}{g}.$$

Also gilt

$$\Pi_3 = \frac{\bar{v}}{gR} =: \varepsilon.$$

Einsetzen:

$$\frac{d^2}{d\hat{t}^2} \hat{x}(\hat{t}) = -\frac{1}{(\varepsilon \hat{x}(\hat{t}) + 1)^2}$$

mit  $\hat{x}(0) = 0$ ,  $\frac{d}{d\hat{t}} \hat{x}(0) = 1$ .

Die näherungsweise Lösung für  $\varepsilon = 0$  ist

$$\frac{d^2}{d\hat{t}^2} \hat{x}(\hat{t}) \approx -1,$$

das heißt wir erhalten die “übliche” Bewegungsgleichung

$$\ddot{x}(t) = -g.$$

## Systematisches Vorgehen

Zur Bestimmung der Referenzgrößen in komplizierteren Systemen ist es nicht immer möglich, wie oben intuitiv die richtigen Größen zu bestimmen. Formal geht man daher wie folgt vor:

$$\ddot{x}(t) = -g \frac{R^2}{(x(t) + R)^2},$$

Anfangsbedingungen  $x(0) = 0$ ,  $\dot{x}(0) = \bar{v}$ .

1. Unabhängige Dimensionen: Länge  $L$ , Zeit  $T$ .
2. Variablen und Parameter:  
Variablen:  $x$ ,  $[x] = L$ ;  $t$ ,  $[t] = T$ . Parameter:  $\bar{v}$  ( $LT^{-1}$ ),  $g$  ( $LT^{-2}$ ),  $R$  ( $L$ ).
3. Dimensionslose Größen: Ansatz

$$[\bar{v}^{\alpha_1} \cdot g^{\alpha_2} \cdot R^{\alpha_3}] = 1.$$

Also

$$\left(\frac{L}{T}\right)^{\alpha_1} \cdot \left(\frac{L}{T^2}\right)^{\alpha_2} \cdot L^{\alpha_3} = 1 \quad \Rightarrow \quad L^{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \cdot T^{-\alpha_1 - 2\alpha_2} = 1.$$

Ausgedrückt als lineares Gleichungssystem

$$\begin{array}{c|ccc} & \bar{v} & g & R \\ \hline L & 1 & 1 & 1 \\ T & -1 & -2 & 0 \end{array} \Rightarrow S = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$S\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Allerdings gilt  $\dim \ker S = 3 - 2 = 1$ ,

$$\ker S = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}.$$

$\bar{v}^2 g^{-1} R^{-1} =: \varepsilon$  ist dimensionslos (i.A. können mehrere “entdimensionalisierte” Parameter auftreten).

4. Referenzgrößen:

$$\hat{x} = \frac{x}{\ell_0}, \quad \hat{t} = \frac{t}{\tau_0}.$$

Ansatz:

$$\ell_0 = \bar{v}^{\alpha_1} g^{\alpha_2} R^{\alpha_3},$$

Gleichheit der Dimensionen erfordert

$$S\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \alpha = c \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(Lösung nicht eindeutig!). Also folgt

$$\ell_0 = R \cdot \varepsilon^c,$$

im Beispiel oben galt  $c = 1$ , also  $\ell_0 = \frac{\bar{v}^2}{g}$ .

Analog für die Referenzzeit:

$$\tau_0 = \bar{v}^{\alpha_1} g^{\alpha_2} R^{\alpha_3}, \quad S\alpha = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Also folgt

$$\alpha = c' \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und damit  $\tau_0 = \frac{\bar{v}}{g} \varepsilon^{c'}$ , im Beispiel oben  $c' = 0$ ,  $\tau_0 = \frac{\bar{v}}{g}$ .

5. Aufstellen der entdimensionalisierten Modellgleichung (selbe Rechnung wie oben)

$$\ddot{\hat{x}}(\hat{t}) = -\frac{1}{(\varepsilon \hat{x}(\hat{t}) + 1)^2}, \quad \hat{x}(0) = 0, \quad \dot{\hat{x}}(0) = 1.$$

**Bemerkung.** Für die Wahl  $\ell_0 = R$  und  $\tau_0 = \frac{\bar{v}}{g}$  erhält man

$$\ddot{\hat{x}}(\hat{t}) = -\varepsilon \frac{1}{(\hat{x}(\hat{t}) + 1)^2}, \quad \hat{x}(0) = 0, \quad \dot{\hat{x}}(0) = \varepsilon.$$

Das ist mathematisch korrekt, aber wir erhalten keine Näherungslösung für  $\varepsilon \approx 0$ .

Mit dem obigen Verfahren haben wir die Anzahl der freien Parameter von drei (Gravitationskonstante, Erdradius, Erdmasse) auf eins ( $\varepsilon$ ) reduziert. Im Allgemeinen lässt sich immer die Anzahl der Parameter um die Anzahl der vorhandenen Dimensionen (hier Länge, Zeit) reduzieren.

### Satz: Buckingham'sches II-Theorem

Gegeben sei ein mathematisches Modell mit  $k$  Variablen  $x_1, \dots, x_k$  und  $l$  Parametern  $x_{k+1}, \dots, x_{k+l}$ , in dem  $m$  unabhängige Dimensionen vorkommen. Dann können  $k + l - m$  dimensionslose Größen  $q_1, \dots, q_{k+l-m}$  als Produkte und Quotienten von  $x_1, \dots, x_{k+l}$  definiert werden und jede skalare Modellgleichung  $f(x_1, \dots, x_{k+l}) = 0$  kann auf eine Relation  $\hat{f}(q_1, \dots, q_{k+l-m}) = 0$  reduziert werden.

Für unser Beispiel:  $m = 2$

$$\begin{aligned} f(x, t, \bar{v}, g, R) = 0 & \quad \left\{ \begin{array}{l} \ddot{x}(t) = -g \frac{R^2}{(x(t) + R)^2} \\ x(0) = 0, \dot{x}(0) = \bar{v} \end{array} \right. \\ \rightsquigarrow f(\hat{x}, \hat{t}, \varepsilon) = 0 & \quad \left\{ \begin{array}{l} \ddot{\hat{x}}(\hat{t}) = -\frac{1}{(\varepsilon \hat{x}(\hat{t}) + 1)^2} \\ \hat{x}(0) = 0, \dot{\hat{x}}(0) = 1 \end{array} \right. \end{aligned}$$

Konsequenz: Aussagen über das Modell, ohne Modellgleichungen zu kennen!

Beispiel Pendel. Schwingungsdauer  $t_{sd}$ ?



Vorwissen/Intuition: Für kleine Auslenkungen ( $\vartheta \ll 1$ ) sollte  $t_{sd}$  nicht von den Anfangsbedingungen abhängen (Auslenkung, Geschwindigkeit). Es sollte eine Relation zwischen  $t_{sd}$  und den Parametern  $l$ ,  $m$  und  $g$  der Form

$$f(t_{sd}, g, m, l) = 0$$

existieren. Also haben wir  $m = 3$  unabhängige Dimensionen  $T, L, M$ .

Buckingham'sches  $\Pi$ -Theorem  $\rightsquigarrow$  Reduktion auf  $\hat{f}(q) = 0$  mit der dimensionslosen Größe

$$q = t_{sd}^{\alpha_1} \cdot l^{\alpha_2} \cdot m^{\alpha_3} \cdot g^{\alpha_4}$$

Dimensionsanalyse:

	$t_{sd}$	$l$	$m$	$g$
$T$	1	0	0	-2
$L$	0	1	0	1
$M$	0	0	1	0

$q$  muss dimensionslos sein, also:

$$S\alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = c \begin{pmatrix} 1 \\ -1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

und damit

$$q = t_{sd} l^{-1/2} m^0 g^{1/2}, \quad t_{sd} = q \sqrt{\frac{l}{g}}.$$

Die Schwingungsdauer ist unabhängig von  $m$ ! Diese Aussage ist ohne Kenntnis der genauen Systemgleichungen möglich.

Insbesondere ändert eine Skalierung  $l \rightarrow s \cdot l$ ,  $g \rightarrow s \cdot g$  die Schwingungsdauer nicht.

Bemerkung: Die tatsächliche Lösung ist  $t_{sd} = 2\pi \sqrt{l/g}$ .

# 4 Strömungssimulation mit der Lattice-Boltzmann-Methode

## 4.1 Kinetische Theorie und Boltzmann-Gleichung

- $N$  Teilchen (Atome, Moleküle, ...) mit den Größen
- $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^3$  ... Position des  $i$ -ten Teilchens,
- $\vec{p}_i \in \mathbb{R}^3$  ... Impuls des  $i$ -ten Teilchens.

Mikroskopische Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\vec{x}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i}, \quad \frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}_i}. \quad (4.1)$$

Dabei ist  $H$  die *Hamilton-Funktion* (Gesamtenergie) des Systems in Abhängigkeit aller Positionen  $(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$  und Impulse  $(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$  und

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \left( \frac{\partial H}{\partial p_{i,1}}, \frac{\partial H}{\partial p_{i,2}}, \frac{\partial H}{\partial p_{i,3}} \right)^\top.$$

Typische Form von  $H$ :

$$H = \sum_{i=1}^N \left( \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m} + U(\vec{x}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V(\vec{x}_i - \vec{x}_j), \quad (4.2)$$

wobei

- $\frac{|\vec{p}_i|^2}{2m}$  ... Kinetische Energie,
- $U(\vec{x}_i)$  ... externes Potential, zum Beispiel Gravitationsfeld, elektrisches Feld,
- $V(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$  ... paarweises Interaktionspotenzial.

Mit

$$|\vec{p}_i|^2 = p_{i,1}^2 + p_{i,2}^2 + p_{i,3}^2$$

folgt dann

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \left( \frac{\partial H}{\partial p_{i,1}}, \frac{\partial H}{\partial p_{i,2}}, \frac{\partial H}{\partial p_{i,3}} \right)^\top = \frac{\vec{p}_i}{m}. \quad (4.3)$$

Damit gilt für die Geschwindigkeit  $\vec{v} = \frac{d\vec{x}_i}{dt}$

$$\frac{d\vec{x}_i}{dt} = \frac{\vec{p}_i}{m}. \quad (4.4)$$

Wichtige Eigenschaft auf mikroskopischer Beschreibungsebene: Das System ist invariant unter Zeitumkehr. Umkehr aller Impulse  $\vec{p}_i \rightarrow -\vec{p}_i$  bei  $t = 0$  führt zu

$$\vec{x}'_i(t) = x_i(-t),$$

das System “läuft rückwärts in der Zeit”.

## Phasenraum

Jeder Mikrozustand ist ein einzelner Punkt  $(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$  im Phasenraum  $\mathbb{R}^{6N}$ . Zusammen mit den Anfangs- und Randbedingungen ist die Zeitentwicklung des mikroskopischen Systems eindeutig festgelegt. Aber:

- Die numerische Berechnung ist in der Praxis nicht durchführbar: Es gilt  $N \gg 1$ <sup>1</sup> und man kann die Anfangsorte und -geschwindigkeiten aller einzelnen Teilchen nicht messen.
- “Interessante” Observablen wie Druck, Temperatur, usw. basieren auf Mittelung über viele mikroskopische Trajektorien.

↪ Statistische Beschreibung.

Idee: Beschreibe Gas oder Flüssigkeit durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ : “Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort  $\vec{x}$  mit Impuls  $\vec{p}$  zum Zeitpunkt  $t$  zu finden”.

$$\int_R f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3x \times d^3p = \frac{\text{Anzahl Teilchen im Raum } R}{\text{Gesamtzahl der Teilchen}}$$

Ludwig Boltzmann 1872: Herleitung der zeitlichen Evolution von  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  ausgehend von der mikroskopischen Beschreibung.

## Boltzmann-Gleichung

$$\partial_t f + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f + \vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f = C[f]$$

$m$  ... Masse eines Teilchens,  
 $C[f]$  ... Kollisionsoperator.

$$\frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f = \frac{p_1}{m} \cdot \partial_{x_1} f + \frac{p_2}{m} \cdot \partial_{x_2} f + \frac{p_3}{m} \cdot \partial_{x_3} f$$

Analog

$$\vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f = \sum_{i=1}^3 F_i \cdot \partial_{p_i} f.$$

Linke Seite der Gleichung: Gleichförmige Flussbewegung

$$\partial_t f + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f + \vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f = 0 \quad (\circ)$$

---

<sup>1</sup>Loschmidt-Konstante  $2,6 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$ , Anzahl der Moleküle pro Kubikmeter eines idealen Gases unter Normalbedingungen

wird gelöst von

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = g\left(\vec{x} - \frac{\vec{p}}{m} \cdot t, \vec{p} - \vec{F} \cdot t\right)$$

für eine beliebige (differenzierbare) Funktion  $g(\vec{x}, \vec{p})$ . Einsetzen in (o)

$$\underbrace{(\partial_{\vec{x}} g) \cdot \left(-\frac{\vec{p}}{m}\right) + (\partial_{\vec{p}} g) \cdot (-\vec{F}) + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} g + \vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} g}_{\partial_t f} = 0$$

Allgemein: Interpretation der linken Seite als “totale Zeitableitung”

$$\frac{d}{dt} f(\vec{x}(t), \vec{p}(t), t) = \partial_{\vec{x}} f \cdot \underbrace{\frac{d\vec{x}(t)}{dt}}_{\vec{p}/m} + \partial_{\vec{p}} f \cdot \underbrace{\frac{d\vec{p}(t)}{dt}}_{\vec{F}} + \partial_t f.$$

### Kollisionsoperator $C[f]$

Exakte Herleitung benötigt die Zwei-Teilchen Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2),$$

sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit  $(\vec{x}_1, \vec{p}_1)$  und ein Teilchen mit  $(\vec{x}_2, \vec{p}_2)$  zu finden.

Zur Bestimmung von  $f^{(2)}$  benötigen wir  $f^{(3)}$ , für die Bestimmung von  $f^{(3)}$  brauchen wir  $f^{(4)}$ , ... für  $f^{(N-1)}$  brauchen wir  $f^{(N)}$ . Systeme mit einer großen Anzahl von Teilchen nennt man BBGKY<sup>2</sup>-Hierarchien  $\rightsquigarrow$  Eine exakte Lösung der ursprünglichen  $N$ -Teilchen Problems ist nicht durchführbar.

Ausweg: Approximationen, um Kollisionsoperator allein durch  $f$  auszudrücken.

Dazu treffen wir einige Annahmen:

1. “Verdünntes” Gas mit kurzreichweitiger Wechselwirkung, Teilchen befinden sich die meiste Zeit im freien Flug, nur gelegentlich kollidieren zwei Teilchen *elastisch*<sup>3</sup> und ändern ihre Flugbahnen.

$$\vec{p} + \vec{p}_* = \vec{p}' + \vec{p}_*', \quad \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + \frac{|\vec{p}_*|^2}{2m} = \frac{|\vec{p}'|^2}{2m} + \frac{|\vec{p}_*'|^2}{2m}.$$

2. Molekulares Chaos bzw. “Stoffzahlansatz” (Boltzmann 1872),  $f^{(2)}$  faktorisiert unmittelbar vor der Kollision, das heißt

$$f^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, t) \approx f(\vec{x}_1, \vec{p}_1, t) \cdot f(\vec{x}_2, \vec{p}_2, t).$$

Also sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Teilchen unkorreliert.

*Aber:* Diese Annahme gilt nicht mehr unmittelbar nach der Kollision. Somit wird implizit eine Zeitrichtung festgelegt und das System wird irreversibel.

<sup>2</sup>Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon

<sup>3</sup>Es gelten Impuls- und Energieerhaltung. Insbesondere wird keine Energie in Form von Wärme oder Verformung verloren.

Kollisionsoperator  $C[f]$ :

$$C[f](\vec{x}, \vec{p}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}^2} B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) (f(\vec{x}, \vec{p}', t) \cdot f(\vec{x}, \vec{p}_* ', t) - f(\vec{x}, \vec{p}, t) \cdot f(\vec{x}, \vec{p}_*, t)) d^2 n d^3 p_*.$$

$\vec{p}'$  und  $\vec{p}_* '$  im Integranden sind Funktionen von  $\vec{p}$  und  $\vec{p}_*$ , festgelegt durch Impuls- und Energieerhaltung.

$$\begin{aligned} \vec{p}' &= \vec{p} - (\vec{n} \cdot (\vec{p} - \vec{p}_*)) \cdot \vec{n} \\ \vec{p}_* ' &= \vec{p}_* - (\vec{n} \cdot (\vec{p}_* - \vec{p})) \cdot \vec{n} \end{aligned}$$

$B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n})$  ist der *Streuquerschnitt*, er bildet mikroskopische Details der Kollision ab. Beispiel: “Harte Kugeln”

$$B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) = \begin{cases} \vec{n} \cdot (\vec{p} - \vec{p}_*), & \vec{n} \cdot (\vec{p} - \vec{p}_*) \geq 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Anmerkung:  $B$  hängt im Allgemeinen nur von  $|\vec{p} - \vec{p}_*|$  und  $\vec{n} \cdot \frac{\vec{p} - \vec{p}_*}{|\vec{p} - \vec{p}_*|}$  ab.

**Interpretation der  $f$ -Terme im Integranden von  $C[f]$**

$$f(\vec{x}, \vec{p}', t) \cdot f(\vec{x}, \vec{p}_* ', t)$$

lässt sich als “gain term” auffassen. Nach der Kollision gibt es ein zusätzliches Teilchen mit Impuls  $\vec{p}$ , das heißt  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  in der Boltzmann-Gleichung nimmt zu.

$$-f(\vec{x}, \vec{p}, t) \cdot f(\vec{x}, \vec{p}_*, t)$$

lässt sich als “loss term” auffassen. Aufgrund der Kollision “verschwindet” ein Teilchen mit Impuls  $\vec{p}$ , das heißt  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  nimmt ab.

## 4.2 Kollisionsinvarianten und Erhaltungssätze

Beispiel: Gesamte kinetische Energie des Systems:

$$E(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|}{2m} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3 p d^3 x.$$

Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass  $f$  räumlich homogen ist, also nicht von  $x$  abhängt. Außerdem sollen keinen externen Kräfte existieren, somit vereinfacht sich die Boltzmann-Gleichung zu

$$\partial_t f = C[f]. \quad (\circ)$$

Zeitliche Änderung der Gesamtenergie:

$$\frac{d}{dt} E(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|}{2m} \partial_t f(\vec{p}, t) d^3 p \stackrel{(\circ)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|}{2m} C[f] d^3 p.$$

Somit folgt, dass die Energieerhaltung  $\frac{d}{dt} E(t) = 0$  äquivalent ist zu

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|}{2m} C[f] d^3 p = 0.$$

Verallgemeinerung: Für welche Funktionen  $\varphi(\vec{p})$  gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) C[f] d^3 p = 0 ?$$

Wir setzen  $C[f]$  ein und verwenden die Abkürzungen

$$f(\vec{x}, \vec{p}', t) =: f', \quad f(\vec{x}, \vec{p}_* ', t) =: f'_*, \quad f(\vec{x}, \vec{p}, t) =: f, \quad f(\vec{x}, \vec{p}_*, t) =: f_*.$$

Damit

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) C[f] d^3 p = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}^2} \varphi(\vec{p}) B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p$$

Substitution:  $\vec{p} \leftrightarrow \vec{p}_*$ ,  $\vec{p}' \leftrightarrow \vec{p}_*'$ ,  $\vec{n} \leftrightarrow -\vec{n}$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}^2} \varphi(\vec{p}_*) \underbrace{B(\vec{p}_* - \vec{p}, -\vec{n})}_{=B(\vec{p}-\vec{p}_*, \vec{n})} \cdot \underbrace{(f'_* f' - f_* f)}_{=f' f'_* - f f_*} d^2 n d^3 p_* d^3 p.$$

Mit der Abkürzung  $B(\vec{p}_* - \vec{p}, -\vec{n}) =: B$  folgt also:

$$\iiint \varphi(\vec{p}) \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p = \iiint \varphi(\vec{p}_*) \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p.$$

Wir können das Integral auch bezüglich  $(\vec{p}', \vec{p}_*')$  anstelle von  $(\vec{p}, \vec{p}_*)$  ausdrücken, unter der Annahme, dass die Determinante der Jacobi-Matrix = 1 ist:

$$\iiint \varphi(\vec{p}) \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p = \iiint \varphi(\vec{p}) B (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_*' d^3 p'$$

Umbenennung:  $(\vec{p}, \vec{p}_*) \leftrightarrow (\vec{p}', \vec{p}_*')$

$$= \iiint \varphi(\vec{p}') \cdot B \cdot \underbrace{(f f_* - f' f'_*)}_{=-(f' f'_* - f f_*)} d^2 n d^3 p_* d^3 p$$

Wie zuvor kann man kann wieder  $\vec{p} \leftrightarrow \vec{p}_*$  substituieren.

Insgesamt erhalten wir

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) C[f] d^3 p &= \iiint \varphi(\vec{p}) \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p \\ &= \iiint \varphi(\vec{p}_*) \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p \\ &= - \iiint \varphi(\vec{p}') \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p \\ &= - \iiint \varphi(\vec{p}_*') \cdot B \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p. \end{aligned}$$

Addiere alle vier Varianten zusammen:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) \cdot C[f] d^3 p &= \iiint \frac{1}{4} (\varphi(\vec{p}) + \varphi(\vec{p}') - \varphi(\vec{p}') - \varphi(\vec{p}_*')) \\ &\quad \cdot B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) \cdot (f' f'_* - f f_*) d^2 n d^3 p_* d^3 p. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir 0 und damit auch die Energieerhaltung, wenn

$$\varphi(\vec{p}) + \varphi(\vec{p}_*) = \varphi(\vec{p}') + \varphi(\vec{p}'_*)$$

für alle  $\vec{p}, \vec{p}_* \in \mathbb{R}^3$  ( $\vec{p}', \vec{p}'_*$  sind Funktionen von  $\vec{p}, \vec{p}_*$ ). Funktionen  $\varphi$  mit dieser Eigenschaft heißen *Kollisionsinvarianten*.

Es stellt sich heraus: Die Allgemeine Lösung

$$\varphi(\vec{p}) = a + \vec{b} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2}c|\vec{p}|^2$$

ist Kollisionsinvariante für beliebige Konstanten  $a \in \mathbb{R}$ ,  $\vec{b} \in \mathbb{R}^3$ ,  $c \in \mathbb{R}$ .

Daraus folgt zum Beispiel für die Impulserhaltung  $\vec{p} + \vec{p}_* = \vec{p}' + \vec{p}'_* \Rightarrow$

$$\vec{b} \cdot \vec{p} + \vec{b} \cdot \vec{p}_* = \vec{b} \cdot \vec{p}' + \vec{b} \cdot \vec{p}'_*.$$

Analog für die Energieerhaltung.

Verschiedene Werte für  $a, b, c$  liefern die bekannten Erhaltungssätze. Für  $\varphi(\vec{p}) = 1$  folgt die Dichteerhaltung

$$\int_{\mathbb{R}^3} C[f] d^3p = 0.$$

Für  $\varphi(\vec{p}) = \vec{p}$  folgt die Impulserhaltung

$$\int_{\mathbb{R}^3} \vec{p} \cdot C[f] d^3p = 0.$$

Für  $\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{2m}|\vec{p}|^2$  folgt die Energieerhaltung

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|^2}{2m} C[f] d^3p = 0.$$

## 4.3 Thermisches Gleichgewicht und H-Theorem

Im Folgenden betrachte räumlich homogene Verteilungen<sup>4</sup> und keine externen Kräfte. Somit vereinfacht sich die linke Seite der Boltzmann-Gleichung zu  $\partial_t f(\vec{p}, t)$ :

$$\partial_t f = C[f]. \quad (\text{B}')$$

Was sind die Gleichgewichtslösungen der Boltzmann-Gleichung als Funktionen  $f$  mit  $C[f] = 0$  (also  $C[f]$  ist die Nullfunktion)?

Zentrale Größe zum “Messen” der Annäherung ans Gleichgewicht ist die *Entropie* (“Unordnung”):

$$S(t) := - \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{p}, t) \log(f(\vec{p}, t)) d^3p.$$

Sie wird mit  $S$  bezeichnet. Es wird auch die Bezeichnung  $-S = H$  verwendet.

Wir leiten nach der Zeit ab und setzen die Boltzmann-Gleichung (B') ein:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S(t) &= - \int (\partial_t f) \log f + f \frac{1}{f} \partial_t f d^3p. \\ &\stackrel{(\text{B}')}{=} - \int \log f C[f] d^3p + \int 1 \cdot C[f] d^3p \end{aligned}$$

Es gilt  $\int 1 \cdot C[f] d^3p = 0$  wegen der Dichteerhaltung.

---

<sup>4</sup>Das heißt  $f$  hängt nicht von  $\vec{x}$  ab.

### Satz: Boltzmann's H-Theorem

Die Entropie nimmt monoton zu ( $\frac{d}{dt}S(t) \geq 0$ ), das heißt

$$-\int_{\mathbb{R}^3} \log f \cdot C[f] d^3p \geq 0$$

für positive Funktionen  $f$  ( $f(\vec{p}, t) > 0$ ).

Gleichheit gilt genau dann, wenn

$$f(\vec{p}) = \exp \left( a + \vec{b} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2} c |\vec{p}|^2 \right) \quad (*)$$

für Konstanten  $a, \vec{b}, c < 0$ .

**Bemerkung.** Wenn  $f$  von der oben genannten Form ist, dann strebt  $S(t)$  asymptotisch gegen einen Gleichgewichtswert (siehe C. Villani).

Die Gleichgewichtslösungen sind also genau von der Form (\*).

“ $\Rightarrow$ ” Sei  $f$  Gleichgewichtslösung, also  $C[f] \equiv 0$ . Dann gilt

$$\int \log f C[f] d^3p = \int \log f \cdot 0 d^3p = 0.$$

Aus der Äquivalenz im H-Theorem folgt dann, dass  $f$  die Form (\*) hat.

“ $\Leftarrow$ ” Setze  $\varphi(\vec{p}) = \log f = a + \vec{b} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2} c |\vec{p}|^2$ .  $\varphi$  ist Kollisionsinvariante, also

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{p}) + \varphi(\vec{p}_*) &= \varphi(\vec{p}') + \varphi(\vec{p}_*') \\ \log f + \log f_* &= \log f' + \log f_*' \\ \log(f \cdot f_*) &= \log(f' \cdot f_*') \\ f \cdot f_* &= f' \cdot f_*'. \end{aligned}$$

Einsetzen in  $C[f]$  ergibt  $C[f] \equiv 0$ .

*Beweis des H-Theorems.* Es gilt (siehe ...)

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) \cdot C[f] d^3p &= \iiint \frac{1}{4} (\varphi(\vec{p}) + \varphi(\vec{p}') - \varphi(\vec{p}_*) - \varphi(\vec{p}_*')) \\ &\quad \cdot B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) \cdot (f' f_*' - f f_*) d^2n d^3p_* d^3p. \end{aligned}$$

Setze  $\varphi(\vec{p}) = \log f(\vec{p}, t)$  ( $f$  festgehalten):

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \log f \cdot C[f] d^3p &= -\frac{1}{4} \iiint \underbrace{(\log f + \log f_* - \log f' - \log f_*')}_{\log \frac{f f_*}{f' f_*'}} (f' f_*' - f f_*) \cdots \\ &= -\frac{1}{4} \iiint f' f_*' (1 - \lambda) \log \lambda \cdot B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) d^2n d^3p_* d^3p. \end{aligned}$$

mit  $\lambda(\vec{p}, \vec{p}_*) := \frac{f f_*}{f' f_*'} > 0$ , da  $f > 0$  laut Annahme.



Es gilt  $B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) \geq 0$  (der Streuquerschnitt ist nicht-negativ) und

$$-(1 - \lambda) \log \lambda \geq 0$$

für alle  $\lambda > 0$  wobei Gleichheit genau dann gilt, wenn  $\lambda = 1$ .

Somit folgt

$$-\frac{1}{4} \iiint f' f'_* (1 - \lambda) \log \lambda \cdot B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) d^2 n d^3 p_* d^3 p \geq 0,$$

also  $\frac{d}{dt} S(t) \geq 0$ .

Was folgt aus  $-\int \log f C[f] d^3 p = 0$ ? Dann muss der Integrand überall  $= 0$  sein, da  $\log f$  und  $C[f]$  stets  $\geq 0$  sind. Es muss also  $B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) = 0$  sein oder  $\lambda(\vec{p}, \vec{p}_*) = 1$  für alle  $\vec{p}, \vec{p}_* \in \mathbb{R}^3$ .

Bis auf Spezialfälle gibt es immer ein  $\vec{n} \in \mathbb{S}^2$  mit  $B(\vec{p} - \vec{p}_*, \vec{n}) > 0$ , also muss  $\lambda(\vec{p}, \vec{p}_*) = 1$  gelten.

$$\lambda(\vec{p}, \vec{p}_*) = 1 \quad \Leftrightarrow \quad f f_* = f' f'_* \quad \Leftrightarrow \quad \log f + \log f_* = \log f' + \log f'_*,$$

also ist  $\varphi(\vec{p}) = \log f(\vec{p}, t)$  eine Kollisionsinvariante. Damit existieren  $a \in \mathbb{R}$ ,  $b \in \mathbb{R}^3$  und  $c \in \mathbb{R}$ , sodass

$$\varphi(\vec{p}) = a + \vec{b} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2} c |\vec{p}|^2,$$

also gilt

$$f(\vec{p}, t) = \exp \left( a + \vec{b} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2} c |\vec{p}|^2 \right)$$

( $c < 0$  wegen Integrierbarkeit). □

**Bemerkung.** Man kann die Gleichgewichtslösungen  $\exp \left( a + \vec{b} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2} c |\vec{p}|^2 \right)$  umschreiben als

$$f_{\text{MB}}(\vec{p}) = \rho \left( \frac{\beta}{2\pi m} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\beta \frac{1}{2m} |\vec{p} - m\vec{u}|^2 \right)$$

mit Dichte  $\rho$  und  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Diese Form bezeichnet man als *Maxwell-Boltzmann-Verteilung*. Das ist eine Gauß-Funktion.

Der Normalisierungsfaktor  $\left( \frac{\beta}{2\pi m} \right)^{\frac{3}{2}}$  wird benötigt, um

$$\int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{MB}}(\vec{p}) d^3 p = \rho$$

sicherzustellen.

Erhaltungssätze (Dichte-, Impuls- und Energieerhaltung) legen die Parameter  $\rho$ ,  $\vec{u}$  und  $\beta$  der MB-Verteilung eindeutig fest. Das heißt, man kann allein aufgrund der erhaltenen Größen auf die asymptotische Gleichgewichtsverteilung schließen,  $f(\vec{p}, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} f_{\text{MB}}(\vec{p})$ .

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{p}, t) d^3 p, & \rho \text{ hängt nicht von } t \text{ ab.} \\ \vec{u} &= \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\vec{p}}{m} f(\vec{p}, t) d^3 p}{\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{p}, t) d^3 p} = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\vec{p}}{m} f(\vec{p}, t) d^3 p \\ E &= \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|^2}{m} f(\vec{p}, t) d^3 p}{\int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{p}, t) d^3 p} \end{aligned}$$

Wähle  $\beta$  so, dass  $\frac{3}{2}\frac{1}{\beta} + \frac{1}{2}m|\vec{u}|^2 = E$ . Dann erfüllt  $f_{\text{MB}}$  mit den Parametern  $\rho, \vec{u}, \beta$

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} f_{\text{MB}}(\vec{p}) d^3p &= \rho, \\ \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\vec{p}}{m} f_{\text{MB}}(\vec{p}) d^3p &= \vec{u}, \\ \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|^2}{m} f_{\text{MB}}(\vec{p}) d^3p &= \frac{3}{2}\frac{1}{\beta} + \frac{1}{2}m|\vec{u}|^2 = E\end{aligned}$$

## 4.4 Übergang zu makroskopischen Kontinuitätsgleichungen

Ab jetzt soll wieder räumliche Abhängigkeit vorliegen, das heißt  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  hängt von  $\vec{x}$ . Somit gilt:

Dichte	$\rho(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p$
Geschwindigkeit	$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\vec{p}}{m} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p$
Gesamtenergie	$E(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{ \vec{p} ^2}{2m} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p$

Relativgeschwindigkeit eines Teilchens:

$$\vec{c} = \frac{\vec{p}}{m} - \vec{u}(\vec{x}, t).$$

Es gilt

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} \vec{c} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p &= \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{\vec{p}}{m} - \vec{u}(\vec{x}, t) \right) f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p \\ &= \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) - \vec{u}(\vec{x}, t) \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} f d^3p}_{\rho} = 0\end{aligned}\quad (*)$$

Somit gilt für  $i, j \in \{1, 2, 3\}$ :

$$\left. \begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{p_i p_j}{m m} f d^3p &= \int (u_i + c_i)(u_j + c_j) f d^3p \\ &= u_i u_j \underbrace{\int f d^3p}_{\rho} + u_i \underbrace{\int c_j f d^3p}_{=0(*)} + u_j \underbrace{\int c_i f d^3p}_{=0(*)} + \underbrace{\int c_i c_j f d^3p}_{=: \sigma_{ij}} \\ &= \rho u_i u_j + \sigma_{ij}\end{aligned}\right\} \quad (*)$$

mit dem (Spannungstensor) bzw. *Drucktensor* (stress tensor)  $\sigma_{ij}$ .

Die Gleichung gilt insbesondere auch für  $j = i$ . Also können wir mit

$$|\vec{p}|^2 = \vec{p} \cdot \vec{p} = p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z$$

die folgende Beziehung herleiten:

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{x}, t) E(\vec{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\vec{p}|^2}{2m} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p \\
&= \rho \frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 + \underbrace{\int \frac{1}{2} m |\vec{c}|^2 f d^3p}_{= \frac{1}{2m} |\vec{p} - m\vec{u}|^2} \\
&= \rho \frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 + \rho \frac{1}{2} \varepsilon(\vec{x}, t),
\end{aligned}$$

wobei  $\varepsilon$  die *interne Energie* bezeichnet:

$$\varepsilon(\vec{x}, t) := \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \int \frac{1}{2m} |\vec{p} - m\vec{u}(\vec{x}, t)|^2 f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^3p.$$

Für  $i \in \{1, 2, 3\}$ :

$$\begin{aligned}
\int \frac{p_i}{m} \frac{|\vec{p}|^2}{2m} f d^3p &= \int \frac{1}{2} m (u_i + c_i) |\vec{u} + \vec{c}|^2 f d^3p \\
&= \int \frac{1}{2} m (u_i + c_i) (|\vec{u}|^2 + 2\vec{u} \cdot \vec{c} + |\vec{c}|^2) f d^3p \\
&= \frac{1}{2} m u_i |\vec{u}|^2 \underbrace{\int f d^3p}_{\rho} + m u_i \sum_{j=1}^3 u_j \underbrace{\int c_j f d^3p}_{=0(\circ)} + u_i \underbrace{\int \frac{1}{2} m |\vec{c}|^2 f d^3p}_{\rho \varepsilon} \\
&\quad + \frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 \underbrace{\int c_i f d^3p}_{=0} + m \sum_{j=1}^3 u_j \underbrace{\int c_i c_j f d^3p}_{\sigma_{ij}} + \int c_i \frac{1}{2} m |\vec{c}|^2 f d^3p \\
&= \rho u_i \left( \frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 + \varepsilon \right) + m \sum_{j=1}^3 u_j \sigma_{ij} + m q_i
\end{aligned}$$

mit der *Wärmestromdichte* (heat flux)  $\vec{q}$ :

$$q_i = \int c_i \frac{1}{2} m |\vec{c}|^2 f d^3p, \quad i \in \{1, 2, 3\}.$$

Strategie: Nutze Erhaltungssätze des Kollisionoperators  $C[f]$  aus, um makroskopische Erhaltungsgleichungen herzuleiten.

Boltzmann-Gleichung:

$$\partial_t f + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f + \vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f = C[f].$$

Wir nehmen an, dass die externe Kraft  $\vec{F}$  nicht vom Impuls  $\vec{p}$  abhängt.

Multipliziere die Boltzmann-Gleichung von links mit  $1, \frac{\vec{p}}{m}, \frac{|\vec{p}|^2}{2m}$  und integriere über den Impuls  $\vec{p}$ .  $\rightsquigarrow$  Rechte Seite verschwindet aufgrund der Erhaltungssätze für  $C[f]$ .

Multiplikation mit 1:

$$\begin{aligned} \int \partial_t f d^3p + \int \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f d^3p + \int \vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f d^3p &= 0 \\ \underbrace{\partial_t \int f d^3p}_{\rho} + \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \underbrace{\int \frac{p_j}{m} f d^3p}_{\rho u_j} + \sum_{j=1}^3 F_j \underbrace{\int \partial_{p_j} f d^3p}_0 &= 0. \end{aligned}$$

Es gilt  $\int \partial_{p_j} f d^3p = 0$ , weil

$$\lim_{|\vec{p}| \rightarrow \infty} f(\vec{p}) = 0, \quad \text{analog zu} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} h(x) = 0 \quad \text{für} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} h(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} h(x) = 0.$$

Also folgt die Kontinuitätsgleichung für die Dichte:

$$\boxed{\partial_t \rho(\vec{x}, t) + \partial_{\vec{x}}(\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t)) = 0}$$

Integration über ein räumlich geschlossenes Volumen  $V$ :

$$\underbrace{\partial_t \int_V \rho(\vec{x}, t) d^3x}_A + \underbrace{\int_V \partial_{\vec{x}}(\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t)) d^3x}_B = 0.$$

$A$  ist die zeitliche Änderung der Masse im Volumen. Für  $B$  gilt nach dem Integralsatz von Gauß:

$$\int_V \partial_{\vec{x}}(\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t)) d^3x = \int_{\delta V} \rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) \cdot \vec{n}(\vec{x}) d^3p$$

mit dem Normalenvektor  $\vec{n}$ . Das lässt sich als die Masse, die durch den Rand  $\delta V$  hinein bzw. hinaus fließt, interpretieren.

Für Multiplikation mit  $\frac{p_i}{m}$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ :

$$\underbrace{\partial_t \int \frac{p_i}{m} f d^3p}_{\rho u_i} + \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \underbrace{\int \frac{p_i p_j}{m m} f d^3p}_{\rho u_i u_j + \sigma_{ij}} + \sum_{j=1}^3 F_j \underbrace{\int \frac{p_i}{m} \partial_{p_j} f d^3p}_C = 0$$

Für  $C$  können wir partiell integrieren. Der zweite Term der partiellen Integration verschwindet und es bleibt

$$\int \frac{p_i}{m} \partial_{p_j} f d^3p = -\frac{1}{m} \int \underbrace{(\partial_{p_j} p_i)}_{=\delta_{ij}} f d^3p = -\frac{1}{m} \delta_{ij} \int f d^3p.$$

Damit gilt

$$\sum_{j=1}^3 F_j \int \frac{p_i}{m} \partial_{p_j} f d^3p = -\frac{1}{m} \rho F_i.$$

Also folgt die Kontinuitätsgleichung für den Impuls:

$$\boxed{\partial_t(\rho u_i) + \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}(\rho u_i u_j + \sigma_{ij}) = \frac{1}{m} \rho F_i}$$

Für Multiplikation mit  $\frac{|\vec{p}|^2}{2m}$  folgt die Kontinuitätsgleichung für die Energie

$$\boxed{\partial_t \left( \rho \left( \frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 + \varepsilon \right) \right) + \sum_{i=1}^3 \partial_{x_i} \left( \rho u_i \left( \frac{1}{2} m |\vec{u}|^2 + \varepsilon \right) + m \sum_{j=1}^3 u_j \sigma_{ij} + m q_i \right) = \sum_{i=1}^3 \rho u_i F_i}$$

## Rolle des Kollisionsoperators $C[f]$ ?

“Schließen” der Kontinuitätsgleichungen, das heißt Ausdrücken der Größen  $\sigma_{ij}$ ,  $q_i$  durch  $\rho$ ,  $\vec{u}$ ,  $\varepsilon$  (“constitutive equations”).

## Umformung der Kontinuitätsgleichung für den Impuls

$$\partial_t(\rho u_i) + \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}(\rho u_i u_j + \sigma_{ij}) = \frac{1}{m} \rho F_i$$

für  $i = 1, 2, 3$ . Kettenregel anwenden:

$$(\partial_t \rho) u_i + \rho \partial_t u_i + u_i \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}(\rho u_j) + \sum_{j=1}^3 \rho u_j (\partial_{x_j} u_i) + \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \sigma_{ij} = \frac{1}{m} \rho F_i.$$

Aus der Kontinuitätsgleichung für die Dichte wissen wir, dass

$$(\partial_t \rho) u_i + u_i \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}(\rho u_j) = u_i (\partial_t \rho + \partial_{\vec{x}} \rho \vec{u}) = 0.$$

Also erhalten wir nach Multiplikation mit  $\frac{1}{\rho}$

$$\partial_t u_i + \sum_{j=1}^3 u_j (\partial_{x_j} u_i) + \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \sigma_{ij} = \frac{1}{m} F_i.$$

Anmerkung: Eine analoge Schreibweise für  $\sum_{j=1}^3 u_j (\partial_{x_j} u_i)$  ist

$$(\vec{u} \cdot \nabla) u_i,$$

was sich als “Ableitung in Richtung  $\vec{u}$ ” interpretieren lässt.

Analog zu oben setzen wir die Kontinuitätsgleichung für die Dichte und den Impuls in die Kontinuitätsgleichung für die Energie ein und erhalten die *Kontinuitätsgleichung für die interne Energie*

$$\rho \partial_t \varepsilon + \sum_{j=1}^3 (\rho u_j \partial_{x_j} \varepsilon + m \partial_{x_j} q_j) + m \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{ij} \partial_{x_j} u_i = 0.$$

**Bemerkung.**

$$\frac{1}{2} \int m \sum_{i=1}^3 c_i^2 \int d^3 p = \frac{1}{2} \int m |\vec{c}|^2 f d^3 p = \rho \cdot \varepsilon.$$

## 4.5 Euler-Gleichungen der Strömungsmechanik

*Approximation:* Verteilungsfunktion  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  befindet sich *lokal* stets im (thermischen) MB-Gleichgewicht, das heißt

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = \rho(\vec{x}, t) \left( \frac{\beta(\vec{x}, t)}{2\pi m} \right)^{3/2} e^{-\beta(\vec{x}, t) \frac{1}{2m} |\vec{p} - m\vec{u}(\vec{x}, t)|^2}$$

mit orts- und zeitabhängigen Parametern

$$\rho(\vec{x}, t), \quad \vec{u}(\vec{x}, t), \quad \beta(\vec{x}, t).$$

Stelle Gleichung (\*) nach  $\sigma_{ij}$  um und nutze  $c_i := \frac{p_i}{m} - u_i$ , es gilt  $dp = mdc$ .

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \int c_i c_j f d^3p \\ &= \int c_i c_j f m^3 d^3c \\ &= \int c_i c_j \rho \left( \frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} e^{-\beta(\vec{x}, t) \frac{1}{2m} |\vec{p} - m\vec{u}(\vec{x}, t)|^2} m^3 d^3c \\ &= \frac{1}{m} \rho \frac{1}{\beta} \partial_{ij} \end{aligned}$$

Für ideale Gase gilt  $\frac{1}{m}\rho = \frac{1}{m} \frac{Nm}{V} = \frac{N}{V}$ . Aus Übungsaufgabe 7 wissen wir, dass  $P = \frac{N}{\beta V}$ . Also

$$\sigma_{ij} = P \cdot \delta_{ij}.$$

Zudem gilt

$$\frac{1}{2}m \sum_{i=1}^3 \sigma_{ii} = \rho \cdot \varepsilon,$$

also

$$\mathcal{P} = \frac{1}{m} \frac{2}{3} \rho \cdot \varepsilon.$$

Nun betrachten wir die Gleichung für  $q_i$  und verwenden wieder  $c_i = \frac{p_i}{m} - u_i$ , also  $dp = mdc$ :

$$\begin{aligned} q_i &= \int c_i \frac{1}{2} |\vec{c}|^2 f d^3p \\ &= \rho \left( \frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \int c_i \frac{1}{2} (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) e^{-\beta(\vec{x}, t) \frac{1}{2m} |\vec{p} - m\vec{u}(\vec{x}, t)|^2} m^3 d^3c. \end{aligned}$$

Der Integrand ist eine ungerade Funktion bezogen auf die Komponente  $c_i$ , also folgt für  $i = 1, 2, 3$ :

$$q_i = 0.$$

Setzen wir nun diese Ergebnisse in die Kontinuitätsgleichungen ein, erhalten wir die *Euler-Gleichungen der Strömungsmechanik* (im allgemeinen kompressiblen Fall):

Dichte	$\partial_t \rho + \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}(\rho u_j) = 0,$
Impuls	$\partial_t u_i + \sum_{j=1}^3 u_j \partial_{x_j} u_i + \frac{1}{\rho} \partial_{x_j} P = \frac{1}{m} F_i$
Interne Energie	$\partial_t \varepsilon + \sum_{j=1}^3 u_j \partial_{x_j} \varepsilon + \frac{m}{\rho} P(\nabla \cdot \vec{u}) = 0$

Dabei ist

$$\nabla \cdot \vec{u} = \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} u_j$$

die *Divergenz* von  $\vec{u}$ .

## 4.6 Navier-Stokes-Gleichungen

*Chapman-Enskog*: Störungstheorie der Boltzmann-Gleichung mit Knudsen-Zahl  $K_n$  als kleinem Parameter:

$$K_n = \frac{\text{Mittlere freie Weglänge eines Moleküls}}{\text{Charakteristische makroskopische Länge}}$$

Zum Beispiel Durchmesser eines Rohrs, durch das die Strömung fließt.

Das führt zu den (viskosen, kompressiblen) Navier-Stokes-Gleichungen.

“constitutive equations”

$$\sigma_{ij} = P \cdot \delta_{ij} - \tau_{ij}$$

- $P$  ... *Druck*,
- $\tau_{ij}$  ... *viskoser Spannungstensor*.

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \mu(\partial_{x_i} u_j + \partial_{x_j} u_i) + \lambda(\nabla \cdot \vec{u})\delta_{ij} \\ &= \underbrace{\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)}_{\xi} (\nabla \cdot \vec{u})\delta_{ij} + \mu(\partial_{x_i} u_j + \partial_{x_j} u_i) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \vec{u})\delta_{ij} \end{aligned}$$

$\xi$  wird meist vernachlässigt,  $\mu$  ist die *dynamische Viskosität*.

$$q_i = -\kappa \partial_{x_i} T$$

mit dem *Wärmeleitkoeffizient*  $\kappa$ .

Für  $i = 1, 2, 3$  gilt

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \tau_{ij} &= \mu \sum_{j=1}^3 \left( \partial_{x_i} \partial_{x_j} u_j + \partial_{x_j}^2 u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_{x_j} (\nabla \cdot \vec{u}) \right) \\ &= \mu \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}^2 u_i + \frac{1}{3} \mu \partial_{x_i} (\nabla \cdot \vec{u}).\end{aligned}$$

Man benutzt den *Laplace-Operator*

$$\sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}^2 =: \nabla^2 =: \Delta.$$

Setzen wir dies in die Kontinuitätsgleichung für den Impuls ein, erhalten wir die *kompressible Navier-Stokes-Impulsgleichung*. Für  $i = 1, 2, 3$  gilt

$$\rho \left( \partial_t u_i + \sum_{j=1}^3 u_j \partial_{x_j} u_i \right) \partial_{x_i} P = \mu \left( \nabla^2 \vec{u} + \frac{1}{3} \partial_{x_i} (\nabla \cdot \vec{u}) \right) + \frac{1}{m} \rho F_i.$$

Anmerkung: Im inkompressiblen Fall  $\rho = \text{const}$  verschwindet der Term,  $\frac{1}{3} \partial_{x_i} (\nabla \cdot \vec{u})$ , da  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ .

## Interpretation der Navier-Stokes-Gleichung

$$\sum_{j=1}^3 u_j \cdot \partial_{x_j} u_i \equiv (\vec{u} \cdot \nabla) u_i$$

beschreibt die *Konvektion* des Geschwindigkeitsfelds von sich selbst.

Nicht-linearer Term in der Navier-Stokes-Gleichung.

Beispiel: Betrachte

$$\partial_t h(\vec{x}, t) + (\vec{u} \cdot \nabla) h(\vec{x}, t) = 0$$

mit  $\vec{u} = \text{const}$ . Gesucht ist  $h(\vec{x}, t)$ .

Lösung: Sei  $h(\vec{x}, t) = g(\vec{x} - t\vec{u})$  für eine beliebige differenzierbare Funktion  $g(\vec{x})$ , dann sind

$$\partial_t h = \frac{d}{dt} g(\vec{x} - t\vec{u}) = -\vec{u} \cdot \nabla g(\vec{x} - t\vec{u})$$

und

$$\nabla h = \nabla g.$$

Für Navier-Stokes ist  $h = u_i$ . Hier ist die Berechnung komplizierter, weil  $\vec{u}$  nicht konstant ist, sich selbst "transportiert".

Der Term

$$\nabla^2 u_i \equiv \Delta u_i \equiv (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) u_i$$

beschreibt die *Diffusion* des Geschwindigkeitsfeldes.



Beispiel: Die Wärmeleitungsgleichung

$$\partial_t h(\vec{x}, t) - \mu \Delta h(\vec{x}, t) = 0$$

wird gelöst von

$$h(\vec{x}, t) = \frac{1}{(\sqrt{4\pi\mu t})^d} e^{-\frac{|\vec{x}|^2}{4\mu t}}$$

mit der Dimension  $d \in \{1, 2, 3\}$ . Das ist eine Gauß-(Glocken-)Funktion, die sich mit der Zeit verbreitert,

$$\lim_{t \rightarrow 0} h(\vec{x}, t) = \delta(\vec{x}),$$

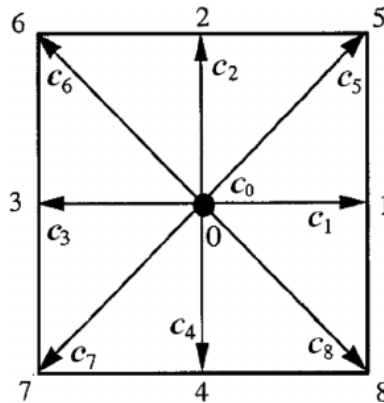
wobei  $\delta$  den Dirac-Impuls bezeichnet.

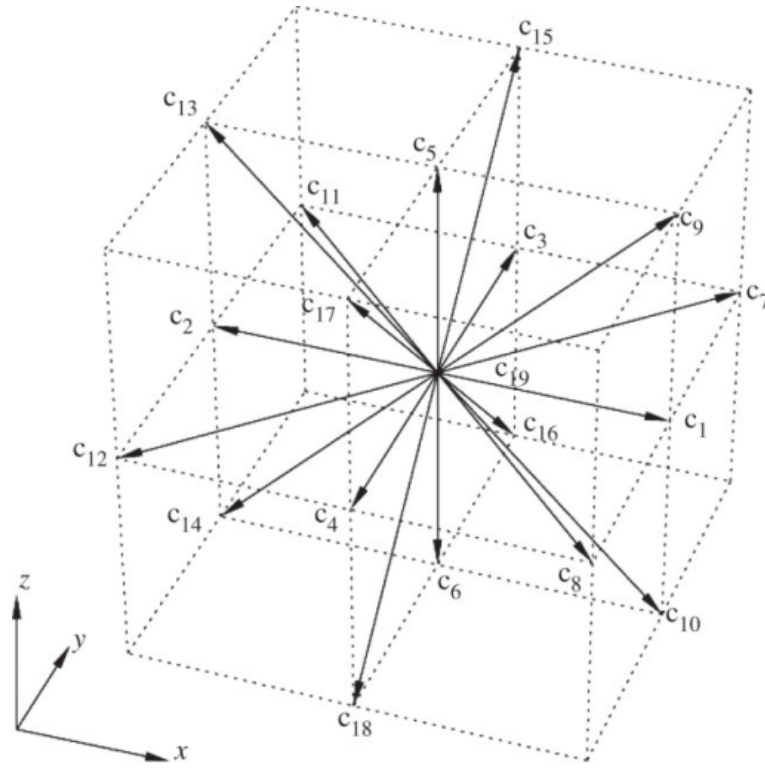
## 4.7 Die Lattice-Boltzmann-Methode

Grundlegende Idee: Diskretisiere die Verteilungsfunktion  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  der Boltzmann-Gleichung, um Navier-Stokes-Gleichung zu approximieren. Also wird

- $\vec{x} \rightsquigarrow$  Reguläres kartesisches Gitter (diskrete, äquidistante Koordinaten),
- $\vec{p} \rightsquigarrow$  Geschwindigkeitsvektoren in Richtung der Nachbarfelder,
- $t \rightsquigarrow t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$  Diskrete Zeitschritte.

Im zweidimensionalen Fall erhält man ein *D2Q9-Schema* (zwei Dimensionen, neun Geschwindigkeiten). Für drei Dimensionen ergibt sich ein *D3Q19-Schema*.





Diskrete Impulsvektoren für D2Q9:

$$\vec{p}_i = \xi \cdot \vec{e}_i$$

mit

$$\begin{aligned} \vec{e}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{e}_1 &= \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \vec{e}_2 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \vec{e}_3 &= \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, & \vec{e}_4 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \vec{e}_5 &= \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ \vec{e}_6 &= \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, & \vec{e}_7 &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, & \vec{e}_8 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Entsprechend gilt die diskretisierte Verteilungsfunktion

$$f_i(\vec{x}, t) := f(\vec{x}, \vec{p}_i, t)$$

für  $t = 0, \dots, 8$ .

Erinnerung: Die Boltzmann-Gleichung (ohne externe Kräfte):

$$\partial_t f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \underbrace{\vec{p} \cdot \nabla f(\vec{x}, \vec{p}, t)}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{C[f](\vec{x}, \vec{p}, t)}_{\text{Kollision}}.$$

Der LBM-Algorithmus behandelt Konvektion und Kollision separat (“splitting”). Für einen Zeitschritt  $t \rightarrow t + \Delta t$  berechne

$$f_i(\vec{x}, t) \xrightarrow{\text{Konvektion}} f_i^*(\vec{x}, t + \Delta t) \xrightarrow{\text{Kollision}} f_i(\vec{x}, t + \Delta t).$$

## Konvektion

“stream step”

Idee: Verteilungsfunktion wird entlang diskreter Impulse  $\vec{p}_i$  zu den Nachbarzellen transportiert.

$$f_i^*(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x} - \Delta t \vec{p}_i, t)$$

für alle  $i = 0, \dots, 8$ .

## Kollision

“collision step”

Mehrere Approximationen:

- Ersetze exakten Kollisionsoperator durch Bhatnagar-Gast-Krook-Approximation (BGK):  
 $C[f] \approx C_{\text{BGK}}[f]$  mit

$$C_{\text{BGK}}[f] = -\frac{1}{\tau}(f - f_{\text{MB}}),$$

wobei  $\tau$  die Zeitskala der Relaxation ins Gleichgewicht ist, dieser Wert wird fest gewählt.

- Taylor-Entwicklung der Maxwell-Boltzmann-Verteilung  $f_{\text{MB}}$  bezüglich der durchschnittlichen Geschwindigkeit  $\vec{u}$ .

$$\begin{aligned} f_{\text{MB}}(\vec{p}) &= \rho \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2} \\ &= \boxed{\rho \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2} \left( 1 + \beta \vec{p} \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (\beta \vec{p} \cdot \vec{u})^2 - \frac{1}{2} \beta |\vec{u}|^2 \right)} + O(u^3) \\ &=: f^{(\text{eq})}(\vec{p}) + O(u^3), \end{aligned}$$

wobei  $d = 2, 3$ .

Die Erhaltungsgrößen bleiben unverändert, das heißt

$$\int \varphi(\vec{p}) f_{\text{MB}}(\vec{p}) d^3 p = \int \varphi(\vec{p}) f^{(\text{eq})}(\vec{p}) d^3 p$$

für die Kollisionsinvarianten  $\varphi(\vec{p}) = 1, \vec{p}, \frac{1}{2} |\vec{p}|^2$ . Der zweidimensionale Fall folgt genauso.

Die Parameter  $\rho, \vec{u}, \beta$  in  $f_{\text{MB}}$  sollen durch Erhaltungssätze festgelegt werden. Im kontinuierlichen Fall:

$$\rho = \int f d^3 p, \quad \vec{u} = \frac{1}{\rho} \int \vec{p} f d^3 p, \quad \varepsilon = \dots$$

## Adaption auf Diskretisierung $f_i(\vec{x}, t)$ ?

Wir kennen  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  nur für diskrete Punkte  $\vec{p}_i$ .

Idee: Konstruiere eine Quadraturformel mit  $\vec{p}_i$  als Stützstellen und  $\left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2}$  als Gewichtsfunktion.

Erinnerung: Quadraturformel (in einer Dimension)

$$\int_a^b h(x)g(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i h(x_i)$$

mit der vorgegebenen Gewichtsfunktion  $g(x)$ . Die Gewichte  $w_i$  und die Stützstellen  $x_i$  werden so gewählt, dass “=” gilt für Polynome  $h$  bis zu einem möglichst hohen Grad.

## Für Lattice-Boltzmann

Die Stützstellen können nicht frei gewählt werden, sondern sind genau die diskreten Impulse  $\vec{p}_i = \xi \cdot \vec{e}_i$ ,  $\xi$  ist der einzige freie Parameter.

Die Gewichte  $w_i$  sollen Isotropie-Bedingungen erfüllen, das heißt sie sollen invariant unter einer Rotation um  $90^\circ$  sein.

$$w_1 = w_2 = w_3 = w_4, \quad w_5 = w_6 = w_7 = w_8.$$

Quadraturformel für D2Q9: Es soll gelten

$$\int h(\vec{p}) \underbrace{\left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2}}_{\text{Gewichtsfunktion}} d^3p = \sum_{i=0}^8 w_i h(\vec{p}_i)$$

mit  $\vec{p}_i = \xi \vec{e}_i$ .  $h$  ist ein Polynom in  $p_x$  und  $p_y$  (zum Beispiel  $h(\vec{p}) = p_x^1 p_y^2 + 1$ ) bis zum Grad 5.

Lösung: Es muss ein Produkt von modifizierten Gauß-Hermite-Integrationen bestimmt werden, eine Quadraturformel in jeder Koordinatenrichtung  $(p_x, p_y)$ .

$$w_0 = \frac{4}{9}, \quad w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = \frac{1}{9}, \quad w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = \frac{1}{36}.$$

Eigentlich:  $\beta$  (inverse Temperatur) sollte kompatibel mit  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$  gewählt werden, sie wird aber hier durch  $\xi$  festgelegt. Die Länge einer Gitterzelle  $\xi \Delta t$  kann sich nicht ändern.

Man arbeitet daher mit einer “isothermalen” Approximation: Halte die Temperatur während der Simulation konstant. Dann wird allerdings die Energieerhaltung verletzt.

*Gebräuchliche Wahl:* Gitterkonstante  $\xi \Delta t = 1$ ,  $\Delta t = 1$  und somit auch  $\xi = 1$ , also  $\beta = 3$ .

Nun wenden wir die Quadraturformel (in 2D) an:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^2} h(\vec{p}) f(\vec{x}, \vec{p}, t) d^2 p &= \int_{\mathbb{R}^2} \underbrace{h(\vec{p}) \frac{f(\vec{x}, \vec{p}, t)}{\left(\frac{\beta}{2\pi}\right) e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2}}}_{\tilde{h}(\vec{p})} \left(\frac{\beta}{2\pi}\right) e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2} d^2 p \\
&\stackrel{\text{Qu.}}{\approx} \sum_{i=0}^8 w_i \tilde{h}(\vec{p}_i) \\
&= \sum_{i=0}^8 h(\vec{p}_i) w_i \underbrace{\frac{f(\vec{x}, \vec{p}_i, t)}{\left(\frac{\beta}{2\pi}\right) e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}_i|^2}}}_{=: f_i(\vec{x}, t)}.
\end{aligned}$$

Insbesondere:

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^2} f d^2 p \approx \sum_{i=0}^8 f_i(\vec{x}, t)$$

sowie

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^2} \vec{p} f d^2 p \approx \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 \vec{p}_i f_i(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \xi \sum_{i=0}^8 \vec{e}_i f_i(\vec{x}, t).$$

Entsprechend für die Gleichgewichtsverteilung:

$$\begin{aligned}
f_i^{(\text{eq})} &= w_i \frac{f^{(\text{eq})}(\vec{p}_i)}{\left(\frac{\beta}{2\pi}\right) e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}_i|^2}} \\
&= w_i \frac{\rho \left(\frac{\beta}{2\pi}\right) e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}_i|^2} \left(1 + \beta \vec{p}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (\beta \vec{p}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{1}{2} \beta |\vec{u}|^2\right)}{\left(\frac{\beta}{2\pi}\right) e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}_i|^2}} \\
&= w_i \rho \left(1 + \beta \vec{p}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (\beta \vec{p}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{1}{2} \beta |\vec{u}|^2\right),
\end{aligned}$$

wobei  $\beta \xi^2 = 3$ .

## Zusammenfassung Basis-LBM-Algorithmus

- Periodische Randbedingungen
- Parameter:  $\xi, \Delta t, \tau \in [\frac{1}{2}, \infty)$ .
- Geometrie des Simulationsgebietes: Rechteck (2D) oder Quader (3D) bestehend aus gleichförmigen Zellen mit Seitenlänge  $\xi \Delta t$ .

Jede Zelle hat diskrete Koordinaten  $\vec{x} \in \xi \cdot \Delta t \cdot \mathbb{Z}^d$ .

- Anfangsbedingung: Diskretisierte Verteilungsfunktion  $f_i(\vec{x}, 0)$  für alle Zellen  $\vec{x}$ , Impulsrichtungen  $i = 0, 1, \dots, 8$  (D2Q9) bzw.  $i = 0, 1, \dots, 18$  (D3Q19).

Algorithmus: Für  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$

Konvektion (“stream step”):

$$f'_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x} - \Delta t \vec{p}_i, t)$$

für alle  $\vec{x}, i$ .

Kollision (“collision step”):

$$\rho = \sum_i f'_i(\vec{x}, t + \Delta t),$$

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_i \vec{p}_i f'_i(\vec{x}, t + \Delta t).$$

Bestimme mit  $\rho$  und  $\vec{u}$  als Parameter die lokale Gleichgewichtsverteilung:

$$f_i^{(\text{eq})} = w_i \rho \left( 1 + \beta \vec{p}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (\beta \vec{p}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{1}{2} \beta |\vec{u}|^2 \right),$$

wobei  $\beta = \frac{3}{\xi^2}$ .

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f'_i(\vec{x}, t + \Delta t) - \underbrace{\frac{1}{\tau} (f'_i(\vec{x}, t + \Delta t) - f_i^{(\text{eq})})}_{BGK}$$

## 4.8 Randbedingungen für Hindernisse

An Wänden und Hindernissen führt man eine Modifikation des Konvektionsschritts aus.

“no-slip”-Randbedingung (kein Rutschen): Die Impulse in Richtung Wand werden umgedreht. An rauen Hindernissen (Steinwand) invertiert man typischerweise die Normal- und Tangentialrichtung.

Bezeichne mit  $\tilde{i}$  den Richtungsvektor entgegengesetzt zur Richtung  $\vec{e}_i$ , das heißt  $\vec{e}_{\tilde{i}} = -\vec{e}_i$ . Somit gilt

$$f'_i(\vec{x}, t + \Delta t) = \begin{cases} f_{\tilde{i}}(\vec{x}, t), & \text{falls } \vec{e}_i \text{ in Richtung Hindernis,} \\ f_i(\vec{x} - \Delta t \vec{p}_i, t) & \text{sonst.} \end{cases}$$

“free-slip”-Randbedingung (freies Rutschen): Lediglich die Normalenrichtung wird umgedreht. Das ist typisch für glatte Oberflächen, zum Beispiel Glas.

## Berücksichtigung externer Kräfte

Erinnerung:

$$\partial_t f + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f + \vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f = C[f].$$

$\vec{F}$  bezeichnet die externe Kraft.

Approximation: Ersetze  $\vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f$  durch  $\vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f_{\text{MB}}|_{\vec{u}=0}$ . Es gilt

$$\partial_{\vec{p}} |\vec{p}|^2 = \begin{pmatrix} \partial_{p_x} \\ \partial_{p_y} \\ \partial_{p_z} \end{pmatrix} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = 2\vec{p}$$

und damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
\vec{F} \cdot \partial_{\vec{p}} f_{\text{MB}}|_{\vec{u}=0} &= \vec{F} \partial_{\vec{p}} \rho \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2} \\
&= \vec{F} \cdot \left( \rho \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2} \left( -\beta \frac{1}{2} 2\vec{p} \right) \right) \\
&= \underbrace{-\rho \beta \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2} (\vec{F} \cdot \vec{p})}_{=: \Delta f^{(\text{ext})}(\vec{p})}.
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir den diskreten und entdimensionalisierten Ausdruck

$$\Delta f_i^{(\text{ext})} = w_i \frac{\Delta f^{(\text{ext})}(\vec{p}_i)}{\left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{d/2} e^{-\beta \frac{1}{2} |\vec{p}|^2}} = w_i \rho \beta (\vec{F} \cdot \vec{p}_i).$$

Somit: Modifiziere den letzten Schritt im Basis-Algorithmus zu

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}, t + \Delta t) - \frac{1}{\tau} (f_i^*(\vec{x}, t + \Delta t) - f_i^{(\text{eq})}) + \Delta f_i^{(\text{ext})},$$

wobei  $f_i^*$  nach der Konvektion (“stream step”) zu betrachten ist.

## Ausblick: Lattice-Boltzmann für freie Oberflächen

Typischer Anwendungsfall: Flüssigkeit mit dynamischer Grenzschicht, zum Beispiel Wasseroberfläche.

↪ Mitverfolgen der Grenzschicht während der Simulation.

Drei Zelltypen:

- F: Fluidzelle
- IF: Interface (Grenzschicht)
- E: Leer (empty)

Berechne eine approximative Oberflächennormale  $\vec{n}$  basierend auf dem “Füllstand” in Zelnachbarschaft.

## 4.9 Image-Inpainting als Navier-Stokes-Gleichung

### Image-Inpainting

Kontinuum-Formulierung (Pixelgröße  $\rightarrow 0$ ).  $\Omega$  sei der gesamte Bildbereich, der Rekonstruktionsbereich ist  $D \subset \Omega$ .

Die Bildfunktion  $\psi : \Omega \rightarrow [0, 1]$  liefert Grauwerte (Farbfotos in mehrere Kanäle auftrennen). Sie ist nur außerhalb von  $D$  bekannt.

Idee (Bertalmio und Koautoren 2000, 2001): Virtuelle Zeitevolution (innerhalb  $D$ ), wobei  $\psi(\vec{x}, t)$  jetzt zusätzlich von “virtueller” Zeit  $t$  abhängt.

$$\partial_t \psi = \vec{N} \cdot \nabla L = \sum_{i=1}^2 N_i \partial_{x_i} L,$$

wobei  $\vec{N}$  die Richtung und  $L$  die Information, die transportiert werden soll, bezeichnet. Vergleiche dazu den Konvektionsterm  $(\vec{u} \cdot \nabla)h$ .

Intuition: Transport entlang von Konturlinien (“Isophoten”). Diese liegen senkrecht zum Gradienten  $\nabla \psi$ . Ein tangentialer Vektor zur Isophote liegt also auch senkrecht zum Gradienten.

$$\vec{N} = \nabla^\perp \psi, \quad \nabla^\perp = \begin{pmatrix} -\partial_{x_2} \\ \partial_{x_1} \end{pmatrix}$$

$\nabla^\perp \psi$  steht senkrecht auf  $\nabla \psi$ , denn

$$(\nabla^\perp \psi)(\nabla \psi) = \begin{pmatrix} -\partial_{x_2} \psi \\ \partial_{x_1} \psi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \psi \\ \partial_{x_2} \psi \end{pmatrix} = 0.$$

Glatte Fortsetzung:

$$L = \Delta \psi, \quad \Delta = \partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2.$$

Somit:

$$\partial_t \psi = \vec{N} \cdot \nabla L = (\nabla^\perp \psi) \cdot \nabla (\Delta \psi).$$

In den Papers von 2000/2001 entwickeln die Autoren einen diskreten Algorithmus, der für Pixelgröße  $\rightarrow 0$  auf diese stetige Differentialgleichung führt.

Bemerkung: Eine äquivalente Darstellung ist

$$\partial_t \psi - \vec{v} \nabla \psi = 0$$

mit  $\vec{v} = \nabla^\perp \Delta \psi$ , denn

$$\begin{aligned} (\nabla^\perp \psi) \cdot \nabla \Delta \psi &= \begin{pmatrix} -\partial_{x_2} \psi \\ \partial_{x_1} \psi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \Delta \psi \\ \partial_{x_2} \Delta \psi \end{pmatrix} \\ &= -(\partial_{x_2} \psi)(\partial_{x_1} \Delta \psi) + (\partial_{x_1} \psi)(\partial_{x_2} \Delta \psi) \\ &= \begin{pmatrix} \partial_{x_2} \Delta \psi \\ -\partial_{x_1} \Delta \psi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \psi \\ \partial_{x_2} \psi \end{pmatrix} \\ &= -\underbrace{(\nabla^\perp \Delta \psi)}_{\vec{v}} \cdot \nabla \psi. \end{aligned}$$

Also wird  $\psi$  von  $\vec{v}$  “transportiert” in Richtung der Konturlinien von  $\Delta \psi$ .

## Zusammenhang mit Navier-Stokes

Gegeben: Geschwindigkeitsfeld  $\vec{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2$ , divergenzfrei ( $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ ).  $\vec{u}$  löse die Navier-Stokes-Gleichung (inkompressibler Fall).



Wirbelstärke:

$$w = \nabla \times \vec{u} := \partial_{x_1} u_2 - \partial_{x_2} u_1$$

Das ist die  $z$ -Komponente der Rotation in drei Dimensionen:

$$\left[ \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \partial_{x_2} \\ \partial_{x_3} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ 0 \end{pmatrix} \right]_3 = \partial_{x_1} u_2 - \partial_{x_2} u_1.$$

Definiere  $\vec{u}^\perp := \begin{pmatrix} u_2 \\ -u_1 \end{pmatrix}$ , dann gilt:

$$\nabla \times \vec{u}^\perp = \partial_{x_1}(-u_1) - \partial_{x_2} u_2 = -\nabla \cdot \vec{u} = 0.$$

$\vec{u}^\perp$  ist wirbelfrei, kann also als Gradient einer “Stromfunktion”  $\psi$  dargestellt werden:

$$\vec{u}^\perp = \nabla \psi, \quad \vec{u} = \nabla^\perp \psi.$$

Eingesetzt in die Wirbelstärke:

$$w = \partial_{x_1} u_2 - \partial_{x_2} u_1 = \partial_{x_1} \partial_{x_1} \psi - \partial_{x_2} (-\partial_{x_2} \psi) = \Delta \psi.$$

Erinnerung: Navier-Stokes-Gleichung mit konstanter Dichte  $\rho(\vec{x}, t) = 1$ :

$$\partial_t \vec{u} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \nabla P = \mu \Delta \vec{u}$$

mit dem Druck  $P$  und der Viskosität  $\mu$ .

Anwenden von  $\nabla \times \cdot$  (von links) liefert

$$\partial_t w + \vec{u} \cdot \nabla w = \mu \Delta w,$$

wobei  $\nabla \times (\nabla P) = 0$  aus Aufgabe 11b folgt.

Im stationären Fall ( $\partial_t w = 0$ ) und ohne Viskosität ( $\mu = 0$ ) bleibt also nur der mittlere Term übrig:

$$0 = \vec{u} \cdot \nabla w = (\nabla^\perp \psi) \cdot \nabla \Delta \psi.$$

Das ist genau der Image-Inpainting-Term.

# 5 Informationssuche im Web: Google's PageRank

Google: 1998 gegründet von Sergey Brin und Larry Page (Googol:  $10^{100}$ )

Schwierigkeiten bei der Websuche:

- Sehr große *Anzahl* von Webseiten ( $1,3 \cdot 10^9$  Seiten; Stand Dezember 2017),
- nicht sortiert (nach Themenkomplexen),
- Web-Suche soll für Laien zugänglich sein ("Intention" der Suche erkennen, Tippfehler ausbessern etc.).

## 5.1 Grobes Modell einer Suchmaschine

1. Suche im "Index": Die Suchmaschine generiert aus dem internen *Index* (Datenbank) eine unsortierte Trefferliste aller für die Suchanfrage relevanten Webseiten (Suchbegriff erscheint auf Webseite).
2. Ranking: Die Trefferliste wird nach Ranking-Faktoren sortiert und ausgegeben.

Suchmaschinen "durchforsten" das Internet mittels "Web-Crawlern" (automatisierte Surfer, "robots"), die Webseiten herunterladen.

Anschließend parsen sie den Inhalt, zum Beispiel nach der Häufigkeit bestimmter Wörter oder der Linkstruktur (Verweise auf andere Webseiten). Die Ergebnisse werden indiziert und in einer Datenbank gespeichert.

### Ranking-Faktoren

- Kriterien: Relevanz für die Suchanfrage, inhaltliche Qualität.
- Anfrageabhängige Faktoren: zum Beispiel Häufigkeit des Suchbegriffs auf der Seite.
- Anfrageunabhängige Faktoren: zum Beispiel "Popularität" einer Seite, "Klickhäufigkeit" oder Verlinkung mit anderen Seiten.

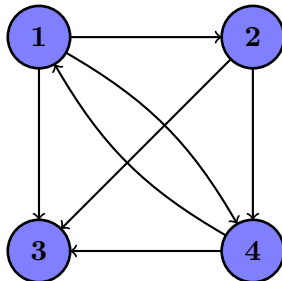
Vorteil: Diese Faktoren können schon vor der Suchanfrage berechnet werden.

*Entscheidende Neuerung in Google's Page-Rank-Algorithmus:* Ausnutzung der Linkstruktur des Internets.

## 5.2 Von der Link-Struktur zum PageRank

Idee: "Eine Webseite ist umso wichtiger, je mehr andere wichtige Seiten darauf verweisen."

Modellbeispiel:



- $n = 4$  Webseiten  $S_i$ ,
- $|S_j|$ : Anzahl der ausgehenden Links,  $|S_1| = 3$ ,  $|S_2| = 2$ , usw.
- $B_j$ : Menge der auf  $S_j$  verweisenden Seiten ("back links"),  $B_1 = \{S_3, S_4\}$ ,  $B_2 = \{S_1\}$ , usw.

$r_j$ : Zu bestimmendes Ranking einer Webseite ("Page Rank")

$$r_i = \sum_{S_j \in B_i} \frac{r_j}{|S_j|}, \quad i = 1, \dots, n.$$

$\Rightarrow$  Indizierung und Speicherung in Datenbank

Selbstreferenziell, Struktur  $A \cdot \vec{r} = \vec{r}$ .

### Matrix-Vektor-Notation

Hyperlink-Matrix  $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Einträge:

$$h_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{|S_i|}, & S_i \in B_j^1 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für den PageRank-Vektor gilt

$$\vec{r}^\top = \vec{r}^\top \cdot H \quad \text{bzw.} \quad H^\top \cdot \vec{r} = \vec{r},$$

das heißt  $\vec{r}$  ist ein Eigenvektor von  $H^\top$  zum Eigenwert 1.

Im Modellbeispiel:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}$$

Linkseigenvektor zum Eigenwert 1:

$$\vec{r}^\top = (0,387, 0,129, 0,290, 0,194).$$

---

<sup>1</sup> $S_i$  besitzt einen Link auf  $S_j$ .

Alle Einträge sind  $\geq 0$ , sie können als “rank” interpretiert werden. Somit ist das Ranking der Webseiten:

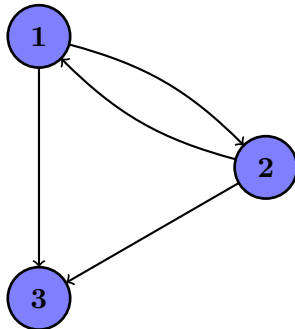
$$S_1, S_3, S_4, S_2.$$

Zum Vergleich betrachte das “naive” Ranking anhand der Anzahl der eingehenden Links:

$$S_3, (S_1, S_4), S_2.$$

Besitzt  $H$  stets einen (eindeutigen) Eigenvektor zum Eigenwert 1? Nein!

### Beispiel für die Nichtexistenz

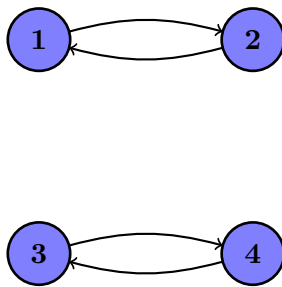


$S_3$  hat keine ausgehenden Links.

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Spektrum:  $\sigma(H) = \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0\}$ . Also ist 1 kein Eigenwert von  $H$ .

### Beispiel für die Uneindeutigkeit



Isolierte Inseln

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$\sigma(H) = \{1, 1, -1, -1\}$ . Es gibt also mehrere Eigenvektoren zum Eigenwert 1.

## 5.3 Diskrete Markov-Ketten

- Zustandsraum  $Z = \{1, 2, \dots, n\}$ .  
Zum Beispiel Wetter:  $Z = \{1, 2\} =: \{ \text{“Sonne”, “Regen”} \}$ .
- $X_k$ : Zufallsvariable mit Werten in  $Z$ , für diskrete Zeitpunkte  $k = 0, 1, \dots$   
Beispiel  $X_5 = 2$ : “Es regnet am fünften Tag”.

### Notation

- $\pi_i^k = \mathbb{P}(X_k = i)$ : Wahrscheinlichkeit, dass  $X_k$  den Zustand  $i$  annimmt.  
Zum Beispiel  $\pi_2^5$ : Wahrscheinlichkeit, dass es am fünften Tag regnet.

$$\pi_i^k \geq 0, \quad \sum_{i \in Z} \pi_i^k = 1.$$

- Der Vektor  $\pi^k$  heißt *Zustandsverteilung* zum Zeitpunkt  $k$ .

## Markov-Eigenschaft

Wahrscheinlichkeitsverteilung zum Zeitpunkt  $k + 1$  hängt nur von der Wahrscheinlichkeitsverteilung am Zeitpunkt  $k$  ab:

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = i_{k+1} | X_k = i_k, X_{k-1} = i_{k-1}, \dots, X_1 = i_1) = \mathbb{P}(X_{k+1} = i_{k+1} | X_k = i_k).$$

$p_{ij}$ : Übergangswahrscheinlichkeit von Zustand  $i$  nach  $j$  in einem Zeitschritt,

$$p_{ij} = \mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_k = i) \geq 0.$$

Diese Größe ist unabhängig von  $k$  wegen der zeitlichen Translationsinvarianz. Somit:

$$\begin{aligned} \pi_j^{k+1} &= \mathbb{P}(X_{k+1} = j) \\ &= \sum_{i \in Z} \underbrace{\mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_k = i)}_{=p_{ij}} \cdot \underbrace{\mathbb{P}(X_k = i)}_{=\pi_i^k} \\ &= \sum_{i \in Z} \pi_i^k p_{ij}. \end{aligned}$$

Matrix-Vektor-Notation:

$$\pi^{k+1} = P^\top \pi^k, \quad P := (p_{ij}).$$

$P$  ist eine *Rekursionsmatrix*, es gilt

$$\pi^{k+1} = P^\top \pi^k = P^\top P^\top \pi^{k-1} = \dots = (P^\top)^{k+1} \pi^0.$$

Außerdem ist  $P$  eine *stochastische Matrix*:

$$p_{ij} \geq 0, \quad \sum_{j \in Z} p_{ij} = 1 \text{ für alle } i.$$

Begründung:

$$\begin{aligned} \sum_{j \in Z} p_{ij} &= \sum_{j \in Z} \mathbb{P}(X_{k+1} = j | X_k = i) \\ &= \mathbb{P}(X_{k+1} \in Z | X_k = i) = 1. \end{aligned}$$

Eine Zustandsverteilung  $\pi$  heißt *stationär* bzw. *Gleichgewichtsverteilung*, falls

$$P^\top \pi = \pi,$$

das heißt  $\pi$  ist Eigenvektor von  $P^\top$  zum Eigenwert 1 und ein Fixpunkt der Iterationsvorschrift

$$\pi^{k+1} = P^\top \pi^k.$$

**Bedingungen an  $P$ , sodass  $\lim_{n \rightarrow \infty} (P^\top)^{k+1} \pi^0$  existiert?**

$P$  ist eine stochastische Matrix, also gilt mit  $e = (1, 1, \dots, 1)^\top$

$$P \cdot e = e,$$

das heißt  $P$  besitzt einen Eigenvektor zum Eigenwert 1. Wegen

$$\sigma(P^\top) = \sigma(P)$$

mit  $\sigma =$  Menge der Eigenwerte<sup>2</sup> ist 1 auch ein Eigenwert von  $P^\top$ .

**Spektralradius:**

$$\rho(P) := \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(P)\}.$$

Es gilt

$$1 \leq \rho(P) \leq \|P\|_\infty,$$

wobei

$$\|P\|_\infty = \max_{i \in Z} \sum_{j \in Z} p_{ij} = 1$$

nach Definition. Also gilt

$$\rho(P) = \rho(P^\top) = 1.$$

Somit ist 1 der dominante Eigenwert, aber es ist a priori nicht klar, ob ein zugehöriger Eigenvektor mit Einträgen  $\geq 0$  existiert.

Eine hinreichende Bedingung ist durch den folgenden Satz gegeben:

**Satz: Perron-Frobenius**

*Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine Matrix mit strikt positiven Einträgen<sup>3</sup>, dann gilt:*

- a)  $A$  hat einen strikt dominanten positiven Eigenwert  $\lambda_1 > 0$ , den sogenannten Perron-Eigenwert.*
- b) Es gibt einen Eigenvektor<sup>4</sup>  $v_1$  zu  $\lambda_1$  mit strikt positiven Einträgen.*
- c) Der Perron-Eigenwert ist algebraisch einfach<sup>5</sup>.*
- d) Außer  $v_1$  gibt es keine weiteren Eigenvektoren<sup>6</sup> von  $A$  mit ausschließlich nicht-negativen Einträgen.*

Damit folgt: Falls die stochastische Matrix  $P$  zusätzlich  $p_{ij} > 0$  für alle  $i, j$  erfüllt, dann hat sie den Perron-Eigenwert  $\lambda_1 = 1$  und es existiert eine eindeutige stationäre Verteilung  $\pi$ .

Außerdem konvergiert die Iterationsvorschrift

$$\pi^{k+1} = P^\top \pi^k$$

für beliebiges  $\pi^0$  gegen  $\pi$ :

$$\pi = \lim_{k \rightarrow \infty} \pi^k.$$

Begründung:

<sup>2</sup>Das kann man zum Beispiel mit dem charakteristischen Polynom beweisen.

<sup>3</sup>Das heißt  $a_{ij} > 0$  für alle  $i, j$ .

<sup>4</sup> $Av_1 = \lambda_1 v_1$ .

<sup>5</sup>Also ist der Eigenraum eindimensional.

<sup>6</sup>Bis auf skalare Vielfache von  $v_1$ .

**Satz**

Es sei  $\lambda_1$  ein algebraisch einfacher, strikt dominanter Eigenwert einer Matrix  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  mit zugehörigem Eigenvektor  $v_1$  und Linkseigenvektor<sup>7</sup>  $w_1$  mit

$$w_1^\top v_1 = 1.$$

Dann gilt für den Iterationsprozess

$$z^{k+1} = Az^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

dass

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{z^k}{\lambda_1^k} = (w_1^\top \cdot z^0) v_1.$$

*Beweis.* Der Beweis wird für diagonalisierbares  $A$  geführt. Der Satz gilt auch anderenfalls, dann muss man die Jordan'sche Normalform verwenden.

Seien  $v_1, \dots, v_n$  eine Basis aus Eigenvektoren mit zugehörigen (nicht notwendigerweise verschiedenen) Eigenwerten  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ .

Schreibe den Anfangszustand  $z^0$  als Linearkombination

$$z^0 = \alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n,$$

dann gilt

$$\begin{aligned} z^k &= Az^{k-1} = A^2 z^{k-2} = \dots = A^k z^0 \\ &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \underbrace{A^k v_i}_{\lambda_i^k v_i}, \end{aligned}$$

somit

$$\frac{z^k}{\lambda_1^k} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \frac{\lambda_i^k}{\lambda_1^k} v_i \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \alpha_1 v_1,$$

weil

$$\frac{\lambda_i^k}{\lambda_1^k} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \begin{cases} 1, & i = 1, \\ 0, & i > 1, \end{cases}$$

aufgrund der strikten Dominanz von  $\lambda_1$ .

Außerdem

$$\begin{aligned} w_1^\top A v_i &= w_1^\top (\lambda_i v_i) = \lambda_i w_1^\top v_i, \\ w_1^\top A v_i &= (w_1^\top A) v_i = (\lambda_1 w_1^\top) v_i \end{aligned}$$

und damit

$$(\lambda_i - \lambda_1) w_1^\top v_i = 0.$$

---

<sup>7</sup>Also  $w_1^\top A = \lambda_1 w_1^\top$  bzw.  $A^\top w_1 = \lambda_1 w_1$ .

Wegen  $\lambda_i \neq \lambda_1$  für alle  $i > 1$  folgt also

$$w_1^\top v_i = 0 \quad \text{für alle } i > 1$$

und damit

$$w_1^\top z^0 = \alpha_1 \underbrace{w_1^\top v_1}_{=1} = \alpha_1. \quad \square$$

Anwendung des Satzes auf die stochastische Matrix  $P^\top$  mit  $p_{ij} > 0$  für alle  $i, j$ :

$$\lambda_1 = 1, \quad v_1 = \pi^8, \quad w_1 = e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix},$$

denn  $e^\top \pi = \sum_{i \in Z} \pi = 1$  nach Definition. Somit gilt für beliebige Anfangsverteilungen  $\pi^0$ :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \pi^k = \underbrace{e^\top \pi^0}_{=1} \pi.$$

## 5.4 Stochastische Interpretation (Zufallssurfer)

**Idee:** PageRank ist proportional zur durchschnittlichen Verweildauer eines Zufallssurfers auf einer Webseite.

- Zustandsraum  $Z$ : Menge aller Webseiten,
- Zufallsvariable  $X_k$ :  $k$ -te besuchte Webseite des Zufallssurfers.

**Annahmen:** Der Zufallssurfer ist gedächtnislos, das heißt sein Verhalten hängt nur von der aktuell besuchten Webseite ab (entspricht der Markov-Eigenschaft). Der Zufallssurfer bewegt sich zur nächsten Seite, indem er

- a) zufällig (gleichverteilt) einen der Links auf der aktuellen Seite verwendet (falls Links vorhanden sind)
- b) zufällig (gleichverteilt) auf eine beliebige Webseite springt (falls keine Links auf der aktuellen Seite vorhanden sind)

Damit ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit

$$q_{ij} = \mathbb{P}(X_{k+1} = S_j | X_k = S_i) = \begin{cases} \frac{1}{|S_j|}, & S_i \text{ besitzt einen Link auf } S_j, \\ \frac{1}{n}, & S_i \text{ besitzt keine Links,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Matrixschreibweise:

$$Q = H + \frac{1}{n} \cdot d e^\top$$

mit

$$e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad d \in \mathbb{R}^n, \quad d_i = \begin{cases} 1, & S_i \text{ besitzt keine Links,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$



$Q = (q_{ij})$  ist sehr ähnlich zur Hyperlink-Matrix  $H$  (außer, wenn keine Links vorhanden sind). Der Term  $\frac{1}{n}de^\top$  ersetzt Nullzeilen in  $H$  durch  $(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n})$ .

$Q$  ist eine stochastische Matrix, es gilt  $q_{ij} \geq 0$  und für alle  $i$  ist  $\sum_{j \in Z} q_{ij} = 1$ .

**Wunsch:** Die Vektoriteration

$$\pi^{k+1} = Q^\top \pi^k$$

soll gegen die stationäre Grenzverteilung  $\pi$  konvergieren, also

$$\pi = \lim_{k \rightarrow \infty} \pi^k, \quad Q^\top \pi = \pi$$

mit  $\pi_i \geq 0$ ,  $\sum_{i=1}^n \pi_i = 1$ . Das impliziert

$$\pi_i = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{l} \sum_{k=0}^{l-1} \pi_i^k,$$

wobei  $\frac{1}{l} \sum_{k=0}^{l-1} \pi_i^k$  die durchschnittliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit nach  $l$  Schritten ist.

*Aber:*  $\lim \pi^k$  existiert im Allgemeinen gar nicht. Siehe zum Beispiel Übungsaufgabe 16(c).

*Erinnerung:* Voraussetzung im Satz von Perron-Frobenius war, dass alle Matrixeinträge strikt positiv sind.

**Idee:** (Brin, Page) Modifiziere den Zufallssurfer, sodass er mit einer kleinen Wahrscheinlichkeit auf eine beliebige Webseite springen kann ("Teleportation").

Damit bewegt sich der "Google"-Zufallssurfer zur nächsten Webseite, indem er mit Wahrscheinlichkeit  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ )

- a) zufällig (gleichverteilt) einen der Links auf der aktuellen Seite verwendet (falls Links vorhanden sind)
- b) zufällig (gleichverteilt) auf eine beliebige Webseite springt (falls keine Links auf der aktuellen Seite vorhanden sind)

und mit Wahrscheinlichkeit  $1 - \alpha$  zufällig mit dem Wahrscheinlichkeitsvektor

$$v, \quad v_i > 0, \quad \sum_{i=1}^n v_i = 1$$

auf eine beliebige Webseite springt.

1998 wurde  $v = \frac{1}{n}e$  mit  $n$  der Gesamtzahl aller Webseiten verwendet. Heute ist die Struktur von  $v$  ein Firmengeheimnis.

## Entsprechende Google-Übergangsmatrix

$$G = \alpha Q + (1 - \alpha)ev^\top$$

Schreibweise:

$$ev^\top = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} (v_1, \dots, v_n) = \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_n \\ \vdots & & \vdots \\ v_1 & \cdots & v_n \end{pmatrix}.$$

$G$  ist wiederum eine stochastische Übergangsmatrix. Für die Einträge gilt  $g_{ij} \geq 0$  (sogar  $> 0$ , da  $v_i > 0$  für alle  $i$ ) und

$$\sum_j g_{ij} = \alpha \sum_j g_{ij} + (1 - \alpha) \sum_j v_j = \alpha + (1 - \alpha) = 1.$$

Somit ist der Satz von Perron-Frobenius anwendbar. Der Perron-Eigenwert ist  $\lambda_1 = 1$  und der entsprechende Eigenvektor  $\pi$  ist die eindeutige Lösung von

$$G^\top \pi = \pi \quad \text{mit} \quad \sum_i \pi_i = 1$$

und erfüllt  $\pi_i > 0$  für alle  $i$ .

**Interpretation:**  $\pi_i$  ist die durchschnittliche Aufenthaltsdauer des Google-Zufallssurfers auf der Webseite  $S_i$  und wird als PageRank verwendet.

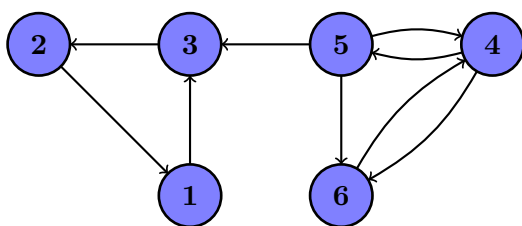
Außerdem: (siehe oben) Die Vektoriteration

$$\pi^{k+1} = G^\top \pi^k$$

mit beliebiger Anfangsverteilung  $\pi^0$  konvergiert gegen  $\pi$ :

$$\pi = \lim_{k \rightarrow \infty} \pi^k.$$

## Beispiel



Hyperlink-Matrix:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es gibt keine "hängenden Knoten", jede Seite besitzt mindestens einen Link. Somit gilt

$$Q = H.$$

Google-Matrix für  $\alpha = \frac{4}{5}$  und  $v = \frac{1}{6}e$ :

$$G = \frac{4}{5}Q + \frac{1}{5} \cdot \frac{1}{6}ee^\top$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{5}{6} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} \\ \frac{5}{6} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} \\ \frac{1}{30} & \frac{5}{6} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} \\ \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{13}{30} & \frac{13}{30} \\ \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{3}{10} & \frac{3}{10} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} \\ \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} & \frac{5}{6} & \frac{1}{30} & \frac{1}{30} \end{pmatrix}$$

PageRank-Vektor  $G^\top \pi = \pi$ :

$$\pi = (0,2001, 0,2085, 0,2189, 0,1557, 0,0956, 0,1211)^\top.$$

Damit ist das Ranking der Webseiten:

$$3, 2, 1, 4, 6, 5.$$

Zum Vergleich: Für  $\alpha = 1$ , also  $G = H$ , erhalten wir

$$\pi = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, 0, 0\right)^\top.$$

Also hätten die Seiten 4, 5 und 6 den PageRank 0.

## 5.5 Berechnung des PageRank-Vektors

Erste Idee: Löse

$$G^\top \pi = \pi, \quad e^\top \pi = 1$$

direkt. Also

$$\begin{aligned} (\alpha Q + (1 - \alpha)ev^\top)^\top \pi &= \pi \\ \alpha Q^\top \pi + (1 - \alpha)v \underbrace{e^\top \pi}_{=1} &= \pi \\ (I - \alpha Q^\top)\pi &= (1 - \alpha)v. \end{aligned}$$

Das ist ein lineares Gleichungssystem für  $\pi$ . Man benötigt für eine dünn besetzte Matrix  $Q$  eine Rechenzeit von  $O(n^2)$ , also ist das Verfahren nicht durchführbar für  $n \approx 10^9$  Webseiten.

Stattdessen: Führe die Vektoriteration

$$\pi^{k+1} = G^\top \pi^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

mit  $\pi^0 = \frac{1}{n}e$  aus.

Um das explizite Aufstellen der Matrix  $G$  zu vermeiden, können wir  $G^\top \pi^k$  auswerten:

$$\begin{aligned} G^\top \pi^k &= (\alpha Q^\top + (1 - \alpha)ve^\top)\pi^k \\ &= \alpha Q^\top \pi^k + (1 - \alpha)ve^\top \pi^k \\ &= \alpha H^\top \pi^k + \alpha \frac{1}{n}e(d^\top \pi^k) + (1 - \alpha)v, \end{aligned}$$

wobei  $d^\top \pi^k$  ein Skalarprodukt ist.

Somit muss nur das Matrix-Vektorprodukt  $H^\top \pi^k$  mit der dünn besetzten Hyperlink-Matrix  $H$  berechnet werden, die Kosten sind  $O(n)$ .

In der Praxis (laut Brin, Page) benötigt man 50 bis 100 Iterationen. Die Berechnung von  $\pi$  dauert einige Tage.

## Konvergenzgeschwindigkeit der Vektoriteration

Die Konvergenz hängt vom Verhältnis der betragsmäßig größten Eigenwerte  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  ab:

$$\|\pi^k - \pi\|_1 \leq c \left( \frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^k$$

mit einer von  $k$  unabhängigen Konstante  $c$ .

Für die Google-Matrix gilt  $\lambda_1 = 1$  und laut Perron-Frobenius ist  $\lambda_1$  strikt dominant, das heißt  $|\lambda_2| < |\lambda_1|$ .

Frage: Um wie viel “kleiner” ist  $|\lambda_2|$ ?

*Behauptung:* Alle anderen Eigenwerte  $\lambda \neq 1$  erfüllen

$$|\lambda| \leq \alpha.$$

*Beweis.* Sei  $u$  ein Eigenvektor von  $G^\top$  zum Eigenwert  $\lambda$ , also

$$G^\top u = \lambda u.$$

Dann gilt

$$e^\top (G^\top u) = \lambda e^\top u$$

sowie

$$(e^\top G^\top)u = (Ge)^\top u = e^\top u.$$

Also bilden wir die Differenz

$$0 = (\lambda - 1)e^\top u \quad \Rightarrow \quad e^\top u = 0,$$

weil  $\lambda \neq 1$ . Damit folgt

$$G^\top u = \alpha Q^\top u + (1 - \alpha) \underbrace{e^\top u}_{=0} = \alpha Q^\top u$$

und es gilt

$$\lambda u = \alpha Q^\top u \quad \text{bzw.} \quad Q^\top u = \frac{\lambda}{\alpha} u.$$

Also ist  $\frac{\lambda}{\alpha}$  ein Eigenwert von  $Q^\top$  und es folgt

$$\left| \frac{\lambda}{\alpha} \right| \leq \rho(Q) = 1. \quad \square$$

Begründung für den Spektralradius  $\rho(Q) = 1$ :  $Q$  ist eine stochastische Matrix, das heißt sie besitzt den Eigenwert 1 wegen  $Qe = e$  und damit

$$1 \leq \rho(Q) \leq \|Q\|_\infty = \max_i \sum_j |q_{ij}| = 1.$$

## Herleitung der Konstante $c$

$$\|\pi^k - \pi\|_1 \leq \alpha^k \|\pi^0 - \pi\|_1 \leq \alpha^k (\|\pi^0\|_1 + \|\pi\|_1) = 2\alpha^k,$$

also ist  $c = 2$ .

Die Konvergenzgeschwindigkeit ist exponentiell in  $k$ . Für eine Genauigkeit von  $d$  Dezimalstellen muss

$$2\alpha^k \stackrel{!}{\leq} 10^{-d}$$

gelten. Bilden des Logarithmus und Auflösen nach  $k$  liefert

$$\begin{aligned} \log 2 + k \cdot \log \alpha &\leq -d \cdot \log 10 \\ k &\geq -\frac{d \cdot \log 10 + \log 2}{\log \alpha} \end{aligned}$$

wegen  $\log \alpha < 0$ .

## Beispiel

$d = 5$  Stellen:

$\alpha$	0,5	0,75	0,8	0,85	0,9	0,99
$k$	18	43	55	76	116	1215

Die Anzahl der benötigten Iterationen wächst sehr schnell für  $\alpha \rightarrow 1$ . Eine kleine Teleportationswahrscheinlichkeit  $(1 - \alpha)$  repräsentiert aber die tatsächliche Link-Struktur besser.

Google 1998:  $\alpha = 0,85$ , ca. 50 Iterationen.

$$2 \cdot 0,85^{50} = 0,000\,59 \dots,$$

also nur etwa drei Stellen Genauigkeit.

Aber: Nur die Rangfolge ist interessant, neben dem PageRank werden noch weitere inhaltsbasierte Kriterien zum Sortieren der Suchergebnisse verwendet. Es muss also keine sehr hohe Genauigkeit bei der Berechnung des PageRank-Vektors  $\pi$  erreicht werden.

## 5.6 Sensitivitätsanalyse des PageRank-Vektors

### Sensitivität bezüglich $\alpha$

Betrachte die Google-Matrix  $G$  und den entsprechenden PageRank-Vektor als Funktion von  $\alpha$ . Man kann zeigen:  $\pi(\alpha)$  ist eine differenzierbare Funktion und

$$\left\| \frac{d\pi(\alpha)}{d\alpha} \right\|_1 \leq \frac{2}{1 - \alpha}.$$

Somit reagiert  $\pi(\alpha)$  nicht allzu sensitiv auf Änderungen von  $\alpha$ , so lange  $\alpha$  nicht zu nahe bei 1 liegt.

Andererseits ist die Abschätzung für  $\alpha \rightarrow 1$  nicht aussagekräftig, da dann  $\frac{2}{1 - \alpha} \rightarrow \infty$ . Es stellt sich aber heraus, dass  $\pi(\alpha)$  in der Tat sehr empfindlich bezüglich Änderungen von  $\alpha$  ist.

## Sensitivität bezüglich $H$

Hier betrachten wir der Einfachheit halber nur das Hinzufügen oder Entfernen von Links zwischen bestehenden Webseiten<sup>9</sup>, nicht aber das Hinzufügen oder Entfernen von Webseiten an sich.

Fasse den PageRank-Vektor als Funktion von  $H$  auf,  $\pi(H)$ . Ziel ist die Ableitung von  $\pi$  bezüglich eines Matrix-Eintrags  $h_{ij}$ :

$$\frac{d\pi}{dh_{ij}}.$$

Ausgangspunkt:

$$G^\top \pi = \pi, \quad e^\top \pi = \sum_{i=1}^n \pi_i = 1.$$

Einsetzen von  $G = \alpha Q + (1 - \alpha)ev^\top$ :

$$\begin{aligned}(I - \alpha Q^\top) \pi &= (1 - \alpha)v \\ \pi &= (1 - \alpha)(I - \alpha Q^\top)^{-1}v.\end{aligned}$$

## Allgemein: Ableitung einer inversen Matrix

Sei  $A(t) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine stetig differenzierbare, matrixwertige Funktion von  $t$  und sei  $A(t)$  invertierbar für alle  $t \in \mathbb{R}$ . Ziel ist,  $\frac{d}{dt}A(t)^{-1}$  zu ermitteln.

$$\begin{aligned}0 &= \frac{d}{dt}I = \frac{d}{dt}(A(t)A(t)^{-1}) \\ &= \left(\frac{d}{dt}A(t)\right)A(t)^{-1} + A(t)\frac{d}{dt}A(t)^{-1}\end{aligned}$$

nach der Produktregel. Also

$$\frac{d}{dt}A(t)^{-1} = -A(t)^{-1} \left(\frac{d}{dt}A(t)\right) A(t)^{-1}.$$

## Ableitung von $\pi(H)$

Hier ist  $t = h_{ij}$ , es gilt

$$A(h_{ij}) = I - \alpha Q^\top = I - \alpha \left( H^\top + \frac{1}{n}ed^\top \right).$$

Also ist

$$\frac{d}{dh_{ij}}A(h_{ij}) = -\alpha \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \cdots & \\ \cdots & 1 & 0 \\ \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix} = -\alpha \hat{e}_j \hat{e}_i^\top$$

mit

$$\hat{e}_i = (\underbrace{0, \dots, 0}_{i-1 \text{ mal}}, 1, 0, \dots, 0)^\top.$$

---

<sup>9</sup>Das heißt, die Einträge von  $H$  ändern sich.

Damit folgt

$$\begin{aligned}\frac{d\pi}{dh_{ij}} &= -(1-\alpha)A(h_{ij})^{-1} \left( \frac{d}{dh_{ij}} A(h_{ij}) \right) A(h_{ij})^{-1}v \\ &= (1-\alpha)(I - \alpha Q^\top)^{-1}(\alpha \hat{e}_j \hat{e}_i^\top)(I - \alpha Q^\top)^{-1}v\end{aligned}$$

Beachte  $(1-\alpha)(I - \alpha Q^\top)v = \pi$ :

$$\begin{aligned}&= \alpha(I - \alpha Q^\top)^{-1} \hat{e}_j \underbrace{\hat{e}_i^\top \pi}_{=\pi_i} \\ &= \alpha \pi_i (I - \alpha Q^\top)^{-1} \hat{e}_j\end{aligned}$$

Die Matrix-Vektor-Multiplikation  $(I - \alpha Q^\top)^{-1} \hat{e}_j$  ergibt die  $j$ -te Spalte von  $(I - \alpha Q^\top)^{-1}$ .

Erinnerung:

$$h_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{|S_i|}, & S_i \text{ besitzt Link auf } S_i, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

## Interpretation

$\pi$  ist umso sensitiver bezüglich Einfügen oder Entfernen eines Links von  $S_i$  nach  $S_j$ , je größer  $\pi_i$  ist.

Wegen  $\rho(Q^\top) = 1$  ist  $I - \alpha Q^\top$  fast singular für  $\alpha \rightarrow 1$ , die Einträge von  $(I - \alpha Q^\top)^{-1}$  divergieren für  $\alpha \rightarrow 1$ .

Somit ist  $\pi$  sehr sensitiv bezüglich Link-Änderung für  $\alpha \rightarrow 1$  (auch, falls  $\pi_i$  klein ist).

## 5.7 Ausblick: Verfeinerung und Verbesserung der Google-Suche

Google 20 Jahre nach Gründung

### 1. Analyse der Suchanfrage

Sprachmodell zum “Verstehen” der Suchanfrage:

$$\text{“How to } \underbrace{\text{change}}_{=\text{replace}} \text{ a light bulb”}$$

und Kategorisierung der Suchanfrage: Spezifische Anfrage?

## 2. Abgleich des Suchbegriffs: Suche im “Index”

Bei Webseiten, die den Suchbegriff enthalten, wird zusätzlich berücksichtigt, wo auf der Seite der Begriff vorkommt (im Titel, Haupttext?).

Das wirkt sich auf die Relevanz für die Suchanfrage aus. Zum Beispiel Begriff “Hunde” sollte Seiten mit Bildern von Hunden, verschiedenen Hunderassen liefern, nicht nur das Wort “Hunde” auf der Webseite.

## 3. Ranking

Neben dem PageRank gibt es mittlerweile viele andere Faktoren:

- Aktualität des Inhalts einer Webseite
- Nutzerfreundlichkeit der Seite
- Präferenz anderer Benutzer (welche aufgeführten Seiten werden von anderen Nutzern bevorzugt?)
- Erkennung von Spam-Seiten (künstliche PageRank-Optimierung)

## 4. Kontextbezug

“Personalisierte Suchergebnisse” basierend auf Standort, Land

$$\text{“football”} \quad \begin{cases} \text{American Football} \\ \text{Fußball} \end{cases}$$

Frühere Suchanfragen (“Barcelona vs. Arsenal”  $\rightsquigarrow$  fußballinteressiert) beeinflussen nachfolgende Suchen (“Barcelona” liefert Fußballverein statt der Stadt)

## 5. Zusammenstellung der Ergebnisse

Ausgewogenheit zwischen eng definierten oder breit gefassten Themen



# 6 Diskretisierung partieller Differentialgleichungen

Partielle Differentialgleichungen (PDE) treten in fast allen quantitativen Naturwissenschaften auf.

## 6.1 Exemplarische Beispiele partieller Differentialgleichungen

### Beispiel 1: Stationäres elliptisches Problem

$u(x) \in \mathbb{R}^d$ ,  $s \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^m$  Ortsvariable (oft  $m = 2, 3$ ).

An  $\partial\Omega$  werden Daten vorgegeben, etwa

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \dots$$

Anwendung: Form einer Seifenblase

Gegeben sei die Höhe des Drahtes als Funktion  $\varphi : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ .

Gesucht ist die Höhe  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  der Seifenblase.

Physikalisches Prinzip der Seifenblasenhaut: Minimierung der Oberfläche

$$J := \int_{\Omega} \sqrt{1 + (\partial_{x_1} u)^2 + (\partial_{x_2} u)^2} dx \rightarrow \min.$$

Plateau'sches Problem:

$$\begin{cases} J \rightarrow \min \\ \text{Randbedingung } u|_{\partial\Omega} = \varphi \end{cases}$$

Bei kleinen Gradienten:

$$\sqrt{1 + (\partial_{x_1} u)^2 + (\partial_{x_2} u)^2} \approx 1 + \frac{1}{2}((\partial_{x_1} u)^2 + (\partial_{x_2} u)^2).$$

Damit lässt sich das Problem vereinfachen:

$$\begin{cases} J := \frac{1}{2} \int_{\Omega} ((\partial_{x_1} u)^2 + (\partial_{x_2} u)^2) dx \rightarrow \min \\ u|_{\partial\Omega} = \varphi \end{cases}$$

Mit der Euler-Lagrange-Gleichung der Variationsrechnung erhält man

$$\begin{cases} (\partial_{x_1} u)^2 + (\partial_{x_2} u)^2 = 0 \\ u|_{\partial\Omega} = \varphi \end{cases}$$

Schreibweise:  $\Delta u = 0$ .

## Beispiel 2: Hyperbolische Kontinuitätsgleichung

- $\rho(x, t) \in \mathbb{R}$ : Dichte
- $u(x, t) \in \mathbb{R}^2$ : Geschwindigkeitsfeld

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho d^3x = - \int_{\partial V} \rho(u \cdot n) d^2S,$$

Zeitliche Änderung der Masse in  $V$  = Flüssigkeit, die in das Volumen hinein bzw. herausströmt

Gauß:

$$\int_{\partial V} \rho(u \cdot n) d^2S = \int_V \nabla \cdot (\rho u) d^3x.$$

Weil  $V$  beliebig ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0.$$

Das ist die Kontinuitätsgleichung für die Dichte.

“hyperbolisch”: Orts- und Zeitableitung haben dieselbe Ordnung, hier 1.

## Beispiel 3: Parabolische Wärmeleitungsgleichung

$u(x, t) \in \mathbb{R}^d$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$ ,  $d = 1, 2, 3$ .

$$\partial_t u = k \Delta u$$

mit dem Laplace-Operator  $\Delta u = \sum_{i=1}^d \partial_{x_i}^2 u$ .

Cauchy-Problem (Anfangs- und/oder Randbedingungen vorgegeben):

$$u(x, t = 0) = u_0(x)$$

Fundamentallösung (in 1D):

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-y)^2}{4kt}} u_0(y) dy.$$

## Bemerkungen

- (a) Beispiele 1, 2 und 3 sind *lineare* PDEs, das heißt sie sind linear in der gesuchten Lösung, zum Beispiel:

$$\Delta(\alpha u(x, t) + v(x, t)) = \alpha \cdot \Delta u(x, t) + \Delta v(x, t).$$

Die Navier-Stokes-Impulsgleichung ist eine nichtlineare PDE

$$\rho \left( \partial_t u_i + \sum_{j=1}^3 u_j \partial_{x_j} u_i \right) + \partial_{x_i} P = \dots$$

Der Term  $u_j \partial_{x_j} u_i$  ist quadratisch in  $u(x, t)$  das heißt

$$u(x, t) \rightarrow \alpha u(x, t), \quad \sum_{j=1}^3 u_j \partial_{x_j} u_i \rightarrow \alpha^2 \sum_{j=1}^3 u_j \partial_{x_j} u_i.$$

- (b) Die Typeneinteilung (elliptisch, hyperbolisch, parabolisch usw.) bestimmt die Art der Zusatzdaten (Anfangs- oder Randwerte), die das Problem *wohlgestellt*<sup>1</sup> machen.

## 6.2 Typische Schritte der numerischen Lösung

1. Geometrieakquisition
2. Diskretisierung (Gitter und numerische Methode)
3. Gleichungssystem aufstellen
4. Gleichungssystem lösen
5. Lösung bewerten (Fehlerabschätzung)
6. Visualisierung

Adaptive Systeme kehren automatisiert von Schritt 5 wieder zu Schritt 2 zurück.

## 6.3 Diskretisierungsprinzipien

- Finite Differenzen: Verallgemeinerungen des Differentialquotienten

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

auf höhere Dimensionen bzw. Ordnungen

---

<sup>1</sup>Das heißt die Lösung ist stetig bezüglich der Anfangs- bzw. Randwerte.

- Finite Volumen: Anwendung vor allem auf Erhaltungsgleichungen

$$\int_V \text{Ausdruck 1} = \int_V \text{Ausdruck 2}$$

für alle Volumen  $V$  in  $\Omega$

Idee: Ersetze “alle  $V$ ” durch ausgewählte, endlich viele Testvolumen  $E_j$ , wobei

$$\Omega = E_1 \hat{\cup} E_2 \hat{\cup} \dots \hat{\cup} E_N,$$

wobei  $\hat{\cup}$  die disjunkte Vereinigung ist.

- Finite Elemente Variationsformulierung  $\rightsquigarrow$  PDE

$$u \in X : J(u) \stackrel{!}{=} \min_{v \in X} J(v)$$

$X$ : Funktionenraum (zum Beispiel alle stetig differenzierbaren Funktionen auf  $\Omega$ ).

Wähle endlich-dimensionalen Unterraum  $X_h \subset X$  und betrachte

$$u_h \in X_h : J(u_h) \stackrel{!}{=} \min_{v_h \in X_h} J(v_h).$$

Für  $J$  quadratisch ist das äquivalent zum linearen Gleichungssystem

$$L_h u_h = f_h.$$

Speziell für Finite Elemente:  $X_h$  ist der Raum der stückweisen Polynome in  $\Omega$ ,  $\Omega$  wird zerlegt (Triangulierung), in 2D Zerlegung in Dreiecke.

## 6.4 Finite Differenzen

Idee:

- Diskretisiere  $\Omega$  durch (uniformes) Gitter mit Gitterkonstante  $h$ . Notation:  $\Omega_h$ .
- Approximiere Differentialoperatoren durch Differenzenquotienten.

Differentialoperatoren: Zum Beispiel symmetrische Differenzen für  $u(x, y)$ :

$$\partial_x u = \underbrace{\frac{u(x+h, y) - u(x-h, y)}{2h}}_{=: \partial_{h,x} u} + O(h^2) \quad \text{für } u \in C^3,$$

$$\partial_x^2 u = \frac{u(x+h, y) - 2u(x, y) + u(x-h, y)}{h^2} + O(h^2) \quad \text{für } u \in C^4.$$

Ableitung nach  $y$  analog.

$$\begin{aligned} -\Delta u &= -(\partial_x^2 u + \partial_y^2 u) \\ &= \frac{4u(x, y) - u(x+h, y) - u(x-h, y) - u(x, y+h) - u(x, y-h)}{h^2} + O(h^2) \\ &\text{für } u \in C^4. \end{aligned}$$

Der diskrete Laplace-Operate  $-\Delta_h u$  wird als *Fünf-Punkte-Stern* bezeichnet.

Abgekürzte Notation in gittereingebetteter Matrix-Schreibweise:

$$\begin{aligned} -\Delta_h &= \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \\ \partial_{h,x} &= \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \partial_{h,x} &= \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

### 6.4.1 Modellproblem Poisson-Gleichung

Modell für elliptisches Randwertproblem

$$\text{Poisson-Gleichung} \quad \begin{cases} -\Delta u = f & \text{auf } \Omega \subset \mathbb{R}^d \text{ Gebiet} \\ u|_{\partial\Omega} = 0 & \text{Homogene Dirichlet'sche Randbedingung} \end{cases}$$

$\Omega$  sei zum Beispiel das Einheitsquadrat  $[0, 1]^2$  für  $d = 2$ .

Wir diskretisieren  $\Omega$  mit der Gitterkonstante  $h = \frac{1}{n}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ . Für  $n = 5$  erhalten wir ein  $6 \times 6$ -Gitter

$$\Omega_h = \{(x, y) \in \Omega : x = ih, y = jh; i, j \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}\}.$$

Die Randpunkte von  $\Omega_h$  werden in  $\Gamma_h$  zusammen gefasst.

Die diskrete Lösung

$$u_h : \Omega_h \setminus \Gamma_h \rightarrow \mathbb{R}$$

ist nur auf den inneren Punkten definiert wegen der Randbedingung  $u|_{\partial\Omega} = 0$ . Das heißt  $u_h$  ist ein Vektor der Dimension  $(n - 1)^2$ .

Die diskretisierte rechte Seite ist

$$f_h := f|_{\Omega_h \setminus \Gamma_h}.$$

Die Diskretisierung mit Fünf-Punkte-Stern-Operator führt zu einem linearen Gleichungssystem

$$L_h u_h = f_h.$$

Wie sieht die Matrix  $L_h$  aus? Das hängt von der Nummerierung der Gitterpunkte ab. Typischerweise wählt man eine lexikographische Nummerierung der inneren Punkte:

$$\begin{bmatrix} & & & \cdots & (n-1)^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ n & n+1 & n+2 & \cdots & 2(n-1) \\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n-1 \end{bmatrix}, \quad u_h = \begin{pmatrix} u(h, h) \\ u(2h, h) \\ \vdots \\ u((n-1)h, h) \\ u(h, 2h) \\ \vdots \\ u((n-1)h, (n-1)h) \end{pmatrix}$$

Damit ergibt sich

$$L_h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & -1 & 0 & \cdots \\ -1 & 4 & -1 & & \cdots & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & 4 & -1 & & \cdots & -1 & 0 & \cdots \\ & & & \ddots & \ddots & & \ddots & & \\ -1 & & & & 4 & 0 & & -1 \\ & -1 & & & 0 & 4 & -1 & & -1 \\ & & -1 & & & -1 & 4 & -1 & \\ & & & \ddots & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Die Hauptdiagonale ist überall 4. Auf den  $-1$ -Nebendiagonalen gibt es wegen der Randpunkte einige Null-Einträge. Insgesamt hat  $L_h$  eine pentadiagonale Struktur und ist dünn besetzt.

Das Aufstellen von  $L_h$  mittels Python erfolgt mit dieser Idee: Nutze die Faktorisierung bezüglich  $x$ - und  $y$ -Richtung aus.

$$-\Delta_h = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \end{bmatrix}}_{(-\partial_{h,x}^2) \otimes I_y} + \underbrace{\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}}_{I_x \otimes (-\partial_{h,y}^2)}$$

mit dem Kronecker-produkt  $\otimes$  (numpy.kron) und  $I_x, I_y$   $(n-1) \times (n-1)$ -Einheitsmatrix.

1. Zeile von  $L_h$ :

$$\frac{1}{h^2} (4u(h, h) - u(2h, h) - u(h, 2h)),$$

2. Zeile von  $L_h$ :

$$\frac{1}{h^2} (4u(2h, h) - 3(3h, h) - u(h, h)u(2h, 2h)).$$

**Aufstellen von  $L_h$  mittels Python** Idee: Nutze Faktorisierung bezüglich  $x$ - und  $y$ -Richtung aus.

$$-\Delta_h = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & \end{bmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Man schreibt

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \end{bmatrix} &=: -\partial_{h,x}^2 \otimes I_y, \\ \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} &=: -\partial_{h,y}^2 \otimes I_x. \end{aligned}$$

Eindimensionaler Fall:

$$-\partial_{h,x}^2 = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$-\partial_{h,x}^2 = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} = \text{Gleiche Matrix wie oben.}$$

### 6.4.2 Lösbarkeit des linearen Gleichungssystems $L_h u_h = f_h$

Elliptische Probleme allgemein: symmetrisch, positiv definit (alle Eigenwerte  $> 0$ ).

Die Konditionszahl von  $L_h$  ist

$$\kappa(L_h) = \|L_h^{-1}\| \cdot \|L_h\| = O(h^{-2}).$$

Die iterative Lösung des Gleichungssystems, zum Beispiel mittels CG-Verfahren (conjugate gradients), benötigt  $\sim \sqrt{\kappa(L_h)} = O(h^{-1})$  Iterationen. Das ist sehr aufwendig für kleine  $h$ . Als Ausweg verwendet man *Mehrgitterverfahren* (multigrid methods), eine Hierarchie von gröberen/feineren Gittern.

## 6.5 Finite Volumen

Erhaltungsprinzip

$$\int_V \text{Ausdruck 1} = \int_V \text{Ausdruck 2} \quad \text{für alle Volumen } V \text{ in } \Omega$$

Beispiel Masseerhaltung:

$$\partial_t \int_V \rho d^3x = \int_V \nabla \cdot (\rho \vec{u}) d^3x.$$

Idee:

1. Ersetze "alle  $V$ " durch ausgewählte, endlich viele Testvolumen  $E_i$ , wobei

$$\Omega = \dot{\bigcup}_{i=1}^n E_n$$

mit der disjunkten Vereinigung  $\dot{\cup}$ .

Für jedes Teilvolumen speichert man Freiheitsgrade ab:

- (a) all-center (ein Freiheitsgrad in der Mitte jedes Volumens)
  - (b) all-edge (ein Freiheitsgrad in der Mitte jeder Kante)
  - (c) all-vertex (ein Freiheitsgrad an jedem Eckpunkt)
2. Integriere die Differentialgleichung über  $E_j$ , wende den Gauß'schen Satz an und approximiere, zum Beispiel

$$-\Delta u = f \quad \Rightarrow \quad - \int_{E_j} \Delta u dx = \int_{E_j} f dx$$

Gauß angewendet auf  $\nabla u$ :

$$\Delta u = \nabla \cdot (\nabla u) = (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)u.$$

Also erhalten wir

$$-\int_{E_j} \Delta u \cdot \vec{n} dS = \int_{E_j} f dx.$$

Benutze Freiheitsgrade, um  $\nabla u \cdot \vec{n}$  durch Differenzen zu approximieren.

### 6.5.1 Modellproblem: Poisson-Gleichung

Teile die Ebene in Quadrate auf und wähle eine all-center

Ersetze Normalenableitung  $\nabla u \cdot \vec{n}$  durch 1. Differenzen zwischen Zellmittelpunkten:

$$\int_{E_j} f dx = - \int_{\partial E_j} \partial_{h,\vec{u}} u_h dS = - \int_{\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4} \partial_{h,\vec{u}} u_h dS. \quad (*)$$

Die Integrale über die einzelnen Seiten sind

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_1} \partial_{h,\vec{u}} dx &= h \cdot \frac{u(x_j + h, y_j) - u(x_j, y_j)}{h}, \\ \int_{\Gamma_2} \partial_{h,\vec{u}} dx &= h \cdot \frac{u(x_j, y_j + h) - u(x_j, y_j)}{h}, \\ \int_{\Gamma_3} \partial_{h,\vec{u}} dx &= h \cdot \frac{u(x_j - h, y_j) - u(x_j, y_j)}{h}, \\ \int_{\Gamma_4} \partial_{h,\vec{u}} dx &= h \cdot \frac{u(x_j, y_j - h) - u(x_j, y_j)}{h}. \end{aligned}$$

Der Faktor  $h$  kommt daher, dass die Länge des Integrationspfads  $\Gamma_1$  genau die Seitenlänge ist.

Eingesetzt in  $(*)$ , teile durch  $\frac{1}{h^2}$ :

$$\frac{1}{h^2} \int_{E_j} f dx = \frac{1}{h^2} \left( 4u(x_j, y_j) - u(x_j + h, y_j) - u(x_j - h, y_j) - u(x_j, y_j + h) - u(x_j, y_j - h) \right) \underbrace{\hspace{10em}}_{-\Delta_h u}$$

Beobachtung: Wir erhalten die gleiche Matrix  $L_h$  wie bei finiten Differenzen, aber die rechte Seite ist

$$f(x_j, y_j) = \oint_{E_j} f dx := \frac{\int_{E_j} f dx}{\int_{E_j} dx}$$

Integraler Mittelwert.

### 6.5.2 Hyperbolische Erhaltungsgleichungen in 1D

Allgemeine Formulierung:

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) + \partial_x f(u(x, t)) = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) \end{cases} \quad (\circ)$$



Gesucht ist  $u(x, t)$ , also haben wir dieselbe Situation wie Massenerhaltung in D.

$$\begin{array}{ccccc} \partial_t \rho & + & \nabla \cdot & (\rho u) & = 0 \\ \updownarrow & & \updownarrow & \updownarrow & \\ u & & \partial_x & f(u(x, t)) & \end{array}$$

Einfachster Fall: Lineare Konvektionsgleichung

$$f(u) = a \cdot u, \quad a \text{ konstant.}$$

Entsprechende Differentialgleichung:

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) + a \partial_x u(x, t) = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) \end{cases}$$

Für differenzierbares  $u$  ist die Lösung:

$$u(x, t) = u_0(x - at),$$

die Anfangsverteilung verschiebt sich mit Geschwindigkeit  $a$  in Richtung des Vorzeichens von  $a$ .

### Beispiel: Reibungsfreie Burgersgleichung

$$f(u) = \frac{1}{2}u^2 \quad \Rightarrow \quad \partial_x f(u(x, t)) = u(x, t) \partial_x u(x, t).$$

Trick: Betrachte Lösungen der gewöhnlichen Differentialgleichung für  $z(t)$ :

$$z'(t) = u(z(t), t), \tag{*}$$

sogenannte *Charakteristiken*.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} u(z(t), t) &= \partial_t u(z(t), t) + \partial_x u(z(t), t) z'(t) \\ &= \partial_t u(z(t), t) + \underbrace{u(z(t), t) \partial_x u(z(t), t)}_{\partial_x f(u(z(t), t))} = 0 \end{aligned}$$

gemäß der Differentialgleichung (o). Also ist  $u(z(t), t)$  zeitlich konstant, insbesondere ist nach (\*) auch  $z'(t)$  konstant. Damit folgt

$$z(t) = z_0 + t \cdot u(z(t), t) = z_0 + t \cdot u(z_0, 0).$$

Also ist  $z(t)$  abhängig von der Anfangsverteilung von  $u$ . Das führt dazu, dass die Verteilung von  $u$  umso schneller transportiert wird, je größer  $u(z_0)$  ist. Es entstehen *Schockwellen* (Stoßwellen, shock waves) mit senkrechtem Abfall auf einer Seite.

Problem aus numerischer Sicht: Die Lösung  $u(x, t)$  entwickelt eine Unstetigkeit durch diese Schockwelle. Dann ist die Beschreibung mittels Differenzenquotienten nicht mehr sinnvoll. Deswegen wurde für solche Anwendungen eine eigene numerische Lösungstheorie entwickelt, siehe zum Beispiel Randall LeVeque: Numerical Methods for Conservation Laws.

## 6.6 Finite Elemente

### 6.6.1 Formulierung als Variationsgleichung

Idee: Schreibe PDE als Variationsgleichung um.

#### Beispiel 1

Poisson-Gleichung auf dem Gebiet  $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ,  $d = 2, 3$ :

$$\begin{cases} -\Delta u = g, & \text{in } \Omega, \\ u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

Nun betrachtet man  $V :=$  Menge aller stetig differenzierbaren Funktionen<sup>2</sup>  $v$  auf  $\Omega$  ( $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  stetig differenzierbar) mit  $v|_{\partial\Omega} = 0$ . Multipliziere die PDE mit beliebigem  $v \in V$  (“Testfunktion”) und wende den Gauß’schen Integralsatz an:

$$-\int_{\Omega} (\Delta u) \cdot v dx = \int_{\Omega} g \cdot v dx \quad \text{für alle } v \in V.$$

Gauß angewendet auf  $(\nabla u)v$  liefert

$$-\int_{\Omega} (\Delta u) \cdot v dx = \int_{\Omega} (\nabla u) \cdot (\nabla v) dx - \underbrace{\int_{\partial\Omega} v \cdot \nabla u \cdot \vec{n} dS}_{=0}.$$

Der zweite Term ist  $= 0$ , weil wir  $v|_{\partial\Omega} = 0$  voraussetzen. Also gilt

$$\underbrace{\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx}_{=: a(u,v)} = \underbrace{\int_{\Omega} g \cdot v dx}_{=: f(x)} \quad \text{für alle } v \in V.$$

Also: Bestimme  $u \in V$ , so dass

$$a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in V,$$

das ist die “Variationsgleichung” mit der “Testfunktion”  $v$ .

**Bemerkung.** Die Randbedingung  $u|_{\partial\Omega} = 0$  wurde direkt in  $V$  “eingebaut”.

#### Beispiel 2

$$\begin{cases} -\Delta u + \vec{w} \cdot \nabla u = g & \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{auf } \partial\Omega \end{cases}$$

$\frac{\partial u}{\partial n}$  bezeichnet die Ableitung in Normalenrichtung:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot \vec{n}.$$

---

<sup>2</sup>Das ist der sogenannte Sobolev-Raum  $H_0^1(\Omega)$ .

Diese Randbedingung wird als *Neumann'sche Randbedingung* bezeichnet.

Definiere  $V :=$  Menge aller stetig differenzierbaren Funktionen auf  $\Omega$ . Im Unterschied zu Beispiel 1 wird nun *nicht*  $v|_{\partial\Omega} = 0$  gefordert.

Multipliziere wieder die PDE mit  $v \in V$  und wende den Gauß'schen Integralsatz an:

$$-\int_{\Omega}(\Delta u) \cdot v dx + \int_{\Omega}(\vec{w} \cdot \nabla u)v dx = \int_{\Omega} g v dx.$$

Gauß angewendet auf  $(\nabla u)v$  liefert wieder

$$-\int_{\Omega}(\Delta u) \cdot v dx = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx - \underbrace{\int_{\partial\Omega} v \nabla u \cdot \vec{n} dS}_{=0},$$

wobei diesmal der zweite Term aufgrund der Neumann'schen Randbedingung wegfällt. Also folgt

$$\underbrace{\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v + (\vec{w} \cdot \nabla u)v dx}_{=:a(u,v)} = \underbrace{\int_{\Omega} g v dx}_{=:f(v)}.$$

Bestimme nun  $u \in V$ , so dass

$$a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in V.$$

## 6.6.2 Abstrakte Variationsgleichung: Mathematische Grundlagen

“Zutaten”

- $V$ : Funktionenraum, zum Beispiel differenzierbare Funktionen auf  $\Omega$  oder (typischerweise für finite Elemente) Sobolev-Raum  $H^1(\Omega)$ .
- $a(u, v)$ : Bilinearform auf  $V$ , das heißt  $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  ist linear in  $u$  und  $v$ .

$$a(u, \gamma v_1 + v_2) = \gamma a(u, v_1) + a(u, v_2),$$

$$a(\gamma u_1 + u_2, v) = \gamma a(u_1, v) + a(u_2, v).$$

Beispiel:

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx.$$

- $f$ : Linearform auf  $V$ , das heißt  $f : V \rightarrow \mathbb{R}$  ist linear.

Beispiel:

$$f(v) = \int_{\Omega} g \cdot v dx$$

mit fest gewählter Funktion  $g$ .

- Problemstellung: Gesucht ist  $u \in V$ , so dass

$$a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in V.$$

## Mathematische Grundlage

### Satz: Satz von Lax-Milgram

Sei  $V$  ein Hilbertraum,  $a$  eine Bilinearform auf  $V$ , die

a) koerziv ist, das heißt es existiert  $c_1 > 0$ , so dass

$$a(v, v) \geq c_1 \|v\|^2 \quad \text{für alle } v \in V,$$

b) stetig ist, das heißt es existiert  $c_2 > 0$ , so dass

$$|a(u, v)| \leq c_2 \|u\| \cdot \|v\| \quad \text{für alle } u, v \in V$$

sowie  $f$  eine stetig Linearform, das heißt es existiert  $c > 0$ , so dass

$$|f(v)| \leq c \|v\| \quad \text{für alle } v \in V.$$

Dann existiert eine eindeutige Lösung  $u \in V$  von

$$a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in V.$$

**Bemerkung.** Die Sobolev-Räume  $H^1(\Omega)$  und  $H_0^1(\Omega)$  ( $u|_{\partial\Omega} = 0$ ) sind Hilberträume, also ist der Satz direkt anwendbar.

### 6.6.3 Diskretisierung

Idee: Wähle einen endlich-dimensionalen Teilraum  $V_h \in V$ , zum Beispiel die stückweise linearen Funktionen auf der Triangulierung von  $\Omega$  und bestimme  $u_h \in V_h$ , so dass

$$a(u_h, v_h) = f(v_h) \quad \text{für alle } v_h \in V_h.$$

Das heißt, die Testfunktionen  $v_h$  werden aus dem Teilraum  $V_h$  anstelle von  $V$  gewählt.

Vorteil: Viele Eigenschaften der kontinuierlichen Formulierung (typisch  $V = H_0^1(\Omega)$ ) lassen sich direkt auf die Diskretisierung übertragen, insbesondere der Satz von Lax-Milgram (angewendet auf  $V_h$ ).

Anforderung an die Triangulierung von  $\Omega$ : Es dürfen keine Ecken auf den Kanten anderer Dreiecke liegen.

Berechnung von  $u_h$ : Gegeben Basis  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  von  $V_h$  kann man  $u_h$  eindeutig darstellen als

$$u_h = \sum_{i=1}^n u_i \varphi_i.$$

Weil  $(\varphi_i)_{i=1}^n$  eine Basis ist, gilt

$$\begin{aligned} a(u_h, v_h) &= f(v_h) \quad \text{für alle } v_h \in V_h \quad \Leftrightarrow \\ a(u_h, \varphi_j) &= f(\varphi_j) \quad \text{für } j = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Einsetzen von  $u_h = \sum_{i=1}^n u_i \varphi_i$ :

$$\sum_{i=1}^n u_i \underbrace{a(\varphi_i, \varphi_j)}_{=: a_{ji}} = f(\varphi_j) \quad \forall j = 1, \dots, n.$$

$\Leftrightarrow$  Lineares Gleichungssystem

$$A_h \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\varphi_1) \\ f(\varphi_2) \\ \vdots \\ f(\varphi_n) \end{pmatrix}$$

mit  $A_h = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ .

Überlegung:  $A_h$  sollte dünn besetzt sein, um das Gleichungssystem für große  $n$  (effizient) lösen zu können. Also wähle die Basisfunktionen  $\varphi_j$  so, dass sie jeweils nur in einem kleinen Teilgebiet von  $\Omega$  von 0 verschieden sind.

$$\Rightarrow a(\varphi_i, \varphi_j) = 0, \quad \text{falls die Teilgebiete von } \varphi_i \text{ und } \varphi_j \text{ disjunkt sind.}$$

Basis von  $V_h$ : stückweise lineare Funktionen  $\varphi_j$ , die im zentralen Knoten 1 sind und auf allen anderen Knoten 0.

$$\varphi_j \in V_h, \quad \varphi_j(x_j) = 1, \quad \varphi_j(x_k) = 0 \quad \text{für alle } k \neq j.$$

Bezeichnung: Lagrange/Courant-Basis

**Bemerkung.** • Vorteil der Formulierung mittels Sobolev-Räumen: Es gilt  $\varphi_j \in H^1(\Omega)$ , da die  $\varphi_j$  stückweise stetig differenzierbar, aber  $\varphi_j \notin C^1(\Omega)$ .

- In Anwendungen werden auch häufig Basisfunktionen mit höherem Polynomgrad verwendet. Die Lagrange-Basis mit stückweise linearen Funktionen hat den Polynomgrad 1.

## 6.7 Diskussion der drei Diskretisierungsprinzipien

	PDE-Typ	Konv.- ordnung	Geometrie von $\Omega$	Struktur- erhaltung	Sonstiges
Finite Differen- zen	universell	hoch	starr achsen- parallel	nur äquidistant	sehr einfach realisierbar für simple Probleme
Finite Vo- lumen	Erhaltungsprinzip oder Divergenzform	niedrig	äußerst flexibel	eingebaut	
Finite Elemente	Variationsprinzip (Variationsglei- chung)	hoch	sehr flexi- bel	eingebaut	Implementierung sehr aufwändig selbst für ein- fache Probleme, Software z.B. AMDiS, DUNE

# Zusammenfassung

- Kapitel 1: Einführung
- Kapitel 2: Basketball-Freiwurf
  - Wie komme ich ausgehend von einer unpräzisen Fragestellung “Beste Art den Freiwurf zu werfen” auf ein mathematisches Modell?
  - Analyse (Beschreibung durch physikalische Bewegungsgleichungen), Vereinfachungen
  - Präzisierung: Möglichst große Toleranz
  - Herleitung eines Modells: Wurfbahn, Systemparameter (zum Beispiel Korbhöhe),
  - Zustandsvariablen (Trajektorie  $\begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}$ )
  - Implementierung und Simulation
  - Auswertung und Interpretation
- Kapitel 3: Methodik der mathematischen Modellierung
  - Modellierungszyklus allgemein
  - Dimensionsanalyse und Skalierung: Größe  $X$ , Dimension  $[X]$ , zum Beispiel  $[l]$  Länge, Einheit Meter
  - Eigenschaften und Rechenregeln

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n, \quad \Rightarrow \quad x \text{ muss dimensionslos sein.}$$

- Entdimensionalisierung, Buckingham’sches II-Theorem
- Kapitel 4: Lattice-Boltzmann-Methode
  - Verteilungsfunktion  $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$
  - Boltzmann-Gleichung

$$\partial_t f + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \partial_{\vec{x}} f + \vec{F}_{\text{ext}} \cdot \partial_{\vec{p}} f = C[f]$$

- Kollisionsinvarianten  $\varphi(\vec{p}) = 1, \vec{p}, \frac{|\vec{p}|^2}{2m}$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) \cdot C[f] d^3 p = 0.$$

- H-Theorem  $\rightsquigarrow$  Maxwell-Boltzmann-Verteilung
- Kontinuitätsgleichungen: Prinzip der Herleitung
- Euler-, Navier-Stokes-Gleichungen: Interpretation der Terme
- Lattice-Boltzmann-Methode
- Image Inpainting
- Kapitel 5: Googles PageRank
  - Link-Struktur: Hyperlink-Matrix
  - Markov-Ketten
  - Stochastische Interpretation als Zufalls-Surfer
  - Vektoriteration zur Berechnung des PageRank-Vektors
- Kapitel 6: Partielle Differentialgleichungen
  - Finite Differenzen, Volumen, Elemente