

## 2 Grundlage

In diesem Abschnitt wird das Fundament der Arbeit gelegt. Hierzu leiten wir zunächst das in der Wissenschaft anerkannte Modell zur Simulation von Fasersuspensionen her. Anschließend definieren wir die hierbei auftauchenden Differentialoperatoren auf der Sphäre  $\mathbb{S}$  und halten Fehlerabschätzungen für abgeschnittene Fourierreihen fest. Diese begründen unsere Diskretisierung der orientierungsabhängigen Differentialgleichung auf der Basis von Fourierbasisfunktionen.

### 2.1 Herleitung des Modells

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, setzt sich eine Fasersuspension bei der Papierherstellung aus dem flüssigen Transportmedium und den meist pflanzlichen Fasern zusammen. Weitere mögliche Bestandteile wie Lufteinschlüsse in Form von Blasen entsprechen einem gesonderten Gebiet der numerischen Strömungssimulation und werden im Folgenden aufgrund der Komplexität vernachlässigt. Die Besonderheit bei der Betrachtung von Fasern im Gegensatz zu sphärischen Partikeln in einem Fluid liegt in der Interaktion der Teilchen: Während das Verhalten von Kugeln nach einem Zusammenstoß verhältnismäßig unproblematisch vorhergesagt werden kann, ist die Kollision von Fasern nicht zuletzt wegen der erhöhten Anzahl an Freiheitsgraden nur sehr schwer zu erfassen. Diese verzahnen sich bereits bei niedrigen Konzentrationen schnell untereinander und neigen zur Flockenbildung, welche die Viskosität der Mischung stark beeinflusst. Neben der Einschränkung des Fließverhaltens überträgt sich die Tendenz zu Verflechtungen auf die Qualität des produzierten Papiers, da sich diese nach der Regelmäßigkeit des Flächenmasseprofils richtet. Unter der Annahme gleichartiger Fasern konnten Kerekes und Schell [20] diese Neigung zur Flockenbildung anhand drei charakteristischer Größen durch eine dimensionslose „crowding number“  $n_v = \frac{2}{3}\alpha \frac{L}{d}$  in drei schemenhafte Gruppen unterteilen. Hierbei entspricht  $\alpha \in [0, 1]$  dem Volumenanteil der Fasern in der Mischung und  $L$  bzw.  $d$  der durchschnittlichen Länge bzw. dem durchschnittlichen Durchmesser der Fasern.

Kerekes und Schell bezeichnen die Fasersuspension in dem Intervall  $0 \leq n_v < 1$  als verdünnt. In diesem Ausschnitt ist die Konzentration der Fasern verschwindend und Interaktionen zwischen den zylindrischen Partikeln sowie Flockenbildungen treten nur sporadisch auf. Auf diese Weise haben die Wechselbeziehungen einen

vernachlässigbaren Einfluss auf den Verlauf der Strömung und können ignoriert werden.

Der halbverdünnte Bereich ist definiert für Werte  $1 \leq n_v \leq 60$  und aufgrund des häufigen Auftretens in der Papierherstellung für Untersuchungen besonders attraktiv. Zusammenstöße und Verflechtungen zwischen den Festkörpern tragen maßgeblich zum Strömungsverhalten bei und dürfen nicht länger unberücksichtigt bleiben.

In der Klasse der konzentrierten Fasersuspensionen  $n_v > 60$  ist die Bewegungsfreiheit der Fibern angesichts der Bildung von Netzen stark eingeschränkt. Aufgrund der so entstehenden Viskosität wird die Bewegung des Gemenges vermindert und das Verhalten nähert sich dem eines Festkörpers.

In diesem Abschnitt werden wir ein Modell zur Behandlung von Fasersuspensionen mit  $n_v \leq 60$ , also einem verdünnten bis halbverdünnten Gemisch, herleiten. Dieses simuliert die Faserinteraktionen durch künstliche Diffusion bei der orientierungsabhängigen Differentialgleichung. Mögliche Verzahnungen und die dadurch entstehende Flockenbildung können bei diesem Modell aufgrund der makroskopischen Betrachtungsweise durch eine Orientierungsverteilungsfunktion  $\psi(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$  nicht ohne Weiteres berücksichtigt werden.

Bevor wir auf das Verhalten der Fibern eingehen, betrachten wir die makroskopische Behandlung der inkompressiblen Mixture. Die Geschwindigkeit  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n$  mit der Raumdimension  $n$  und der Druck  $p = p(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}_+$  der Mischung erfüllen die **inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen**

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{x}} p + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \tau_{\text{eff}}, \quad \text{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}) = 0. \quad (2.1)$$

Hierbei beschreibt  $\tau_{\text{eff}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  den effektiven Spannungstensor und  $\rho \in \mathbb{R}_+$  die effektive Dichte der Fasersuspension.  $\rho$  und  $\mathbf{u}$  sind für die zweiphasige Strömung definiert durch

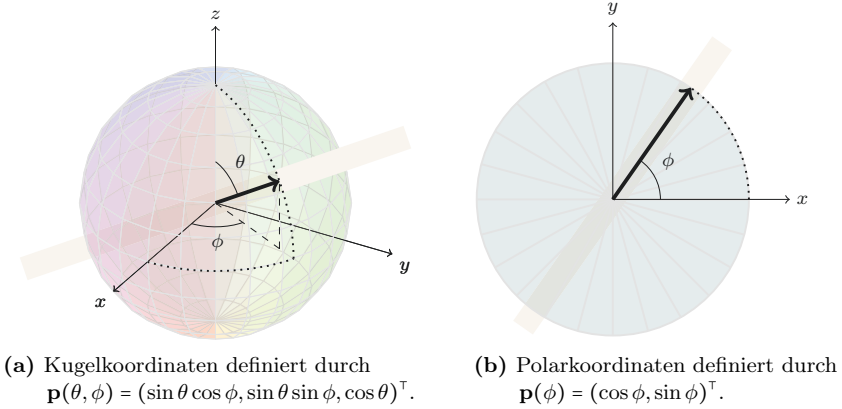
$$\rho = (1 - \alpha)\rho_f + \alpha\rho_s, \quad (2.2a)$$

$$\rho\mathbf{u} = (1 - \alpha)\rho_f\mathbf{u}_f + \alpha\rho_s\mathbf{u}_s \quad (2.2b)$$

mit dem wie bereits beschriebenen Volumenanteil  $\alpha \in [0, 1]$  der Fibern und der Dichte  $\rho_f \in \mathbb{R}_+$  bzw. Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_f \in \mathbb{R}^3$  des Fluids.  $\rho_s \in \mathbb{R}_+$  und  $\mathbf{u}_s \in \mathbb{R}^3$  geben die entsprechenden Größen der fiberabhängigen Phase wieder. Mit diesen Bezeichnungen entspricht  $\rho$  der durchschnittlichen Dichte und  $\rho\mathbf{u}$  der durchschnittlichen Impulsdichte in einem Ort  $\mathbf{x}$  des Gemisches.

Ist das Fluid eine reine Flüssigkeit, also  $\alpha \equiv 0$ , so ist  $\tau_{\text{eff}}$  durch den viskosen Spannungstensor für Newtonsche Fluide definiert. Dieser kann mit dem Deformationstensor  $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u}^\top)$  und den Materialkonstanten  $\lambda, \nu \in \mathbb{R}$  approximiert werden durch

$$\tau = \lambda(\text{div}_{\mathbf{x}}\mathbf{u})\mathbf{I} + 2\nu\mathbf{D} = 2\nu\mathbf{D} \quad (2.3)$$



**Abbildung 2.1:** Koordinatensystem zur Definition der Orientierung  $\mathbf{p} \in \mathbb{S}^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$  einer Faser für unterschiedliche Raumdimensionen.

und ist damit für inkompressible Fluide proportional zum symmetrischen Teil des Geschwindigkeitsgradienten. Demnach sollte der effektive Spannungstensor  $\tau_{\text{eff}}$  einer Fasersuspension im Grenzwert niedriger Fiberanteile gegen den viskosen Spannungstensor  $\tau$  konvergieren. Diesen Aspekt werden wir später bei einer möglichen Definition von  $\tau_{\text{eff}}$  erneut aufgreifen.

Durch die Differentialgleichungen (2.1) ist das Fundament zur Simulation der Fasersuspensionen gelegt. Dieses enthält jedoch mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ , dem Druck  $p \in \mathbb{R}_+$  und dem Volumenanteil  $\alpha \in [0, 1]$  eine Unbekannte mehr als das System (2.1) kontrollieren kann. Des Weiteren ist unser Modell augenblicklich unabhängig von der Orientierung der Fasern, sodass diese derzeit entgegen der Vorstellung willkürlich in dem Transportmedium zirkulieren könnten. Aus diesem Grund müssen die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen (2.1) um (mindestens) eine weitere partielle Differentialgleichung ergänzt werden, die insbesondere von der Orientierung der Fasern abhängt.

Wir fokussieren uns bei der Herleitung einer orientierungsabhängigen Differentialgleichung zunächst auf eine einzelne Faser. Diese kann interpretiert werden durch ein Seil mit einer beliebigen Massenverteilung, welches an willkürlichen Stellen gekrümmt werden kann. Für unser Modell mit mehreren Millionen Fasern ist eine derart allgemeine Betrachtung jedoch unverhältnismäßig. Stattdessen approximieren wir sie durch einen (länglichen) starren Zylinder, der durch die konstante Länge  $L$  und den konstanten Durchmesser  $d$  sowie die Koordinaten seines Schwerpunktes  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  und einem Punkt auf der Einheitssphäre  $\mathbf{p} \in \mathbb{S}^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_2 = 1\} \subset \mathbb{R}^n$  eindeutig definiert ist (siehe Abbildung 2.1). Die Orientierung der Faser im Raum wird hierbei eindeutig durch  $\mathbf{p} \in \mathbb{S}^{n-1}$  beschrieben. Dagegen ist  $\mathbf{p}$  aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Fiberenden lediglich bis auf das Vorzeichen durch die

Orientierung festgelegt. Eine Faser mit der Orientierung entlang  $\mathbf{p}$  besitzt damit die selbe Ausrichtung wie eine Faser entlang  $-\mathbf{p}$ . Befindet sich ein solches längliches Objekt isoliert in einer Flüssigkeit, so kann die Entwicklung der Orientierung durch die **Jeffery-Gleichung** angenähert werden [19]

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{p} + \lambda [\mathbf{D} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{D} : (\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}) \mathbf{p}]. \quad (2.4)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^\top)$  den bereits erwähnten **Deformations-tensor** (engl. „strain rate tensor“),  $\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} - \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^\top)$  den **Spinntensor** (engl. „vorticity tensor“) und  $\lambda = \frac{r_e^2 - 1}{r_e^2 + 1}$  einen von dem Längenverhältnis  $r_e = \frac{L}{d}$  abhängigen Faserparameter.

Wie bereits in der Einleitung beschrieben, wollen wir bei der Fasersuspension nicht jede individuelle Faser in der Lagrangeschen Betrachtungsweise beobachten. Bei der Vielzahl an Teilchen würden so die Grenzen der heutigen Rechenanlagen bereits bei sehr geringen Volumina überschritten. Stattdessen betrachten wir das Gemisch in einer Eulerschen Betrachtungsweise. Hierzu nehmen wir an, dass alle Teilchen die selbe Länge  $L$  und den selben Durchmesser  $d$  besitzen. Außerdem führen wir eine lokale Orientierungsverteilungsfunktion  $\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n-1} \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+$  ein, welche die bedingte Wahrscheinlichkeit angibt, eine zur Zeit  $t$  im (festen) Ort  $\mathbf{x}$  befindliche Fiber mit der Orientierung  $\mathbf{p}$  vorzufinden [17]. Demnach gilt für diese lokale Verteilungsfunktion

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \psi(\mathbf{x}, -\mathbf{p}, t) \geq 0, \quad \text{für alle } \mathbf{p} \in \mathbb{S}^{n-1}, \text{ Orte } \mathbf{x} \text{ und Zeiten } t, \quad (2.5a)$$

$$\int_{\mathbb{S}^{n-1}} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = 1 \quad \text{für alle Orte } \mathbf{x} \text{ und Zeiten } t. \quad (2.5b)$$

Zusammen mit dem Volumenanteil  $\alpha : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow [0, 1]$  sind damit die Aufenthaltsorte und Ausrichtungen der gesamten Fibern makroskopisch festgehalten.

Für verdünnte Gemische, bei denen die Interaktion der Fibern vollständig ignoriert werden kann, wird die Entwicklung der lokalen Orientierungsverteilungsfunktion  $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  beschrieben durch die Fokker-Planck-Gleichung [12, 27]

$$\frac{d\psi}{dt} + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}}\psi) = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\psi + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}}\psi) = 0. \quad (2.6)$$

Wollen wir außerdem bei höheren Konzentrationen die Wechselwirkungen zwischen einzelnen Fasern mit in das Modell einbeziehen, so ist dies aufgrund der globalen Betrachtungsweise nicht mit exakten physikalischen Formeln durchführbar. Stattdessen wird die „freie Beweglichkeit“ der Fasern durch einen zusätzlichen diffusiven Term in der Gleichung (2.6) eingeschränkt. Auf diese Weise erhalten wir mit der Drehdiffusivität (engl. „rotary diffusivity“)  $D_r$  die für das Modell einer Fasersuspension relevante **nichtkonservative Fokker-Planck-Gleichung** [2, 25]

$$\frac{d\psi}{dt} + \nabla_{\mathbf{p}} \cdot (\dot{\mathbf{p}}\psi) = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\psi + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}}\psi) = \Delta_{\mathbf{p}}(D_r\psi). \quad (2.7)$$

Folger und Tucker [13] definierten diese durch  $D_r = C_I \dot{\gamma} = C_I (\frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbf{D})^{1/2}$  mit einer empirischen Konstanten  $C_I \geq 0$ . Dieser Wert sollte aufgrund der Arbeit von [20] insbesondere von der charakteristischen Größe  $n_v$  der Fasersuspension abhängen. In manchen Arbeiten wird der diffusive Term der Fokker-Planck-Gleichung (2.7) zur Simulation der Faserinteraktionen auch in die Jeffery-Gleichung (2.4) verschoben [1, 26].

Die an dieser Stelle eingeführte Fokker-Planck-Gleichung (2.7) liefert die Einschränkung des Modells auf verdünnte bis halbverdünnte Fasersuspensionen, da sie die bei höheren Konzentrationsdichten in Betracht zu ziehende Flockenbildung nicht reproduzieren kann. Außerdem beschreibt sie nach der Definition von  $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  lediglich die Wahrscheinlichkeitsdichte einer im (festen) Ort  $\mathbf{x}$  befindlichen Faser in der Orientierung  $\mathbf{p}$  vorzufinden und gibt keine Auskunft über die örtliche Konvektion der Teilchen. Die hierfür relevante Differentialgleichung entspricht der **Kontinuitätsgleichung** für den Volumenanteil  $\alpha(\mathbf{x}, t) \in [0, 1]$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}_s \alpha) = 0 \quad (2.8)$$

mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{u}_s$  der faserabhängigen Phase, die im Allgemeinen durch die Gleichung (2.2b) festgehalten wird. Um das Modell nicht durch eine weitere Differentialgleichung für  $\mathbf{u}_f$  und  $\mathbf{u}_s$  erweitern zu müssen, nehmen wir an, dass die Fasern (nahezu) ungebremst mit dem Gemisch treiben und wir somit  $\mathbf{u}_s = \mathbf{u}$  annehmen können. Damit ergibt sich mit den Gleichungen für die effektive Dichte (2.2a) und Impulsdichte (2.2b)

$$\begin{aligned} (1 - \alpha) \rho_f \mathbf{u}_f + \alpha \rho_s \mathbf{u}_s &= \rho \mathbf{u} \\ \Leftrightarrow (1 - \alpha) \rho_f \mathbf{u}_f + \alpha \rho_s \mathbf{u} &= (1 - \alpha) \rho_f \mathbf{u} + \alpha \rho_s \mathbf{u} \\ \Leftrightarrow (1 - \alpha) \rho_f \mathbf{u}_f &= (1 - \alpha) \rho_f \mathbf{u} \end{aligned} \quad (2.9)$$

und wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit zusätzlich  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_f$  annehmen. Damit strömen beide Phasen des Gemisches mit der identischen Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$ . Definieren wir weiter die globale Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n-1} \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+$  durch  $\tilde{\psi}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \alpha(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ , so ergibt sich unter Verwendung der nichtkonservativen Fokker-Planck-Gleichung (2.7) für die lokale Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion und der Kontinuitätsgleichung (2.8) für den Volumenanteil

$$\begin{aligned} 0 &= \alpha \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \psi + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}} \psi) - \Delta_{\mathbf{p}}(D_r \psi) \right) + \psi \left( \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u} \alpha) \right) \\ &= \alpha \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \psi + \psi \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u} \alpha) + \alpha \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}} \psi) - \alpha \Delta_{\mathbf{p}}(D_r \psi) \\ &= \frac{\partial \alpha \psi}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u} \alpha \psi) + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}} \alpha \psi) - \Delta_{\mathbf{p}}(D_r \alpha \psi) \\ &= \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} + \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u} \tilde{\psi}) + \operatorname{div}_{\mathbf{p}}(\dot{\mathbf{p}} \tilde{\psi}) - \Delta_{\mathbf{p}}(D_r \tilde{\psi}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Damit erfüllt  $\tilde{\psi}$ , welche die Wahrscheinlichkeitsdichte beschreibt eine Fiber im Ort  $\mathbf{x}$  zur Orientierung  $\mathbf{p}$  zu finden, die **konservative Fokker-Planck-Gleichung** (2.10). Man beachte hierbei, dass aufgrund der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen (2.1), die eine divergenzfreie Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$  verlangt, beide partielle Differentialgleichungen (2.7) und (2.10) äquivalent sind. Bei der Herleitung der konservativen Formulierung (2.10) haben wir diese Aussage jedoch nicht verwendet, sodass das Resultat (2.10) auch für allgemeine Geschwindigkeiten  $\mathbf{u}$  mit  $\text{div}_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \neq 0$  gültig bleibt. Wir werden im Folgenden immer (bei ortsabhängigen Verteilungsfunktionen) die globale Definition der Wahrscheinlichkeitsdichte mit der entsprechenden Differentialgleichung (2.10) verwenden und zur besseren Übersicht auf die Tilde  $\tilde{\cdot}$  verzichten.

Wir haben hiermit Differentialgleichungen für beide Phasen einer Fasersuspension festgehalten. Während die Entwicklung der Fibern, repräsentiert durch die Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion, durch die Fokker-Planck-Gleichung (2.10) definiert ist, wird das Transportmedium mit Hilfe der weit verbreiteten inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen (2.1) beschrieben. Diese sind jedoch abhängig von dem bisher unbekannten Spannungstensor  $\tau_{\text{eff}}$ , welcher nach unseren Überlegungen von der Ausrichtung der Fasern abhängen und für niedrige Konzentrationen gegen den viskosen Spannungstensor  $\tau$  konvergieren sollte. Unter Berücksichtigung dieser Beschaffenheiten kann er durch die Formel [14, 28, 31]

$$\begin{aligned} \tau_{\text{eff}} &= 2\mu_{\text{eff}} [\mathbf{D} + N_p \mathbb{A}_4 : \mathbf{D} + N_s (\mathbb{A}_2 \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbb{A}_2)], \\ \mu_{\text{eff}} &= \nu(1 + \alpha H), \quad N_p = \frac{\alpha E}{1 + \alpha H}, \quad N_s = \frac{\alpha B}{1 + \alpha H} \end{aligned} \quad (2.11)$$

mit der dynamischen Viskosität  $\nu$  des Transportmediums und den nichtnegativen Materialkonstanten  $H, E, B \geq 0$  der Fibern genähert werden. Des Weiteren definiert  $\mathbb{A}_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$  bzw.  $\mathbb{A}_4 \in \mathbb{R}^{n \times n \times n \times n}$  den Orientierungstensor zweiter bzw. vierter Ordnung in Abhängigkeit von der lokalen Orientierungsverteilung  $\psi$ . Diese Tensoren werden im nächsten Abschnitt 3 definiert und genauer untersucht. Aufgrund der Existenz in der Definition (2.11) des effektiven Spannungstensors  $\tau_{\text{eff}}$  ist ein besonderes Augenmerk darauf zu legen, dass bei einer numerischen Simulation die Tensoren  $\mathbb{A}_2$  und  $\mathbb{A}_4$  ihre physikalischen Eigenschaften beibehalten.

## 2.2 Formelsammlung auf der Sphäre $\mathbb{S}^1$

Der Fokus dieser Arbeit wird wie im Abschnitt 2.1 erläutert auf der Simulation der Fokker-Planck-Gleichung (2.10) liegen. Sie beschreibt die Entwicklung der Orientierungszustände von Fibern in einer Fasersuspension und ist demnach in der Orientierungskomponente auf der Sphäre  $\mathbb{S}^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$  für  $n = 2, 3$  definiert. Aus diesem Grund wollen wir in diesem Abschnitt zunächst hilfreiche Formeln für die relevanten Operatoren zusammenfassen und uns dabei insbesondere auf den Spezialfall  $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$  beziehen.

Nach [8, 10] sind der **Flächengradient**, die **tangentiale Divergenz** und der **Laplace-Beltrami Operator** für eine  $\mathcal{C}^\infty$ -reguläre  $m$ -dimensionale Untermannigfaltigkeit  $M$ ,  $m \in \{1, \dots, n-1\}$ , im  $\mathbb{R}^n$  definiert durch

$$\nabla_M \hat{f}(p) = \nabla \bar{f}(p) - \nabla \bar{f}(p) \cdot \nu(p) \nu(p) \quad \text{für alle } \hat{f} \in \mathcal{C}^1(M), \quad (2.12)$$

$$\operatorname{div}_M \hat{X} = \operatorname{tr} \nabla_M \hat{X} \quad \text{für } \hat{X} \in \mathcal{C}^1(M; \mathbb{R}^n), \quad (2.13)$$

$$\Delta_M \hat{v} = \operatorname{div}_M (\nabla_M \hat{v}) \quad \text{für } \hat{v} \in \mathcal{C}^2(M) \quad (2.14)$$

mit dem kontinuierlichen Einheitsnormalenfeld  $\nu : M \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$  und einer glatten Erweiterung  $\bar{f}$  von  $\hat{f} : M \rightarrow \mathbb{R}$  auf eine  $m$ -dimensionale offene Umgebung von  $M$ , also  $\bar{f}|_M = \hat{f}$ . Diese Operatoren können mit einer lokalen Parametrisierung  $\varphi : U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow V \subset M$  von  $M$  dargestellt werden durch [8, 10]

$$(\nabla_M \hat{f}) \circ \varphi = D\varphi g^{-1} \nabla(\hat{f} \circ \varphi), \quad (2.15)$$

$$(\operatorname{div}_M \hat{X}) \circ \varphi = g^{kl} \partial_k \varphi \cdot \partial_l (\hat{X} \circ \varphi), \quad (2.16)$$

$$(\Delta_M \hat{v}) \circ \varphi = \frac{1}{\sqrt{\det g}} \sum_{i,j=1}^m \partial_i (\sqrt{\det g} g^{ij} \partial_j (\hat{v} \circ \varphi)) \quad (2.17)$$

mit der von  $\varphi$  induzierten Metrik  $g = D\varphi^\top D\varphi \in \mathbb{R}^{m \times m}$ .  $g^{ij}$  entspricht hierbei den Komponenten der Inversen von  $g$ . Sei nun außerdem  $M$  zusammenhängend, kompakt und ohne Rand, so gelten das Analogon der Greenschen Formeln [8, 10]

$$\int_M (\Delta_M \hat{v}) \hat{\eta} \, d\mu = - \int_M \nabla_M \hat{v} \cdot \nabla_M \hat{\eta} \, d\mu = \int_M \hat{v} \Delta_M \hat{\eta} \, d\mu \quad \text{für alle } \hat{\eta}, \hat{v} \in \mathcal{C}^2(M) \quad (2.18)$$

und des Gaußschen Satzes

$$\int_M \hat{\eta} \operatorname{div}_M \hat{X} \, d\mu = - \int_M \nabla_M \hat{\eta} \cdot \hat{X} \, d\mu \quad (2.19)$$

für alle  $\hat{\eta} \in \mathcal{C}^1(M)$  und tang. Vektorf.  $\hat{X} \in \mathcal{C}^1(M; \mathbb{R}^n)$ .

Für den zweidimensionalen Fall ist eine (lokale) Parametrisierung der Sphäre  $\mathbb{S}^1$  gegeben durch die Polarkoordinaten  $\varphi : [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$  mit

$$\varphi(\phi) = \mathbf{p}(\phi) = (\cos \phi, \sin \phi)^\top. \quad (2.20)$$

Damit ergibt sich die induzierte Metrik  $g = \sin^2 \phi + \cos^2 \phi = 1$  sowie

$$(\nabla_{\mathbb{S}} \hat{f}) \circ \varphi = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \end{pmatrix} \partial_\phi (\hat{f} \circ \varphi) =: \nabla_\phi (\hat{v} \circ \varphi), \quad (2.21)$$

$$(\operatorname{div}_{\mathbb{S}} \hat{X}) \circ \varphi = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \end{pmatrix} \cdot \partial_\phi (\hat{X} \circ \varphi) =: \operatorname{div}_\phi (\hat{X} \circ \varphi), \quad (2.22)$$

$$(\Delta_{\mathbb{S}} \hat{v}) \circ \varphi = \partial_\phi^2 (\hat{v} \circ \varphi) =: \Delta_\phi (\hat{v} \circ \varphi). \quad (2.23)$$

Im weiteren Verlauf der Arbeit werden wir anstelle  $\nabla_{\mathbb{S}}$ ,  $\operatorname{div}_{\mathbb{S}}$  bzw.  $\Delta_{\mathbb{S}}$  auch  $\nabla_{\mathbf{p}}$ ,  $\operatorname{div}_{\mathbf{p}}$  bzw.  $\Delta_{\mathbf{p}}$  schreiben.

## 2.3 Fehlerabschätzungen für die abgeschnittene Fourierreihe

Später werden wir uns bei dem Modell zur Simulation der Fokker-Planck-Gleichung (2.10) auf ebene Verteilungsfunktionen konzentrieren. Die Fibern strömen damit im zweidimensionalen Raum  $\mathbb{R}^2$  und ihre Orientierungen sind durch die Polarkoordinaten (vergleiche Abbildung 2.1b) mit dem Winkel  $\phi$  festgelegt. Es bietet sich daher an, die zugehörige (ortsunabhängige) Verteilungsfunktion  $\psi : [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{R}$  durch eine Linearkombination aus Fourierbasisfunktionen zu approximieren, welche im Idealfall mit der abgeschnittenen Fourierreihe übereinstimmt. Für Konvergenzaussagen einer solchen Näherung werden wir hierzu an dieser Stelle einige Fehlerabschätzungen der abgeschnittenen Fourierreihe festhalten [15].

Jede quadratintegrale Funktion  $u : [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{R}$  kann durch ihre eindeutige Fourierreihe dargestellt werden (siehe Abschnitt 3)

$$u(x) = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)). \quad (2.24)$$

Zum Abschneiden dieser Reihendarstellung definieren wir für  $N_{\mathbf{p}} \in \mathbb{N}_0$  den Operator  $\mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} : \mathcal{L}^2[0, 2\pi) \rightarrow \mathcal{L}^2[0, 2\pi)$  durch

$$\mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} u(x) := a_0 + \sum_{k=1}^{N_{\mathbf{p}}} (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)), \quad (2.25)$$

für welchen nach der Definition der Fourierkoeffizienten (3.3) mit der parsevalschen Identität trivialerweise gilt

$$\|u - \mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} u\|_{\mathcal{L}^2}^2 = \left\| \sum_{k > N_{\mathbf{p}}} a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx) \right\|_{\mathcal{L}^2}^2 = \pi \sum_{k > N_{\mathbf{p}}} (a_k^2 + b_k^2). \quad (2.26)$$

Weiter gilt aufgrund der Gleichungen (3.3) für  $k \in \mathbb{N}$

$$|a_k| = \begin{cases} \frac{1}{\pi k^q} \left| \int_0^{2\pi} u^{(q)}(x) \cos(kx) dx \right| & \text{falls } q \text{ gerade,} \\ \frac{1}{\pi k^q} \left| \int_0^{2\pi} u^{(q)}(x) \sin(kx) dx \right| & \text{falls } q \text{ ungerade,} \end{cases} \quad (2.27a)$$

$$|b_k| = \begin{cases} \frac{1}{\pi k^q} \left| \int_0^{2\pi} u^{(q)}(x) \sin(kx) dx \right| & \text{falls } q \text{ gerade,} \\ \frac{1}{\pi k^q} \left| \int_0^{2\pi} u^{(q)}(x) \cos(kx) dx \right| & \text{falls } q \text{ ungerade} \end{cases} \quad (2.27b)$$

mit der  $q$ -ten Ableitung  $u^{(q)}$  von  $u$ ,  $q \in \mathbb{N}_0$ . Damit lässt sich eine erste Abschätzung für den Abschneidefehler herleiten [15]

$$\|u - \mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} u\|_{\mathcal{L}^2} \leq C_q N_{\mathbf{p}}^{-q} \|u^{(q)}\|_{\mathcal{L}^2} \quad (2.28)$$

mit einer von  $q$  abhängigen Konstanten  $C_q$ . Falls  $u$  analytisch ist, kann die Fehlerabschätzung [30]

$$\|u - \mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} u\|_{\mathcal{L}^2} \leq C_q N_{\mathbf{p}}^{-q} \|u^{(q)}\|_{\mathcal{L}^2} \sim C_q \frac{q!}{N_{\mathbf{p}}^q} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \sim C e^{-c N_{\mathbf{p}}} \|u\|_{\mathcal{L}^2} \quad (2.29)$$

mit einer weiteren Konstanten  $c \neq c(N_{\mathbf{p}})$  hergeleitet werden, die von der analytischen Lösung  $u$  abhängt und damit die exponentielle Konvergenz des Fehlers bei zunehmender Ordnung  $N_{\mathbf{p}}$  widerspiegelt. Durch wiederholtes Anwenden der Ungleichung (2.28) gelten außerdem für  $0 \leq k \leq l < \infty$  die Eigenschaften [15]

$$\|u - \mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} u\|_{\mathcal{W}^{k,2}} \leq C_{k,l} N_{\mathbf{p}}^{k-l} \|u\|_{\mathcal{W}^{l,2}}. \quad (2.30)$$

Canuto et al. [7] haben des Weiteren eine punktweise Konvergenz der abgeschnittenen Fourierreihe bewiesen

$$\|u - \mathcal{P}_{N_{\mathbf{p}}} u\|_{\mathcal{L}^\infty} \leq C_q (1 + \log N_{\mathbf{p}}) N_{\mathbf{p}}^{-q} \|u^{(q)}\|_{\mathcal{L}^\infty}. \quad (2.31)$$

Wir werden später im Abschnitt 5 auf die in diesem Abschnitt festgehaltenen Fehlerabschätzungen zurückkommen und dabei die Konvergenz des im Abschnitt 4 hergeleiteten numerischen Verfahrens mit derjenigen der abgeschnittenen Fourierreihe vergleichen. Hierbei sei bereits angemerkt, dass die Konvergenzen (2.28), (2.30) und (2.31) an den von uns untersuchten Beispielen nicht zu erkennen sind und stattdessen die exponentielle Konvergenz (2.29) erfasst werden kann.

Galerkin-Spektralverfahren für die  
Fokker-Planck-Gleichung

Lohmann, C.

2016, XI, 95 S. 15 Abb. in Farbe., Softcover

ISBN: 978-3-658-13310-8