

Eine spektrale Methode für die Boltzmann-Gleichung

Seminar: Aktuelle Themen der Numerik

Autor: *Mario M. Koretz*

Betreuer: *Prof. Dr. Manuel Torrilhon*

25.08.2016

Abstract:

Die folgende im Rahmen des Seminars „Aktuelle Themen der Numerik“ entstandene Ausarbeitung behandelt auf Grundlage des Papers „Numerical Solution of the Boltzmann Equation I: Spectrally Accurate Approximation of the Collision Operator, (L. Pareschi and G. Russo; 2000)“, [4], die Grundlagen der molekularen Gasdynamik, der leitenden Beziehungen und Gleichungen und insbesondere eine spektrale Methode zur Lösung der Boltzmann Gleichung.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Simulation molekularer Gasdynamik	1
1.1.1	Prämisse der molekularen Gasdynamik	1
1.1.2	Kinematische Modellierung von Molekülen	1
1.2	Die Boltzmann-Gleichung	2
1.3	Repräsentation der makroskopischen Erhaltungsgrößen	4
2	Eine spektrale Methode für den Kollisionsoperator	6
2.1	Grundsätzliche Vorgehensweise und Problemformulierung	6
2.1.1	Splitting von Transport und Kollisionen	6
2.1.2	Aufteilung des Kollisionsoperators	7
2.2	Herleitung des spektralen Schemas	7
2.2.1	Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes	7
2.2.2	Spektraler Galerkin Ansatz und Formulierung des Schemas	9
2.2.3	Rechenaufwand des spektralen Schemas	10
3	Eigenschaften der spektralen Methode	11
3.1	Fourierreihe	11
3.2	Konsistenzbetrachtungen	11
3.2.1	Fehler in den Erhaltungsgrößen	11
3.2.2	Konsistenz der Approximation des Kollisionsoperators	12
3.3	Stabilität und Eindeutigkeit der Lösung	12
4	Ergebnisse und Fazit	13
	Literaturverzeichnis	14

1 Einleitung

Das folgende Kapitel soll die nötigen Grundlagen aufbereiten, die erforderlich sind, um Eingang in die komplizierte Thematik der molekularen Gasdynamik zu finden. Dazu wird neben den zugrunde liegenden physikalischen Phänomenen die Boltzmann-Gleichung eingeführt, welche überwiegend der zentrale Ausgangspunkt vieler numerischer Simulationen in diesem Gebiet ist und auch hier die zentrale Gleichung darstellt.

1.1 Simulation molekularer Gasdynamik

1.1.1 Prämisse der molekularen Gasdynamik

Bei der numerischen Simulation von Fluiden reicht unter gewissen Umständen eine makroskopische Betrachtung der Zustandsgrößen nicht mehr aus, um alle zeitlich ablaufenden Prozesse der betrachteten Strömung hinreichend zu erfassen. Dies ist der Fall, wenn die mittlere freie Weglänge zwischen den Molekülen des Fluids zu hoch ist als es noch physikalisch sinnvoll als Kontinuum modellieren zu können.

Genau an dieser Stelle setzt die molekulare Gasdynamik ein, in welcher nun die Betrachtung der makroskopischen Zustandsgrößen wie Dichte, Impuls und Energie um die Betrachtung mikroskopischer Zustände wie die Geschwindigkeiten einzelner Moleküle des Fluids erweitert wird. Dies hat offensichtlich die Folge, dass gängige Gleichungen zur Beschreibung der Transportprozesse nicht mehr adäquat sind und ein neues Ausgangsmodell gewählt werden muss.

1.1.2 Kinematische Modellierung von Molekülen

Wie in [Abbildung 1.1](#) sehr vereinfacht dargestellt, soll die Dynamik eines Systems aus Molekülen, in dem in dieser Arbeit betrachteten Fall ein einatomiges verdünntes Gas, simuliert werden. Dabei müssen möglichst alle nicht vernachlässigbaren physikalischen Phänomene berücksichtigt werden, um eine realistische Modellierung sicherzustellen.

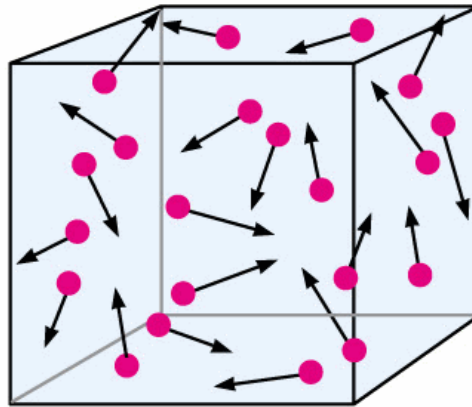


Abbildung 1.1: Beobachtung von Gasmolekülen (Quelle: <https://socratic.org>)

Abbildung 1.1 veranschaulicht recht gut, dass für einen Beobachter die Moleküle eines Gases ein scheinbar willkürliches Bewegungsmuster aufweisen. In einem realen Gas ist die Anzahl der Moleküle offensichtlich noch um ein vielfaches größer und daher die Erfassung des kinematischen Zustand jedes einzelnen Moleküls im betrachteten Gas nicht möglich.

Unter der Annahme, jedes Molekül ließe sich für einen gewissen Zeitraum beobachten, wird deutlich, dass die Moleküle bei Annäherungen miteinander interagieren müssten und dies weitere Herausforderungen bei der Modellierung hervorbringt. Denn neben der Modellierung des allgemeinen Zustands des Gases, muss nun auch ein physikalisches Modell der Molekülinteraktionen, insbesondere bei Kollisionen, eingeführt werden. Letztlich gilt es noch, die Modellierungen der Moleküldynamik an die makroskopischen Zustandsgrößen des Gases zu koppeln.

Zur Beschreibung der Molekülzustände, d.h. Geschwindigkeit und Ort in der Zeit, wird eine probabilistische Betrachtungsweise herangezogen, in welcher die zeitliche Entwicklung der Molekülzustände über eine Verteilungsfunktion beschrieben wird [4]. Dabei kann sich auf die Erkenntnisse von Maxwell und Boltzmann gestützt werden, welche eine charakteristische Verteilung der Molekülgeschwindigkeiten im Gleichgewichtszustand, die sogenannte „*Maxwell Boltzmann Verteilung*“, nachweisen konnten. Über die kinetische Gastheorie soll nun modelliert und simuliert werden, wie die Entwicklung eines Systems hin zu diesem Gleichgewichtszustand abläuft.

1.2 Die Boltzmann-Gleichung

Ehe auf die Differentialgleichung eingegangen wird, welche die zeitliche Entwicklung der zuvor angesprochenen Verteilungsfunktion beschreibt, sind zunächst einige Anmerkungen notwendig.

In der folgenden Modellierung eines *einatomigen, verdünnten* Gases wird unter der Annahme gearbeitet, dass jeweils nur *binäre Interaktionen* zwischen Molekülen statt finden und zudem davon ausgegangen, dass jede Kollision zweier Moleküle eine Änderung der Geschwindigkeiten und Positionen verursacht. Des Weiteren wird auf das Wirken *äußerer Kräfte* auf das Gas verzichtet, da hier ein großes Gewicht auf die Betrachtung der korrekten Lösung der Umverteilung der Mo-

lekülgeschwindigkeiten durch Stöße gelegt werden soll. Die Idee für Tests eines numerischen Löser besteht in Folge dessen schließlich darin, dass ein zuvor gestörtes System sich selbst überlassen wird und letztlich den Gleichgewichtszustand erreichen soll.

Unter der Gültigkeit der obigen Annahmen, ergibt sich die nach Ludwig Boltzmann benannte Differentialgleichung zur zeitlichen Änderung der Verteilung der Molekülgeschwindigkeiten zu [4]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\epsilon} Q(f, f), \quad x, v \in \mathbb{R}^3. \quad (1.1)$$

$f = f(x, v, t)$ ist in der obigen Gleichung (1.1) die bereits erwähnte Verteilungsfunktion, welche die Dichte von Teilchen am Ort x mit der Geschwindigkeit v zu einem Zeitpunkt t beschreibt. Bei v handelt es sich um die *mikroskopische* Geschwindigkeit der Teilchen in der „Orts-Geschwindigkeits-Zelle“ (x, v) . Das Kriterium, ob das betrachtete Fluid als Kontinuum beschrieben werden kann, wird über die sogenannte Knudsen-Zahl ϵ als Parameter und Koeffizient vor dem Kollisionsoperator $Q(f, f)$ geführt. Die Knudsen-Zahl beschreibt in ihrer generellen Definition das Verhältnis aus mittlerer freier Weglänge und einer physikalischen Referenzlänge wie etwa der Durchmesser eines Moleküls.

Der Kollisionsoperator $Q(f, f)(v)$ modelliert die zuvor erwähnte Umverteilung der Geschwindigkeit v durch Stöße mittels einer gegebenen Verteilungsfunktion f und ist neben dem Transport auf der linken Seite der zentrale Bestandteil der Boltzmann-Gleichung. Der Kollisionsoperator ist durch das fünffache Integral

$$Q(f, f)(v) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(|g|, \theta) \cdot [f(v')f(v'_1) - f(v)f(v_1)] d\omega dv_1 \quad (1.2)$$

definiert, wobei $g = v - v_1$.

$B(|g|, \theta)$ ist dabei der sogenannte „Kollisionskern“, welcher in Abhängigkeit der Differenzgeschwindigkeit g und dem Umlenkungswinkel Θ zweier Moleküle die Kollisionsmechanik mathematisch-physikalisch modelliert. Üblicherweise wird dieser in der Form

$$B(|g|, \theta) = b_\alpha(\theta)|g|^\alpha. \quad (1.3)$$

verwendet, da sich so über den Parameter α verschiedene Molekülmodelle einstellen lassen. In der hier präsentierten Methode wird für alle Testfälle eine vom Umlenkungswinkel unabhängige Modellierung verwendet, womit $b_\alpha(\theta)$ eine einfache Konstante ist. Eine nähere Definition der verschiedenen Gasmodelle würde den Rahmen dieser Arbeit überschreiten. Näheres zu diesem Thema kann im Werk „Molecular Gas Dynamics“ von G. A. Bird [1] nachgelesen werden.

Die Vektoren v und v_1 repräsentieren die Geschwindigkeiten der zugehörigen Moleküle *vor* den Kollisionen. Somit kann das Produkt „ $f(v) \cdot f(v_1)$ “ als *Verfügbarkeit* von Stoßpaaren mit den Geschwindigkeiten v und v_1 angesehen werden [2]. Das negative Vorzeichen bedeutet, dass diese Moleküle ihre Pre-Kollisionsgeschwindigkeit ändern, die Geschwindigkeiten v' und v'_1 annehmen und dies somit als „Verlust“ im Kollisionsoperator interpretiert wird. v' und v'_1 sind dem entspre-

chend die Geschwindigkeiten *nach* der Kollision. Das Produkt „ $f(v') \cdot f(v'_1)$ “ steht wiederum für die *Verfügbarkeit* von Molekülpaaren mit den Geschwindigkeiten v' und v'_1 . Die Geschwindigkeiten nach den Kollisionen hängen von den Pre-Kollisionsgeschwindigkeiten ab und werden über

$$v'(v, v_1) = \frac{1}{2}(v + v_1 + |v - v_1|\omega), \quad v'_1(v, v_1) = \frac{1}{2}(v + v_1 - |v - v_1|\omega)$$

berechnet.

In den obigen Formeln ist ω der Einheitsvektor der Sphäre

$$S^2 = \{\omega \in \mathbb{R}^3, |\omega|^2 = 1\},$$

womit das innere Integral des Kollisionsoperators als zwei-dimensionales Integral über die Oberfläche der Sphäre S^2 definiert ist. Über ω , welcher den normierten relativen Pfad zwischen den kollidierenden Molekülen *vor* der Kollision beschreibt, können somit verschiedene Kollisionskonstellationen festgelegt werden. Wie in Abbildung 1.2 illustriert, folgt für die geometrische Interpretation des inneren Integrals, dass über sämtliche möglichen Kollisionskonstellationen der Stoßpartner mit den Geschwindigkeiten (v, v_1) und den assoziierten Geschwindigkeiten (v', v'_1) integriert wird. Über das äußere Integral wird zusätzlich noch über den gesamten Geschwindigkeitsraum integriert, womit die Umverteilung von f mittels Kollisionen vollständig beschrieben ist.

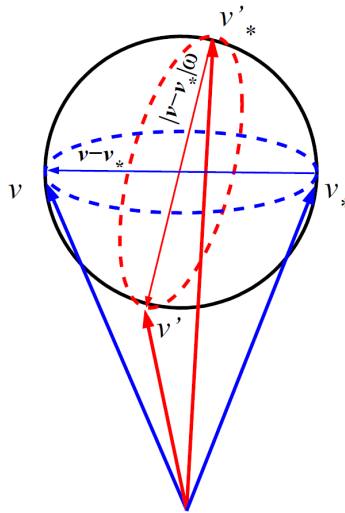


Abbildung 1.2: Geometrische Darstellung des Integrals über die Sphäre S^2 (Quelle: [5])

1.3 Repräsentation der makroskopischen Erhaltungsgrößen

Die mikroskopische Betrachtung der Moleküldynamik ist über die resultierende Verteilungsfunktion direkt an die makroskopischen Zustandsgrößen des Systems gekoppelt. Die Anzahl der Partikel

des Systems kann über die Gleichung

$$N(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t) \, dv \, dx \quad (1.4)$$

berechnet werden. Die Erhaltungsgrößen Dichte, Impulsdichte und Energiedichte ergeben sich analog über

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t) \, dv \quad (1.5a)$$

$$\rho u = \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t) \cdot v \, dv \quad (1.5b)$$

$$\rho e = \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t) \cdot |v|^2 \, dv \quad (1.5c)$$

2 Eine spektrale Methode für den Kollisionsoperator

Nachdem die wichtigsten Grundkenntnisse der zugrunde liegenden Problematik in den vorangehenden Abschnitten erklärt sind, beschreibt das folgende Kapitel die Grundvoraussetzungen und Vorgehensweise einer spektralen Methode für die Boltzmann-Gleichung auf Basis des Papers von L. Pareschi. Einige Anmerkungen bezüglich der typischen Vorgehensweise und der Problemformulierung in Abschnitt 2.1 sind gefolgt von der Herleitung der spektralen Methode und der finalen Formulierung des Lösungsschemas in Abschnitt 2.2.

2.1 Grundsätzliche Vorgehensweise und Problemformulierung

Es gibt grundsätzliche Vorgehensweisen für die Herleitung eines Lösungsschemas für die Boltzmann-Gleichung, welche den meisten Methoden gemein sind. Auf diese soll in diesem Abschnitt eingegangen werden.

2.1.1 Splitting von Transport und Kollisionen

Es wird im Folgenden die Möglichkeit ausgenutzt, den Transport und Kollisionsmechanismus getrennt betrachten zu können. Dies wird etwa über die „Strang Splitting“-Methode realisiert. Diese ermöglicht die Zerlegung einer Differentialgleichung, wenn anwendbar, in eine Summe aus Differentialoperatoren. Für die gegebene Boltzmann-Gleichung ist auf diese Weise eine Aufteilung zwischen der *homogenen Boltzmann-Gleichung*

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} Q(f, f) \quad (2.1)$$

und der Transportgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = 0 \quad (2.2)$$

möglich.

Es findet damit eine zeitliche Aufteilung zwischen der Auflösung des Kollisionsoperators in der homogenen Boltzmann-Gleichung und dem Transport durch die Moleküle statt. Eine zeitliche Aufteilung bedeutet an dieser Stelle, dass innerhalb eines Zeitschrittes Δt zunächst die homogene Boltzmann-Gleichung und anschließend die Transportgleichung gelöst wird. Das Lösen der homogenen Boltzmann-Gleichung ist aufgrund der komplizierten Diskretisierung des Kollisionsoperators die aufwendigere Aufgabe und erfordert für die Herleitung eines Lösungsschemas daher höhere Aufmerksamkeit. Aus diesem Grund wird in dem dieser Ausarbeitung zugrunde liegenden Paper auf die konkrete Betrachtung der Transportgleichung verzichtet und lediglich die Herleitung einer spektralen Methode für die homogene Boltzmann-Gleichung näher ausgeführt.

2.1.2 Aufteilung des Kollisionsoperators

Wie durch die Vorzeichen der Terme in obiger Definition des Kollisionsoperators angedeutet, lässt sich der Operator in einen Zunahme- und Verlustteil $Q^+(f, f)$ und $f \cdot L(f)$ separieren. Konkret definiert sind diese Terme über

$$Q^+(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(|g|, \theta) \cdot [f(v')f(v'_1)] d\omega dg, \quad (2.3)$$

$$L(f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(|g|, \theta) \cdot [f(v - g)] d\omega dg, \quad (2.4)$$

wobei wiederum $g = v - v_1$ gilt und der vollständige Kollisionsoperator demnach über $Q(f, f) = Q^+(f, f) - f \cdot L(f)$ dargestellt wird. Es gilt hierbei zu beachten, dass $f(v)$ als Vorfaktor vor $L(f)$ verschoben wurde und in $L(f)$ nicht enthalten ist. Aufgrund der Verwendung von g in obiger Darstellung ergeben sich auch entsprechend angepasste Ausdrücke für die Berechnung von v' und v'_1 .

Unter Verwendung dieser Aufteilung und Notation des Kollisionsoperators ergibt sich als Formulierung des Anfangswertproblems

$$\frac{\partial f}{\partial t} + f L(f) = Q^+(f, f), \quad (2.5)$$

$$f(x, v, t = 0) = f_0(x, v), \quad (2.6)$$

wobei zu Beginn eine passende Verteilungsfunktion gegeben sein muss. Diese kann zum Testen grundsätzlich beliebig sein und repräsentiert in Referenz zur Ausführung oben eine „Störung“ des Systems, welche über die Umverteilung durch Stöße bei einem korrekt entwickelten Lösungsschema über die Zeit entwickelt zum Gleichgewichtszustand und damit zu einer Maxwell'schen Verteilung führt.

2.2 Herleitung des spektralen Schemas

2.2.1 Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes

Es soll eine numerische spektrale Methode zur Ermittlung von Werten der Verteilungsfunktion f für festgelegte Geschwindigkeiten v entwickelt werden. Bei entsprechender Diskretisierung des Geschwindigkeitsraumes treten insbesondere die drei folgenden Problemstellungen auf.

1. Wahl diskreter Werte von v , für welche numerische Werte von f bestimmt werden
2. Setzen von Randwerten für v
3. Vermeidung der Überschneidung von Perioden von f

Hier soll die Betrachtung der konkreten Anzahl berechneter Werte vernachlässigt bleiben. Das Setzen von Rändern des Geschwindigkeitsraumes ist hingegen definitiv notwendig, da f unmöglich

auf ganz \mathbb{R}^3 bestimmt werden kann, was zur Folge hat, dass auch der Träger von f innerhalb dieser künstlichen Geschwindigkeitsränder liegen muss. Zugleich führt ein künstliches Abschneiden an den Rändern von f jedoch dazu, dass ein Massen-, Impuls- und Energieerhalt des Kollisionsoperators nicht mehr gegeben ist und die Genauigkeit der Ergebnisse sinkt.

Diese Ungenauigkeit kann durch eine „Verbreiterung“ des Trägers von f möglichst gering gehalten werden. Allerdings wird f in einer spektralen Methode mittels einer Summe trigonometrischer Polynome approximiert und erhält somit eine eigene charakteristische Periodizitätseigenschaft. Dies führt zu einer Überschneidung, auch als *Aliasing* bekannt, der festgelegten Perioden von f und verursachen damit ungenaue oder gar negative Werte an den Rändern einer Periode.

Den obigen Erkenntnissen zufolge muss die Größe der Periode, auf welcher f spektral approximiert wird, groß genug sein, um einen möglichst „breiten“ Bereich zu ermöglichen, auf welchem f ungleich Null sein kann ohne Überschneidungen von Perioden zu erhalten und zugleich die Gültigkeit des Kollisionsoperators in Bezug auf Impuls- und Energieerhalt zu erfüllen. Um eine komplizierte Anpassung der Gleichungen oder der numerischen Methode in dieser Hinsicht zu vermeiden, wird in der hier präsentierten Methode auf die folgende Erkenntnis zurückgegriffen [3]:

Wenn der Träger von f , $Supp(f(v))$, innerhalb der Kugel $\mathcal{B}(0, R)$ festgelegt wird, gilt für den Kollisionsoperator

(i) $Supp(Q(f, f)(v)) \subset \mathcal{B}(0, \sqrt{2}R)$, und damit

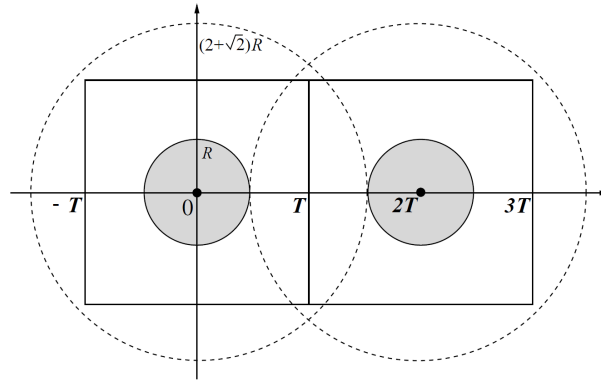
(ii)

$$Q(f, f)(v) = \int_{\mathcal{B}(0, 2R)} \int_{S^2} B(|g|, \theta) \cdot [f(v')f(v'_1) - f(v)f(v-g)] d\omega dg,$$

mit $v', v'_1, (v-g) \in \mathcal{B}(0, (2 + \sqrt{2})R)$.

Das bedeutet, dass der durch die Wahl des Trägers von f induzierte Träger von $Q(f, f)$ dazu führt, dass der Kollisionsoperator auf dem obigen abgegrenzten Integrationsgebiet innerhalb des Geschwindigkeitsraumes seine Gültigkeit behält.

Mittels dieser Überlegung kann nun auch die Größe der Periode der Approximation von f festgelegt werden, welche zugleich direkten Einfluss darauf nimmt, in welchem Maße Aliasing auftritt. Diese wird dabei als Würfel $[-T, T]^3$ beschrieben, wobei $2T$ der Länge der Periode in jeder Richtung entspricht. In Abbildung 2.1 wird dies anschaulich visualisiert, wobei $(2 + \sqrt{2})$ dem Abstand zwischen dem Zentrum der „linken“ Periode von f und dem Beginn der „rechten“ Periode von f entspricht, sodass gerade keine Überschneidung auftritt.

Abbildung 2.1: Zweidimensionale Illustration der Perioden von f (Quelle: [4])

Wie die obige Abbildung zudem illustriert, ist es allgemein dennoch ausreichend, f auf dem Würfel $[-T, T]^3$ mit $T \geq (3 + \sqrt{2})R/2$ zu entwickeln. Hier darf allerdings nicht vernachlässigt werden, dass die Approximation von f sich mit jedem Zeitschritt der Maxwell'schen Verteilung annähert, welche keinen kompakten Träger besitzt ($Supp(f(v))$ wird größer). Dies führt, wie die Ergebnisse der präsentierten Methode bestätigen, zwangsläufig nach einer gewissen Zeit zu Fehlern durch Aliasing.

Für die Herleitung und Formulierung der spektralen Methode, wird im Folgenden $T = \pi$ und $R = \lambda \cdot \pi = (2/(3 + \sqrt{2})) \cdot \pi$ gewählt.

2.2.2 Spektraler Galerkin Ansatz und Formulierung des Schemas

Bei der hier vorgestellten Methode wird ein spektraler Galerkin Ansatz gewählt. Dabei wird das aus dem oben aufgestellten Anfangswertproblem formulierte Residuum mit trigonometrischen Basisfunktionen multipliziert und über den zuvor definierten periodischen Würfel integriert. Damit folgt für $k = (k_1, k_2, k_3) = -N, \dots, N$

$$\int_{[-\pi, \pi]^3} \left(\frac{\partial f_N}{\partial t} + f_N L(f_N) - Q^+(f_N, f_N) \right) \cdot e^{-ik \cdot v} dv = 0, \quad (2.7)$$

wobei f_N die spektrale Approximation von f ist, welche über die endliche Fourier-Reihe

$$f_N(v) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_k \cdot e^{ik \cdot v} \quad (2.8)$$

mit den Fourierkoeffizienten

$$\hat{f}_k = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{[-\pi, \pi]^3} f(v) \cdot e^{-ik \cdot v} dv \quad (2.9)$$

repräsentiert wird. Dies ist äquivalent zu der Forderung, dass das Residuum orthogonal zu allen trigonometrischen Polynomen von Grad $\leq N$ ist. Das Lösen nach den unbekanntenen Fourierkoeffi-

zienten, also das Lösen des damit entstehenden Systems aus gewöhnlichen Differentialgleichungen, führt somit zur gewünschten Approximation f_N von f .

Als Nächstes wird die spektrale Repräsentation von f in den Verlust- und Zunahmeteil des Kollisionsoperators eingesetzt. Über den obigen spektralen Galerkin-Ansatz und einfachen Indexverschiebungen folgt das spektrale Schema mit,

für $k = (k_1, k_2, k_3) = -N, \dots, N$,

$$\frac{\partial \hat{f}_k}{\partial t} + \sum_{k=-N}^N \hat{f}_{k-m} \hat{f}_m \hat{B}(m, m) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_{k-m} \hat{f}_m \hat{B}(k - m, m) \quad (2.10)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\hat{f}_k(0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{[-\pi, \pi]^3} f_0(v) \cdot e^{-ik \cdot v} dv. \quad (2.11)$$

wobei über $\hat{f}_k = 0$ bei $|k_j| > N$, $j = 1, 2, 3$ der kompakte Träger der Lösung gewährleistet wird. An dieser Stelle muss angemerkt werden, dass die Anfangsbedingung $\hat{f}_k(0)$ ebenfalls Fourier-entwickelt werden muss. Zudem ist der Kollisions-Kern $\hat{B}(l, m)$ definiert durch

$$\hat{B}(l, m) = \int_{\mathcal{B}(0, 2\lambda\pi)} \int_{S^2} B(|g|, \theta) \cdot e^{-ig \cdot \frac{(l+m)}{2} - i|g|\omega \cdot \frac{(m-l)}{2}} d\omega dg \quad (2.12)$$

2.2.3 Rechenaufwand des spektralen Schemas

Die Auswertung des zuvor vorgestellten spektralen Schemas erfordert nach Angaben des zugrunde liegenden Papers genau $\mathcal{O}(N^6)$ Operationen. Damit ist es günstiger als übliche Diskrete-Geschwindigkeit-Algorithmen, welche zudem Winkeldiskretisierungen benötigen und damit die Anzahl der Operationen entsprechend erhöhen.

Des Weiteren handelt es sich bei dem Verlustterm (die Summe auf der linken Seite) des diskretisierten Kollisionsoperators um eine Faltungssumme, die sich über angemessene Transformationen mit nur $\mathcal{O}(N^3 \log(N))$ Operationen berechnen lässt. Dies ist für den Zunahmeteil nicht der Fall. Da sich Verlust- und Zunahmeteil getrennt berechnen lassen und zudem noch unterschiedlich aufwendig, erklärt dies an dieser Stelle nachträglich den effektiven Nutzen der ursprünglichen Aufteilung und der entsprechenden Formulierung des Problems.

Zuletzt ist noch anzumerken, dass die Kern-Modes $\hat{B}(l, m)$, welche jeweils über ein fünffaches Integral definiert sind, in eine vereinfachte Form überführt werden können. Diese ermöglicht die Auswertung der Kern-Modes über die Berechnung einfacher eindimensionaler Integrale. Da diese Werte für jeden Zeitschritt gültig bleiben, können alle Kern-Modes zu Beginn der Simulation berechnet und gespeichert werden und nehmen keinen weiteren Einfluss auf die Rechenzeit.

3 Eigenschaften der spektralen Methode

Das folgende Kapitel stellt die wichtigsten Erkenntnisse aus den Eigenschaften der präsentierten spektralen Methode vor.

3.1 Fourierreihe

Die Approximation f_N erfolgt über Teilsummen der Fourierreihe von f . Aufgrund der Periodizität der zugehörigen trigonometrischen Polynome führt dies an den Rändern einer Periode von f zu teils negativen Werten. Zur Vorbeugung von negativen Werten, können die Fourierkoeffizienten gefiltert werden, um f_N zu glätten. Ein solcher Glättungsoperator ist definiert durch

$$\mathcal{S} f_N(v) = f_N^s = \sum_{k=-N}^N \sigma_k \hat{f}_k e^{ik \cdot v} \quad (3.1)$$

wobei für die Faktoren gilt: $\sigma_k = \sigma_{k_1} \sigma_{k_2} \sigma_{k_3}$ sind *reel* und *nicht-negativ*, wobei $\sigma_{k_j} = \sigma_{-k_j}$ und $\sigma_{|k_j|} \leq \sigma_{|k_j-1|}$, $j = 1, 2, 3$.

Geeignete Werte für diese Faktoren ergeben sich zum Beispiel über den Filter

$$\sigma_{k_j} = \left(1 - \frac{|k_j|}{N}\right), \quad j = 1, 2, 3. \quad (3.2)$$

3.2 Konsistenzbetrachtungen

3.2.1 Fehler in den Erhaltungsgrößen

Die Berechnung der makroskopischen Erhaltungsgrößen für eine Approximation f_N erfolgt analog zur Repräsentation in Abschnitt 1.3, wobei diese von den Fourierkoeffizienten von v und v^2 abhängt. Eine Abschätzung der Fehler in diesen Erhaltungsgrößen führt zu

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_N, \\ |\rho u - (\rho u)_N| &\leq \frac{C_1}{N^{1/2}} \|f\|_2, \\ |\rho e - (\rho e)_N| &\leq \frac{C_1}{N^{3/2}} \|f\|_2, \end{aligned}$$

womit zwar auf den Erhalt von Masse innerhalb einer Periode von f_N , jedoch nicht von Impuls und Energie geschlossen werden kann. Es stellt sich bei der Betrachtung der spektralen Genauigkeit der Methode jedoch heraus, dass die Variationen in diesen fehlerbehafteten Größen spektral klein sind und ausschließlich auf Aliasing zurückzuführen sind.

3.2.2 Konsistenz der Approximation des Kollisionsoperators

Da für $f, g \in L^2([-\pi, \pi]^3)$ gilt, dass zum einen der Kollisionsoperator $Q^\lambda(f_N, g_N)$ ein trigonometrisches Polynom vom Grad $2N$ und damit unendlich glatt ist,

$$Q^\lambda(f_N, g_N) \in \mathbb{P}_{2N},$$

und des Weiteren die L^2 -Norm direkt von der L^2 -Norm von f und g abhängt,

$$\|Q^\lambda(f, g)\|_2 \leq C\|f\|_2\|g\|_2,$$

folgt für die Abschätzung der Konsistenz des Kollisionsoperators $Q_N^\lambda(f_N)$ in der L^2 -Norm

$$\|Q^\lambda(f) - Q_N^\lambda(f_N)\|_2 \leq C \left(\|f - f_N\|_2 + \frac{\|Q^\lambda(f_N)\|_{H_p^r}}{N^r} \right) \quad \forall r \geq 0. \quad (3.3)$$

Dabei Bezieht sich λ auf den zuvor gewählten diskreten Geschwindigkeitsraum und der Index N bezeichnet wie auch für f eine spektrale Approximation mittels N Fourier-Modes. H_p^r repräsentiert einen Sobolev-Unterraum r -fach differenzierbarer Funktionen. Da $Q_N^\lambda(f_N)$ unendlich glatt ist, verschwindet die $\|\cdot\|_{H_p^r}$ aus der obigen Approximation und die Genauigkeit des Kollisionsoperators hängt ausschließlich von der Genauigkeit von f_N ab. Die spektrale Genauigkeit von f_N hängt wiederum von der Glattheit der exakten Lösung f ab,

$$\|f - f_N\|_2 \leq \frac{C}{N^r} \|f\|_{H_p^r}.$$

Somit ist die vorgestellte Methode konsistent, da eine glatte, differenzierbare exakte Lösung f unmittelbar zu einer spektral genauen Approximation f_N führt. Analoges gilt für die Erhaltungsgrößen Impuls und Energie.

3.3 Stabilität und Eindeutigkeit der Lösung

Bezüglich der Stabilität der Methode kann folgende Aussage getätigt werden: Es existiert eine eindeutige und positive Lösung $f_N(t, v) \in C^1([0, T], \mathbb{P}^N)$, für $T > 0$ und $\|f_N\|_1 = \rho$ zu dem Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_N}{\partial t} + \mu f_N &= \mathcal{S}J_N^\lambda(f_N), & v \in \mathbb{R}^3, t > 0 \\ f_N(v, t=0) &= f_{0,N}^s(v) \end{aligned} \quad (3.4)$$

unter der Voraussetzung dass f_0 nicht negativ, $\|f_0\|_1 = \rho$, $\mu \geq C_\alpha 4\pi(2\lambda\pi)^\alpha \rho$ und \mathcal{S} ein gültiger Glättungsoperator ist.

Über μ wird die aufgeprägte Störung des Systems definiert und $J^\lambda(f, f) = Q^\lambda(f, f) + \mu f$ ist ein positiv-monotoner Operator.

4 Ergebnisse und Fazit

Um den inhaltlichen Rahmen dieser Seminararbeit nicht zu überschreiten, soll im Folgenden lediglich auf die korrekte Funktionalität des präsentierten Schemas eingegangen werden.

Für den betrachteten Testfall ist die Anfangsbedingung $f(v, 0) = \frac{v^2}{\pi\sigma^2} \exp(-v^2/\sigma^2)$ gewählt worden, wobei σ so gewählt wird, dass der Träger von $f(v, 0)$ möglichst genau $\mathcal{B}(0, R)$ annähert. Zu dieser Anfangsverteilung ist auch für jeden Zeitschritt eine exakte Lösung $f(v, t)$ bekannt. Die gewählte Verteilung repräsentiert entsprechend ein System außerhalb des Gleichgewichtszustands. Ohne Wirkung äußerer Kräfte entwickelt sich diese Verteilung mit einem korrekten Löser hin zur Maxwell'schen Verteilung, welche einer Gauß'schen Verteilung ähnelt.

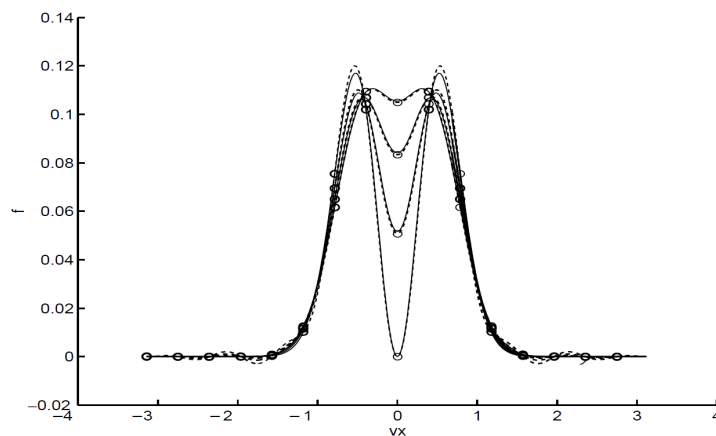


Abbildung 4.1: Verteilungsfunktion $f(v_x, 0, t)$ zu den Zeitpunkten $t = 0, 3, 6, 9$ bei $N = 16$ Fourier-Modes (Quelle: [4])

Obiger Abbildung ist zu entnehmen, dass sich die approximierte Verteilungsfunktion mit jedem Zeitschritt der Gleichgewichtsverteilung annähert. Dabei ist die exakte Lösung über die Linien, die numerisch bestimmten Werte über die Kreise, und die trigonometrische Interpolation der numerischen Werte über die gestrichelten Linien dargestellt. An den Rändern sind sehr gut die Fehler durch Aliasing zu beobachten, wenngleich die numerisch bestimmten Werte alle positiv sind.

Fazit

Insgesamt kann festgehalten werden, dass sich eine spektrale Methode zur Diskretisierung des Kollisionsoperators der Boltzmann-Gleichung eignet und spektral genaue Ergebnisse erzeugt werden können. Insbesondere die Wahl des diskreten Geschwindigkeitsraumes spielt bei der Formulierung des Schemas eine entscheidende Rolle und muss sorgfältig betrachtet werden, um zwar Aliasing zu verhindern, aber möglichst wenig Einbußen bei der Genauigkeit im Geschwindigkeitsraum hinnehmen zu müssen.

Literaturverzeichnis

- [1] Bird, G. A. (1994). *Molecular Gas Dynamics*. Clarendon Press.
- [2] Narayan, A. and Klöckner, A. (2009). Deterministic numerical schemes for the boltzmann equation.
- [3] Pareschi, L. and Perthame, B. (1996). A fourier spectral method for homogeneous boltzmann equations. *Transport Theory Statist. Phys.*, 25:369 – 383.
- [4] Pareschi, L. and Russo, G. (2000). Numerical solution of the boltzmann equation i: Spectrally accurate approximation of the collision operator. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(4):1217 – 1245.
- [5] Pareschi, L. and Russo, G. (2005). An introduction to the numerical analysis of the boltzmann equation.