

# **Schallausbreitung in der Methode der Finiten Massen**

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades  
eines Doktors der Naturwissenschaften  
der Fakultät für Mathematik und Physik  
der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

vorgelegt von  
Gerd Sautter  
aus Eningen

Mai 2004

Dissertation eingereicht am: 06. Mai 2004

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Juli 2004

Dekan: Professor Dr. Herbert Müther

1. Berichterstatter: Professor Dr. Harry Yserentant

2. Berichterstatter: Professor Dr. Christian Lubich

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Die Methode der Finiten Massen für kompressible Fluide</b>	<b>5</b>
2.1	Massenpakete und Formfunktionen . . . . .	5
2.1.1	Wahl der Formfunktion . . . . .	7
2.1.2	Eigenschaften von B-Splines . . . . .	8
2.2	Massendichte, Geschwindigkeit und lokale Massenanteile . . . . .	9
2.3	Bewegungsgleichungen für adiabatische Fluide . . . . .	10
2.4	Wärmeerzeugung in Stößen . . . . .	11
2.5	Viskosität und Wärmeleitung . . . . .	13
2.6	Erhaltungseigenschaften . . . . .	14
2.6.1	Massenerhaltung . . . . .	14
2.6.2	Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls . . . . .	15
2.6.3	Diskrete Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Die akustische Wellengleichung</b>	<b>18</b>
3.1	Herleitung der akustischen Wellengleichung . . . . .	19
3.2	Schwache Formulierung der akustischen Wellengleichung . . . . .	23
3.2.1	Die Bilinearform der inneren Energie . . . . .	24
3.2.2	Schwache Formulierung des Anfangswertproblems . . . . .	25
3.2.3	Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität der milden Lösung . . . . .	26
3.3	Abstrakte Wellengleichungen . . . . .	27
3.3.1	Das abstrakte Cauchyproblem . . . . .	28
3.3.2	Existenz- und Eindeutigkeit der Lösung . . . . .	29
3.3.3	Stabilitätsabschätzungen in der Energiehalbnorm . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Schallausbreitung in adiabatischen Fluiden</b>	<b>34</b>
4.1	Schallausbreitung mit Teilchen konstanter Größe . . . . .	35
4.1.1	Die linearisierten Bewegungsgleichungen über regelmäßigen Gittern . . . . .	35
4.1.2	Stabilität der Finiten Massen-Diskretisierung . . . . .	38
4.1.3	Konsistenz und Konvergenz mit der akustischen Wellengleichung . . . . .	39

4.1.4	Superkonvergenz in den Gitterpunkten . . . . .	40
4.2	Schallausbreitung mit deformierbaren Teilchen . . . . .	42
4.2.1	Linearisierung der Kräfte und Drehmomente . . . . .	42
4.2.2	Die linearisierten Bewegungsgleichungen . . . . .	49
4.2.3	Energieerhaltung und Stabilität . . . . .	52
4.2.4	Die linearisierten Bewegungsgleichungen über regelmäßigen Gittern	55
4.2.5	Konsistenz und Konvergenz mit der akustischen Wellengleichung und ihrer Ortsableitung . . . . .	57
4.3	Numerische Simulation . . . . .	66
<b>5</b>	<b>Galerkin Diskretisierung</b>	<b>68</b>
5.1	Übereinstimmung der linearisierten Kräfte und Drehmomente . . . . .	69
5.2	Stabilität der Semidiskretisierung . . . . .	72
5.3	Konvergenz der Semidiskretisierung . . . . .	73
5.3.1	Abschätzungen des Fehlers $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \ \mathbf{u} - \mathbf{v}_h\ _{H^1(\mathbb{R}^d)}$ . . . . .	75
5.3.2	Konvergenzaussagen in der Energiehalbnorm . . . . .	87
<b>6</b>	<b>Die Methode der Finiten Massen für hyperelastische Materialien</b>	<b>90</b>
6.1	Die Deformation . . . . .	90
6.2	Die innere Energie . . . . .	91
6.3	Die Bewegungsgleichungen hyperelastischer Materialien . . . . .	92
6.4	Externe Kräfte . . . . .	93
<b>7</b>	<b>Schallausbreitung in hyperelastischen Materialien</b>	<b>95</b>
7.1	Die linearisierten Bewegungsgleichungen über regelmäßigen Gittern . . . . .	96
7.2	Energieerhaltung und Stabilität der Finiten Massen- Diskretisierung . . . . .	101
7.3	Konsistenz und Konvergenz mit der linearen Elastizitätsgleichung . . . . .	103
<b>A</b>	<b>Einführung in die Elastizitätstheorie</b>	<b>107</b>
A.1	Kinematik und starre Deformationen . . . . .	107
A.2	Die Gleichgewichtsbedingungen . . . . .	109
A.2.1	Das Axiom des statischen Gleichgewichts . . . . .	109
A.2.2	Das Prinzip der virtuellen Arbeit . . . . .	111
A.2.3	Die Piola-Kirchhoff-Transformation . . . . .	111
A.2.4	Äußere Kräfte . . . . .	113
A.3	Materialgesetze . . . . .	115
A.3.1	Elastische Materialien . . . . .	115
A.3.2	Hyperelastische Materialien . . . . .	121

---

A.3.3	St. Venant-Kirchhoff Materialien . . . . .	124
A.4	Lineare Elastizitätstheorie . . . . .	125
<b>B</b>	<b>Bezeichnungen</b>	<b>127</b>
B.1	Allgemeine Konventionen . . . . .	127
B.2	Differentialkalkül . . . . .	128
B.3	Funktionenräume . . . . .	128
B.4	Methode der Finiten Massen . . . . .	129
B.4.1	Teilchengrößen . . . . .	129
B.4.2	Felder . . . . .	129
B.4.3	Energien . . . . .	130
B.5	Elastizität . . . . .	130
<b>C</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>131</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Die Entwicklung des Schalls als Folge von Schwingungen eines Gases oder eines Fluids war bereits in der Antike bekannt. Schon damals gelangte man zu der heute grundlegenden Erkenntnis, daß sich der Schall kugelförmig ausbreitet und lies dieses Wissen in den naturakustischen Theaterbau einfließen. Am Grundriß des zu dieser Zeit entstandenen Dionysos Theaters, bei dem das Auditorium halbkreisförmig um die Orchestra angeordnet ist, kann man dies heute noch erkennen. Es dauerte jedoch bis ins 18. Jahrhundert ehe ein mathematisches Modell zur Beschreibung der Schallausbreitung entwickelt werden konnte. Damals war es Leonhard Euler [Eul59], der im Jahre 1759 erstmals die eindimensionale Wellengleichung für die Schallausbreitung publizierte.

In der Zwischenzeit wurde die Eulersche Theorie verallgemeinert und man ist in der Lage, die Strömung eines Gases oder eines Fluids vollständig zu beschreiben, in dem man das Geschehen in der Umgebung ortsfester Punkte betrachtet. Auf diese Weise wird man auf die Kontinuitätsgleichung und die Newtonsche Bewegungsgleichung geführt, die das Fundament der Strömungsmechanik bilden. Je nachdem, ob Viskosität eine Rolle spielt oder nicht, ergeben sich hieraus die Euler- oder Navier-Stokes-Gleichungen. Diese Differentialgleichungen bilden dann die Grundlage numerischer Verfahren wie der Finite-Differenzen, Finite-Volumen oder Finite-Element-Methoden, die auf einer Diskretisierung des Raumes basieren und weite Verbreitung in den Ingenieurwissenschaften gefunden haben. Leider besitzt der Eulersche Zugang auch erhebliche Nachteile, was sich insbesondere in den noch immer unbefriedigend geklärten Existenz- und Eindeutigkeitsfragen der Navier-Stokes-Gleichungen widerspiegelt.

Einen alternativen Zugang zur Beschreibung der Bewegung von Fluiden bietet neben dem Eulerschen Modell das Lagrangesche Modell. Es verfolgt die Bewegung der Masse selbst und führt deshalb oft zu einer geschmeidigeren Form der resultierenden partiellen Differentialgleichungen. Ein sehr populäres Verfahren dieser Art ist die Smoothed Particle Hydrodynamics [Mon92], das in einzelnen Gebieten der Astrophysik sehr häufig zur Anwendung gelangt.

Mit der Methode der Finiten Massen hat H. Yserentant [Yse97a], [Yse97b] Ende der 90er Jahre ein neues Lagrangesches Verfahren zur Simulation kompressibler Strömungen entwickelt, das seine endgültige Reife in der 2000 veröffentlichten Arbeit [GLY00] erlangt hat. Die grundlegende Idee dieses Verfahrens besteht darin, die in der Strömung vorhandene Gesamtmasse in kleine, sich überlappende Massenpakete aufzuteilen. Diese Massenpakete, auch Teilchen genannt, bewegen sich unter dem Einfluß von inneren und äußeren Kräften, sowie den Gesetzen der Thermodynamik. Sie können sich zusammenziehen, ausdehnen, gegenseitig blockieren, rotieren und sogar linear ihre Form verändern. Ähnlich wie bei Finite-Element-Methoden wird ihre innere Massenverteilung durch eine Formfunktion mit kompaktem Träger beschrieben. Eine attraktive Eigenschaft dieses Ansatzes besteht in

der Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls. Aber auch die Gesamtmasse des Systems bleibt bei diesem Ansatz erhalten, so daß die aus dem Teilchenmodell hervorgehenden diskreten Lösungen die Kontinuitätsgleichung automatisch erfüllen.

In einem kompressiblen Fluid wird die Schallausbreitung durch die akustische Wellengleichung beschrieben, die aus der Linearisierung der Euler Gleichungen um den Zustand konstanter Massendichte und Geschwindigkeit Null hervorgeht. Von einem Lagrangeschen Verfahren zur Simulation kompressibler Strömungen wie der Methode der Finiten Massen erwartet man daher, daß es die Schallausbreitung in einem adiabatischen Fluid korrekt erfaßt und die um den Gleichgewichtszustand konstanter Massendichte linearisierten Bewegungsgleichungen eine stabile und konvergente Diskretisierung der akustischen Wellengleichung liefern.

Der erste Teil dieser Arbeit zeigt die Fähigkeit der Methode der Finiten Massen die Schallausbreitung in adiabatischen Fluiden in korrekter Form zu reproduzieren und führt eine umfangreiche Stabilitäts- und Konvergenzanalyse durch.

Hierfür wird in Kapitel zwei die Methode der Finiten Massen zunächst kurz vorgestellt. Die Bewegungsgleichungen adiabatischer Fluide werden hergeleitet und in Kapitel vier um den Gleichgewichtszustand konstanter Massendichte linearisiert. Dabei unterscheidet man zwischen dem vereinfachten Teilchenmodell mit ausschließlich translatorischen Freiheitsgraden und dem vollständigen Teilchenmodell, bei dem sich die Teilchen zusätzlich linear deformieren und Verformungen innerhalb der Strömung wiedergeben können. In Kapitel 4.1 beziehungsweise Kapitel 4.2 werden diese getrennt voneinander untersucht. Schnell stellt sich heraus, daß beide Linearisierungen stabil sind. Die kinetische Energie ist nämlich für alle Zeiten durch die entsprechende linearisierte Gesamtenergie des Systems beschränkt. Bilden die Teilchen in der Gleichgewichtslage ein unendlich ausgedehntes, regelmäßiges Gitter, so gehen die linearisierten Bewegungsgleichungen in beiden Teilchenmodellen in ein einfaches Differenzenverfahren über.

Beschränkt man sich auf Teilchen, die ausschließlich translatorische Freiheitsgrade besitzen und sich im Raum zwar frei bewegen, dabei ihre Form jedoch nicht verändern können, so handelt es sich um eine Diskretisierung zweiter Ordnung der akustischen Wellengleichung des Geschwindigkeitsfeldes. Angesichts des Variationscharakters der Methode der Finiten Massen überrascht dieses Ergebnis nicht sonderlich und wurde bereits in [Yse01] erkannt. Leider reduziert die Tatsache, daß die Teilchen als unabhängige Einheiten aufgefaßt werden und man mit der Summe der kinetischen Energien der Einzelteilchen in die Lagrange-funktion eingeht, die Konvergenzordnung des Verfahrens erheblich. Durch geringfügige Modifikation des Teilchenmodells, bei der man stattdessen mit der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie in die Lagrange-funktion eingeht, läßt sich jedoch eine beliebig hohe Konvergenzrate erzielen. Es liegt sogar Superkonvergenz in den Gitterpunkten vor.

Arbeitet man mit dem allgemeinen Modell deformierbarer Teilchen, so konvergieren die Lösungen des zugrunde liegenden Differenzenverfahrens in den Teilchenpositionen immer noch quadratisch gegen die Lösungen der akustischen Wellengleichung (des Geschwindigkeitsfeldes). Da es sich bei dem Teilchenmodell mit ausschließlich translatorischen Freiheitsgraden um den Spezialfall nichtdeformierbarer Teilchen handelt, ist dieses Ergebnis auch zu erwarten. Darüberhinaus liefert das Differenzenverfahren in den Teilchendeformationen eine Diskretisierung erster Ordnung des Ortsgradienten der akustischen Wellengleichung. Eine Erläuterung der effizienten numerischen Realisierung in Kapitel 4.3 rundet das vierte



Kapitel ab.

Auch im allgemeinen Modell der Methode der Finiten Massen kann durch entsprechende Modifikation wieder eine beliebig hohe Konvergenzrate erzielt werden. Die entscheidende Idee besteht abermals darin, die Lagrange-Funktion aus der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie zu bilden. Das dadurch resultierende Differenzenverfahren wird im Gegensatz zu Kapitel vier nicht direkt untersucht, sondern als Galerkin-Diskretisierung der akustischen Wellengleichung interpretiert und in Kapitel fünf ausführlich diskutiert. Mit den in Kapitel drei gewonnenen Erkenntnissen über die akustische Wellengleichung ist dies im Wesentlichen aus zweierlei Gründen möglich. Zum einen besitzt die innere Energie der Galerkin-Diskretisierung über einem geeignet gewählten Ansatzfunktionsraum dieselbe quadratische Entwicklung um den Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte wie die innere Energie der Methode der Finiten Massen. Zum anderen induziert die innere Energie des Systems eine Bilinearform, die eine schwache Formulierung der akustischen Wellengleichung in geeigneten Hilberträumen gestattet und damit eine Galerkin-Diskretisierung überhaupt erst möglich macht. Das zugehörige Anfangswertproblem besitzt eine eindeutig milde Lösung und genügt einer kontinuierlichen Stabilitätsabschätzung. Wegen der Abgeschlossenheit des gewählten Ansatzfunktionsraums überträgt sich die kontinuierliche Stabilität auf die Semi-diskretisierung und durch Konstruktion geeigneter Quasiinterpolanten ist man in der Lage, Konvergenzaussagen in der von der Bilinearform induzierten Energiehalbnorm treffen zu können. Auch hier kann man wieder mit dem vollen Ansatzfunktionsraum arbeiten oder diesen auf Elemente mit ausschließlich positionellen Freiheitsgraden einschränken. Letztere führen unter geeigneten Voraussetzungen bereits auf beliebig gute Konvergenzraten. Besteht die Formfunktion etwa aus einem Tensorprodukt von B-Splines zweiter Ordnung, so ist die Konvergenz quadratisch, während sie für B-Splines dritter Ordnung bereits kubisch ist. Mit vollen Ansatzfunktionen erhöht sich diese Konvergenzrate in zwei- und dreidimensionalen Strömungen sogar noch um eine Ordnung.

Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der Schallausbreitung in hyperelastischen Materialien. Dabei handelt es sich um eine spezielle Klasse elastischer Materialien, deren Schallausbreitung bekanntlich durch die lineare Elastizitätsgleichung beschrieben wird. Ihre wichtigsten Vertreter sind die St. Venant-Kirchhoff-Materialien, zu denen die bedeutenden Werkstoffe Eisen und Aluminium gehören.

Bevor in Kapitel sechs die Schallausbreitung für diese Materialien diskutiert wird, muß in Kapitel fünf die Methode der Finiten Massen für hyperelastische Materialien eingeführt werden. Da sich hyperelastische Materialien durch die Existenz eines Energiefunktional auszeichnen, das lediglich vom Gradienten der Deformation abhängig ist, sind diese für einen Lagrangeschen Ansatz geradezu prädestiniert. Die innere Energie eines hyperelastischen Materials wird dann durch dieses Energiefunktional eindeutig bestimmt.

Auch für isotrope, hyperelastische Materialien erfaßt die Methode der Finiten Massen die Schallausbreitung in exakter Form. Für Teilchen, die ausschließlich translatorische Freiheitsgrade besitzen, resultiert dasselbe Konvergenzverhalten wie bei adiabatischen Fluiden. Unter geeigneten Voraussetzungen an die Formfunktion konvergieren die Lösungen der linearisierten Bewegungsgleichungen über einem regelmäßigen Gitter quadratisch gegen die Lösungen der linearen Elastizitätsgleichung.

## Danksagung

*Ich sage nur ein Wort: Vielen Dank.  
Horst Hrubesch, Fußballer*

Bei Herrn Professor Dr. Harry Yserentant möchte ich mich ganz herzlich für die Möglichkeit dieser Promotion im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 382 der Universität Tübingen bedanken. Sein umfangreiches Wissen war mir bei der Entstehung der vorliegenden Arbeit stets Ansporn und eine große Hilfe. Mein Dank gilt ferner Dr. Peter Leinen und Dr. Markus Klingler, die mir bei der Implementierung der Methode der Finiten Massen einige Tipps geben konnten und auch sonst für ein fachliches Gespräch immer Zeit fanden. Bedanken möchte ich mich auch bei Dr. Markus Wacker für die wertvollen mathematischen Diskussionen im Bereich der Operatorhalbgruppen sowie Dr. Udo Riese für die sorgfältige Lektüre des Manuskripts. Bei allen anderen Mitgliedern des Arbeitsbereichs Numerik bedanke ich mich für Anregungen und die freundschaftliche Atmosphäre, in der diese Arbeit entstehen konnte.

## Kapitel 2

# Die Methode der Finiten Massen für kompressible Fluide

Die Methode der Finiten Massen ist eine Lagrangesche Methode zur numerischen Simulation von Fluiden, die mit entsprechenden Modifikationen auch für hyperelastische Materialien geeignet ist. Sie wurde von H. Yserentant in zahlreichen Arbeiten Ende der 90er Jahre für kompressible Fluide entwickelt. Im Gegensatz zu Finite Volumen- und Finite Element Methoden, die auf einer Diskretisierung des Raumes basieren, besteht die Idee der Methode der Finiten Massen darin, die Gesamtmasse auf endlich viele Massenpakete, auch Teilchen genannt, aufzuteilen. Während in den ersten Arbeiten [Ys97a], [Ys97b] keinerlei Verformungen der Teilchen zugelassen waren und diese lediglich ihre Orientierung im Raum ändern konnten, wurden bereits in den darauffolgenden Arbeiten [Ys99a], [Ys99b] skalare Größenänderungen der Teilchen möglich. In [GLY00] schließlich sind lineare Deformationen der Teilchen erlaubt. Die obigen Quellen beschreiben das Konvergenzverhalten in Form von Kompaktheitsresultaten und motivieren die verwendeten Kraftterme. Weitere Arbeiten zur Methode der Finiten Massen beschäftigen sich mit einer Konvergenzanalyse in externen Kraft- und Geschwindigkeitsfeldern [Yse00] und der Schallausbreitung in kompressiblen Fluiden [Yse01] mit Teilchen konstanter Größe. Auch auf astrophysikalische Problemstellungen wurde die Methode in jüngster Vergangenheit angewandt [KI03a], [KI03b] und deren Eignung zur Simulation entsprechender Strömungen gezeigt.

In diesem Kapitel wird die Methode der Finiten Massen und deren wichtigste Eigenschaften für kompressible Fluide kurz vorgestellt. Da im vierten Kapitel eine Untersuchung der Schallausbreitung in rein adiabatischen Fluiden durchgeführt wird, stehen bei der folgenden Einführung adiabatische Fluide im Vordergrund. Aber auch die Fähigkeit der Methode der Finiten Massen zur Modellierung von Stößen und viskosen Fluiden soll hier kurz erläutert werden. Grundlagen zur Fluidodynamik finden sich in den Standardwerken von Chorin und Marsden [ChMa93] oder Courant und Friedrichs [CoFr48]. Zur Einführung in die Kontinuumsmechanik sei auf Gurtin [Gur81] oder Chadwick [Cha76] verwiesen.

### 2.1 Massenpakete und Formfunktionen

Massenpakete bezeichnen wir als Teilchen. Diese bewegen sich unter dem Einfluß von inneren und äußeren Kräften, sowie den Gesetzen der Thermodynamik. Sie können sich überlappen, ausdehnen, zusammenziehen, rotieren und sogar linear ihre Form verändern. Ihre innere Massenverteilung wird durch eine Lipschitz-stetige, stückweise stetig differenzierbare Formfunktion  $\hat{\psi}_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger beschrieben. Dabei verlangt man Nichtnegativität als natürliche Forderung für Massendichten, ausreichende Glattheit für die nach-

stehend hergeleiteten Bewegungsgleichungen sowie einen kompakten Träger aus Gründen der Implementierbarkeit. Es bezeichne

$$m_i = \int \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (2.1)$$

die Masse des  $i$ -ten Teilchens, dessen Punkte  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$  sich entlang der Trajektorien

$$t \rightarrow \mathbf{q}_i(t) + \mathbf{H}_i(t)\mathbf{y}, \quad \det \mathbf{H}_i(t) > 0 \quad (2.2)$$

bewegen. Damit bleibt für alle Zeiten die Orientierung der Teilchen erhalten und der Vektor  $\mathbf{q}_i(t)$  bestimmt die Position des  $i$ -ten Teilchens im Raum, während die  $d \times d$ -Matrix  $\mathbf{H}_i(t)$  die lineare Verformung des Teilchens angibt. Zwischen der Körperkoordinate und der Ortskoordinate zur Zeit  $t$  besteht der Zusammenhang

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}_i(t)^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i(t)).$$

Für die lokale Massendichte des  $i$ -ten Teilchens zur Zeit  $t$  machen wir den Ansatz

$$\mathbf{x} \rightarrow (\det \mathbf{H}_i(t))^{-1} \widehat{\psi}_i(\mathbf{H}_i(t)^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i(t)))$$

und begnügen uns damit, die Massenverteilung aller Teilchen durch ein und dieselbe Formfunktion

$$\widehat{\psi}_i := m_i \psi \quad (2.3)$$

zu beschreiben, wobei wir die Normierungsbedingungen

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

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

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

mit einem positiven, skalaren Wert  $J$  machen. Dies ermöglicht uns eine geschmeidige Darstellung der Kraftterme. Es gilt folgendes Lemma.

**Lemma 2.1.1.** *Unter den obigen Voraussetzungen hat jedes Teilchen den Schwerpunkt  $\mathbf{q}_i$ .*

*Beweis.* Nach der Definition des Schwerpunktes eines Kontinuums und (2.3) gilt unter Verwendung von (2.4) und (2.5)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m_i} \int (\det \mathbf{H}_i(t))^{-1} \widehat{\psi}_i(\mathbf{H}_i(t)^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i(t))) \mathbf{x} d\mathbf{x} \\ &= \int (\det \mathbf{H}_i(t))^{-1} \psi(\mathbf{y}) (\mathbf{q}_i(t) + \mathbf{H}_i(t)\mathbf{y}) (\det \mathbf{H}_i(t)) d\mathbf{y} \\ &= \mathbf{q}_i(t) \int \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} + \mathbf{H}_i(t) \int \psi(\mathbf{y}) \mathbf{y} d\mathbf{y} = \mathbf{q}_i(t). \end{aligned} \quad (2.7)$$

□

**Bemerkung.** Die obigen Normierungsbedingungen stellen keinerlei Einschränkung an die Form der Teilchen dar, da die erforderlichen Eigenschaften durch entsprechende Umskalierungen stets erreicht werden können. Eine ausführliche Erläuterung dieses Umstandes findet man in [Gau00].

### 2.1.1 Wahl der Formfunktion

Für die Wahl der Formfunktionen  $\psi$  sind prinzipiell viele Möglichkeiten denkbar. Als besonders geeignet erweisen sich jedoch Tensorprodukte von eindimensionalen B-Splines. Sie sind je nach Ordnung entsprechend glatt und haben auf regelmäßigen Gittern hervorragende Approximationseigenschaften, die in späteren Kapiteln von Bedeutung sein werden. Man fordert, daß das Integral über einen Spline stets gleich eins ist und definiert nach [Wer92] oder [Sch46] mit charakteristischen Funktionen auf Intervallen rekursiv

$$B_{k,1} := \mathbb{1}_{[k,k+1]},$$

$$B_{k,l+1} := \mathbb{1}_{[k,k+l]} \frac{x-k}{l} B_{k,l} + \mathbb{1}_{[k+1,k+l+1]} \frac{k+l+1-x}{l} B_{k+1,l}.$$

Der regelmäßige B-Spline der Ordnung  $n$  auf dem Intervall  $[0,n]$  ist dann durch  $B_{0,n}$  gegeben. Verschiebt man die  $B_{0,n}$ -Splines auf den Intervallmittelpunkt 0, so erhält man die  $B_n$ -Splines. Ausgehend von der charakteristischen Funktion  $B_1$  auf  $[-1/2, 1/2]$  lassen sich diese direkt mit der Rekursionsformel

$$B_{n+1}(x) = \int B_n(x-y) B_1(y) dy \quad (2.8)$$

berechnen und besitzen demnach die Faltungsdarstellung

$$B_n = \underbrace{B_1 * \cdots * B_1}_{n \text{ mal}}.$$

Der  $B_n$ -Spline verschwindet für  $|x| > n/2$  und ist bereits für  $n \geq 3$  eine  $(n-2)$ -mal stetig differenzierbare Funktion. Seine wichtigsten Vertreter sind der 1B-Spline

$$B_2(x) = \begin{cases} 1 - |x| & : |x| \leq 1, \\ 0 & : \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.9)$$

der 2B-Spline

$$B_3(x) = \begin{cases} \frac{3}{4} - |x|^2 & : |x| \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{2}|x|^2 - \frac{3}{2}|x| + \frac{9}{8} & : \frac{1}{2} < |x| \leq \frac{3}{2}, \\ 0 & : \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.10)$$

sowie der 3B-Spline

$$B_4(x) = \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{1}{2}|x|^2(2-|x|) & : |x| \leq 1, \\ \frac{1}{6}(2-|x|)^3 & : 1 < |x| \leq 2, \\ 0 & : \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.11)$$

Bei der Methode der Finiten Massen ist eine Normierung des Trägers auf  $[-1,1]$  vorteilhaft, was durch

$$\tilde{B}_m(x) = \frac{m}{2} B_m\left(\frac{mx}{2}\right)$$

leicht erreicht werden kann, im Folgenden jedoch nicht von Bedeutung sein wird. Natürlich erfüllen B-Splines und damit auch deren Tensorprodukte die Normierungsbedingungen (2.4), (2.5) und (2.6) und sind schon deshalb eine gute Wahl für  $\psi$ .

### 2.1.2 Eigenschaften von B-Splines

Über einem unendlich ausgedehnten Gitter besitzen B-Splines noch weitere vorteilhafte Eigenschaften, die in diesem Abschnitt angegeben werden und weitere Gründe für die Wahl der Formfunktion als Tensorprodukte von eindimensionalen B-Splines sind. So kann etwa für jedes  $n > 1$  durch entsprechende Skalierung stets

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} B_n(x - k) = 1 \quad (2.12)$$

erreicht werden. Aber auch andere Summen besitzen dann eine besonders einfache Form, wie folgender Satz zeigt.

**Satz 2.1.2.** *Unter der Voraussetzung (2.12) erfüllen die durch (2.8) rekursiv definierten  $B_n$ -Splines die folgenden Eigenschaften*

- (1) Für jedes  $n \geq 2$  ist  $\sum_{k \in \mathbb{Z}} k B_n(x - k) = x$ .
- (2) Für jedes  $n \geq 3$  ist  $\sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 B_n(x - k) = x^2 + \beta$  mit  $\beta = \sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 B_n(k)$ .
- (3) Für jedes  $n \geq 4$  ist  $\sum_{k \in \mathbb{Z}} k^3 B_n(x - k) = x^3 + \gamma x$  mit  $\gamma = 3\beta$ .

*Beweis.* Für jedes  $n \geq 2$  existieren Koeffizienten  $\alpha(k) \in \mathbb{R}$  mit  $\sum_{k \in \mathbb{Z}} \alpha(k) B_n(x - k) = x$ .

Dann ist

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \alpha(k+1) B_n(x - k) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \alpha(k+1) B_n((x+1) - (k+1)) \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \alpha(k) B_n((x+1) - k) = x+1 = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (\alpha(k) + 1) B_n(x - k), \end{aligned}$$

woraus durch Koeffizientenvergleich  $\alpha(k+1) = \alpha(k) + 1$  folgt. Induktiv erhält man daraus  $\alpha(k) = k + \alpha(0)$ . Da  $B_n$  gerade ist, verschwindet  $\sum_k k B_n(k)$  und in  $x = 0$  resultiert  $\alpha(0) = 0$ , womit (1) gezeigt ist. Zum Beweis von (2) seien Koeffizienten  $\alpha(k) \in \mathbb{R}$  derart gewählt, daß  $\sum_k \alpha(k) B_n(x - k) = x^2$  für jedes  $n \geq 3$  gilt. Analog erhält man nach Koeffizientenvergleich  $\alpha(k+1) = \alpha(k) + 2k + 1$ , woraus durch Induktion  $\alpha(k) = k^2 - \beta$  und insbesondere in  $x = 0$

$$0 = \sum_k (k^2 - \beta) B_n(-k) = \sum_k k^2 B_n(k) - \beta \sum_k B_n(-k)$$

folgt. Bleibt noch (3) zu zeigen. Mit völlig analoger Vorgehensweise wählt man zunächst wiederum reelle Koeffizienten  $\alpha(k)$ , die  $\sum_k \alpha(k) B_n(x - k) = y^2$  erfüllen und erhält nach Rechnung durch Koeffizientenvergleich  $\alpha(k+1) = \alpha(k) + (3k^2 - \beta) + 3k + 1$ , woraus induktiv schließlich  $\alpha(k) = k^3 - \gamma k$  mit  $\gamma = 3\beta$  folgt.  $\square$

## 2.2 Massendichte, Geschwindigkeit und lokale Massenanteile

Stets bezeichne

$$\psi_i(\mathbf{x}) := (\det \mathbf{H}_i)^{-1} \widehat{\psi}_i(\mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i)) = (\det \mathbf{H}_i)^{-1} \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \quad (2.13)$$

die im Raum transformierte Formfunktion. Bezeichnet  $\nabla$  den Gradienten bezüglich  $\mathbf{x}$ , so besitzt sie die Ableitungen

$$\nabla \psi_i = \frac{\mathbf{H}_i^{-T}}{\det \mathbf{H}_i} (\nabla \widehat{\psi}_i), \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} = -\nabla \psi_i, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} = -[\nabla \psi_i][\mathbf{y}]^T - \psi_i \mathbf{H}_i^{-T}, \quad (2.16)$$

was in [GLY00] nachgelesen werden kann. Die Gesamtmasendichte

$$\rho(\mathbf{x}, t) := \sum_i \psi_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.17)$$

ergibt sich durch Superposition der lokalen Massendichten der einzelnen Teilchen. Die Punkte  $\mathbf{y}$  des  $i$ -ten Teilchens haben die Geschwindigkeit

$$t \rightarrow \dot{\mathbf{q}}_i(t) + \dot{\mathbf{H}}_i(t) \mathbf{y},$$

woraus sich das Geschwindigkeitsfeld

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{x}, t) := \dot{\mathbf{q}}_i(t) + \dot{\mathbf{H}}_i(t) \mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i(t))$$

in Ortskoordinaten ableitet. Das Problem besteht nun darin, daß die Geschwindigkeiten sich überlagernder Teilchen unterschiedlich sein können und man deshalb Ortspunkten zunächst keine Geschwindigkeiten zuordnen kann. Der Ausweg besteht in der Definition des Massenfluß

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}_i(\mathbf{x}, t).$$

Mit Hilfe der lokalen Massenanteile

$$\chi_i(\mathbf{x}, t) := \frac{\psi_i(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \quad (2.18)$$

ist man dann in der Lage das globale Geschwindigkeitsfeld  $\mathbf{v}$ , welches durch die Beziehung Fluß = Masse · Geschwindigkeit

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

definiert ist, durch die konvexe Linearkombination

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \chi_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}_i(\mathbf{x}, t)$$

darzustellen. Da die lokalen Massenanteile und ihre Gradienten in den Kraftintegralen auftreten werden, ist es sinnvoll, sie außerhalb ihres Trägers durch 0 auf den gesamten Raum fortzusetzen.

### 2.3 Bewegungsgleichungen für adiabatische Fluide

Um den thermodynamischen Zustand eines kompressiblen Fluids vollständig beschreiben zu können, benötigt man außer der Massendichte noch eine zweite thermodynamische Größe, wie etwa die Temperatur oder den Druck. Die Methode der Finiten Massen verwendet hierfür die Entropiedichte

$$s(\mathbf{x}, t) := \sum_i S_i(t) \psi_i(\mathbf{x}, t).$$

Dabei bezeichnet  $S_i(t)$  die zur Zeit  $t$  konstante spezifische Entropie der einzelnen Teilchen. Der Druck  $\pi(\rho, s)$ , die absolute Temperatur  $\theta(\rho, s)$  sowie die innere Energie  $\varepsilon(\rho, s)$  (pro Einheitsvolumen) sind skalare Funktionen der Massendichte und der Entropiedichte. Diese Funktionen sind nicht unabhängig voneinander, sondern durch die thermodynamische Relation

$$\theta D\left(\frac{s}{\rho}\right) = D\left(\frac{\varepsilon}{\rho}\right) + \pi D\left(\frac{1}{\rho}\right)$$

der absoluten Differentiale der spezifischen Entropie  $s/\rho$ , der spezifischen inneren Energie  $\varepsilon/\rho$  und dem spezifischen Volumen  $1/\rho$  miteinander verknüpft. Stellt man die dabei auftretenden 1-Formen in den Termen  $D\rho$  und  $Ds$  dar, so ist diese äquivalent zu den Gibbsschen Fundamentalrelationen der Thermodynamik

$$\pi = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \rho + \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} s - \varepsilon, \quad \theta = \frac{\partial \varepsilon}{\partial s}. \quad (2.19)$$

Bei einem rein adiabatischen Fluid ist die innere Energie  $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  lediglich eine Funktion der Massendichte  $\rho$ . Dies gilt dann auch für den Druck  $\pi(\rho)$  und die Gibbsschen Relationen (2.19) nehmen die Gestalt

$$\pi(\rho) = \varepsilon'(\rho)\rho - \varepsilon(\rho),$$

an. Fluide, bei denen der Druck lediglich von der Dichte abhängt, bezeichnet man auch als elastische Fluide. Diese finden sich in zahlreichen Anwendungen wieder und beinhalten etwa die isentropen Gase. Wir nehmen stets an, daß  $\varepsilon$  eine strikt positive, einmal stetig differenzierbare Funktion von  $\rho$  ist, die für  $\rho \leq 0$  verschwindet. Ferner existiere  $\varepsilon''(\rho)$  und sei für  $\rho > 0$  strikt positiv. Ein typisches Beispiel hierfür sind die inneren Energien

$$\varepsilon(\rho) = \frac{\pi_0}{\gamma - 1} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^\gamma, \quad \rho > 0, \gamma > 1, \quad (2.20)$$

wie sie bei idealen Gasen vorkommen.

Um nun für rein adiabatische Fluide die zugehörigen Bewegungsgleichungen abzuleiten, verwenden wir den klassischen Lagrange Formalismus. Ein Massenpunkt mit der Masse  $m$  und der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  hat die kinetische Energie  $E = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2$ . Dieser mechanische Sachverhalt motiviert uns in Analogie dazu die kinetische Energie eines Teilchens durch

$$E_i(t) := \frac{1}{2} \int \psi_i(\mathbf{x}, t) |\mathbf{v}_i(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$$

zu definieren. Noch einmal sei daran erinnert, daß die Masse  $m_i$  mit den Bezeichnungen (2.3) und (2.13) von  $\psi_i$  eingeht. Die kinetische Energie besitzt die geschlossene Darstellung

$$E_i(t) = \frac{1}{2} \left( m_i |\dot{\mathbf{q}}_i|_2^2 + J m_i \|\dot{\mathbf{H}}_i\|_F^2 \right). \quad (2.21)$$



Als kinetische Gesamtenergie erhält man folglich

$$E(t) := \sum_i E_i(t). \quad (2.22)$$

Neben der kinetischen Energie besitzt das System innere Energie, deren Dichte als Funktion der Massendichte bereits definiert ist und folglich durch

$$V(t) := \int \varepsilon(\rho(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \quad (2.23)$$

gegeben ist. Aus der kinetischen Energie und der inneren Energie bildet man die Lagrange-funktion

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

des Systems. Aus dieser leiten sich die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_i} = 0, \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{H}}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{H}_i} = 0,$$

ab. Mit den Kräften

$$\mathbf{F}_i := - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i}$$

und den Drehmomenten

$$\mathbf{M}_i := - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{H}_i}$$

nehmen die FMM-Bewegungsgleichungen die Gestalt

$$\begin{aligned} m_i \ddot{\mathbf{q}}_i &= \mathbf{F}_i, \\ J m_i \ddot{\mathbf{H}}_i &= \mathbf{M}_i \end{aligned} \quad (2.24)$$

an. Für rein adiabatische Fluide gilt genauer

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i &= - \int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} d\mathbf{x}, \\ \mathbf{M}_i &= - \int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Die hierbei auftretenden Ableitungen sind mit (2.15) und (2.16) leicht zu berechnen. Ferner ist zu beachten, daß in diese Bewegungsgleichungen die Teilchenmasse nur noch über die innere Energie eingeht, da sich die Masse in  $\mathbf{F}_i$  und  $\mathbf{M}_i$  mit der linken Seite von (2.24) herausdividiert.

## 2.4 Wärmeerzeugung in Stößen

Legt man dem Modell eine innere Energie zugrunde, die im Gegensatz zu rein adiabatischen Strömungen sowohl von der Massendichte als auch der Entropiedichte abhängt, so erweitern

sich die Kräfte und die Drehmomente der Bewegungsgleichungen dementsprechend um die jeweiligen Ableitungsterme zu

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_i &= - \int \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + S_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} d\mathbf{x}, \\ \mathbf{M}_i &= - \int \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} + S_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} d\mathbf{x}.\end{aligned}\quad (2.26)$$

Es sind dann sowohl die Gesamtenergie als auch die Gesamtentropie Erhaltungsgrößen und das System ist zeitsymmetrisch. Für allgemeine reibungsfreie Strömungen entspricht dies jedoch nicht den kontinuumsmechanischen Vorstellungen, da an jenen Stellen, wo kinetische Energie in Wärme umgewandelt wird, die Zeitsymmetrie aufgegeben werden muß. Diese Diskrepanz basiert auf den verschiedenen Bewegungsenergien der beiden Modelle. Während in der Kontinuumsmechanik die mittlere kinetische Energie

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

verwendet wird, ist im Modell der Finiten Massen die Bewegungsenergie über die Summe der Bewegungsenergien der einzelnen Teilchen definiert. Diese beiden Energien differieren um die Fluktuationsenergie

$$\hat{E} := E - \bar{E} = \frac{1}{4} \int \rho \sum_{i,j=1}^N \chi_i \chi_j |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|^2 d\mathbf{x}.$$

In glatten Strömungen ist die Fluktuationsenergie vergleichsweise klein, kann in Stößen jedoch dominieren und muß deshalb über eine Reibungskraft in innere Energie umgewandelt werden. Hierfür wurde in [Ys99b] die Reibungskraft

$$\mathbf{F}_i^{(r)} := -\frac{1}{2} \int R \psi_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{v}] d\mathbf{x} \quad (2.27)$$

eingeführt. Sie zeigt in Richtung des globalen Geschwindigkeitsfeldes und wird in ihrer Stärke vom Reibungskoeffizienten  $R \geq 0$  bestimmt, der zum Beispiel eine Funktion der Dichte sein kann. Damit dämpft sie lokale Geschwindigkeitsschwankungen und koppelt die Teilchen weich aneinander. Die entsprechende Reibungskraft für die Bewegungsgleichungen der Deformationen  $\mathbf{H}_i$

$$\mathbf{M}_i^{(r)} := -\frac{1}{2} \int R \psi_i [\mathbf{v}_i - \mathbf{v}] [\mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i)]^T d\mathbf{x} \quad (2.28)$$

ist so konstruiert, daß Energieerhaltung garantiert ist. Zum Beweis dieser Eigenschaft verweisen wir auf Abschnitt (2.6).

Durch die Reibung der Teilchen untereinander wird Wärme erzeugt, wodurch die spezifischen Entropien nicht mehr konstant bleiben, sondern zunehmend größer werden. Sie gehorchen dabei der Entropiegleichung

$$\theta_i(t) S_i'(t) = \delta Q_i(t),$$

welche dem zweiten Gesetz der Thermodynamik Rechnung trägt. Die Größe

$$\theta_i := \frac{\partial V}{\partial S_i} = \int \theta(\rho, s) \psi_i d\mathbf{x}$$

ist der Mittelwert zwischen der absoluten Temperatur des Teilchens und der spezifischen Hitzezufuhr

$$\delta Q_i^{(r)} = \int \chi_i R \mathbf{q} d\mathbf{x}. \quad (2.29)$$

Hierbei beschreibt

$$\mathbf{q} := \frac{1}{4} \rho \sum_{i,j} \chi_i \chi_j |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|^2 \geq 0$$

die Dichte der Fluktuationsenergie.

## 2.5 Viskosität und Wärmeleitung

Bei viskosen Strömungen wirkt eine weitere Kraft

$$\int_{\partial W_t} \mathbf{T} \mathbf{n} d\sigma$$

auf die in einer mit dem Fluß transportierten Teilmenge  $W_t \subseteq \mathbb{R}^d$  enthaltenen Masse. Es handelt sich hierbei um die anfangs innerhalb einer gegebenen Teilmenge  $W$  des von Masse erfüllten Gebiets liegenden Masse. Die viskose Kraft wird demnach maßgeblich durch den Viskoseanteil des Spannungstensors bestimmt. Dieser ist abhängig von der Dichte, der Temperatur und dem symmetrischen Anteil

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

des Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes. In Newtonschen Fluiden hängt der Viskoseanteil des Spannungstensors linear von  $\mathbf{D}$  ab, und ist von der Form

$$\mathbf{T} = 2\eta \left[ \mathbf{D} - \frac{1}{d} (\text{sp} \mathbf{D}) \mathbf{I} \right] + \xi (\text{sp} \mathbf{D}) \mathbf{I}.$$

Dabei beschreibt der erste Summand vorhandene Scherkräfte im Fluid und der zweite die Volumenviskosität. Die viskose Parameter  $\eta$  und  $\xi$  sind dabei nichtnegative Funktionen von  $\rho$  und  $\theta$ . Dies garantiert, daß

$$\mathbf{T} : \mathbf{D} \geq 0$$

ist und innere Reibung kinetische Energie vernichtet. Eine Forderung aus dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik. Um nun viskose Kräfte zu modellieren, seien  $\chi_\delta \in [0, 1]$  stetig differenzierbare Funktionen, die außerhalb von  $W_t$  verschwinden und für  $\delta \rightarrow 0$  punktweise gegen die Charakteristische Funktion auf  $W_t$  konvergieren, also

$$\chi_\delta(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbb{1}_{W_t}(\mathbf{x}) \text{ für } \delta \rightarrow 0$$

für alle  $\mathbf{x} \in W_t$  erfüllen. Es ist dann

$$\int_{\partial W_t} \mathbf{T} \mathbf{n} \, d\sigma = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \int \mathbf{T} \nabla \chi_\delta \, d\mathbf{x}.$$

Bezeichnet  $I$  die Menge aller Teilchen, die ursprünglich in  $W$  enthalten sind, so dient der Massenanteil

$$\chi_W(\mathbf{x}, t) = \sum_{i \in I} \chi_i(\mathbf{x}, t)$$

als diskretes Gegenstück zu den Funktionen  $\chi_\delta$ . Damit ist die viskose Kraft, die auf dieser Teilmenge wirkt von der Form

$$- \int \mathbf{T} \nabla \chi_W \, d\mathbf{x},$$

bzw.

$$\mathbf{F}_i^{(v)} = - \int \mathbf{T} \nabla \chi_i \, d\mathbf{x} \quad (2.30)$$

stellt die viskose Kraft des  $i$ -ten Teilchens dar. Integriert wird dabei über das von Masse erfüllte Gebiet zur Zeit  $t$ . Die zugehörigen viskosen Kräfte für  $M_i$  sind

$$\mathbf{M}_i^{(v)} = - \int [\mathbf{T} \nabla \chi_i] [\mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i)]^T \, d\mathbf{x} - \int \chi_i \mathbf{T} \mathbf{H}_i^{-T} \, d\mathbf{x}, \quad (2.31)$$

und die spezifische Hitzezufuhr zum  $i$ -ten Teilchen ist durch

$$\delta Q_i^{(v)} = \int \chi_i \mathbf{T} : \mathbf{D} \, d\mathbf{x} \quad (2.32)$$

definiert. Das Problem dieses Ansatzes besteht darin, daß im mehrdimensionalen die Ableitungen der Massenanteile  $\chi_i$  Singularitäten am Gebietsrand haben können und nicht immer quadratintegrierbar sind. Glücklicherweise wird dies oft durch das Abklingverhalten von  $\mathbf{T}$  und der Beschaffenheit der Ansatzfunktionen  $\psi$  kompensiert. Um zusätzlich die Wärmeleitung zu berücksichtigen, muß die rechte Seite der Entropie-Gleichung zu

$$\delta Q_i = \delta Q_i^{(v)} + \delta Q_i^{(r)} + \int \mathbf{k} \cdot \nabla \chi_i \, d\mathbf{x} \quad (2.33)$$

erweitert werden. Das Symbol  $\mathbf{k}$  bezeichnet dabei den Wärmefluß, der meist durch das Foursche Gesetz  $\mathbf{k} = \kappa \nabla \theta$  mit dem Wärmeleitkoeffizienten  $\kappa$  gegeben ist.

## 2.6 Erhaltungseigenschaften

### 2.6.1 Massenerhaltung

Das Prinzip der Massenerhaltung, wonach von der Masse eines strömenden Fluids nichts verschwinden und nichts entstehen kann, wird in der Kontinuumsmechanik mittels der Kontinuitätsgleichung differentiell formuliert. Sie lautet

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

und bringt die zeitliche Änderung der Massendichte mit ihrem Fluß in Zusammenhang. In unserem Teilchenmodell ist diese nach Konstruktion erfüllt.

**Lemma 2.6.1.** *Für endlich viele Teilchen gilt die Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = \sum_i \left( \frac{\partial \psi_i}{\partial t} + \operatorname{div} \psi_i \mathbf{v}_i \right) = 0.$$

*Beweis.* Der Beweis beruht auf der Tatsache, daß sich die beiden Terme wegen (2.15), (2.16) und der Beziehung  $\operatorname{div} (\psi_i \mathbf{v}_i) = \mathbf{H}_i^{-T} : \mathbf{H}'_i$  gegenseitig aufheben.  $\square$

Sind die Formfunktionen nicht differenzierbar, wie beispielsweise in den Untersuchungen von [Yse00], so gilt die Kontinuitätsgleichung noch in einer schwachen Formulierung und kann unter Abschnitt 2 der zitierten Arbeit nachgelesen werden.

### 2.6.2 Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls

Zur Untersuchung der Erhaltungseigenschaften beschränken wir uns auf den Fall, daß keine äußeren Kräfte vorhanden sind. Dabei ist es von Vorteil, nicht den Drehimpuls selbst sondern lediglich seine Komponenten zu betrachten. Im dreidimensionalen Raum ist der Drehimpuls von der Gestalt

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

und kann mit einer geeigneten schiefsymmetrischen Matrix  $\mathbf{W}$  in der Form

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

geschrieben werden. Die Matrizen  $\mathbf{W} \in \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  sind durch das Vektorprodukt eindeutig bestimmt und bilden eine Basis des Raumes der schiefsymmetrischen Matrizen. Verschwindet demnach der skalarwertige Ausdruck  $L(t)$  für alle schiefsymmetrischen Matrizen  $\mathbf{W}$ , so ist ebenfalls  $\mathbf{L}(t) = 0$ . Diese Argumentation gilt nicht nur in dreidimensionalen Räumen, sondern auch in Räumen beliebiger Dimensionen.

**Satz 2.6.2.** *Sind die Bewegungsgleichungen*

$$\begin{aligned} m_i \ddot{\mathbf{q}}_i &= \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_i^{(r)} + \mathbf{F}_i^{(v)}, \\ J m_i \ddot{\mathbf{H}}_i &= \mathbf{M}_i + \mathbf{M}_i^{(r)} + \mathbf{M}_i^{(v)} \end{aligned}$$

und die Entropiegleichung

$$\theta_i S'_i = \delta Q_i^{(r)} + \delta Q_i^{(v)}$$

für alle Teilchen erfüllt, so sind Gesamtenergie, Impuls und Drehimpuls Erhaltungsgrößen. Mit einer beliebigen schiefsymmetrischen Matrix  $\mathbf{W} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  gilt demnach

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (V + E) &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int \rho \mathbf{v} d\mathbf{x} &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int \rho \mathbf{x} \cdot \mathbf{W} \mathbf{v} d\mathbf{x} &= 0. \end{aligned}$$

*Beweis.* Vgl. [GLY00].  $\square$

### 2.6.3 Diskrete Erhaltung von Energie, Impuls und Drehimpuls

Um die hergeleiteten Bewegungsgleichungen numerisch lösen zu können, müssen zunächst die in den Kräften auftretenden Integrale diskretisiert werden. Die dazu verwendete Quadraturformel sollte die Lagrangeschen Eigenschaften unseres Modells respektieren. Es ist gegenüber Verschiebungen, Drehungen und, was die Teilchengestalt angeht, sogar gegen allgemeine lineare Transformationen des Raumes invariant. Da eine mit der Massendichte gewichtete skalare oder vektorwertige Funktion  $\mathbf{f}$  über der Referenzkonfiguration durch

$$\int \mathbf{f} \rho \, d\mathbf{x} = \sum_i m_i \int \mathbf{f}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}$$

ausgewertet werden kann, resultiert daraus mit den Gewichten  $\alpha_\nu > 0$  und den Knoten  $\mathbf{a}_\nu$  die Quadraturformel

$$\int \mathbf{f} \rho \, d\mathbf{x} \rightarrow \sum_i m_i \left[ \sum_\nu \alpha_\nu \mathbf{f}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{a}_\nu) \right] =: \int \mathbf{f} \, d\mu \quad (2.34)$$

für die Methode der Finiten Massen. Für die spezifische innere Energie  $\tilde{\varepsilon} := \varepsilon/\rho$  erhält man mit dieser Quadraturformel das diskrete Potential

$$\tilde{V} = \int \tilde{\varepsilon}(\rho, s) \, d\mu, \quad (2.35)$$

und die zugehörigen diskreten Kräfte berechnen sich durch

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_i &= - \int \left( \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \rho} + S_i \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial s} \right) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} \, d\mu - \sum_\nu \alpha_\nu (\nabla \tilde{\varepsilon})(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{a}_\nu), \\ \tilde{\mathbf{M}}_i &= - \int \left( \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \rho} + S_i \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial s} \right) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \, d\mu - \sum_\nu \alpha_\nu [(\nabla \tilde{\varepsilon})(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{a}_\nu)] [\mathbf{a}_\nu]^T. \end{aligned}$$

Die zweiten Terme resultieren aus der Tatsache, daß die Quadraturpunkte mit den Teilchen mitbewegt werden. Sie verlangen nur Auswertungen in Quadraturpunkten, die vom  $i$ -ten Teilchen selbst stammen. Entsprechend ergibt sich die Temperatur des  $i$ -ten Teilchens als

$$\tilde{\theta}_i = \int \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial s} \psi_i \, d\mu$$

und die Reibungskräfte (2.27), (2.28), sowie die viskosen Kräfte (2.30), (2.31) werden mit der Quadraturformel (2.34) diskretisiert. Analog verfährt man mit der jeweiligen Wärmezufuhr (2.29) und (2.32) sowie dem Wärmefluß (2.33).

Das Resultat dieser Diskretisierungen ist ein großes System gewöhnlicher Differentialgleichungen, die nun zeitintegriert werden müssen. Hierfür wurde von Lubich ein exponentielles Integrationsschema im Sinne der Arbeit [HoLu97] angegeben. Das Integrationsschema nutzt die Struktur der Gleichungen effizient aus und findet sich in [GLY00] ausführlich dargestellt.

**Satz 2.6.3.** *Die mit der Quadraturformel (2.34) diskretisierte Gesamtenergie  $\tilde{\mathcal{E}} = E + \tilde{V}$ , Impuls und Drehimpuls sind Erhaltungsgrößen.*

*Beweis.* Vgl. [GLY00]. □

---

Beim Übergang zur Zeitintegration geht diese Eigenschaft natürlich verloren. Allerdings geht das exponentielle Integrationsschema, wenn sowohl Viskose- als auch Reibungskräfte nicht vorhanden sind, in das symplektische Strömer-Verlet Schema über. Impuls und Drehimpuls sind in diesem Fall Erhaltungsgrößen und der Energiefehler ist für große Zeiten vernachlässigbar, vgl. [HaLu00].

## Kapitel 3

# Die akustische Wellengleichung

Die adiabatische Bewegung eines kompressiblen Fluids mit Dichte  $\rho$  und Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  vernachlässigt jeglichen thermodynamischen Effekt. Sie wird durch die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \quad (3.1)$$

und die Impulsgleichung

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{v} = -\frac{\nabla \pi}{\rho}, \quad (3.2)$$

den sogenannten Euler Gleichungen, beschrieben. Der Druck  $\pi$  ist eine Funktion der Masendichte  $\rho$ . Zwischen ihm und der inneren Energie besteht die Beziehung

$$\pi(\rho) = \varepsilon'(\rho)\rho - \varepsilon(\rho), \quad (3.3)$$

welche nach Kapitel 2.3 einen Spezialfall der Gibbsschen Fundamentalrelation der Thermodynamik darstellt, bei dem die innere Energie  $\varepsilon(\rho, s) = \varepsilon(\rho)$  nicht von der spezifischen Entropie abhängt. Die Linearisierung der Euler Gleichungen um die konstante Lösung  $(\rho, \mathbf{v}) = (\bar{\rho}, 0)$  führt auf die akustischen Gleichungen [LaLi91]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\bar{\rho} \operatorname{div} \mathbf{v} \quad (3.4)$$

und

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{\pi'(\bar{\rho})}{\bar{\rho}} \nabla \rho. \quad (3.5)$$

Differenziert man die erste Gleichung nach der Zeit, bildet von der zweiten Gleichung die Divergenz und subtrahiert anschließend die beiden Ergebnisse voneinander, so erhält man die skalare Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = c^2 \Delta \rho \quad (3.6)$$

mit der Schallgeschwindigkeit

$$c = \sqrt{\pi'(\bar{\rho})} = \sqrt{\varepsilon''(\bar{\rho})\bar{\rho}}. \quad (3.7)$$

Durch Differentiation der zweiten Gleichung nach der Zeit und Elimination der Zeitableitung von  $\rho$  mit (3.4), läßt sich die Akustik eines adiabatischen Fluids auch mittels der partiellen Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2} = c^2 \nabla(\operatorname{div} \mathbf{v}). \quad (3.8)$$

beschreiben. Man bezeichnet sie schlicht als akustische Wellengleichung.



Für viele naturwissenschaftliche Probleme bietet neben dem Eulerschen Modell, das Lagrangesche Modell einen alternativen Zugang zur Beschreibung der Bewegung von Fluiden oder Körpern, der oft zu einer geschmeidigeren Darstellung der resultierenden (partiellen) Differentialgleichungen führt. Da der Methode der Finiten Massen das Lagrangesche Modell zugrunde liegt, leiten wir die akustische Wellengleichung aus der Lagrangefunktion eines mechanischen Systems her. Diese besitzt eine schwache Formulierung in geeigneten Hilberträumen, deren eindeutige Lösung existiert und einer Stabilitätsabschätzung genügt. Zum Beweis dieser Eigenschaften betrachtet man eine größere Klasse von Gleichungen, die allgemeinen abstrakten Wellengleichungen und deren zugehöriges abstraktes Cauchyproblem. Die Tatsache, daß die eindeutige Lösung des inhomogenen Problems einer Stabilitätsabschätzung genügt, ist von entscheidender Bedeutung für die Untersuchung der Schallausbreitung in der Methode der Finiten Massen. Die Konvergenzaussage in adiabatischen Fluiden aus Kapitel 5 für die Galerkin Diskretisierung basiert hierauf wesentlich.

### 3.1 Herleitung der akustischen Wellengleichung

Die Bewegung der zahlreichen Massenpunkte eines Fluids oder Körpers  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$  wird in der Kontinuumsmechanik durch eine Deformation  $\varphi : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$  bzw. deren zugehörige Trajektorie  $t \rightarrow \varphi(\mathbf{x}, t)$  beschrieben. Da die wellenförmige Bewegung des Schalls aus kleinen Auslenkungen dieser Massenpunkte innerhalb des Mediums herrührt, stellt man die Deformation gerne in der Form

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$$

dar und bezeichnet die Auslenkung  $\mathbf{u} : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$  als Verschiebung aus dem Gleichgewichtszustand. Ist die innere Energie  $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  eine stetige Funktion mit  $\varepsilon(0) = 0$  und die Massendichte

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho(\mathbf{x}, t) \det(\nabla \varphi)(\mathbf{x}, t)$$

eine beschränkte Funktion mit kompaktem Träger, so sind sowohl die kinetische Gesamtenergie

$$E_K = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, 0) |\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \quad (3.9)$$

als auch die innere Energie

$$V_K = \int_{\Omega} \varepsilon \left( \frac{\rho(\mathbf{x}, 0)}{\det(\mathbf{I} + (\nabla \mathbf{u})(\mathbf{x}, t))} \right) \det(\mathbf{I} + (\nabla \mathbf{u})(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \quad (3.10)$$

des Systems wohldefiniert und lassen sich durch Transformation als Funktionen der Deformation  $\mathbf{u}$  und deren Zeitableitung  $\dot{\mathbf{u}}$  auffassen. Aus diesen leiten sich die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial E_K}{\partial \dot{\mathbf{u}}} + \frac{\partial V_K}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (3.11)$$

ab, deren Linearisierung um den Gleichgewichtszustand  $(\rho, \mathbf{u}) = (\bar{\rho}, 0)$  mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho} > 0$  und Auslenkung Null auf die akustische Wellengleichung (3.8) führt. Die

Linearisierung ist dabei ein rein formaler Prozeß, bei dem der Term  $\frac{\partial V_K}{\partial \mathbf{u}}$  der inneren Energie nicht über einem festen Funktionenraum linearisiert, sondern direkt durch seinen linearen Anteil ersetzt wird. Eine äquivalente Vorgehensweise besteht darin, neben der kinetischen Energie, die bereits in quadratischer Form vorliegt, auch die innere Energie formal zu quadratisieren und mit dieser in die Lagrangefunktion einzugehen. Auf beiden Wegen wird man über eine schwache Formulierung der Lagrangeschen Bewegungsgleichungen auf eine schwache Formulierung der akustischen Wellengleichung geführt, aus der dann die klassische Formulierung folgt.

Über ausgewählten Funktionenräumen weicht dieser formale Prozeß der Linearisierung der Lagrangeschen Bewegungsgleichungen oder der Quadratisierung der inneren Energie einer gewöhnlichen Taylorentwicklung. Ein geeigneter Kandidat hierfür ist der Raum  $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  der unendlich oft stetig differenzierbaren Funktionen auf  $\mathbb{R}^d$ , die außerhalb einer kompakten Teilmenge verschwinden. Sowohl bei der Quadratisierung

$$V_{\bar{\rho}}(\mathbf{u}) = V_{\bar{\rho}}(0) + V'_{\bar{\rho}}(0) \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{2} V''_{\bar{\rho}}(0) \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + o(\mathbf{u}^2)$$

der inneren Energie  $V_\rho(\mathbf{u}) := V_K(\rho, \mathbf{u})$  als auch bei der Linearisierung der Lagrangeschen Bewegungsgleichungen benötigt man für Funktionen  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  die Richtungsableitungen  $V'_\rho(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v}$  und  $V''_\rho(\mathbf{u}) \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ . Bevor diese über dem Zustand konstanter Massendichte  $\rho = \bar{\rho}$  und Verschiebung  $\mathbf{u} = 0$  berechnet werden können, bedarf es der im nächsten Lemma angegebenen Ableitungen skalarer Funktionen.

**Lemma 3.1.1.** *Seien  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$ . Die skalaren Funktionen  $f(\alpha) = \det(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B})$  und  $g(\alpha) = \text{sp}(\mathbf{A}(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1})$  besitzen die Ableitungen*

- (1)  $f'(\alpha) = \det(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B}) \text{sp}(\mathbf{B}(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B})^{-1})$ ,
- (2)  $g'(\alpha) = -\text{sp}(\mathbf{A}(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} \mathbf{C}(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1})$ .

*Beweis.* Für  $\delta \in \mathbb{R}$  ist

$$f(\alpha + \delta) = \det((\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B}) + \delta \mathbf{B}) = \det((\mathbf{I} + \delta \mathbf{B}(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B})^{-1})(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B})),$$

woraus mit dem Determinantenmultiplikationssatz wegen

$$\det((\mathbf{I} + \delta \mathbf{B}(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B})^{-1})) = 1 + \delta \text{sp}(\mathbf{B}(\mathbf{A} + \alpha \mathbf{B})^{-1}) + o(\delta)$$

die erste Behauptung folgt. Zum Beweis der zweiten Behauptung betrachten wir die Funktion  $M : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}, \alpha \mapsto (\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1}$ . Aus Kenntnis der Neumannschen Reihe

$$(\mathbf{I} + \delta \mathbf{A})^{-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i (\delta \mathbf{A})^i$$

schließen wir

$$\begin{aligned} M(\alpha + \delta) &= (\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C} + \delta \mathbf{C})^{-1} = ((\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})(\mathbf{I} + \delta(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} \mathbf{C}))^{-1} \\ &= (\mathbf{I} - \delta(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} \mathbf{C} + o(\delta))(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} \\ &= (\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} - \delta(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} \mathbf{C}(\mathbf{B} + \alpha \mathbf{C})^{-1} + o(\delta) \end{aligned}$$

und somit  $M'(\alpha) = -(\mathbf{B} + \alpha\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}(\mathbf{B} + \alpha\mathbf{C})^{-1}$ . Wegen

$$\text{sp}'(\mathbf{A})[\mathbf{H}] = \text{sp}[\mathbf{H}] \quad \text{für alle } \mathbf{H} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$$

folgt die zweite Behauptung aus der Kettenregel.  $\square$

Mit diesem Lemma lassen sich die gesuchten Richtungsableitungen der inneren Energie  $V_\rho(\mathbf{u})$  über dem Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte mühelos angeben. Die dazu benötigten Bedingungen an die innere Energie  $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  sind keinesfalls technischer Natur, sondern physikalisch sinnvoll und werden etwa von idealen Gasen (2.20) erfüllt.

**Lemma 3.1.2.** *Sei  $\mathbf{u} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  und  $\rho$  eine beschränkte Funktion mit kompaktem Träger. Ist die innere Energie  $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  eine stetig differenzierbare Funktion mit  $\varepsilon(0) = 0$ , so gilt für die Ableitung der inneren Energie  $V_\rho(\mathbf{u}) := V_K(\rho, \mathbf{u})$  in Richtung  $\mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$*

$$\begin{aligned} V'_\rho(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} = \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \varepsilon\left(\frac{\rho}{\det(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u})}\right) \det(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u}) \right. \\ \left. - \varepsilon'\left(\frac{\rho}{\det(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u})}\right)\rho \right\} \text{sp}(\nabla\mathbf{v}(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u})^{-1}) \, d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

*Beweis.* Sei  $\alpha \in [0, 1]$  und  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ . Aus der Hilfsfunktion  $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,

$$\varphi(\alpha) = V_\rho(\mathbf{u} + \alpha\mathbf{v}) = \int \varepsilon\left(\frac{\rho}{\det(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u} + \alpha\nabla\mathbf{v})}\right) \det(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u} + \alpha\nabla\mathbf{v}) \, d\mathbf{x}$$

erhält man durch Differentiation unter dem Integral mit Lemma 3.1.1(1) die Richtungsableitung  $\varphi'(\alpha)|_{\alpha=0} = V'_\rho(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v}$  wie oben angegeben. Ermöglicht wird die Differentiation unter dem Integral durch die getroffenen Voraussetzungen. Unter diesen ist der Integrand in (3.12) nämlich eine beschränkte Funktion mit kompaktem Träger.  $\square$

**Bemerkung 3.1.3.** Die Richtungsableitung (3.12) ist auch unter allgemeineren Voraussetzungen noch wohldefiniert. Für  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  genügt es hierfür, die Differenzierbarkeit der inneren Energie  $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  und die Stetigkeit der Abbildung  $\rho \mapsto \varepsilon'(\rho)\rho$  auf ganz  $\mathbb{R}$  zu fordern. Um dies einzusehen kann man oBdA annehmen, daß für ein  $\delta > 0$  die Abschätzung  $\det(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u}) \geq \delta$  auf dem Träger von  $\mathbf{v}$  gilt. Es ist dann  $\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u}$  beschränkt und es existiert eine Konstante  $C(\mathbf{u}) > 0$  mit  $\text{sp}(\nabla\mathbf{v}(\mathbf{I} + \nabla\mathbf{u})^{-1}) \leq C(\mathbf{u})\|\nabla\mathbf{v}\|$ . Nach Voraussetzung sind die innere Energie und die Abbildung  $\rho \mapsto \varepsilon'(\rho)\rho$  stetig, nehmen also auf kompakten Intervallen ihr Maximum bzw. Minimum an. Folglich existiert für alle  $\mathbf{x}$  ein  $C'(\mathbf{u}) > 0$ , so daß der Integrand durch  $C'(\mathbf{u})\|\nabla\mathbf{v}\|$  beschränkt ist.

Über dem Gleichgewichtszustand  $(\rho, \mathbf{u}) = (\bar{\rho}, 0)$  mit konstanter Massendichte erhält man wegen (3.3) insbesondere

$$V'_{\bar{\rho}}(0) \cdot \mathbf{v} = -\pi(\bar{\rho}) \int \text{sp}(\nabla\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} = -\pi(\bar{\rho}) \int \text{div } \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = 0.$$

Darüberhinaus kann der Ausdruck (3.12) mit entsprechend angepaßten Glattheitsbedingungen an die innere Energie ein weiteres Mal differenziert werden. Im Speziellen ergibt sich über dem konstanten Zustand  $(\rho, \mathbf{u}) = (\bar{\rho}, 0)$  das folgende Lemma.

**Lemma 3.1.4.** Seien  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  und  $\varepsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  eine zweimal differenzierbare Funktion. Sind die Abbildungen  $\rho \mapsto \varepsilon'(\rho)\rho$  und  $\rho \mapsto \varepsilon''(\rho)\rho^2$  stetige Funktionen auf  $\mathbb{R}$ , so gilt über dem Gleichgewichtszustand  $(\rho, \mathbf{u}) = (\bar{\rho}, 0)$  mit konstanter Massendichte

$$V_{\bar{\rho}}''(0)\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \varepsilon''(\bar{\rho})\bar{\rho}^2 \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x}.$$

*Beweis.* Sei  $\mathbf{u} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  und  $\alpha \in [0, 1]$ . Für alle  $\mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  definiert man die Funktion  $f_{\mathbf{v}} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $f_{\mathbf{v}}(\mathbf{u}) = V_{\rho}'(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v}$  wie in (3.12) erhalten. Zur Berechnung ihrer Richtungsableitung  $f_{\mathbf{v}}'(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} = V_{\rho}''(\mathbf{u})\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}$  nach  $\mathbf{w} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  betrachtet man wiederum die durch  $\varphi(\alpha) = f_{\mathbf{v}}(\mathbf{u} + \alpha\mathbf{w})$  definierte Hilfsfunktion, aus der durch Differentiation unter dem Integral mit Lemma 3.1.1(2)

$$\begin{aligned} \varphi'(\alpha)|_{\alpha=0} &= \int \left\{ \varepsilon(\tau) \det(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) - \varepsilon'(\tau)\rho \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon''(\tau) \frac{\rho^2}{\det(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u})} \right\} \operatorname{sp}(\nabla \mathbf{w}(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u})^{-1}) \operatorname{sp}(\nabla \mathbf{v}(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u})^{-1}) \\ &\quad - \left\{ \varepsilon(\tau) \det(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) - \varepsilon'(\tau)\rho \right\} \operatorname{sp}(\nabla \mathbf{v}(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u})^{-1} \nabla \mathbf{w}(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u})^{-1}) \, d\mathbf{x} \end{aligned}$$

und schließlich  $\varphi'(\alpha)|_{\alpha=0} = V_{\rho}''(\mathbf{u})\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}$  resultiert. Die innere Energie  $\varepsilon$  und deren Ableitungen sind dabei in  $\tau = \rho / \det(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u})$  auszuwerten. Auch hier ist die Differentiation unter dem Integral gestattet, was mit ähnlichen Argumenten wie in Bemerkung 3.1.3 gezeigt werden kann. Im Zustand konstanter Massendichte  $\rho = \bar{\rho}$  und Verschiebung  $\mathbf{u} = 0$  gilt

$$\begin{aligned} V_{\bar{\rho}}''(0)\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} &= \left\{ \varepsilon(\bar{\rho}) - \varepsilon'(\bar{\rho})\bar{\rho} + \varepsilon''(\bar{\rho})\bar{\rho}^2 \right\} \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \left\{ \varepsilon(\bar{\rho}) - \varepsilon'(\bar{\rho})\bar{\rho} \right\} \int \operatorname{sp}(\nabla \mathbf{v} \nabla \mathbf{u}) \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Durch zweimalige partielle Integration folgt

$$\begin{aligned} \int \operatorname{sp}(\nabla \mathbf{v} \nabla \mathbf{u}) \, d\mathbf{x} &= \sum_{r,s} \int (D_s v_r)(D_r u_s) \, d\mathbf{x} = - \sum_{r,s} \int (D_s D_r u_s) v_r \, d\mathbf{x} \\ &= \sum_{r,s} \int (D_s u_s)(D_r v_r) \, d\mathbf{x} = \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} \end{aligned}$$

und alles ist gezeigt.  $\square$

Mit diesen Hilfssätzen ist es nun ein Leichtes, die akustische Wellengleichung aus der Lagrangeschen Bewegungsgleichung herzuleiten. Unter Verwendung der obigen Notation  $V_{\rho}(\mathbf{u}) = V_K(\rho, \mathbf{u})$  ist die Lagrangesche Bewegungsgleichung (3.11) nämlich genau dann für alle Testfunktionen  $\mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  erfüllt, wenn

$$\frac{d}{dt} E_K'(\dot{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{v} + V_{\rho}'(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.13)$$

gilt. Über dem Zustand konstanter Massendichte  $\rho = \bar{\rho}$  und Verschiebung  $\mathbf{u} = 0$  ist einerseits  $\frac{d}{dt} E_K'(\dot{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{v} = \bar{\rho} \int \ddot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}$ . Andererseits ist man dank Lemma 3.1.4 in der Lage, die

Linearisierung von  $V'_\rho(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{v}$  um diesen Zustand angeben zu können. Unter Berücksichtigung der Beziehung (3.7) zwischen der Schallgeschwindigkeit  $c$  und der zweiten Ableitung der inneren Energie  $\varepsilon$  ist diese von der Gestalt

$$V''_\rho(0)\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \bar{\rho}c^2 \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x}$$

und die entsprechende Linearisierung der schwach formulierten Lagrangeschen Bewegungsgleichung (3.13) führt auf die Gleichung

$$\bar{\rho} \int \{ \ddot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{v} + c^2 \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \} = 0. \quad (3.14)$$

Damit erhält man unmittelbar das angestrebte Resultat in der klassischen Formulierung.

**Satz 3.1.5.** Sei  $\varphi : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$  die Bewegung eines unendlich ausgedehnten Fluids oder Gases  $\Omega = \mathbb{R}^d$ . Mit einer Verschiebung  $\mathbf{u} : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ ,  $\mathbf{u} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ , sei diese von der Gestalt  $\varphi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ . Unter den Voraussetzungen von Lemma 3.1.4 resultiert aus der Linearisierung der Lagrangeschen Bewegungsgleichung (3.11) um den Gleichgewichtszustand  $\mathbf{u} = 0$  mit konstanter Massendichte  $\rho = \bar{\rho} > 0$  die akustische Wellengleichung

$$\ddot{\mathbf{u}} = c^2 \nabla(\operatorname{div} \mathbf{u}). \quad (3.15)$$

Diese beschreibt die Schallausbreitung innerhalb eines Fluids oder Körpers mit der Schallgeschwindigkeit  $c = \sqrt{\varepsilon''(\bar{\rho})\bar{\rho}} \in \mathbb{R}_+$ .

*Beweis.* Sind  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ , so erhält man durch partielle Integration

$$\int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = - \int \nabla(\operatorname{div} \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x},$$

und die Behauptung folgt direkt aus den Vorbemerkungen. Für alle  $\mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  ist nämlich (3.14) genau dann erfüllt, wenn

$$\bar{\rho} \int \{ \ddot{\mathbf{u}} - c^2 \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} \} \cdot \mathbf{v} = 0$$

für alle  $\mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  gilt, woraus die Behauptung mit dem Lemma von Dubois-Reymond (siehe etwa [FiKa, S.249]) folgt.  $\square$

## 3.2 Schwache Formulierung der akustischen Wellengleichung

Einen Zugang für die numerische Behandlung von Anfangswertproblemen eröffnet der Weg über deren schwache Formulierung. Die Tatsache, daß die akustische Wellengleichung einer solchen Formulierung zugänglich ist, basiert im Wesentlichen darauf, daß die zweite Ableitung der inneren Energie eine Bilinearform definiert.

### 3.2.1 Die Bilinearform der inneren Energie

Wie man im vorherigen Abschnitt gesehen hat, ist für alle Funktionen  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$

$$-\int \nabla \operatorname{div} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x},$$

und die zweite Ableitung der kontinuierlichen inneren Energie induziert über dem Gleichgewichtszustand  $(\rho, \mathbf{u}) = (\bar{\rho}, 0)$  mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho} > 0$  eine Bilinearform  $B_c : C_c^\infty(\mathbb{R}^d) \times C_c^\infty(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$  mit

$$B_c(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^2 \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = c^2 \langle \operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2}.$$

**Definition 3.2.1.** Für jede offene Teilmenge  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$  bezeichnet

$$H(\operatorname{div}; \Omega) := \{ \mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid \operatorname{div} \mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R}) \}$$

den Raum der quadratintegrierbaren Funktionen  $\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\Omega)$ , deren Divergenz ebenfalls quadratintegrierbar ist. Zusammen mit der Norm  $\|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div}; \Omega)}^2 := \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R})}^2$  bildet dieser einen Hilbertraum. Ist  $\Omega = \mathbb{R}^d$ , so schreiben wir kurz  $H(\operatorname{div})$ .

Der Raum  $H(\operatorname{div})$  ist stetig und dicht eingebettet in den Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ . Genauer ist  $\|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2} \leq \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})}$  für alle  $\mathbf{u} \in H(\operatorname{div})$ . Die Vervollständigung des Raumes  $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  bezüglich der  $\|\cdot\|_{H(\operatorname{div})}$ -Norm ist gerade  $H(\operatorname{div})$ , was eine Fortsetzung der Bilinearform  $B_c$  auf den Hilbertraum  $H(\operatorname{div})$  ermöglicht.

**Satz 3.2.2.** Die beschränkte Bilinearform  $B_c(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^2 \langle \operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2}$ ,  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ , besitzt eine eindeutige Fortsetzung  $B : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$  mit dem Definitionsbereich  $D(B) = H(\operatorname{div}) \times H(\operatorname{div})$ ,

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^2 \int \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = c^2 \langle \operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2},$$

auf den Abschluß  $H(\operatorname{div})$  von  $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  bezüglich  $\|\cdot\|_{H(\operatorname{div})}$ . Die Fortsetzung hat für alle  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in H(\operatorname{div})$  die Eigenschaften

- (1)  $B$  ist symmetrisch, d.h.  $B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = B(\mathbf{v}, \mathbf{u})$ .
- (2)  $B$  ist nichtnegativ, d.h.  $B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \geq 0$ .
- (3)  $B$  ist beschränkt, d.h.  $B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \leq c^2 \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})} \|\mathbf{v}\|_{H(\operatorname{div})}$ .
- (4)  $B$  ist  $H(\operatorname{div})$ -elliptisch bezüglich  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ , d.h. es existiert eine Konstante  $C > 0$  mit

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2 \geq C \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})}^2.$$

*Beweis.* Nach der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung ist für alle  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$

$$B_c(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^2 \langle \operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2} \leq c^2 \|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2} \|\operatorname{div} \mathbf{v}\|_{\mathcal{L}^2} = c^2 \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})} \|\mathbf{v}\|_{H(\operatorname{div})}$$

und die beschränkte Bilinearform  $B_c$  induziert für jedes feste  $\mathbf{u} \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$  das stetige Funktional

$$T_c : C_c^\infty(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{v} \mapsto T_c(\mathbf{v}) := B_c(\mathbf{u}, \mathbf{v}).$$

Da stetige Funktionale von dichten Teilräumen eindeutig und stetig auf den Abschluß fortgesetzt werden können [Wer95,II.1.5], existiert eine eindeutige, stetige Fortsetzung  $T : H(\operatorname{div}) \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{v} \mapsto T\mathbf{v} := B(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  mit  $B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^2 \langle \operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2}$ . Offensichtlich ist  $B$  symmetrisch und nichtnegativ und mit  $C := \min\{c^2, 1\}$  ist

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2 = c^2 \|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2 \geq C \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})}^2$$

und somit alles gezeigt.  $\square$

**Bemerkung 3.2.3.** Dank der  $H(\operatorname{div})$ -Elliptizität von  $B$  bezüglich  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  und der Definition der Norm auf  $H(\operatorname{div})$ , definiert für jedes  $\lambda > 0$

$$\|\mathbf{u}\|_{B_\lambda}^2 := B(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + \lambda \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

eine äquivalente Norm auf  $H(\operatorname{div})$ . Es ist nämlich  $\|\mathbf{u}\|_{B_\lambda} = 0$  genau dann erfüllt, wenn  $\mathbf{u} = 0$  gilt und

$$\min\{c^2, \lambda\} \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})}^2 \leq c^2 \|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \lambda \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2}^2 = \|\mathbf{u}\|_{B_\lambda}^2 \leq \max\{c^2, \lambda\} \|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div})}^2$$

ist.

### 3.2.2 Schwache Formulierung des Anfangswertproblems

Die im vorherigen Abschnitt gewonnenen Erkenntnisse ermöglichen es, eine schwache Formulierung der akustischen Wellengleichung in den Hilberträumen  $H(\operatorname{div}) \hookrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  anzugeben. Testet man nämlich (3.15) mit einer Funktion  $\mathbf{v}$  aus  $H(\operatorname{div})$ , so erhält man

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}(t), \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2} + B(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{v} \in H(\operatorname{div}), \quad (3.16)$$

woraus die schwache Formulierung des zugehörigen Anfangswertproblems der inhomogenen akustischen Wellengleichung resultiert.

**Anfangswertproblem 3.2.4.** Gegeben seien Elemente  $\mathbf{u}_0 \in H(\operatorname{div}), \mathbf{v}_0 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  und eine stetige Inhomogenität  $\mathbf{f} \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d))$ . Gesucht ist eine Funktion  $\mathbf{u} : \mathbb{R}_+ \rightarrow H(\operatorname{div})$ , die milde Lösung des Anfangswertproblems

$$(SWG) \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}(t), \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2} + B(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = \langle \mathbf{f}(t), \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2} & \text{für alle } \mathbf{v} \in H(\operatorname{div}), \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \\ \dot{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{v}_0 \end{cases}$$

ist. Dabei bezeichnet  $B : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}$  die symmetrische, nichtnegative und bezüglich  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$   $H(\operatorname{div})$ -elliptische Bilinearform  $B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^2 \langle \operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2}$  mit Definitionsbereich  $D(B) = H(\operatorname{div}) \times H(\operatorname{div})$  aus Satz 3.2.2.

Motiviert durch den üblichen Lösungsbegriff [EnNa00, Definition 6.3] des abstrakten Cauchyproblems in Kapitel 3.3.1, versteht man unter einer milden Lösung eine Funktion

$$\mathbf{u} \in C(\mathbb{R}_+, H(\operatorname{div})) \cap C^1(\mathbb{R}_+, \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)),$$

die das Anfangswertproblem (SWG) in dem Sinne erfüllt, daß für alle  $\mathbf{v} \in H(\operatorname{div})$

$$\int_0^t \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}(s), \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2} + B(\mathbf{u}(s), \mathbf{v}) \, ds = \int_0^t \langle \mathbf{f}(s), \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2} \, ds$$

gilt.

### 3.2.3 Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität der milden Lösung

Die Existenz und Eindeutigkeit einer milden Lösung des Anfangswertproblems (SWG) der akustischen Wellengleichung ist nicht offensichtlich. Das Hauptproblem besteht in der Tatsache, daß die Bilinearform  $B$  nicht  $H(\operatorname{div})$ -elliptisch ist und der übliche Weg über das Theorem von Lax-Milgram deshalb nicht beschritten werden kann. Leider ist die Einbettung  $H(\operatorname{div}) \hookrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  auch nicht kompakt, so daß eine Charakterisierung der Lösung mittels Eigenfunktionen, wie dies in [RaTh88] durchgeführt wird, ebenfalls nicht in Frage kommt. Der Ausweg aus dieser Situation liegt in der Theorie unbeschränkter quadratischer Formen. Mit ihr und der Halbgruppentheorie ist es möglich, die Existenz und Eindeutigkeit einer milden Lösung zu beweisen. Auch die für spätere numerische Untersuchungen wichtige Stabilität der milden Lösung läßt sich auf diese Weise gewinnen.

**Satz 3.2.5.** *Das inhomogene Anfangswertproblem (SWG) besitzt eine eindeutige milde Lösung  $\mathbf{u} \in C(\mathbb{R}_+, H(\operatorname{div})) \cap C^1(\mathbb{R}_+, \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d))$ , die der Stabilitätsabschätzung*

$$\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathcal{L}^2}^2 + B(\mathbf{u}(t), \mathbf{u}(t)) \leq \|\dot{\mathbf{u}}_0\|_{\mathcal{L}^2}^2 + B(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_0) + \int_0^t \|\mathbf{f}(s)\|_{\mathcal{L}^2}^2 \, ds$$

genügt. Ist  $\mathbf{f} = 0$ , so gilt die Energiegleichung

$$\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathcal{L}^2}^2 + B(\mathbf{u}(t), \mathbf{u}(t)) = \|\dot{\mathbf{u}}_0\|_{\mathcal{L}^2}^2 + B(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_0)$$

*Beweis.* Folgt unmittelbar aus Korollar 3.3.8 aus Abschnitt 3.3 mit der Bilinearform  $b = B$  und den Hilberträumen  $H = H(\operatorname{div}) \hookrightarrow L = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ .  $\square$

**Bemerkung 3.2.6.** Lions und Magenes haben für eine wesentlich größere Klasse von Evolutionsproblemen die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung  $\mathbf{u} \in C([0, T], H) \cap C^1([0, T], L)$  gezeigt, die

$$(HP) \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} c(t, \mathbf{u}(t), \mathbf{v}) + a(t, \dot{\mathbf{u}}(t), \mathbf{v}) + b(t, \dot{\mathbf{u}}(t), \mathbf{v}) = \langle \mathbf{f}(t), \mathbf{v} \rangle_L & \text{für alle } \mathbf{v} \in H, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0 \in H, \\ \dot{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{v}_0 \in L \end{cases}$$

im Distributionssinne erfüllt [DaLi92, XVIII,5] und in diesem Sinne auch Problem (SWG) löst. Die Bilinearformen genügen auf den stetigen und dicht eingebetteten Hilberträumen  $H$  und  $L$  verschiedenen Bedingungen. Der Beweis ist recht mühsam und basiert auf der sogenannten Parabolischen Regularisierung, bei der das hyperbolische Problem (HP) durch ein parabolisches approximiert wird [LiMa72]. Die resultierende Energiegleichung ist jedoch genau wie die Lösung nur auf dem kompakten Intervall  $[0, T]$  gegeben.



### 3.3 Abstrakte Wellengleichungen

In diesem Abschnitt wird die Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität einer milden Lösung, des schwach formulierten Anfangswertproblems (SWG) der akustischen Wellengleichung gezeigt und ein Beweis von Satz 3.2.5 geführt. Hierfür betrachtet man ein allgemeiner formuliertes Anfangswertproblem, das aufgrund der Bemerkung 3.2.3 und den Eigenschaften der Bilinearform  $B$  in  $H(\operatorname{div}) \hookrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  aus Satz 3.2.2 auch das Anfangswertproblem (SWG) der akustischen Wellengleichung umfaßt.

**Anfangswertproblem 3.3.1.** Sei der Hilbertraum  $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle_H, \|\cdot\|_H)$  dicht in den Hilbertraum  $(L, \langle \cdot, \cdot \rangle_L, \|\cdot\|_L)$  eingebettet und  $b : L \times L \rightarrow \mathbb{R}$  eine nichtnegative, symmetrische Bilinearform mit Definitionsbereich  $D(b) = H \times H$ . Es definiere

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_{b_\lambda} = b(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \lambda \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_L \quad \text{für alle } \mathbf{u}, \mathbf{v} \in H, \lambda > 0$$

ein Skalarprodukt auf  $H_{b_\lambda} = (H, \langle \cdot, \cdot \rangle_{b_\lambda})$ , dessen induzierte Norm  $\|\cdot\|_{b_\lambda}$  äquivalent zur Norm  $\|\cdot\|_H$  auf  $H$  ist. Gesucht ist eine milde Lösung

$$\mathbf{u} \in C(\mathbb{R}_+, H) \cap C^1(\mathbb{R}_+, L)$$

des Anfangswertproblems

$$(AWP) \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}(t), \mathbf{v} \rangle_L + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = \langle \mathbf{f}(t), \mathbf{v} \rangle_L & \text{für alle } \mathbf{v} \in H, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \\ \dot{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{v}_0 \end{cases}$$

für gegebene Elemente  $\mathbf{u}_0 \in H, \mathbf{v}_0 \in L$  und  $\mathbf{f} \in C(\mathbb{R}_+, L)$ .

Unter den gegebenen Voraussetzungen ist (AWP) äquivalent zu der abstrakten Wellengleichung

$$(AWG) \quad \begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{A}\mathbf{u}(t) = \mathbf{f}(t) & \text{in } L, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \\ \dot{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{v}_0, \end{cases}$$

mit dem von der Bilinearform  $b$  induzierten, unbeschränkten Operator  $(\mathbf{A}, D(\mathbf{A}))$ . Dies zeigt man mit der Theorie unbeschränkter quadratischer Formen. Die der Bilinearform  $b : L \times L \rightarrow \mathbb{R}$  assoziierte quadratische Form  $b[\cdot]$  mit

$$b[\mathbf{u}] := b(\mathbf{u}, \mathbf{u}), \quad \mathbf{u} \in H,$$

ist dicht definiert in  $L$ . In Anlehnung an die direkte Beziehung der quadratischen Form zur Bilinearform, bezeichnet man den Definitionsbereich  $H$  der quadratischen Form ebenfalls mit  $D(b)$ . Für alle  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in D(b)$  induziert die nichtnegative, symmetrische Bilinearform  $b$  das innere Produkt  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{b_\lambda}$  und der Definitionsbereich  $D(b)$  bildet einen Prähilbertraum, der Dank der Äquivalenz von  $\|\cdot\|_H$  und  $\|\cdot\|_{b_\lambda}$  sogar vollständig ist. Damit ist  $b$  abgeschlossen [Kat66, VI, Thm 1.11]. Nach dem ersten Repräsentationstheorem [Kat66, VI, Thm. 2.1] existiert dann ein unbeschränkter, selbstadjungierter Operator  $\mathbf{A} : D(\mathbf{A}) \subseteq D(b) \rightarrow L$  mit

$$b(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_L \quad \text{für alle } \mathbf{u} \in D(\mathbf{A}), \mathbf{v} \in D(b),$$

welcher ebenfalls nichtnegativ, symmetrisch und abgeschlossen ist. Aus der Tatsache, daß für alle  $\mathbf{v} \in H$  das Skalarprodukt  $\langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle_L$  genau dann verschwindet, wenn  $\mathbf{f} = 0 \in L$  gilt, folgt die Behauptung.

### 3.3.1 Das abstrakte Cauchyproblem

Da ein symmetrischer, selbstadjungierter und nichtnegativer Operator  $m$ -akkretiv ist [Kat66, V, Prob.3.32], läßt sich für  $\mathbf{A}$  nach [Kat66, V, Thm.3.33] mit Hilfe des Dunfordintegrals eine eindeutige Wurzel  $(\mathbf{A}^{1/2}, D(\mathbf{A}^{1/2}))$  definieren. Nach dem zweiten Repräsentationstheorem [Kat66, VI, Thm.2.23] ist sogar

$$b(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \mathbf{A}^{1/2} \mathbf{u}, \mathbf{A}^{1/2} \mathbf{v} \rangle_L \quad \text{für alle } \mathbf{u} \in D(\mathbf{A}^{1/2}) = D(b) = H.$$

Der Hilbertraum  $\mathcal{H}_\lambda := H_{b_\lambda} \times L$  besitzt die vom Skalarprodukt induzierte Norm

$$\|\mathbf{z}\|_\lambda^2 = \|\mathbf{A}^{1/2} \mathbf{u}\|_L^2 + \lambda \|\mathbf{u}\|_L^2 + \|\mathbf{v}\|_L^2 \quad \text{für alle } \mathbf{u} \in H_{b_\lambda}, \mathbf{v} \in L,$$

und die abstrakte Wellengleichung (AWG) kann auf ein System erster Ordnung auf  $\mathcal{H}_\lambda$  reduziert werden. Setzt man nämlich  $\mathbf{v} := \dot{\mathbf{u}}$  und

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}, \mathbf{z}_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_0 \\ \mathbf{v}_0 \end{pmatrix}, \mathbf{f} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{f} \end{pmatrix}, \mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \mathbf{A} & 0 \end{pmatrix},$$

so erhält man gerade das inhomogene abstrakte Cauchyproblem

$$(IACP) \quad \begin{cases} \dot{\mathbf{z}}(t) + \mathcal{A}\mathbf{z}(t) = \mathbf{f}(t), & t \geq 0, \\ \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0. \end{cases}$$

**Definition 3.3.2.** Eine stetige Funktion  $\mathbf{z} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{X}$  auf einem Banachraum  $\mathcal{X}$ , für die  $\int_0^t \mathbf{z}(s) ds \in D(\mathcal{A})$  für alle  $t \geq 0$  ist und

$$\mathbf{z}(t) = \mathcal{A} \int_0^t \mathbf{z}(s) ds + \mathbf{z}_0$$

erfüllt, bezeichnet man als milde Lösung des (homogenen) abstrakten Cauchyproblems

$$(ACP) \quad \begin{cases} \dot{\mathbf{z}}(t) + \mathcal{A}\mathbf{z}(t) = 0, & t \geq 0, \\ \mathbf{z}(0) = \mathbf{z}_0. \end{cases}$$

**Satz 3.3.3.** Der Operator  $(-\mathcal{A}, D(\mathcal{A}))$  erzeugt eine  $C_0$ -Gruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}_\lambda$  mit  $D(\mathcal{A}) = D(\mathbf{A}) \times H$  und das abstrakte Cauchyproblem (ACP) besitzt die eindeutige milde Lösung  $\mathbf{z}(t) = \mathbf{T}(t)\mathbf{z}_0$  in  $\mathcal{H}_\lambda$ .

*Beweis.* Nach dem Spektraltheorem existiert ein Hilbertraum  $\mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R}, \mu)$  und ein unitärer Operator  $U : L \rightarrow \mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R}, \mu)$ , sowie eine auf  $\Omega$   $\mu$ -meßbare skalare Funktion  $m$  mit der Eigenschaft, daß  $(U\mathbf{A}U^{-1}f)(\omega) = m(\omega)f(\omega)$  für fast alle  $\omega \in \Omega, f \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R}, \mu)$  gilt. Dabei ist  $mf \in \mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R}, \mu), D(m) = UD(\mathbf{A})$  und wegen der Nichtnegativität von  $\mathbf{A}$  ist  $m \geq 0$  fast überall. Weiterhin setzt man analog zur Vorgehensweise in [GoWa03]

$$\tilde{\mathbf{z}}(t) = \begin{pmatrix} U\mathbf{u}(t) \\ U\mathbf{v}(t) \end{pmatrix}, \tilde{\mathbf{z}}_0 = \begin{pmatrix} U\mathbf{u}_0 \\ U\mathbf{v}_0 \end{pmatrix}, \tilde{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ m & 0 \end{pmatrix}$$

und das (ACP) ist äquivalent zu

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{z}}(t) + \tilde{\mathcal{A}}\tilde{z}(t) &= 0, \quad t \geq 0, \\ \tilde{z}(0) &= \tilde{z}_0\end{aligned}$$

auf dem Raum  $\tilde{\mathcal{H}}_\lambda = D(\sqrt{m}) \times \mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R}, \mu)$ . Die  $C_0$ -Gruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  auf  $\mathcal{H}_\lambda$  ist dann durch

$$\tilde{\mathbf{T}}(t) = \begin{pmatrix} \cos(t\sqrt{m}) & \frac{1}{\sqrt{m}} \sin(t\sqrt{m}) \\ -\sqrt{m} \sin(t\sqrt{m}) & \cos(t\sqrt{m}) \end{pmatrix}$$

gegeben. Die Funktionen Sinus und Cosinus sind in dieser Darstellung nicht von unbeschränkten Operatoren, sondern lediglich von reell-wertigen Funktionen abhängig und nach l'Hospital ist  $\frac{1}{\sqrt{m}} \sin(t\sqrt{m})$  auch für  $m = 0$  definiert. Bezüglich der entsprechenden Norm

$$\|\tilde{z}\|_\lambda^2 = \|\sqrt{m}\tilde{u}\|_L^2 + \lambda\|\tilde{u}\|_L^2 + \|\tilde{v}\|_L^2$$

ist für alle  $\tilde{z} = (\tilde{u}, \tilde{v})$  aus  $\tilde{\mathcal{H}}_\lambda$   $\lim_{t \rightarrow 0} \|\tilde{\mathbf{T}}(t)\tilde{z} - \tilde{z}\|_\lambda = 0$ . Darüberhinaus prüft man anhand der Additionstheoreme für Sinus und Cosinus leicht  $\tilde{\mathbf{T}}(s)\tilde{\mathbf{T}}(t) = \tilde{\mathbf{T}}(s+t)$  für alle  $s, t \in \mathbb{R}$  nach. Damit ist  $(\tilde{\mathbf{T}}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  eine von  $(-\tilde{\mathcal{A}})$  erzeugte  $C_0$ -Gruppe auf  $\tilde{\mathcal{H}}_\lambda$  und alles gezeigt.  $\square$

### 3.3.2 Existenz- und Eindeutigkeit der Lösung

Mit den gewonnenen Erkenntnissen ist man nun in der Lage, die Existenz- und Eindeutigkeit einer milden Lösung des Anfangswertproblems 3.3.1 anzugeben. Der milde Lösungsbegriff des Anfangswertproblems und die Voraussetzungen wurden derart gewählt, daß man hierfür nur noch die Existenz- und Eindeutigkeit einer milden Lösung des inhomogenen, abstrakten Cauchyproblems (IACP) zu zeigen braucht. Da  $(-\mathcal{A})$  der Generator einer  $C^0$ -Gruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  auf  $\mathcal{H}_\lambda$  ist, liefert die Variation der Konstanten-Formel die milde Lösung von (IACP).

**Satz 3.3.4.** *Bezeichnet  $(\mathbf{T}(t))_{t \geq 0}$  die von  $(-\mathcal{A})$  erzeugte  $C_0$ -Halbgruppe auf  $\mathcal{H}_\lambda$ , so ist für  $\mathbf{f} \in \mathcal{L}^1([0, T], \mathcal{H}_\lambda)$  mit  $T > 0$  die Funktion  $\mathbf{z} \in C([0, T], \mathcal{H}_\lambda)$  mit*

$$\mathbf{z}(t) = \mathbf{T}(t)\mathbf{z}_0 + \int_0^t \mathbf{T}(t-s)\mathbf{f}(s) ds, \quad t \in [0, T],$$

die eindeutige milde Lösung von (IACP) auf  $\mathcal{H}_\lambda$ .

*Beweis.* Nach Satz 3.3.3 ist  $(-\mathcal{A})$  der Generator einer  $C_0$ -Gruppe auf  $\mathcal{H}_\lambda$  und der Beweis folgt unmittelbar aus [Paz83, Kapitel 4.2].  $\square$

Da  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  eine Gruppe auf  $\mathcal{H}_\lambda$  ist, läßt sich die Lösung  $\mathbf{z} \in C([0, T], \mathcal{H}_\lambda)$  auch auf die negative Zeitachse fortsetzen, worauf man bei einer Evolutionsgleichung jedoch verzichtet.

**Korollar 3.3.5.** *Das Anfangswertproblem 3.3.1 besitzt eine eindeutige milde Lösung  $\mathbf{u} \in C(\mathbb{R}_+, H) \cap C^1(\mathbb{R}_+, L)$ .*

*Beweis.* Da  $\mathbf{f} \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{H}_\lambda)$ , ist  $\mathbf{f} \in \mathcal{L}^1([0, T], \mathcal{H}_\lambda)$  für jedes  $T > 0$ . Nach Satz 3.3.4 existiert dann auf jedem Intervall  $[0, T]$ , somit also auf ganz  $\mathbb{R}_+$ , eine eindeutige milde Lösung  $\mathbf{z} = (\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}) \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{H}_\lambda)$ . Deren erste Komponente ist gerade die milde Lösung des Anfangswertproblems 3.3.1.  $\square$

### 3.3.3 Stabilitätsabschätzungen in der Energiehalbnorm

Die optimale Stabilitätsabschätzung erzielt man bei Anfangswertproblemen der Art

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}(t), \mathbf{v} \rangle_L + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = 0 & \text{für alle } \mathbf{v} \in H, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \\ \dot{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{v}_0 \end{cases}$$

insbesondere dann, wenn  $b : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$  eine  $H$ -elliptische Bilinearform ist. In diesem Fall induziert  $b$  nämlich die sogenannte Energienorm auf  $H$ ,

$$\|\mathbf{u}\|_b^2 := b(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \quad \text{für alle } \mathbf{u} \in H.$$

Die  $C_0$ -Lösungsgruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  des zugehörigen abstrakten Cauchy Problems ist dann unitär auf dem Hilbertraum  $(H, b(\cdot, \cdot)) \times L$ , was sich in der resultierenden Energiegleichung

$$\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_L^2 + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{u}(t)) = \|\dot{\mathbf{u}}_0\|_L^2 + b(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_0) \quad (3.17)$$

für die Lösung  $\mathbf{u} \in C(\mathbb{R}_+, H) \cap C^1(\mathbb{R}_+, L)$  widerspiegelt.

Leider ist die Bilinearform  $b$  des Anfangswertproblems 3.3.1 nur nichtnegativ und

$$b(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \|\mathbf{A}^{1/2} \mathbf{u}\|_L^2 \quad \text{für alle } \mathbf{u} \in H \quad (3.18)$$

definiert lediglich eine Halbnorm  $|\cdot|_b$  auf  $H$ . Die üblichen Techniken zum Beweis der Energiegleichung (3.17) auf Hilberträumen können demnach nicht angewendet werden. Aus dem Theorem über beschränkte Störungen [EnNa00,III,Thm.1.3] läßt sich aber wenigstens die Quasikontraktivität der Lösungsgruppe des Anfangswertproblems 3.3.1 zeigen. Für  $\lambda > 0$  ist der Operator

$$\mathcal{A}_\lambda := \mathcal{B}_\lambda - \mathcal{A} := \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\lambda \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{A} & 0 \end{pmatrix}$$

mit  $D(\mathcal{A}_\lambda) = D(\mathcal{A})$  nämlich schiefsymmetrisch auf  $\mathcal{H}_\lambda$  und erzeugt eine unitäre Gruppe. Da  $\mathcal{B}_\lambda$  ein beschränkter Operator auf  $\mathcal{H}_\lambda$  mit Norm  $\sqrt{\lambda}$  ist, erfüllt die von  $-\mathcal{A} = \mathcal{A}_\lambda - \mathcal{B}_\lambda$  erzeugte Gruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  für jedes  $\lambda > 0$  somit die Abschätzung

$$\|\mathbf{T}(t)\|_\lambda \leq e^{\sqrt{\lambda}|t|} \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}.$$

Mit anderen Techniken läßt sich diese Abschätzung noch verbessern und lineares Wachstum

$$\|\mathbf{T}(t)\|_\lambda \leq \sqrt{2}(1 + \sqrt{\lambda}|t|) \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}$$

zeigen [GoWa03, Prop.2.1]. In Anbetracht der Tatsache, daß dieses mit der Größe  $t \frac{\sin(t\sqrt{m})}{t\sqrt{m}}$  bereits in der Lösungsgruppe  $(\tilde{\mathbf{T}}(t))$  enthalten ist, ein nicht sonderlich überraschendes Ergebnis. Es bringt zum Ausdruck, daß sich die Lösung in der Norm  $\|\cdot\|_\lambda$  aufschaukeln kann. Man ist daran interessiert, eine Norm oder wenigstens Halbnorm  $|\cdot|_?$  zu finden, die diesen Effekt nicht messen kann und für alle  $\mathbf{z} = (\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in \mathcal{H} = H \times L$

$$|\mathbf{T}(t)\mathbf{z}|_? = |\mathbf{z}|_?$$

erfüllt. Der geeignete Kandidat hierfür ist die Energiehalbnorm  $|\cdot|_b$ , definiert durch

$$|\mathbf{z}|_b^2 = b(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + \|\mathbf{v}\|_L^2. \quad (3.19)$$

Zum Beweis schneidet man den Kern  $N := N(\mathbf{A})$  des Operators  $\mathbf{A}$  heraus und betrachtet die homogene abstrakte Wellengleichung (AWG) zunächst auf dem Quotienten-Hilbertraum  $L_N := L/N$ . Dies sind gerade die rotationsfreien Lösungen von (AWG) und die nichtnegative Bilinearform  $b(\cdot, \cdot)$  definiert wegen (3.18) ein Skalarprodukt auf dem unvollständigen inneren Quotientenraum  $H_{N,b} := (H/N, b(\cdot, \cdot))$ . Dessen Vervollständigung  $\overline{H}_{N,b}$  bezeichnet man als Energieraum und betrachtet das abstrakte Cauchyproblem auf dem Hilbertraum  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b} := \overline{H}_{N,b} \times L_N$  mit

$$\|\mathbf{z}\|_b^2 = b(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + \|\mathbf{v}\|_L^2 \quad \text{für alle } \mathbf{z} = (\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in \overline{\mathcal{H}}_{N,b}.$$

**Satz 3.3.6.** *Der Operator  $(-\mathbf{A})$  erzeugt eine unitäre  $C_0$ -Gruppe auf dem Hilbertraum  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$  und*

$$\mathbf{z}(t) = \mathbf{T}(t)\mathbf{z}_0 \quad (3.20)$$

ist die eindeutige milde Lösung von (ACP) auf  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$ .

*Beweis.* Man betrachtet zunächst das homogene (ACP) auf  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$ . Analog zum Beweis von Satz 3.3.3 ist die  $C_0$ -Gruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  auf  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$  durch

$$\tilde{\mathbf{T}}(t) = \begin{pmatrix} \cos(t\sqrt{m}) & \frac{1}{\sqrt{m}} \sin(t\sqrt{m}) \\ -\sqrt{m} \sin(t\sqrt{m}) & \cos(t\sqrt{m}) \end{pmatrix}$$

auf  $\tilde{\mathcal{H}}_{N,b} = \tilde{V} \times \mathcal{L}^2(\Omega, \mathbb{R})$  gegeben. Dabei bezeichnet  $\tilde{V}$  die Vervollständigung von  $D(\sqrt{m})$  in der Norm  $\|\sqrt{m} \cdot\|_L$ . Seien  $\tilde{u} \in D(m)$  und  $\tilde{v} \in D(\sqrt{m})$ . Da

$$\left\| \tilde{\mathbf{T}}(t) \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} \right\|_{N,b}^2 = \|\sqrt{m} \cos(t\sqrt{m})\tilde{u} + \sin(t\sqrt{m})\tilde{v}\|_L^2 + \|\cos(t\sqrt{m})\tilde{v} - \sqrt{m} \sin(t\sqrt{m})\tilde{u}\|_L^2$$

ist mit  $\tau := t\sqrt{m}$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\| \tilde{\mathbf{T}}(t) \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} \right\|_{N,b}^2 &= 2 \{ \langle \sqrt{m} \cos(\tau)\tilde{u} + \sin(\tau)\tilde{v}, \sqrt{m} \cos(\tau)\tilde{v} - m \sin(\tau)\tilde{u} \rangle_L \\ &\quad + \langle \cos(\tau)\tilde{v} - \sqrt{m} \sin(\tau)\tilde{u}, -\sqrt{m} \sin(\tau)\tilde{v} - m \cos(\tau)\tilde{u} \rangle_L \} \\ &= 0 \end{aligned}$$

und  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  unitär auf  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$ . Der Rest der Behauptungen über den Generator  $(-\mathbf{A})$  und die milde Lösung folgt aus dem Beweis von Satz 3.3.3.  $\square$

Bleibt noch der Rotationsanteil auf dem Kern  $N$  von  $\mathbf{A}$  zu untersuchen. Hier ist  $\mathbf{A} = 0$  und die abstrakte Wellengleichung

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{A}\mathbf{u}(t) = 0 & \text{auf } N, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{n}_1 \in N, \\ \dot{\mathbf{u}}(0) = \mathbf{n}_2 \in N \end{cases}$$

bzw. das zugehörige abstrakte Cauchyproblem

$$\begin{cases} \dot{z}(t) + \mathcal{A}z(t) = 0, & t \geq 0, \\ z(0) = z_0 \end{cases}$$

besitzt auf  $N \times N$  für  $z_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix}$  die Lösung

$$z(t) = \mathbf{T}(t)z_0 = \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_2 + t\mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix}.$$

Auf dem Produktraum  $N \times N$  definiert die  $\|\cdot\|_b$ -Norm ebenfalls nur eine Halbnorm  $|\cdot|_b$  mit

$$\begin{aligned} \left| \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix} \right|_b^2 &= b(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1) + \|\mathbf{n}_2\|_L^2 = \|\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{n}_1\|_L^2 + \|\mathbf{n}_2\|_L^2 \\ &= \langle \mathbf{A}\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1 \rangle + \|\mathbf{n}_2\|_L^2 = \|\mathbf{n}_2\|_L^2 \quad \forall (\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) \in N \times N. \end{aligned}$$

Wie auf dem Raum  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$  gilt demnach auch hier

$$\left| \mathbf{T}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix} \right|_b^2 = \left| \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix} \right|_b^2, \quad (3.21)$$

woraus man die gesuchte Abschätzung in der Energiehalbnorm  $|\cdot|_b$  ableiten kann.

**Korollar 3.3.7.** Die eindeutige milde Lösung von (IACP) aus Satz 3.3.4 erfüllt auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = H \times L$  die Abschätzung

$$|\mathbf{T}(t)z|_b = |z|_b, \quad \text{für alle } z \in \mathcal{H}.$$

*Beweis.* Sei  $z = (\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in \mathcal{H}$  und  $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2 \in N$ , dem Kern von  $\mathbf{A}$ . Es ist  $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{x} + \mathbf{n}_1, \mathbf{y} + \mathbf{n}_2)$  mit  $\mathbf{x} \in N^\perp$  in  $H$  und  $\mathbf{y} \in N^\perp$  in  $L$ , die mit den Quotientenräumen  $H_{N,b}$  und  $L_N$  identifiziert werden können. Es bezeichne  $\mathcal{H}_{N,b} := H_{N,b} \times L_N$  den in  $\overline{\mathcal{H}}_{N,b}$  dichten Teilraum. Nach Satz 3.3.3 läßt die Gruppe  $(\mathbf{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$  den Raum  $\mathcal{H}_\lambda$ , also  $\mathcal{H}_{N,b} \oplus N$  und somit auch  $\mathcal{H}_{N,b}$ , invariant. Damit ist einerseits nach Satz 3.3.6

$$\left\| \mathbf{T}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_b = \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_b$$

und andererseits gilt nach (3.21)

$$\left| \mathbf{T}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix} \right|_b = \left| \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix} \right|_b.$$

Damit erhält man die gesuchte Abschätzung bezüglich der Energiehalbnorm  $|\cdot|_b$  auf  $\mathcal{H}$ , da  $\mathcal{H}$  mit  $\mathcal{H}_{N,b} \oplus N$  identifiziert werden kann.  $\square$

**Korollar 3.3.8.** Die eindeutige milde Lösung  $\mathbf{u} \in C(\mathbb{R}_+, H) \cap C^1(\mathbb{R}_+, L)$  des Anfangswertproblems 3.3.1 genügt der Stabilitätsabschätzung

$$\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_L^2 + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{u}(t)) \leq \|\dot{\mathbf{u}}_0\|_L^2 + b(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_0) + \int_0^t \|\mathbf{f}(s)\|_L^2 ds.$$

Ist  $f = 0$ , so gilt die Energiegleichung

$$\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_L^2 + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{u}(t)) = \|\dot{\mathbf{u}}_0\|_L^2 + b(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_0).$$

*Beweis.* Die Lösungsgruppe der eindeutigen milden Lösung des (IACP)

$$\mathbf{z}(t) = \mathbf{T}(t)\mathbf{z}_0 + \int_0^t \mathbf{T}(t-s)\mathbf{f}(s) ds$$

aus Satz 3.3.4 erfüllt nach Korollar 3.3.7 für alle  $\mathbf{z} \in \mathcal{H}$  die Abschätzung

$$|\mathbf{T}(t)\mathbf{z}|_b = |\mathbf{z}|_b.$$

Nach Definition (3.19) der Energiehalbnorm  $|\cdot|_b$  resultiert somit aus der Abschätzung

$$|\mathbf{z}(t)|_b \leq |\mathbf{T}(t)\mathbf{z}_0|_b + \int_0^t |\mathbf{T}(t-s)\mathbf{f}(s)|_b ds$$

für die Lösung des inhomogenen Anfangswertproblems neben der gesuchten Stabilitätsabschätzung auch die Energiegleichung

$$\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_L^2 + b(\mathbf{u}(t), \mathbf{u}(t)) = \|\dot{\mathbf{u}}_0\|_L^2 + b(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_0)$$

für die Lösung des zugehörigen homogenen Anfangswertproblems 3.3.1. □

## Kapitel 4

# Schallausbreitung in adiabatischen Fluiden

Die Schallausbreitung in einem kompressiblen Fluid wird durch die akustische Wellengleichung (3.15) beschrieben, welche im Eulerschen Modell der Fluidodynamik aus der Linearisierung der Kontinuitätsgleichung (3.1) und Momentengleichung (3.2) um einen Zustand konstanter Massendichte und Geschwindigkeit Null resultiert. Liegt der adiabatischen Bewegung eines kompressiblen Fluids hingegen das Lagrangesche Modell zugrunde, so leitet sich nach Kapitel 3.1 die akustische Wellengleichung aus der Linearisierung der Lagrange-schen Bewegungsgleichung (3.11) um den Gleichgewichtszustand konstanter Massendichte. Von einem Lagrangeschen Verfahren zur Simulation kompressibler Strömungen wie der Methode der Finiten Massen erwartet man daher, daß die um den Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte linearisierten Bewegungsgleichungen auf eine konvergente Diskretisierung der akustischen Wellengleichung führen und somit die Schallausbreitung in einem kompressiblen Fluid korrekt erfaßt.

Das vorliegende Kapitel zeigt die Fähigkeit der Methode der Finiten Massen die Schallausbreitung in korrekter Form zu reproduzieren und macht eine umfassende Konvergenzanalyse in adiabatischen Fluiden, bei denen die innere Energie ausschließlich eine Funktion der Massendichte darstellt. Beschränkt man sich auf Teilchen, die sich im Raum zwar frei bewegen, dabei jedoch ihre Größe, Orientierung oder Form nicht verändern können, also ausschließlich translatorische Freiheitsgrade besitzen, so ist die Konvergenz quadratisch. Angesichts des Variationscharakters der Methode der Finiten Massen überrascht dieses Ergebnis nicht sonderlich und wurde bereits in [Yse01] erkannt. Der limitierende Faktor für die Konvergenzordnung ist die Tatsache, daß die Teilchen als unabhängige Einheiten aufgefaßt werden und die Summe der kinetischen Energien der Einzelteilchen (2.22) anstelle der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie in die Lagrange-funktion eingeht. Bildet man stattdessen die Lagrange-funktion aus der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie, so führt dies über einem geeigneten Würfelgitter auf ein Differenzenverfahren, mit dem eine beliebige Konvergenzrate erzielt werden kann. Es liegt sogar Superkonvergenz in den Gitterpunkten vor. Im zweiten Abschnitt wird der allgemeine Fall deformierbarer Teilchen untersucht, bei dem neben den linearisierten Bewegungsgleichungen der Teilchenpositionen auch die der Deformationen aufgestellt werden müssen. Es stellt sich heraus, daß die Lösung des resultierenden Differenzenverfahrens in den Teilchenpositionen immer noch quadratisch gegen die Lösung der akustischen Wellengleichung konvergiert, während in den Teilchendeformationen lineare Konvergenz gegen deren Gradienten vorliegt. Auch hier kann eine beliebig hohe Konvergenzrate erzielt werden, wenn man mit der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie in die Lagrange-funktion eingeht. Die auf diese Art modifizierte Methode der Finiten Massen stellt eine Galerkin Diskretisierung der akustischen Wellengleichung dar, was im darauffolgenden Kapitel 5 thematisiert wird. Eine kurze Erläuterung der numerischen Realisierung des Differenzenverfahrens schließt das vorliegende Kapitel ab.



## 4.1 Schallausbreitung mit Teilchen konstanter Größe

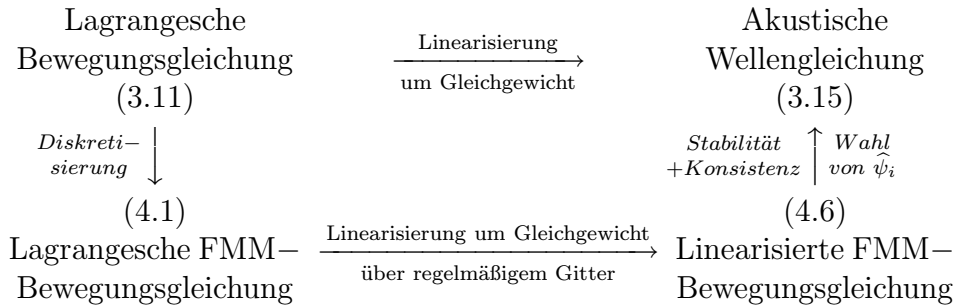
Das einfachste Modell der Methode der Finiten Massen basiert auf Teilchen, die lediglich translatorische Freiheitsgrade  $\mathbf{q}_i(t)$  besitzen und ihre Größe  $\mathbf{H}_i(t) = \mathbf{I}$  nicht ändern können. Um die Schallausbreitung eines adiabatischen Fluids in diesem Modell mit Teilchen konstanter Größe zu beschreiben, genügt es demnach die Bewegungsgleichungen der Teilchenpositionen

$$m_i \ddot{\mathbf{q}}_i = \mathbf{F}_i \quad (4.1)$$

mit den Kräften

$$\mathbf{F}_i = \int \varepsilon'(\rho) \nabla \psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

um den Gleichgewichtszustand konstanter Masse zu linearisieren. Es stellt sich heraus, daß man unter bestimmten Voraussetzungen an die Formfunktionen  $\hat{\psi}_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$  über einem regelmäßigen Gitter eine Diskretisierung zweiter Ordnung der akustischen Wellengleichung erhält. Der Beweis beruht auf dem bekannten Prinzip, wonach sich die Konvergenz aus der Stabilität und Konsistenz der Diskretisierung ableitet. Das folgende Diagramm veranschaulicht diese Vorgehensweise und spiegelt deren wichtigste Aspekte wieder.



Die Methode der Finiten Massen verwendet bei der Diskretisierung der Lagrangeschen Bewegungsgleichung (3.11) die Kinetische Energie (2.22) der Einzelteilchen. Um die Konvergenzrate in die Höhe zu treiben, ist es erforderlich, das Teilchenmodell geringfügig zu modifizieren und stattdessen mit der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie (3.9) in die Lagrangefunktion einzugehen.

In den folgenden Abschnitten werden die Idee und Vorgehensweise zur Linearisierung der Lagrangeschen Bewegungsgleichung um den Gleichgewichtszustand konstanter Masse sowie das Konzept zur Verbesserung der Konvergenzrate aus [Yse01] kurz erläutert und die wichtigsten Resultate dieser Arbeit vorgestellt.

### 4.1.1 Die linearisierten Bewegungsgleichungen über regelmäßigen Gittern

Beschränkt man sich auf Teilchen mit ausschließlich translatorischen Freiheitsgraden, so bewegen sich die Punkte  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$  des  $i$ -ten Teilchens entlang der Tajektorien  $t \mapsto \mathbf{q}_i(t) + \mathbf{y}$  und anhand der in (2.13) festgelegten Notation bezeichnet  $\psi_i(\mathbf{x}) := \hat{\psi}_i(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i(t))$  die im Raum transformierte Formfunktion. Die wesentliche Idee besteht nun darin, zu unendlich vielen Teilchen überzugehen, die um die Gleichgewichtspunkte  $\bar{\mathbf{q}} := (\bar{\mathbf{q}}_1, \bar{\mathbf{q}}_2, \dots)$  oszillieren, so daß die Gesamtmasse im Gleichgewicht

$$\bar{\rho} = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{\psi}_i(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^{\infty} \hat{\psi}_i(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)$$

einen konstanten und positiven Wert auf dem ganzen  $\mathbb{R}^d$  annimmt. Da unendlich viele Teilchen um die Gleichgewichtslage oszillieren, enthält das System natürlich auch unendlich viel innere Energie

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

Jedoch bleiben in einer Umgebung, in der die Teilchen genügend nahe an den Gleichgewichtspunkten liegen, die Kräfte  $\mathbf{F}_i$  wohldefiniert und können dort mittels einer Taylorentwicklung linearisiert werden. Befindet sich das System einmal im Gleichgewicht, so wird es dieses zu keinem Zeitpunkt mehr verlassen, da die Kräfte  $\bar{\mathbf{F}}_i := \mathbf{F}_i(\bar{\mathbf{q}})$  dort verschwinden. Man erhält innerhalb einer Umgebung des  $i$ -ten Teilchens die Ableitungen

$$\mathbf{F}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{q}_j} = - \int \varepsilon''(\rho) [\nabla \psi_i] [\nabla \psi_j]^T d\mathbf{x} + \delta_{ij} \mathbf{Q}_{ii},$$

deren Matrizen  $\mathbf{Q}_{ii}$  auf der Blockdiagonalen durch

$$\mathbf{Q}_{ii} = \int \varepsilon''(\rho) [\nabla \psi_i] [\nabla \rho]^T d\mathbf{x}$$

gegeben sind (vgl. [Yse01, Lemma1]). Über dem Gleichgewicht mit konstanter Massendichte  $\rho(\mathbf{x}) = \bar{\rho}$  verschwinden die Matrizen  $\mathbf{Q}_{ii}$  und

$$\bar{\mathbf{F}}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{q}_j}(\bar{\mathbf{q}}) = - \int \varepsilon''(\bar{\rho}) [\nabla \bar{\psi}_i] [\nabla \bar{\psi}_j]^T d\mathbf{x}. \quad (4.2)$$

Schreibt man die Teilchenpositionen in der Form  $\mathbf{q}_i(t) = \bar{\mathbf{q}}_i + \mathbf{d}_i(t)$ , so geht die linearisierte Bewegungsgleichung (4.1) in die Darstellung

$$\mathbf{d}_i''(t) = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{\infty} \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j(t) \quad (4.3)$$

über. Da im Träger des  $i$ -ten Teilchens endlich viele Teilchen liegen, ist die Summe auf der rechten Seite endlich und die Kräfte wohldefiniert. Die linearisierten Bewegungsgleichungen (4.3) werden nun in den Gitterpunkten eines regelmäßigen, unendlich ausgedehnten Gitter angegeben.

**Definition 4.1.1.** Sind die Vektoren  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d \in \mathbb{R}^d$  linear unabhängig, so bildet die Menge der Punkte

$$\mathbf{G} := \left\{ \sum_{\mu=1}^d k_{\mu} \mathbf{e}_{\mu} : k_{\mu} \in \mathbb{Z} \right\}$$

ein regelmäßiges Gitter mit der Einheitszelle

$$\mathbf{Z} := \left\{ \sum_{\mu=1}^d \lambda_{\mu} \mathbf{e}_{\mu} : 0 \leq \lambda_{\mu} \leq 1 \right\}.$$

Wir betrachten im folgenden ausschließlich regelmäßige Gitter  $\mathbf{G}$ , deren Einheitszelle das Volumen eins besitzt, also  $\text{vol}(\mathbf{Z}) = 1$  gilt. Schreibt man die Gleichgewichtspunkte in der Form

$$\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}, \bar{\mathbf{q}}_j = h\mathbf{l} \quad \mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathbf{G}, \quad (4.4)$$

so bilden diese im Falle der Einheitsbasis  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d$  ein Würfelgitter der Gitterweite  $h > 0$ . Geht man davon aus, daß die Massenverteilung aller Teilchen durch dieselbe Lipschitz-stetige, stückweise stetig differenzierbare Formfunktion

$$\hat{\psi}_i(\mathbf{y}) = \frac{m}{h^d} \psi\left(\frac{\mathbf{y}}{h}\right).$$

mit kompaktem Träger gegeben ist, so besitzen mit der Normierungsbedingung (2.4) alle Teilchen dieselbe Masse

$$m_i = \int \hat{\psi}_i(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \frac{m}{h^d} \int \psi\left(\frac{\mathbf{y}}{h}\right) d\mathbf{y} = m \int \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = m.$$

Nimmt man zusätzlich an, daß sich die Translationen der Formfunktion um Gitterpunkte zu einer Konstanten addieren, dann ist diese sogar eindeutig bestimmt.

**Lemma 4.1.2.** *Addieren sich Translationen der Formfunktion  $\psi$  zu einer Konstanten, so ist wegen  $\text{vol}(\mathbf{Z}) = 1$*

$$\int \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \Leftrightarrow \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x} - \mathbf{k}) = 1.$$

*Beweis.* Vgl. [Yse01, Lemma 2]. □

Auf dem unendlich ausgedehnten Gitter  $\mathbf{G}$  vereinfacht sich die Gesamtmasseendichte des Gleichgewichtszustandes

$$\bar{\rho} = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \frac{m}{h^d} \psi\left(\frac{\mathbf{x} - h\mathbf{k}}{h}\right)$$

demnach zu der einfachen Beziehung

$$\bar{\rho} = \frac{m}{h^d}$$

zwischen der Gesamtmasseendichte  $\bar{\rho}$ , den Teilchenmassen  $m$  und der Gitterweite  $h$ . Zur Berechnung der Koeffizientenmatrizen (4.2) aus der linearisierten Bewegungsgleichung (4.3) wird das folgende Potential eingeführt.

**Definition und Satz 4.1.3.** *Das Potential  $U : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  mit*

$$U(\mathbf{x}) := \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4.5)$$

*besitzt die Eigenschaften*

- (1)  *$U$  ist gerade, d.h.  $U(-\mathbf{x}) = U(\mathbf{x})$ .*

- (2) Ist  $\psi$  eine Lipschitz-stetige, stückweise stetig differenzierbare Funktion mit kompaktem Träger, so ist  $U$  eine zweimal stetig differenzierbare Funktion mit kompaktem Träger und besitzt die Hesse-Matrix

$$\mathbf{U}''(\mathbf{x}) = - \int [(\nabla\psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})][(\nabla\psi)(\mathbf{y})]^T d\mathbf{y}.$$

- (3)  $\mathbf{U}''$  ist gerade.

*Beweis.* Natürlich ist  $U$  gerade und (1) und (3) folgen. Zum Beweis von (2) berechnet man zuerst

$$\nabla U(\mathbf{x}) = \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y})) d\mathbf{y} = - \int (\nabla\psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

Durch Transformation  $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{x}$  erhält man

$$\nabla U(\mathbf{x}) = - \int (\nabla\psi)(\tilde{\mathbf{y}})\psi(\tilde{\mathbf{y}} + \mathbf{x}) d\tilde{\mathbf{y}}$$

und folglich durch erneute Differentiation nach  $\mathbf{x}$

$$\mathbf{U}''(\mathbf{x}) = - \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} ((\nabla\psi)(\tilde{\mathbf{y}})\psi(\tilde{\mathbf{y}} + \mathbf{x})) d\tilde{\mathbf{y}} = - \int [(\nabla\psi)(\tilde{\mathbf{y}})][(\nabla\psi)(\tilde{\mathbf{y}} + \mathbf{x})]^T d\tilde{\mathbf{y}},$$

woraus durch Rücktransformation die Behauptung folgt.  $\square$

Mit diesem Potential besitzen die linearisierten Bewegungsgleichungen (4.3) über dem Gitter  $\mathbf{G}$  die Darstellung

$$\mathbf{d}''_{\mathbf{k}}(t) = c^2 h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{U}''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t), \quad (4.6)$$

zu deren Berechnung man lediglich die Hessematrix des Potentials in endlich vielen, von Null verschiedenen, Gitterpunkten benötigt.

#### 4.1.2 Stabilität der Finiten Massen-Diskretisierung

Zum Beweis der Stabilität der Finiten Massen-Diskretisierung faßt man die Störungen zu Folgen  $\mathbf{d} = (\mathbf{d}_i)$  zusammen. Die linearisierte Bewegungsgleichung (4.3) ist dann äquivalent zu der Operatorgleichung

$$\mathbf{d}''(t) = \mathbf{T} \mathbf{d}(t) \quad (4.7)$$

im Hilbertraum  $H$  der Folgen  $\mathbf{d}$  mit endlicher Norm

$$\|\mathbf{d}\|_H^2 := \sum_{i=1}^{\infty} m_i |\mathbf{d}_i|^2 < \infty.$$

Unter der Voraussetzung, daß die Zahl der Wechselwirkungspartner eines jeden Teilchens gleichmäßig beschränkt ist und eine gemeinsame obere Schranke für die Norm der Koeffizientenmatrizen  $\mathbf{F}_{ij}$  existiert, ist  $\mathbf{T} : H \rightarrow H$  ein beschränkter Operator und die Operatorgleichung (4.7) besitzt für gegebene Anfangswerte  $\mathbf{d}(0), \mathbf{d}'(0) \in H$  eine eindeutige Lösung

$\mathbf{d}, \mathbf{d}' : [0, \infty) \rightarrow H$  im Hilbertraum  $(H, \|\cdot\|_H)$ . Da  $\mathbf{T}$  auch selbstadjungiert und nichtpositiv ist [Yse01, Theorem 2], ist die linearisierte Gesamtenergie

$$\mathcal{E}_{lin}(t) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{d}'(t), \mathbf{d}'(t) \rangle - \frac{1}{2} \langle \mathbf{d}(t), \mathbf{T} \mathbf{d}(t) \rangle \quad (4.8)$$

eine Erhaltungsgrösse und die kinetische Energie für alle Zeiten  $t \geq 0$  durch die Anfangsenergie  $\mathcal{E}_{lin}(0)$  beschränkt. Die Diskretisierung ist demnach stabil.

### 4.1.3 Konsistenz und Konvergenz mit der akustischen Wellengleichung

Der Beweis, daß die über dem Gitter linearisierten Gleichungen (4.3) eine konsistente und wegen der Stabilität auch konvergente Diskretisierung der akustischen Wellengleichung (3.15) liefern, ist anspruchsvoll und nur unter bestimmten Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  richtig. Eine Schlüsselrolle spielt dabei der folgende Satz.

**Satz 4.1.4.** *Für alle vektorwertigen Polynome  $\mathbf{p} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  vom Grad  $2p+1$  ist die Bedingung*

$$h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{U}''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{p}(h\mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \nabla(\operatorname{div} \mathbf{p})(h\mathbf{l}) \quad (4.9)$$

genau dann erfüllt, wenn für alle skalarwertigen Polynome  $P : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  vom Grad  $2p+1$

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} P(\mathbf{k}) \mathbf{U}''(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k}) \mathbf{P}''(\mathbf{k}) \quad (4.10)$$

gilt. Dies ist genau dann der Fall, wenn (4.10) nur für alle homogenen Polynome  $P$  vom Grad kleiner gleich  $2p$  gilt.

*Beweis.* Vgl. [Yse01, Theorem 4]. □

Da  $U$  gerade ist, besitzt jedes lineare Polynom  $P : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  nach Lemma 4.1.2 die Darstellung

$$P(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l}) P(\mathbf{l}),$$

und die linearisierten Bewegungsgleichungen (4.3) sind konsistent mit der akustischen Wellengleichung. In diesem Sinne ist die Gleichung

$$h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{U}''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{p}(h\mathbf{l}) = \nabla(\operatorname{div} \mathbf{p})(h\mathbf{k})$$

für alle vektorwertigen Polynome  $\mathbf{p}$  genau dann erfüllt, wenn (4.10) für alle skalarwertigen Polynome  $P$  gilt. Ein Kriterium dafür gibt der nächste Satz.

**Satz 4.1.5.** *Spannen die Translationen  $U(\cdot - \mathbf{k})$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$ , von  $U$  den Raum der Polynome vom Grad  $2p$  auf, so ist die Konsistenzbedingung (4.10) aus Satz 4.1.4 für alle Polynome vom Grad  $2p+1$  erfüllt.*

*Beweis.* Vgl. [Yse01, Theorem 5]. □

Die Konsistenzbedingung (4.9) ist also dann erfüllt, wenn die Translationen  $U(\cdot - \mathbf{k})$  des Potentials  $U$  den Raum der Polynome  $2p$ -ten Grades aufspannen. Ist  $\mathbf{G}$  ein Würfelgitter und die Formfunktion

$$\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{\psi}(\mathbf{x}_\mu) \quad (4.11)$$

das Tensorprodukt einer ebenfalls Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren Funktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger, so ist das Potential

$$U(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{U}(\mathbf{x}_\mu) \quad (4.12)$$

ebenfalls ein Tensorprodukt mit der Funktion  $\tilde{U} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  definiert durch

$$\tilde{U}(x) = \int \tilde{\psi}(x - y) \tilde{\psi}(y) dy. \quad (4.13)$$

Der  $B_n$ -Spline (2.8) ist für jedes natürliche  $n$  eine  $(n - 2)$ -mal stetig differenzierbare Funktion und stellt für  $n \geq 3$  eine zulässige Wahl für die Formfunktion  $\tilde{\psi} = B_n$  dar. Ferner umfassen die Translationen  $B_n(\cdot - \mathbf{k})$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}$  den Raum der Polynome vom Grad  $n - 1$ . Da B-Splines gerade sind, ist das eindimensionale Potential die Faltung  $\tilde{U} = B_n * B_n = B_{2n}$  und die Translationen von  $\tilde{U}$  bzw.  $U$  spannen den Raum der skalarwertigen bzw.  $d$ -vektorwertigen Polynome vom Grad  $2n - 1$  auf. Besteht demnach die Formfunktion (4.11) aus den B-Splines  $B_n = \tilde{\psi}$ , so führt dies für  $n \geq 3$  zu konsistenten Diskretisierungen der akustischen Wellengleichung für alle vektorwertigen Polynome vom Grad  $2n - 1$ . Für Polynome vom Grad drei wird dies durch lineare B-Splines  $B_2$  und für Polynome vom Grad fünf durch quadratische B-Splines  $B_3$  erreicht. Die zugehörigen Diskretisierungen (4.6) konvergieren für jedes  $\tilde{\psi} = B_n$  quadratisch gegen die Lösungen der akustischen Wellengleichung.

#### 4.1.4 Superkonvergenz in den Gitterpunkten

Durch eine geringfügige Modifikation des zugrunde liegenden Teilchenmodells läßt sich sogar eine beliebig hohe Konvergenzrate und Superkonvergenz in den Gitterpunkten erzielen. Die kinetische Gesamtenergie, die bisher dazu verwendet wurde, um die Lagrangefunktion aufzustellen, bestand aus der kinetischen Energie der Einzelteilchen. In der vorliegenden Situation oszillieren jedoch unendlich viele Teilchen um die Gleichgewichtspunkte (4.4) und es bietet sich an, mit einer kinetischen Energie in die Lagrangefunktion einzugehen, die nicht nur von den Geschwindigkeiten der Einzelteilchen, sondern auch von deren Gleichgewichtslage abhängt. Der kanonische Kandidat hierfür ist die kontinuumsmechanische kinetische Energie (3.9). Mit der Deformation  $\mathbf{u} : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$  des vom adiabatischen Fluid eingenommenen Volumens  $\Omega$  ist diese über der Gleichgewichtslage mit konstanter Massendichte von der Gestalt

$$E_K = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \bar{\rho} |\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}. \quad (4.14)$$

Ausgehend von der Diskretisierung

$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_{\mathbf{k}}(t)$$

der Deformation  $\mathbf{u}$  resultieren mit derselben Vorgehensweise wie bei der Herleitung von (4.6) die linearisierten Bewegungsgleichungen

$$\sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{d}_{\mathbf{l}}''(t) = c^2 h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t).$$

Diese erfüllen die Konsistenzbedingung aus Satz 4.1.4 und können stabil nach  $\mathbf{d}_{\mathbf{k}}''$  aufgelöst werden, wenn die skalare Funktion

$$\alpha(h\boldsymbol{\nu}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \cos(h\boldsymbol{\nu}) U(\mathbf{k})$$

mit  $\alpha(h\boldsymbol{\nu}) = 1 + O(h^2)$  von Null verschieden ist, was leicht durch Fourier-Transformation gezeigt werden kann. Eine ausführliche Analyse dieser Funktion findet in [Yse01] statt. Insbesondere ist  $\alpha$  über einem Würfelgitter stets von Null verschieden, wenn die Formfunktion aus einem Tensorprodukt von  $B_n$ -Splines beliebigen Grades besteht. In diesem Fall liegt demnach Superkonvergenz in den Gitterpunkten vor und eine beliebige Konvergenzrate kann erzielt werden. Mit quadratischen  $B_n$ -Splines ist diese von vierter Ordnung, während für Tensorprodukte von kubischen Splines bereits Konvergenz sechster Ordnung vorliegt.

## 4.2 Schallausbreitung mit deformierbaren Teilchen

Den weiteren Untersuchungen wird das allgemeine Modell der Methode der Finiten Massen zugrunde gelegt. In diesem besitzen die Teilchen nicht nur translatorische Freiheitsgrade, sondern können sich auch linear deformieren und damit Verformungen innerhalb einer Strömung wiedergeben. Neben den Bewegungsgleichungen für die Teilchenpositionen sind im allgemeinen Modell zusätzlich die Bewegungsgleichungen der Deformationen eines jeden Teilchens um den Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte zu linearisieren. Das hieraus in Kapitel 4.2.4 resultierende Differenzenverfahren erfaßt die Schallausbreitung eines adiabatischen Fluids in korrekter Form und liefert über einem regelmäßigen Würfelgitter eine konvergente Diskretisierung der akustischen Wellengleichung. Nach dem bewährten Prinzip „Stabilität und Konsistenz ergibt Konvergenz“ wird in den beiden Abschnitten 4.2.3 und 4.2.5 gezeigt, daß die Differenzgleichung der Teilchenpositionen eine quadratische Diskretisierung der akustischen Wellengleichung liefert und die Lösung der zugehörigen Gleichung der Deformationen linear gegen den Gradienten der akustischen Wellengleichung konvergiert.

Bevor die linearisierten Bewegungsgleichungen der Teilchenpositionen und Deformationen in Kapitel 4.2.2 jedoch aufgestellt und das zugehörige Differenzenverfahren abgeleitet werden kann, benötigt man sowohl eine Linearisierung der Kräfte als auch eine Linearisierung der Drehmomente um den Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte.

### 4.2.1 Linearisierung der Kräfte und Drehmomente

Sind neben den translatorischen Freiheitsgraden  $\mathbf{q}_i(t) \in \mathbb{R}^d$  auch lineare Verformungen  $\mathbf{H}_i(t) \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  der Teilchen zugelassen, so bewegen sich die Teilchen entlang der Trajektorien

$$t \rightarrow \mathbf{q}_i(t) + \mathbf{H}_i(t)\mathbf{y}, \quad \det \mathbf{H}_i(t) > 0.$$

Außer den Bewegungsgleichungen für die Positionen müssen nun zusätzlich die Bewegungsgleichungen der Deformationen (2.24), um den Gleichgewichtszustand linearisiert werden. Für adiabatische Fluide sind diese nach (2.25) von der Gestalt

$$m_i \ddot{\mathbf{q}}_i(t) = - \int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} d\mathbf{x}, \quad (4.15)$$

$$J m_i \ddot{\mathbf{H}}_i(t) = - \int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} d\mathbf{x}. \quad (4.16)$$

Wie in (2.16) gezeigt wurde, besitzen die dabei auftretenden Fréchet-Ableitungen die Darstellung

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} = -[\nabla \psi_i][\mathbf{y}]^T - \psi_i \mathbf{H}_i^{-T} \quad (4.17)$$

mit  $\mathbf{y} = \mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i(t))$ . Beim Übergang zu unendlich vielen Teilchen, die um den Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  mit  $\bar{\mathbf{q}} = (\bar{\mathbf{q}}_i)_{i \in I}$  und  $\bar{\mathbf{H}} = (\bar{\mathbf{H}}_i)_{i \in I}$  oszillieren, bleiben in einer genügend kleinen Umgebung der Gleichgewichtslage neben den Kräften

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i} = \int \varepsilon'(\rho) \nabla \psi_i d\mathbf{x} \quad (4.18)$$



natürlich auch die Drehmomente

$$\mathbf{M}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{H}_i} = \int \varepsilon'(\rho) \left( [\nabla \psi_i][\mathbf{y}]^T + \psi_i \mathbf{H}_i^{-T} \right) d\mathbf{x} \quad (4.19)$$

wohldefiniert und man ist in der Lage, die lineare Taylorapproximation von  $\mathbf{F}_i$  und  $\mathbf{M}_i$  anzugeben. Da sowohl die Kräfte als auch die Drehmomente eine Funktion der Positionen  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_i)_{i \in I}$  und Deformationen  $\mathbf{H} = (\mathbf{H}_i)_{i \in I}$  sind, benötigt man hierfür die Ableitungen

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{q}_j}, \quad \mathbf{G}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{H}_j}, \quad \mathbf{N}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \mathbf{q}_j}, \quad \mathbf{M}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \mathbf{H}_j}, \quad (4.20)$$

die sich aus der leicht nachzurechnenden Eigenschaft

$$[\mathbf{A}\mathbf{v}][\mathbf{w}]^T = \mathbf{A}[\mathbf{v}][\mathbf{w}]^T, \quad \text{für alle } \mathbf{A} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R}) \text{ und } \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d \quad (4.21)$$

des äußeren Produkts ableiten. Wegen den Beziehungen (2.13), (2.14) gilt damit für die Drehmomente

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_i &= \int \varepsilon'(\rho(\mathbf{x})) \left( \left[ \frac{\mathbf{H}_i^{-T}}{\det \mathbf{H}_i} (\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y}) \right] [\mathbf{y}]^T + \frac{\mathbf{H}_i^{-T}}{\det \mathbf{H}_i} \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \right) d\mathbf{x} \\ &= \int \varepsilon'(\rho(\mathbf{x})) \mathbf{H}_i^{-T} \left( [(\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T + \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right) \frac{1}{\det \mathbf{H}_i} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Nach Transformation auf das Referenzteilchen via  $\mathbf{y} = \mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i)$  erhält man

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{H}_i^{-T} \int \varepsilon'(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \left( [(\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T + \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right) d\mathbf{y}. \quad (4.22)$$

Diese Gleichung der Drehmomente über dem Referenzteilchen ist der Kern weiterer Untersuchungen. Zunächst beobachtet man an dieser Darstellung die notwendige Eigenschaft unseres Modells, daß die Teilchen sich im Gleichgewicht nicht mehr deformieren. Über dem Gleichgewicht mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho}$  heben sich die beiden Terme, über die integriert wird, gegenseitig auf.

**Lemma 4.2.1.** *Unabhängig von der Wahl der Formfunktion  $\widehat{\psi}_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  gilt*

$$(1) \quad \int \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} d\mathbf{y} = m_i \mathbf{I},$$

$$(2) \quad \int [(\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T d\mathbf{y} = -m_i \mathbf{I}.$$

*Beweis.* Die erste Behauptung folgt unmittelbar aus der Definition  $m_i = \int \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$ . Durch partielle Integration über den kompakten Träger des  $i$ -ten Teilchens erhält man

$$\int (\nabla_r \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y}) y_s d\mathbf{y} = - \int \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \delta_{rs} d\mathbf{y} = -m_i \delta_{rs}$$

und damit Aussage (2). □

**Lemma 4.2.2.** *Befindet sich das System im Gleichgewicht, so bleibt es dies für alle Zeiten und es findet wegen  $\bar{\mathbf{M}}_i := \mathbf{M}_i(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = 0$  keinerlei Verformung der Teilchen mehr statt.*

*Beweis.* Offensichtlich verschwinden die Kräfte (4.18) über dem Gleichgewicht, da  $\varepsilon'(\bar{\rho})$  konstant ist. Aus (4.22) folgt mit Lemma 4.2.1 die Behauptung.  $\square$

Aus der Darstellung (4.22) lassen sich auch die zur Linearisierung der Drehmomente benötigten Ableitungen  $\mathbf{M}_{ij}$  berechnen. Allerdings benötigt man hierfür die folgenden Fréchet-Ableitungen, die auch bei der zunächst durchgeführten Linearisierung der Kräfte verwendet werden.

**Lemma 4.2.3.** *Sei  $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  stetig differenzierbar. Für  $\mathbf{A}, \mathbf{H} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  und  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$  gelten die Fréchet-Ableitungen*

$$(1) \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}} \left[ \frac{1}{\det \mathbf{H}} \psi(\mathbf{y}) \right] = - \frac{\mathbf{H}^{-T}}{\det \mathbf{H}} \psi(\mathbf{y})$$

$$(2) \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}} \left[ \frac{1}{\det \mathbf{H}} \psi(\mathbf{H}^{-1} \mathbf{x}) \right] = - \frac{\mathbf{H}^{-T}}{\det \mathbf{H}} [(\nabla \psi)(\mathbf{H}^{-1} \mathbf{x})] [\mathbf{H}^{-1} \mathbf{x}]^T - \frac{\mathbf{H}^{-T}}{\det \mathbf{H}} \psi(\mathbf{H}^{-1} \mathbf{x})$$

$$(3) \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}} \psi(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y})) = \mathbf{A}^T [(\nabla \psi)(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y}))] [\mathbf{y}]^T.$$

*Beweis.* Für eine beliebig kleine Matrix  $\mathbf{E} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  erhält man die Darstellungen

$$\det(\mathbf{H} + \mathbf{E}) = \det \mathbf{H} + (\det \mathbf{H}) \mathbf{H}^{-T} : \mathbf{E} + o(\mathbf{E})$$

sowie

$$(\mathbf{H} + \mathbf{E})^{-1} = \mathbf{H}^{-1} - \mathbf{H}^{-1} \mathbf{E} \mathbf{H}^{-1} + o(\mathbf{E}),$$

deren linearer Anteil bekanntlich die Fréchet-Ableitung von  $\det \mathbf{H}$  bzw.  $\mathbf{H}^{-1}$  ist. Mit der Quotientenregel findet man die Ableitung von  $\mathbf{H} \mapsto \frac{1}{\det \mathbf{H}}$  demnach als die lineare Abbildung

$$\mathbf{E} \mapsto - \frac{\mathbf{H}^{-T} : \mathbf{E}}{\det \mathbf{H}}$$

und für  $\mathbf{E} = \mathbf{I}$  folgt (1). Wegen  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{A}^T \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$  erhält man aus der Produktregel die lineare Abbildung

$$\mathbf{E} \mapsto - \frac{\mathbf{H}^{-T}}{\det \mathbf{H}} (\nabla \psi)(\mathbf{H}^{-1} \mathbf{v}) \cdot \mathbf{E} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{v} - \frac{\mathbf{H}^{-T} : \mathbf{E}}{\det \mathbf{H}} \psi(\mathbf{H}^{-1} \mathbf{v})$$

als totale Ableitung von  $\mathbf{H} \mapsto \frac{1}{\det \mathbf{H}} \psi(\mathbf{H}^{-1} \mathbf{v})$  und für  $\mathbf{E} = \mathbf{I}$  folgt auch Behauptung (2). Bleibt noch (3) zu zeigen. Bezeichnet dazu  $\tau : \mathbf{H} \mapsto \psi(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y}))$ , so gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau}{\partial H_{kl}} &= \sum_m (\nabla_m \psi)(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y})) \frac{\partial}{\partial H_{kl}} \sum_{r,s} A_{mr} H_{rs} y_s \\ &= \sum_m (\nabla_m \psi)(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y})) \sum_{r,s} A_{mr} \delta_{kr} \delta_{ls} y_s \\ &= \sum_m (\nabla_m \psi)(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y})) A_{mk} y_l = \sum_m A_{km}^T (\nabla_m \psi)(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y})) y_l \\ &= \mathbf{A}^T [(\nabla \psi)(\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{H} \mathbf{y}))] [\mathbf{y}]^T \Big|_{kl}. \end{aligned}$$

$\square$

**Definition 4.2.4.** Für beliebige Matrizen  $\mathbf{A} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  und Vektoren  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  bezeichnet man die 3-Tensoren  $\mathbf{A} \odot \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d^3}$  bzw.  $\mathbf{x} \odot \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{d^3}$ , welche für alle  $1 \leq m, n, r \leq d$  durch das Produkt

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{x} |_{mnr} := A_{mn}x_r = x_r A_{mn} = \mathbf{x} \odot \mathbf{A} |_{rmn}$$

definiert sind, als Tensorprodukt von  $\mathbf{A}$  mit  $\mathbf{x}$  bzw. von  $\mathbf{x}$  mit  $\mathbf{A}$ . Sind  $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$ , so heißt der für alle  $1 \leq m, n, r, s \leq d$  durch

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} |_{mnr s} := A_{mn}B_{rs}$$

definierte 4-Tensor  $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{d^4}$  das Kronecker-Produkt von  $\mathbf{A}$  mit  $\mathbf{B}$ .

**Bemerkung.** Das in der Standardliteratur häufig verwendete Kronecker-Produkt von quadratischen Matrizen  $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  wird üblicherweise in der Form

$$\mathbf{A} \oplus \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\mathbf{B} & \dots & a_{1d}\mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{d1}\mathbf{B} & \dots & a_{dd}\mathbf{B} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d^2 \times d^2}$$

definiert. Setzt man jedoch  $u = (m-1)d + r$  und  $v = (n-1)d + s$ , so ist obige Definition

$$\mathbf{A} \oplus \mathbf{B} |_{uv} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} |_{mnr s}$$

äquivalent zu dem gewöhnlichen Kronecker-Produkt  $\oplus$ , weshalb man namentlich keine Unterscheidung macht.

**Lemma 4.2.5.** Ist die totale Massendichte in einer Umgebung des  $i$ -ten Teilchens strikt positiv, so existieren die Ableitungen  $\mathbf{F}_{ij}, \mathbf{G}_{ij}$  und besitzen die Darstellungen

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij} &= - \int \varepsilon''(\rho) [\nabla \psi_i] [\nabla \psi_j]^T d\mathbf{x} + \delta_{ij} \mathbf{Q}_{ii}, \\ \mathbf{G}_{ij} &= \int \varepsilon''(\rho) \nabla \psi_i \odot \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{H}_j} d\mathbf{x} + \delta_{ij} (\mathbf{R}_{ii} + \mathbf{S}_{ii}). \end{aligned}$$

Die Matrizen  $\mathbf{Q}_{ii}$  auf der Blockdiagonalen sind dabei durch

$$\mathbf{Q}_{ii} = \int \varepsilon''(\rho) [\nabla \psi_i] [\nabla \rho]^T d\mathbf{x}$$

gegeben und die 3-Tensoren  $\mathbf{R}_{ii}, \mathbf{S}_{ii}$  sind von der Gestalt

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{ii} &= \int \varepsilon''(\rho) \nabla \psi_i \odot [\nabla \rho] [\mathbf{y}]^T d\mathbf{x}, \\ \mathbf{S}_{ii} &= \left( \frac{\partial \mathbf{H}_i^{-T}}{\partial \mathbf{H}_i} \right) \int \varepsilon'(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) (\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \end{aligned}$$

*Beweis.* Im Gegensatz zur Methode der Finiten Massen mit ausschließlich positionellen Freiheitsgraden hängen die Formfunktionen  $\psi_i(\mathbf{x})$  nun von  $\mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i)$  ab, was jedoch nichts an der in Abschnitt 4.1.1 angegebenen Darstellung der Ableitungen  $\mathbf{F}_{ij}$  ändert. Zum

Beweis der verbleibenden Behauptung über die Form der Ableitungen  $\mathbf{G}_{ij}$ , transformiert man die Kräfte (4.18) via  $\mathbf{y} = \mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_i)$  auf das Referenzteilchen und erhält dort

$$\mathbf{F}_i = \int \varepsilon'(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \mathbf{H}_i^{-T} (\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (4.23)$$

Da nach Lemma 4.2.3 (2)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_j}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}_j} \sum_k \frac{1}{\det \mathbf{H}_k} \widehat{\psi}_k(\mathbf{H}_k^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_k)) \\ &= -\frac{\mathbf{H}_j^{-T}}{\det \mathbf{H}_j} [(\nabla \widehat{\psi}_j)(\mathbf{H}_j^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_j))] [\mathbf{H}_j^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_j)]^T \\ &\quad - \frac{\mathbf{H}_j^{-T}}{\det \mathbf{H}_j} \widehat{\psi}_j(\mathbf{H}_j^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_j)) \end{aligned}$$

gilt, resultiert für  $i \neq j$  durch Vertauschung von Differentiation und Integration und anschließender Rücktransformation via  $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}$  aus (4.23)

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{ij} &= \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \mathbf{H}_i^{-T} (\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y}) \odot \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_j}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= - \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{x})) \nabla \psi_i(\mathbf{x}) \odot \left\{ [\nabla \psi_j(\mathbf{x})] [\mathbf{y}_j]^T + \psi_j(\mathbf{x}) \mathbf{H}_j^{-T} \right\} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet wie üblich  $\mathbf{y}_j = \mathbf{H}_j^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}_j)$ . Der Fall  $i = j$  ist ein wenig komplizierter. Zunächst liefert die Differentiation von (4.23) nach der Produktregel

$$\mathbf{G}_{ii} = \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \mathbf{H}_i^{-T} (\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y}) \odot \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_i}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) d\mathbf{y} + \mathbf{S}_{ii}.$$

Bleibt noch eine partielle Ableitung zu berechnen. Hierfür zieht man den  $i$ -ten Summanden aus der unendlichen Summe der Gesamtdichte heraus, also

$$\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) = \sum_{k \neq i} \frac{1}{\det \mathbf{H}_k} \widehat{\psi}_k(\mathbf{H}_k^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_k)) + \frac{1}{\det \mathbf{H}_i} \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}),$$

und erhält durch Differentiation nach  $\mathbf{H}_i$  mit Lemma 4.2.3 (1) & (3)

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_i}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) = \sum_{k \neq i} \frac{\mathbf{H}_k^{-T}}{\det \mathbf{H}_k} [(\nabla \widehat{\psi}_k)(\mathbf{H}_k^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_k))] [\mathbf{y}]^T - \frac{\mathbf{H}_i^{-T}}{\det \mathbf{H}_i} \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}).$$

Nach Rücktransformation auf  $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}$  ergibt sich schließlich

$$\mathbf{G}_{ii} = \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{x})) \nabla \psi_i(\mathbf{x}) \odot \left\{ \left[ \sum_{k \neq i} \nabla \psi_k(\mathbf{x}) \right] [\mathbf{y}] - \mathbf{H}_i^{-T} \psi_i(\mathbf{x}) \right\} d\mathbf{x} + \mathbf{S}_{ii},$$

womit wegen  $\nabla \rho = \sum_k \nabla \psi_k$  alles gezeigt ist.  $\square$

Mit denselben Methoden lassen sich auch die partiellen Ableitungen  $\mathbf{N}_{ij}$ ,  $\mathbf{M}_{ij}$  der Drehmomente  $\mathbf{M}_i$  berechnen.

**Lemma 4.2.6.** *Ist die totale Massendichte in einer Umgebung des  $i$ -ten Teilchens strikt positiv, so existieren die Ableitungen  $\mathbf{N}_{ij}$ ,  $\mathbf{M}_{ij}$  und besitzen die Darstellungen*

$$\begin{aligned}\mathbf{N}_{ij} &= \int \varepsilon''(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \odot \nabla \psi_j d\mathbf{x} + \delta_{ij} \mathbf{T}_{ii}, \\ \mathbf{M}_{ij} &= - \int \varepsilon''(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \otimes \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{H}_j} d\mathbf{x} + \delta_{ij} (\mathbf{U}_{ii} + \mathbf{V}_{ii}).\end{aligned}$$

Die Tensoren vierter Stufe  $\mathbf{U}_{ii}$ ,  $\mathbf{V}_{ii}$  und der Tensor dritter Stufe  $\mathbf{T}_{ii}$  auf der jeweiligen Blockdiagonalen sind dabei durch

$$\mathbf{T}_{ii} = - \int \varepsilon''(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \odot \nabla \rho d\mathbf{x}$$

und

$$\begin{aligned}\mathbf{U}_{ii} &= - \int \varepsilon''(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \otimes [\nabla \rho][\mathbf{y}]^T d\mathbf{x} \\ \mathbf{V}_{ii} &= \left( \frac{\partial \mathbf{H}_i^{-T}}{\partial \mathbf{H}_i} \right) \int \varepsilon'(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \left\{ [(\nabla \hat{\psi}_i)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T + \hat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right\} d\mathbf{y}\end{aligned}$$

gegeben.

*Beweis.* Der Beweis verläuft analog zum Beweis des vorherigen Lemmas und man unterscheidet auch hier zwei Fälle. Ist  $i \neq j$  so erhält man zum einen aus Gleichung (4.19)

$$\mathbf{N}_{ij} = - \int \varepsilon''(\rho) \left\{ [\nabla \psi_i][\mathbf{y}]^T + \psi_i \mathbf{H}_i^{-T} \right\} \odot \nabla \psi_j d\mathbf{x}$$

und zum anderen aus Gleichung (4.22) nach Rücktransformation auf  $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}$

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{ij} &= - \mathbf{H}_i^{-T} \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{x})) \frac{1}{\det \mathbf{H}_i} \left\{ [(\nabla \hat{\psi}_i)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T + \hat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right\} \\ &\quad \otimes \left\{ \frac{\mathbf{H}_j^{-T}}{\det \mathbf{H}_j} [(\nabla \hat{\psi}_j)(\mathbf{y}_j)][\mathbf{y}_j]^T + \frac{\mathbf{H}_j^{-T}}{\det \mathbf{H}_j} \hat{\psi}_j(\mathbf{y}_j) \right\} d\mathbf{x} \\ &= - \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{x})) \left\{ [\nabla \psi_i(\mathbf{x})][\mathbf{y}]^T + \psi_i(\mathbf{x}) \mathbf{H}_i^{-T} \right\} \\ &\quad \otimes \left\{ [\nabla \psi_j(\mathbf{x})][\mathbf{y}_j]^T + \psi_j(\mathbf{x}) \mathbf{H}_j^{-T} \right\} d\mathbf{x}.\end{aligned}$$

Komponentenweise rechnet man nämlich leicht  $\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{q}_j} = -\nabla \psi_j$  nach und kennt darüberhinaus die Ableitung  $\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_j}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})$  bereits aus dem Beweis des letzten Lemmas. Wie immer bezeichnet  $\mathbf{y} := \mathbf{y}_i = \mathbf{H}_i^{-1}(\mathbf{q}_i - \mathbf{x})$ . Für  $i = j$  liefert wiederum die Differentiation der Gleichung (4.22)

$$\mathbf{N}_{ii} = \mathbf{H}_i^{-T} \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \left\{ [(\nabla \hat{\psi}_i)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T + \hat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right\} \odot \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{q}_i}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) \right\} d\mathbf{y}$$

und mit der Produktregel

$$\mathbf{M}_{ii} = \mathbf{H}_i^{-T} \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})) \left\{ [(\nabla \widehat{\psi}_i)(\mathbf{y})] [\mathbf{y}]^T + \widehat{\psi}_i(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right\} \otimes \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_i}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) \right\} d\mathbf{y} + \mathbf{V}_{ii}.$$

Auf identische Art und Weise, wie man im Beweis von Lemma 4.2.5

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{H}_i}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) = \sum_{k \neq i} \frac{\mathbf{H}_k^{-T}}{\det \mathbf{H}_k} [(\nabla \widehat{\psi}_k)(\mathbf{H}_k^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_k))] [\mathbf{y}]^T - \frac{\mathbf{H}_i^{-T}}{\det \mathbf{H}_i} \widehat{\psi}_i(\mathbf{y})$$

durch Abspalten des  $i$ -ten Summanden hergeleitet hat, erhält man

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{q}_i}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) = \sum_{k \neq i} \frac{\mathbf{H}_k^{-T}}{\det \mathbf{H}_k} (\nabla \widehat{\psi}_k)(\mathbf{H}_k^{-1}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y} - \mathbf{q}_k))$$

woraus durch Transformation via  $\mathbf{x} = \mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}$  schließlich

$$\mathbf{N}_{ii} = \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{x})) \left\{ [\nabla \psi_i][\mathbf{y}]^T + \psi_i \mathbf{H}_i^{-T} \right\} \odot \left\{ \sum_{k \neq i} \nabla \psi_k(\mathbf{x}) \right\}$$

und

$$\mathbf{M}_{ii} = \int \varepsilon''(\rho(\mathbf{x})) \left\{ [\nabla \psi_i(\mathbf{x})] [\mathbf{y}]^T + \psi_i(\mathbf{x}) \mathbf{H}_i^{-T} \right\} \otimes \left\{ \left[ \sum_{k \neq i} \nabla \psi_k(\mathbf{x}) \right] [\mathbf{y}]^T - \psi_i(\mathbf{x}) \mathbf{H}_i^{-T} \right\} d\mathbf{x} + \mathbf{V}_{ii}$$

folgt. Wegen der Definition  $\nabla \rho = \sum_k \nabla \psi_k$  sind damit alle Behauptungen bewiesen.  $\square$

Die Darstellung der Tensoren  $\mathbf{V}_{ii}$  und  $\mathbf{S}_{ii}$  als Integral über das Referenzteilchen liegt darin begründet, daß man in dieser Form unter bestimmten Voraussetzungen unmittelbar deren Verschwinden erkennen kann. Ist etwa die Massendichte konstant, so folgt dies aus Lemma 4.2.1. Natürlich sind dann wegen  $\nabla \bar{\rho} = 0$  auch die Tensoren  $\mathbf{Q}_{ii} = \mathbf{R}_{ii} = \mathbf{T}_{ii} = \mathbf{U}_{ii} = 0$  und nach den eben gezeigten Lemmata 4.2.5 & 4.2.6 besitzen die Ableitungsterme im Gleichgewicht  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  die Form

$$\bar{\mathbf{F}}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{q}_j}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) := -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int [\nabla \bar{\psi}_i][\nabla \bar{\psi}_j]^T d\mathbf{x} \quad (4.24)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{H}_j}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) := \varepsilon''(\bar{\rho}) \int \nabla \bar{\psi}_i \odot \frac{\partial \bar{\psi}_j}{\partial \mathbf{H}_j} d\mathbf{x} \quad (4.25)$$

$$\bar{\mathbf{N}}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \mathbf{q}_j}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) := \varepsilon''(\bar{\rho}) \int \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \mathbf{H}_i} \odot \nabla \bar{\psi}_j d\mathbf{x} \quad (4.26)$$

$$\bar{\mathbf{M}}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \mathbf{H}_j}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) := -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \mathbf{H}_i} \otimes \frac{\partial \bar{\psi}_j}{\partial \mathbf{H}_j} d\mathbf{x}. \quad (4.27)$$

Dabei verdeutlicht die Notation  $\frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \mathbf{H}_i}$ , daß der Term  $\frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i}$  und damit  $\psi_i$  sowie  $\nabla \psi_i$  in den Gleichgewichtspunkten  $\bar{\mathbf{y}} = \bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)$  ausgewertet wird.

### 4.2.2 Die linearisierten Bewegungsgleichungen

Schreibt man neben den Positionen  $\mathbf{q}_i(t) = \bar{\mathbf{q}}_i + \mathbf{d}_i(t)$  auch die Deformationen der Teilchen in der Form

$$\mathbf{H}_i(t) = \bar{\mathbf{H}}_i + \mathbf{D}_i(t),$$

so können die zugehörigen linearisierten Bewegungsgleichungen in der Auslenkung  $(\mathbf{d}_i(t), \mathbf{D}_i(t))$  aus dem Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}_i, \bar{\mathbf{H}}_i)$  eines jeden Teilchens formuliert werden. Die folgende Definition ermöglicht eine elegante Darstellung der resultierenden Bewegungsgleichungen.

**Definition 4.2.7.** Sind  $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{d^m}$ ,  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{d^n}$  Tensoren  $m$ -ter bzw.  $n$ -ter Stufe mit  $n < m$ , so bezeichnet

$$\mathbf{T}[\mathbf{U}]|_{r_1 \dots r_{m-n}} = \sum_{r_{m-n+1}, \dots, r_m=1}^d T_{r_1 \dots r_{m-n+1} \dots r_m} U_{r_{m-n+1} \dots r_m}$$

die zugehörige Kontraktion über die letzten  $n$  Stufen von  $\mathbf{T}$ .

Besteht der Tensor vierter Stufe  $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{d^4}$  etwa aus dem Kronecker-Produkt  $\mathbf{T} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$  zweier Matrizen  $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$ , so gilt für jede Matrix  $\mathbf{D} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  und alle  $1 \leq m, n \leq d$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})[\mathbf{D}]|_{mn} = \sum_{r,s=1}^d (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})|_{mnr s} D_{rs} = \mathbf{A}(\mathbf{B} : \mathbf{D})|_{mn}.$$

Entsprechend ist definitionsgemäß  $(\mathbf{x} \odot \mathbf{A})[\mathbf{D}] = \mathbf{x}(\mathbf{A} : \mathbf{D})$  für jedes  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  und  $(\mathbf{A} \odot \mathbf{x})[\mathbf{d}] = \mathbf{A}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{d})$  für  $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^d$ . Mit dieser Notation erhält man folgendes Resultat.

**Satz 4.2.8.** Für genügend kleine Störungen  $\mathbf{d}_i(t)$ ,  $\mathbf{D}_i(t)$  sind die über dem Gleichgewichtszustand linearisierten Bewegungsgleichungen mit den partiellen Ableitungstermen (4.24)-(4.27) von der Form

$$\begin{aligned} m_i \ddot{\mathbf{d}}_i(t) &= \sum_{j=1}^{\infty} \left( \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j(t) + \bar{\mathbf{G}}_{ij}[\mathbf{D}_j(t)] \right), \\ J m_i \ddot{\mathbf{D}}_i(t) &= \sum_{j=1}^{\infty} \left( \bar{\mathbf{N}}_{ij}[\mathbf{d}_j(t)] + \bar{\mathbf{M}}_{ij}[\mathbf{D}_j(t)] \right). \end{aligned} \quad (4.28)$$

*Beweis.* In einer genügend kleinen Umgebung  $U(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  des Gleichgewichtszustandes  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  sind sowohl die Kräfte  $\mathbf{F}_i$  als auch die Drehmomente  $\mathbf{M}_i$  als Funktionen der Positionen  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_i)_{i \in I}$  und der Deformationen  $\mathbf{H} = (\mathbf{H}_i)_{i \in I}$  wohldefiniert. Eine Entwicklung um den Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = (\bar{\mathbf{q}}_i, \bar{\mathbf{H}}_i)_{i \in I}$  liefert nach dem Satz von Taylor

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i(\mathbf{q}, \mathbf{H}) &= \mathbf{F}_i(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) + \sum_j \sum_r \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial q_{j,r}}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) d_{j,r} \\ &\quad + \sum_j \sum_{r,s} \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial H_{j,rs}}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) D_{j,rs} + O(\|(\mathbf{d}, \mathbf{D})\|^2) \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \left( \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j(t) + \bar{\mathbf{G}}_{ij}[\mathbf{D}_j(t)] \right) + O(\|(\mathbf{d}, \mathbf{D})\|^2) \end{aligned}$$

und entsprechend

$$\mathbf{M}_i(\mathbf{q}, \mathbf{H}) = \bar{\mathbf{M}}_i(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) + \sum_{j=1}^{\infty} \left( \bar{\mathbf{N}}_{ij}[\mathbf{d}_j(t)] + \bar{\mathbf{M}}_{ij}[\mathbf{D}_j(t)] \right) + O(\|(\mathbf{d}, \mathbf{D})\|^2).$$

Dies folgt mit Definition 4.2.7 und Lemma 4.2.2 unmittelbar aus den Lemmata 4.2.5 & 4.2.6, bzw. den daraus resultierenden Termen (4.24)-(4.27) über dem Gleichgewichtszustand.  $\square$

**Bemerkung 4.2.9.** Natürlich kann man die Positionen und Deformationen der Teilchen auch zu einem Vektor  $\alpha_i(t) := (\mathbf{q}_i(t), \mathbf{H}_i(t)) \in \mathbb{R}^{d+d^2}$  zusammenfassen und die linearisierten Bewegungsgleichungen direkt in den  $\alpha_i$  herleiten. In diesem Fall ist die Gesamtmasendichte (2.17)

$$\rho(\mathbf{x}, \alpha_i) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}, \alpha_i)$$

eine Funktion der  $\alpha_i$  und aus der inneren Energie (2.23) resultieren durch Differentiation unter dem Integral die Kraftterme

$$\mathcal{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \alpha_i} = -\int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i} \in \mathbb{R}^{(d+d^2)}. \quad (4.29)$$

Die dabei vorgenommene Vertauschung von Differentiation und Integration wird durch die Eigenschaft ermöglicht, daß  $\varepsilon(\rho)$  eine gleichmäßig Lipschitz-stetige, fast überall in  $\mathbf{x}$  stetig differenzierbare Funktion der  $\alpha_i$  darstellt. Mit ähnlichen Argumenten erhält man für  $i \neq j$  die Linearisierung der Kräfte

$$\frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \alpha_j} = -\frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} = -\int \varepsilon''(\rho) \left[ \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i} \right] \left[ \frac{\partial \psi_j}{\partial \alpha_j} \right]^T d\mathbf{x}.$$

Der Fall  $i = j$  ist ein wenig komplizierter und kann ohne zusätzliche Glattheitsbedingungen an die Lipschitz-stetige, stückweise stetig differenzierbare Formfunktion  $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger nicht angegeben werden. Dies ist auch der Grund, warum wir diesen allgemeinen Zugang nicht gewählt haben und stattdessen in Abschnitt 4.2.1 die Linearisierung der Kräfte  $\mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i}$  und Drehmomente  $\mathbf{M}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{H}_i}$  getrennt voneinander durchgeführt haben. Geht man jedoch davon aus, daß die Formfunktion  $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  zweimal stetig differenzierbar ist, so erhält man

$$\frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \alpha_i} = -\frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_i \partial \alpha_i} = -\int \varepsilon''(\rho) \left[ \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i} \right] \left[ \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i} \right]^T d\mathbf{x} - \int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial \alpha_i^2} d\mathbf{x}$$

und damit insgesamt

$$\mathcal{F}_{ij} := \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \alpha_j} = -\int \varepsilon''(\rho) \left[ \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i} \right] \left[ \frac{\partial \psi_j}{\partial \alpha_j} \right]^T d\mathbf{x} - \delta_{ij} \int \varepsilon'(\rho) \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial \alpha_i^2} d\mathbf{x}. \quad (4.30)$$

Über dem Gleichgewichtszustand  $\bar{\alpha} = (\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  mit konstanter Massendichte  $\rho = \bar{\rho}$  sind sowohl die innere Energie  $\varepsilon(\bar{\rho})$  als auch ihre Ableitungen  $\varepsilon'(\bar{\rho})$  und  $\varepsilon''(\bar{\rho})$  konstant. Wegen der Normierungsbedingung (2.4) ist

$$\int \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i} d\mathbf{x} = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \int \psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \int \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = 0,$$



und es bestätigt sich einerseits das Resultat aus Lemma 4.2.2. Die Kräfte (4.29) verschwinden und das System bleibt für alle Zeiten im Gleichgewicht, falls es sich dort einmal befindet. Andererseits verschwinden aber aus demselben Grund in (4.30) auch die Terme für  $i = j$  und es ergeben sich die linearisierten Kraftterme

$$\bar{\mathcal{F}}_{ij} := \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \alpha_j}(\bar{\alpha}) = -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int \left[ \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \alpha_i} \right] \left[ \frac{\partial \bar{\psi}_j}{\partial \alpha_j} \right]^T d\mathbf{x} \in \mathbb{M}^{(d+d^2)}(\mathbb{R}).$$

Wir sprechen auch hier von einer Linearisierung der Kraftterme  $\mathcal{F}_i$ , obwohl sich diese aus den linearisierten Kraft- und Drehmomentstermen  $\mathbf{F}_i$  und  $\mathbf{M}_i$  zusammensetzen. Mit den Lemmata 4.2.5 & 4.2.6 ist man in der Lage, dieselbe Linearisierung auch für eine Lipschitzstetige, stückweise stetig differenzierbare Formfunktion  $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger zu realisieren. Aus diesen Lemmata lassen sich nämlich die hierfür benötigten Ableitungen  $\frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \alpha_i}$  und  $\frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \alpha_i}$  aus den schon bekannten Ableitungen (4.20) bilden. Mit der Beziehung (2.15) für den Gradienten von  $\psi_i$  erhält man zum einen

$$\frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \alpha_j} = - \int \varepsilon''(\rho) \left( \left[ \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} \right] \left[ \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{q}_j} \right]^T, \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} \odot \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{H}_j} \right) d\mathbf{x} + \delta_{ij}(\mathbf{Q}_{ii}, \mathbf{R}_{ii} + \mathbf{S}_{ii}) \in \mathbb{R}^{d^2} \times \mathbb{R}^{d^3}$$

und zum anderen

$$\frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \alpha_j} = - \int \varepsilon''(\rho) \left( \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \odot \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{q}_j}, \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \otimes \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{H}_j} \right) d\mathbf{x} + \delta_{ij}(\mathbf{T}_{ii}, \mathbf{U}_{ii} + \mathbf{V}_{ii}) \in \mathbb{R}^{d^3} \times \mathbb{R}^{d^4}.$$

Bezeichnet  $\mathcal{F}_i = (\mathbf{F}_i, \mathbf{M}_i)^T$  wiederum die partielle Ableitung  $-\frac{\partial V}{\partial \alpha_i}$  der inneren Energie, so ist

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{ij} &= - \frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \\ &= - \int \varepsilon''(\rho) \left( \left[ \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} \right] \left[ \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{q}_j} \right]^T, \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{q}_i} \odot \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{H}_j}, \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \odot \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{q}_j}, \frac{\partial \psi_i}{\partial \mathbf{H}_i} \otimes \frac{\partial \psi_j}{\partial \mathbf{H}_j} \right) d\mathbf{x} \\ &\quad + \delta_{ij}(\mathbf{Q}_{ii}, \mathbf{R}_{ii} + \mathbf{S}_{ii}, \mathbf{T}_{ii}, \mathbf{U}_{ii} + \mathbf{V}_{ii}) \in \mathbb{R}^{d^2} \times \mathbb{R}^{d^3} \times \mathbb{R}^{d^3} \times \mathbb{R}^{d^4}. \end{aligned}$$

Über dem Gleichgewicht  $\bar{\alpha}$  mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho}$  verschwinden bekanntlich auch unter dieser schwächeren Voraussetzung an  $\psi$  die Terme für  $i = j$ . Faßt man  $\alpha_i \in \mathbb{R}^{(d+d^2)}$  als langen Vektor auf, der die  $\mathbf{H}_i$  etwa spaltenweise enthält, so folgt wegen der Isometrie  $\mathbb{R}^{d^2} \times \mathbb{R}^{d^3} \times \mathbb{R}^{d^3} \times \mathbb{R}^{d^4} \cong \mathbb{R}^{(d+d^2)^2}$  über dem Gleichgewicht ebenfalls

$$\bar{\mathcal{F}}_{ij} = \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \alpha_j}(\bar{\alpha}) = -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int \left[ \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \alpha_i} \right] \left[ \frac{\partial \bar{\psi}_j}{\partial \alpha_j} \right]^T d\mathbf{x}. \quad (4.31)$$

Da aus der geschlossenen Darstellung (2.22) der kinetischen Energie die Ableitung

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_i} = \begin{pmatrix} m_i \mathbf{I} & 0 \\ 0 & J m_i \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{q}}_i \\ \ddot{\mathbf{H}}_i \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

mit den Blöcken  $m_i \mathbf{I} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  und  $J m_i \mathbf{I} \in \mathbb{M}^{d^2}(\mathbb{R})$  resultiert, sind damit die um den Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte linearisierten Bewegungsgleichungen (4.28) für genügend kleine Störungen  $\mathbf{a}_i := (\mathbf{d}_i, \mathbf{D}_i)$  äquivalent zu

$$\mathbf{K} \mathbf{a}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{\infty} \bar{\mathcal{F}}_{ij} \mathbf{a}_j \quad (4.33)$$

mit der invertierbaren Diagonalmatrix

$$\mathbf{K} := \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{I} & 0 \\ \hline 0 & \mathbf{J}\mathbf{I} \end{array} \right) \in \mathbb{M}^{(d+d^2)}(\mathbb{R}). \quad (4.34)$$

Da sich nur endlich viele Teilchen im Träger des  $i$ -ten Teilchens befinden ist die Summe auf der rechten Seite endlich und die linearisierten Kräfte sind wohldefiniert.

### 4.2.3 Energieerhaltung und Stabilität

Um die Stabilität der vollständigen Methode der Finiten Massen zu zeigen, verallgemeinert man die Vorgehensweise aus der Methode mit ausschließlich translatorischen Freiheitsgraden aus Abschnitt 4.1.2. Dazu faßt man die Positionen und Deformationen der Teilchen zu einem Vektor  $\alpha_i(t) = (\mathbf{q}_i(t), \mathbf{H}_i(t)) \in \mathbb{R}^{d+d^2}$  zusammen. Die um den Gleichgewichtszustand mit konstanter Massendichte linearisierten Bewegungsgleichungen der Methode der Finiten Massen sind für genügend kleine Störungen  $\mathbf{a}_i = (\mathbf{d}_i, \mathbf{D}_i) \in \mathbb{R}^{(d+d^2)}$  dann äquivalent zu dem Differentialgleichungssystem (4.33) mit der invertierbaren Diagonalmatrix (4.34). Faßt man die Störungen wiederum zu Folgen  $(\mathbf{a}_i)_{i \in I} \in \mathbb{R}^{(d+d^2)}$  zusammen, so ist das Differentialgleichungssystem (4.33) äquivalent zu einer Operatorgleichung der Form

$$\mathbf{K}\mathbf{a}''(t) = \mathbf{S}\mathbf{a}(t) \quad (4.35)$$

mit

$$\mathbf{S}\mathbf{a}(t) = \left( \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{\infty} \bar{\mathcal{F}}_{ij} \mathbf{a}_j(t) \right)_{i=1}^{\infty}.$$

**Definition 4.2.10.** Sei  $(L, \langle \cdot, \cdot \rangle_L, \|\cdot\|_L)$  der Hilbertraum aller Folgen  $\mathbf{a} = (\mathbf{a}_i)_{i \in I}$  mit der (gewichteten) Norm

$$\|\mathbf{a}\|_L := \left( \sum_{i=1}^{\infty} m_i |\mathbf{a}_i|^2 \right)^{1/2} < \infty.$$

Dabei bezeichnet  $|\cdot|$  wie üblich die Euklidische-Norm.

Unter der Annahme, daß eine gemeinsame obere Schranke für die Norm der Koeffizientenmatrizen  $\bar{\mathcal{F}}_{ij}$  aus (4.33) existiert, also etwa

$$\|\bar{\mathcal{F}}_{ij}\| = \sup_{|\mathbf{a}_j|=1} |\bar{\mathcal{F}}_{ij} \mathbf{a}_j| \leq M \quad \forall i, j \in I \quad (4.36)$$

gilt, besitzt die Operatorgleichung (4.35) eine eindeutige Lösung im Hilbertraum  $L$ . Dies beruht unter anderem auf der Tatsache, daß sich im Träger eines jeden Teilchens nur endlich viele andere Teilchen befinden. Die Anzahl der Teilchen innerhalb des Trägers des  $i$ -ten Teilchens ist damit nach Übergang zum Maximum für alle  $i \in I$  gleichmäßig beschränkt.

**Satz 4.2.11.** Für gegebene Anfangswerte  $\mathbf{a}(0), \mathbf{a}'(0) \in L$  besitzt die Operatorgleichung (4.35) eine eindeutige Lösung  $\mathbf{a}, \mathbf{a}' : [0, \infty) \rightarrow L$ .

*Beweis.* Unter der Voraussetzung (4.36) ist  $\mathbf{S}$  auf  $L$  ein beschränkter Operator. Da die Teilchenmassen  $m_j$  stets nichtnegativ sind, gilt nämlich

$$\begin{aligned} \|\mathbf{S}\mathbf{a}\|_L^2 &= \sum_i m_i |\mathbf{S}\mathbf{a}|_i|^2 \leq \sum_i \frac{1}{m_i} \sum_j \|\bar{\mathcal{F}}_{ij}\|^2 |\mathbf{a}_j|^2 \\ &\leq \left( \sum_i \frac{1}{m_i} M^2 \right) \sum_j |\mathbf{a}_j|^2 \leq C \sum_j m_j |\mathbf{a}_j|^2 = C \|\mathbf{a}\|_L^2 \end{aligned}$$

und die Behauptung folgt mit der Invertierbarkeit der Matrix  $\mathbf{K}$  aus den Existenz- und Eindeutigkeitsätzen gewöhnlicher Differentialgleichungen.  $\square$

Um die Stabilität der Linearisierung zeigen zu können, benötigt man weitere Eigenschaften des beschränkten linearen Operators  $\mathbf{S}$ .

**Lemma 4.2.12.** *Der beschränkte lineare Operator  $\mathbf{S} \in \mathcal{L}(L)$  ist selbstadjungiert und nicht-positiv.*

*Beweis.* Auf dem Teilraum  $\mathcal{S} = \{\mathbf{a} = (\mathbf{a}_i) : \mathbf{a}_i = 0 \text{ bis auf endlich viele } i \in I\} \subset L$  gilt offensichtlich

$$\bar{\mathcal{F}}_{ij}^T = \bar{\mathcal{F}}_{ji}$$

und  $\mathbf{S}$  ist selbstadjungiert auf  $\mathcal{S}$ . Mit (4.31) erhält man für alle Folgen  $\mathbf{a} = (\mathbf{a}_i) \in \mathcal{S}$  die Beziehung

$$\sum_i \mathbf{a}_i \cdot \left( \sum_j \bar{\mathcal{F}}_{ij} \mathbf{a}_j \right) = \sum_i \sum_r a_{i,r} \sum_j \sum_s \bar{\mathcal{F}}_{ij} \Big|_{rs} a_{j,s} = -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int |\mathbf{a}_i \cdot \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha_i}|^2 d\mathbf{x},$$

also  $\langle \mathbf{S}\mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle_L \leq 0$ . Da  $\mathcal{S}$  dicht in  $L$  liegt und stetige Operatoren stetig auf den Abschluß  $\bar{\mathcal{S}} = L$  fortgesetzt werden können, folgt damit die Behauptung.  $\square$

Aus der Selbstadjungiertheit und Nichtpositivität des linearen Operators  $\mathbf{S}$  resultiert die wichtige Erkenntnis, daß die linearisierte Gesamtenergie  $\mathcal{E}_{lin}(t) = E(t) + V_{lin}(t)$  des Systems eine Erhaltungsgröße darstellt. Im Gegensatz zu der Methode der Finiten Massen mit ausschließlich translatorischen Freiheitsgraden, bei der die linearisierte Gesamtenergie (4.8) nicht von den Deformationen  $\mathbf{D}_i$  anhängig ist, erweitert sich diese nun um den Deformationsanteil der kinetischen- und inneren Energie. Nach (4.32) und der Definition des Skalarproduktes  $\langle \cdot, \cdot \rangle_L$  auf dem Hilbertraum  $L$  ist die kinetische Energie von der Gestalt  $E(t) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{K}\mathbf{a}'(t) \rangle_L$ . Die linearisierte innere Energie besitzt die Darstellung  $V_{lin}(t) = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{a}(t), \mathbf{S}\mathbf{a}(t) \rangle_L$ .

**Satz 4.2.13.** *Die linearisierte Gesamtenergie der vollständigen Methode der Finiten Massen*

$$\mathcal{E}_{lin}(t) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{K}\mathbf{a}'(t) \rangle_L - \frac{1}{2} \langle \mathbf{a}(t), \mathbf{S}\mathbf{a}(t) \rangle_L$$

*ist eine Erhaltungsgröße.*

*Beweis.* Der beschränkte Operator  $\mathbf{S}$  ist nach Lemma 4.2.12 selbstadjungiert auf  $L$  und mit (4.35) ergibt sich wegen der Symmetrie der invertierbaren Matrix  $\mathbf{K}$  durch Differentiation

$$\begin{aligned}\mathcal{E}'_{lin}(t) &= \langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{K} \mathbf{a}''(t) \rangle_L - \frac{1}{2} (\langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{S} \mathbf{a}(t) \rangle_L + \langle \mathbf{S} \mathbf{a}(t), \mathbf{a}'(t) \rangle_L) \\ &= \langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{K} \mathbf{a}''(t) \rangle_L - \langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{S} \mathbf{a}(t) \rangle_L = 0.\end{aligned}$$

□

**Korollar 4.2.14.** Die kinetische Energie  $E(t)$  ist für alle Zeiten  $t$  durch die linearisierte Gesamtenergie  $\mathcal{E}_{lin}(0)$  beschränkt. Insbesondere ist die Linearisierung stabil.

*Beweis.* Nach Satz 4.2.13 ist die linearisierte Gesamtenergie  $\mathcal{E}_{lin}(t) = \mathcal{E}_{lin}(0)$  konstant. Da  $\mathbf{S} \in \mathcal{L}(L)$  nichtpositiv ist, gilt für alle  $t$

$$E(t) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{a}'(t), \mathbf{K} \mathbf{a}'(t) \rangle_L = \mathcal{E}_{lin}(t) + \frac{1}{2} \langle \mathbf{a}(t), \mathbf{S} \mathbf{a}(t) \rangle_L \leq \mathcal{E}_{lin}(0).$$

□

Wie üblich transformiert sich die Stabilität auf den inhomogenen Fall. Eine wichtige Aussage, die dazu benötigt wird, den globalen Diskretisierungsfehler durch den lokalen Abbruchfehler abzuschätzen.

**Satz 4.2.15.** Sei  $\mathbf{f} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{L}(L)$  stetig und  $\mathbf{K}$  eine Diagonalmatrix der Dimension  $d + d^2$ . Die Lösung des Anfangswertproblems

$$\mathbf{K} \mathbf{a}''(t) = \mathbf{S} \mathbf{a}(t) + \mathbf{f}(t), \quad \mathbf{a}(0) = 0, \quad \mathbf{a}'(0) = 0$$

erfüllt mit  $C := \|\mathbf{K}^{-1}\|_L$  die a priori Abschätzung

$$\|\mathbf{a}\|_L \leq C \int_0^t (t-s) \|\mathbf{f}(s)\|_L ds.$$

*Beweis.* Da  $\mathbf{S}$  beschränkt und  $\mathbf{K}$  invertierbar ist, schließt man aus der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen die Existenz einer Lösung  $\mathbf{E} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathcal{L}(L)$  des Anfangswertproblems

$$\mathbf{E}''(t) = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{E}(t), \quad \mathbf{E}(0) = 0, \quad \mathbf{E}'(0) = \mathbf{I}.$$

Mit diesem Fundamentalsystem besitzt die Lösung des gegebenen Anfangswertproblems bekanntlich die Darstellung

$$\mathbf{a}(t) = \int_0^t \mathbf{E}(t-s) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{f}(s) ds,$$

und  $\mathbf{a} = \mathbf{E}(t) \mathbf{v}$  ist für jedes beliebige  $\mathbf{v} \in L$  eine Lösung des homogenen Anfangswertproblems

$$\mathbf{a}''(t) = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{a}(t), \quad \mathbf{a}(0) = 0, \quad \mathbf{a}'(0) = \mathbf{v}.$$

Da  $\mathbf{K}$  eine Diagonalmatrix ist, läßt sich die linearisierte Gesamtenergie auch in der Form

$$\mathcal{E}_{lin}(t) = \frac{1}{2} \|\mathbf{a}'(t)\|_L^2 - \frac{1}{2} \langle \mathbf{a}(t), \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{a}(t) \rangle_L$$

schreiben. Nach den beiden Sätzen 4.2.11 und 4.2.13 ist damit für alle Zeiten  $t \geq 0$  die Abschätzung  $\|\mathbf{a}'(t)\|_L \leq \|\mathbf{v}\|_L$  erfüllt. Folglich ist

$$\|\mathbf{E}(t)\mathbf{v}\|_L \leq \int_0^t \|\mathbf{a}'(s)\|_L ds \leq t \|\mathbf{v}\|_L$$

oder  $\|\mathbf{E}(t)\|_L \leq t$  für alle  $t \geq 0$ .  $\square$

#### 4.2.4 Die linearisierten Bewegungsgleichungen über regelmäßigen Gittern

Über einem unendlich ausgedehnten Gitter  $\mathbf{G}$  der Gitterweite  $h > 0$ , wie es in Definition 4.1.1 mit  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$  eingeführt wurde, vereinfachen sich neben den linearisierten Bewegungsgleichungen (4.28) der Positionen (4.6) auch die der Deformationen. Dies basiert auf der Tatsache, daß die Teilchengestalt invariant gegenüber linearen Transformationen des Raumes ist und somit alle Matrizen  $\mathbf{H}_i$  im Gleichgewicht von der Form

$$\bar{\mathbf{H}}_i = h\mathbf{I} \quad (4.37)$$

sind. Die Formfunktionen  $\hat{\psi}_i$  werden daher in den Gleichgewichtspunkten

$$\bar{\mathbf{y}} = \bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i) = \frac{1}{h}(\mathbf{x} - h\mathbf{k}) = \mathbf{x}/h - \mathbf{k}$$

ausgewertet. Wie in Kapitel 2.1 eingeführt, geht man dabei von einer Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren Formfunktion  $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$  mit kompaktem Träger aus, und macht für alle Teilchen den Ansatz

$$\hat{\psi}_i(\mathbf{y}) = m_i \psi(\mathbf{y})$$

mit den Normierungsbedingungen (2.4) bis (2.6). Unter der Voraussetzung, daß alle Teilchen dieselbe Masse  $m_i = m$  besitzen nimmt die Gesamtmasseendichte des Gleichgewichtszustandes über dem Gitter wieder die einfache Beziehung

$$\bar{\rho} = \frac{m}{h^d} \quad (4.38)$$

an. Nach Lemma 4.1.2 gilt wegen  $\bar{\mathbf{H}}_i = h\mathbf{I}$  und  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$  nämlich

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \sum_{i=1}^{\infty} \bar{\psi}_i(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\det \bar{\mathbf{H}}_i} \hat{\psi}_i(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{m}{\det \bar{\mathbf{H}}_i} \psi(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) \\ &= \frac{m}{h^d} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) = \frac{m}{h^d}, \end{aligned}$$

und man kann die um den Gleichgewichtszustand linearisierten Bewegungsgleichungen aus Satz 4.2.8 über einem regelmäßigen Gitter angeben.

**Satz 4.2.16.** *Bilden die Gleichgewichtspunkte  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\bar{\mathbf{q}}_j = h\mathbf{l}$ ,  $\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathbf{G}$ , ein regelmäßiges Gitter der Gitterweite  $h > 0$ , so lauten die linearisierten FMM-Bewegungsgleichungen aus Satz 4.2.8*

$$\ddot{\mathbf{d}}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{c^2}{h^2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \left( \mathbf{U}''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t) + \mathbf{G}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) [\mathbf{D}_{\mathbf{l}}(t)] \right), \quad (4.39)$$

$$\ddot{\mathbf{D}}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{c^2}{Jh^2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \left( \mathbf{N}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) [\mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t)] + \mathbf{M}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) [\mathbf{D}_{\mathbf{l}}(t)] \right) \quad (4.40)$$

mit der Hessematrix des Potentials  $U$  aus Definition und Satz 4.1.3, den Tensoren dritter Stufe

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) := - \int (\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \odot \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{y})] [\mathbf{y}]^T + \psi(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right\} d\mathbf{y}, \quad (4.41)$$

$$\mathbf{N}(\mathbf{x}) := - \int \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})] [\mathbf{y} - \mathbf{x}]^T + \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \mathbf{I} \right\} \odot (\nabla \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4.42)$$

sowie dem Tensor vierter Stufe

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{x}) := & - \int \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})] [\mathbf{y} - \mathbf{x}]^T + \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \mathbf{I} \right\} \\ & \otimes \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{y})] [\mathbf{y}]^T + \psi(\mathbf{y}) \mathbf{I} \right\} d\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (4.43)$$

*Beweis.* Über dem Gitter  $\mathbf{G}$  mit  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\bar{\mathbf{q}}_j = h\mathbf{l}$  und (4.37) gilt im Gleichgewicht

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_i(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\det \bar{\mathbf{H}}_i} \hat{\psi}_i(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) = \frac{m}{h^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}), \\ \nabla \bar{\psi}_i(\mathbf{x}) &= \frac{\bar{\mathbf{H}}_i^{-T}}{\det \bar{\mathbf{H}}_i} (\nabla \hat{\psi}_i)(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) = \frac{m}{h^{(d+1)}} (\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

Da alle Teilchen dieselbe Masse  $m_i = m$  besitzen, sind die Terme  $\sum_j \bar{\mathbf{N}}_{ij} [\mathbf{d}_j(t)]$  und  $\sum_j \bar{\mathbf{M}}_{ij} [\mathbf{D}_j(t)]$  über dem Gitter von der Gestalt

$$- \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \varepsilon''(\bar{\rho}) \frac{m^2}{h^{2(d+1)}} \int \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})] [\mathbf{x}/h - \mathbf{k}]^T + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{I} \right\} ((\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{l}) \cdot \mathbf{d}_{\mathbf{l}}) d\mathbf{x}$$

und

$$\begin{aligned} & - \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \varepsilon''(\bar{\rho}) \frac{m^2}{h^{2(d+1)}} \int \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})] [\mathbf{x}/h - \mathbf{k}]^T + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{I} \right\} \\ & \quad \left\{ [(\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{l})] [\mathbf{x}/h - \mathbf{l}]^T + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{l}) \mathbf{I} \right\} : \mathbf{D}_{\mathbf{l}}(t) \right\} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Durch Transformation auf das Referenzteilchen via  $\mathbf{y} = \mathbf{x}/h - \mathbf{l}$  folgt mit der Beziehung  $c^2 = \varepsilon''(\bar{\rho}) \bar{\rho}$  für die Schallgeschwindigkeit Gleichung (4.40). Analog zeigt man Gleichung (4.39) für die Positionsauslenkungen.  $\square$

### 4.2.5 Konsistenz und Konvergenz mit der akustischen Wellengleichung und ihrer Ortsableitung

Unter geeigneten Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  ist man nun in der Lage, die Konsistenz der linearisierten Bewegungsgleichungen der Methode der Finiten Massen mit der akustischen Wellengleichung  $\ddot{\mathbf{u}} = c^2 \nabla(\operatorname{div} \mathbf{u})$  bzw. deren Gradienten

$$\nabla \ddot{\mathbf{u}} = c^2 \nabla(\operatorname{Div}(\nabla \mathbf{u}^T)) \quad (4.44)$$

zu zeigen. Genauer stellt sich heraus, daß die linearisierten Bewegungsgleichungen der Positionsauslenkungen (4.39) konsistent mit der akustischen Wellengleichung sind, während die Bewegungsgleichungen der Deformationsauslenkungen (4.40) eine konsistente Diskretisierung des Gradienten  $\nabla \ddot{\mathbf{u}}$  bilden. Wegen der Stabilität der Diskretisierung, die durch Satz 4.2.15 zum Ausdruck kommt, ist die Diskretisierung konvergent und die Störungen breiten sich wie Schallwellen entlang dem Gitter aus. Dies läßt sich besonders elegant beweisen, wenn man die 3-Tensoren  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{N}$  sowie den 4-Tensor  $\mathbf{M}$  besser versteht. Zu diesem Zweck definiert man zwei Funktionen, die eine Interpretation der Tensoren als zweite Ableitungen gestatten. Die daraus resultierenden Symmetrien in gewissen Komponenten der Tensoren spielen auch bei der Galerkin Diskretisierung in Kapitel 5 eine entscheidende Rolle.

**Definition und Lemma 4.2.17.** Sei  $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$  eine zulässige Formfunktion. Dann sind die durch

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) := \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) \mathbf{y} \, d\mathbf{y}, \quad (4.45)$$

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}) := \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) [\mathbf{y}][\mathbf{y} - \mathbf{x}]^T \, d\mathbf{y} \quad (4.46)$$

definierten Abbildungen  $\mathbf{v} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  und  $\mathbf{V} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  zweimal stetig differenzierbare Funktionen mit kompaktem Träger. Ist  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{\psi}(x_\mu)$  das Tensorprodukt einer Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren, geraden Funktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger, so ist zum einen  $\mathbf{v}$  ungerade und erfüllt die Beziehung

$$2\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}U(\mathbf{x}), \quad (4.47)$$

und zum anderen ist  $\mathbf{V} = \mathbf{V}^T$  symmetrisch und gerade.

*Beweis.* Eine zulässige Formfunktion  $\psi$  ist eine Lipschitz-stetige, stückweise stetig differenzierbare Funktion mit kompaktem Träger. Damit sind sowohl  $\mathbf{v}$  als auch  $\mathbf{V}$  zweimal stetig differenzierbar. Für jedes  $1 \leq m, n, r, s \leq d$  rechnet man leicht

$$\nabla_{mr}^2 v_s(\mathbf{x}) = - \int (\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \odot \{[(\nabla \psi)(\mathbf{y})][\mathbf{y}]^T + \psi(\mathbf{y})\mathbf{I}\} \, d\mathbf{y} \Big|_{mrs} \quad (4.48)$$

und

$$\begin{aligned} (\nabla_{mn}^2 V_{rs})(\mathbf{x}) = & - \int [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})][(\nabla \psi)(\mathbf{y})] \otimes [\mathbf{y}][\mathbf{y} - \mathbf{x}] \Big|_{nmrs} \\ & - \mathbf{I} \otimes [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})][\psi(\mathbf{y})(\mathbf{y} - \mathbf{x})] \Big|_{mrns} \\ & + \mathbf{I} \otimes [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})][\psi(\mathbf{y})(\mathbf{y})] \Big|_{nsmr} \, d\mathbf{y} - U(\mathbf{x})\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \Big|_{mrns}. \end{aligned}$$

nach. Der Beweis beruht auf der Transformation  $\mathbf{z} := \mathbf{y} - \mathbf{x}$  nach der ersten partiellen Differentiation. Zum Beweis der Symmetrie von  $\mathbf{V}$  zerlegt man die Matrix  $\mathbf{V} = \mathbf{U} - \mathbf{W}$  in symmetrische Matrizen  $\mathbf{U} = \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y})[\mathbf{y}][\mathbf{y}]^T d\mathbf{y}$  und  $\mathbf{W} = \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y})[\mathbf{y}][\mathbf{x}]^T d\mathbf{y}$ . Sicherlich ist  $\mathbf{U}$  symmetrisch. Zum Beweis der Symmetrie von  $\mathbf{W}$ , und damit von  $\mathbf{V}$ , sei oBdA  $1 \leq r \neq s \leq d$ . Ist  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{\psi}(x_\mu)$  das Tensorprodukt einer geraden Funktion  $\tilde{\psi}$  mit kompaktem Träger, so erkennt man mit Hilfe des Transformationssatzes

$$\begin{aligned} \int \tilde{\psi}(\mathbf{y} - \mathbf{x})\tilde{\psi}(\mathbf{y})\mathbf{y} d\mathbf{y} &= \int \tilde{\psi}(\mathbf{x} - \mathbf{y})\tilde{\psi}(\mathbf{y})\mathbf{y} d\mathbf{y} = \int \tilde{\psi}(\mathbf{z})\tilde{\psi}(\mathbf{x} - \mathbf{z})(\mathbf{x} - \mathbf{z}) d\mathbf{z} \\ &= \mathbf{x} \int \tilde{\psi}(\mathbf{z} - \mathbf{x})\tilde{\psi}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} - \int \tilde{\psi}(\mathbf{z} - \mathbf{x})\tilde{\psi}(\mathbf{z})\mathbf{z} d\mathbf{z} \end{aligned}$$

und damit die Beziehung

$$\int \tilde{\psi}(\mathbf{y} - \mathbf{x})\tilde{\psi}(\mathbf{y})\mathbf{y} d\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{2} \int \tilde{\psi}(\mathbf{y} - \mathbf{x})\tilde{\psi}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

Mit der Notation  $d\tilde{\mathbf{y}} := dy_1 \dots dy_{\mu \neq r} \dots dy_d$  folgt aus dem Satz von Fubini

$$\begin{aligned} \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y})y_r d\mathbf{y} &= \int \prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq r}}^d \tilde{\psi}(y_\mu - x_\mu)\tilde{\psi}(y_\mu) d\tilde{\mathbf{y}} \int \tilde{\psi}(y_r - x_r)\tilde{\psi}(y_r)y_r dy_r \\ &= \int \prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq r}}^d \tilde{\psi}(y_\mu - x_\mu)\tilde{\psi}(y_\mu) d\tilde{\mathbf{y}} \left( \frac{x_r}{2} \int \tilde{\psi}(y_r - x_r)\tilde{\psi}(y_r) dy_r \right) \\ &= \frac{x_r}{2} \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \end{aligned}$$

Daraus erhält man einerseits wegen

$$W_{rs} = x_s \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y})y_r d\mathbf{y} = \frac{x_r x_s}{2} \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = W_{sr}$$

die Symmetrie von  $\mathbf{W}$  und andererseits die Beziehung (4.47) zwischen  $\mathbf{v}$  und dem Potential  $U$ . Da  $U$  gerade ist, ist damit  $\mathbf{v}$  ungerade. Schliesslich folgt aus der Symmetrie von  $\mathbf{V}$  mit dem Transformationssatz die Eigenschaft  $\mathbf{V}(-\mathbf{x}) = \mathbf{V}(\mathbf{x})$ .  $\square$

Auf gewisse Art und Weise lassen sich die 3-Tensoren  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{N}$  aus den linearisierten Bewegungsgleichungen als zweite Ableitungen der vektorwertigen Funktion  $\mathbf{v}$  auffassen. Unter geeigneten Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  folgen daraus zwei wichtige Symmetrien. Zum einen in der ersten und zweiten Komponente von  $\mathbf{G}$  und zum anderen in der ersten und dritten Komponente von  $\mathbf{N}$ .

**Lemma 4.2.18.** *Ist  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{\psi}(x_\mu)$  das Tensorprodukt einer Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren, geraden Funktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger, so gilt für jedes  $1 \leq m, r, s \leq d$*

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) \Big|_{mrs} = \nabla_{mr}^2 v_s(\mathbf{x}) = -\nabla_{mr}^2 v_s(-\mathbf{x}) = -\mathbf{N}(\mathbf{x}) \Big|_{rsm}. \quad (4.49)$$



Die Komponenten der 3-Tensoren (4.41) und (4.42) aus den linearisierten Bewegungsgleichungen (4.39) & (4.40) erfüllen die Symmetrien

$$\mathbf{G}(\mathbf{x})|_{mrs} = \mathbf{G}(\mathbf{x})|_{rms} \quad (4.50)$$

und

$$\mathbf{N}(\mathbf{x})|_{rsm} = \mathbf{N}(\mathbf{x})|_{msr}. \quad (4.51)$$

*Beweis.* Nach (4.48) ist offensichtlich für jedes  $1 \leq m, r, s \leq d$

$$\mathbf{G}(\mathbf{x})|_{mrs} = \nabla_{mr}^2 v_s(\mathbf{x}).$$

Darüberhinaus rechnet man

$$\begin{aligned} \mathbf{N}(\mathbf{x})|_{rsm} &= - \int \{ (\nabla_r \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})(y_s - x_s) + \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \delta_{rs} \} (\nabla_m \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= D_r \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - x_s D_r \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d\mathbf{y} \\ &\quad - \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d\mathbf{y} \delta_{rs}, \end{aligned}$$

woraus sich durch Transformation via  $\mathbf{z} = \mathbf{y} - \mathbf{x}$  sofort

$$\begin{aligned} \mathbf{N}(\mathbf{x})|_{rsm} &= D_r \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z})(z_s + x_s) dz - x_s D_r \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) dz \\ &\quad - \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) dz \delta_{rs} \\ &= D_r D_m \int \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) z_s dz = \nabla_{mr}^2 v(-\mathbf{x}) \end{aligned}$$

ergibt. Unter den gegebenen Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  ist nach Lemma 4.2.17  $v$  ungerade. Es resultiert die Beziehung (4.49) und daraus die Symmetrien (4.50) & (4.51).  $\square$

Ein wenig aufwendiger gestaltet sich die Darstellung des 4-Tensors  $\mathbf{M}$  als zweite Ableitung der matrixwertigen Funktion  $\mathbf{V}$ . Unter denselben Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  resultieren auch hier wichtige Symmetrien.

**Lemma 4.2.19.** Die Komponenten des 4-Tensors (4.43) aus der linearisierten Bewegungsgleichung (4.40) besitzen für jedes  $1 \leq m, n, r, s \leq d$  die Darstellung

$$\mathbf{M}(\mathbf{x})|_{mnr s} = \nabla_{mr}^2 V_{sn}(\mathbf{x}) \quad (4.52)$$

Ist die Formfunktion  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{\psi}(x_\mu)$  das Tensorprodukt einer Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren, geraden Funktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger, so gilt für alle  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  die Symmetrie

$$\mathbf{M}(\mathbf{x})|_{mnr s} = \mathbf{M}(\mathbf{x})|_{msrn}. \quad (4.53)$$

*Beweis.* Für jedes  $1 \leq m, n, r, s \leq d$  ist

$$\mathbf{M}(\mathbf{x})|_{mnr s} = - \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})(\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s (y_n - x_n) d\mathbf{y} \quad (4.54)$$

$$- \delta_{rs} \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) (y_n - x_n) d\mathbf{y} \quad (4.55)$$

$$- \delta_{mn} \int (\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} \quad (4.56)$$

$$- \delta_{mn} \delta_{rs} \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (4.57)$$

Wegen der Linearität des Integrals setzt sich der erste Term (4.54) aus den beiden Anteilen

$$- \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})(\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s y_n d\mathbf{y} \quad (4.58)$$

und

$$x_n \int (\nabla_m \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})(\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s d\mathbf{y} \quad (4.59)$$

zusammen. Wir betrachten zunächst (4.58). Durch Transformation via  $\mathbf{z} = \mathbf{y} - \mathbf{x}$  erhält man nach Vertauschung von Differentiation und Integration

$$\begin{aligned} D_m \int \psi(\mathbf{z})(\nabla_r \psi)(\mathbf{z} + \mathbf{x})(z_s + x_s)(z_n + x_n) dz \\ = D_m \left\{ D_r \int \psi(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) z_s z_n dz + x_n D_r \int \psi(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) z_s dz \right. \\ \left. + x_s D_r \int \psi(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) z_n dz + x_n x_s D_r \int \psi(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) dz \right\}. \end{aligned}$$

Mit der Notation  $\tau(\mathbf{x}) := \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y})$  ergibt sich nach Rücktransformation via  $\mathbf{y} = \mathbf{z} + \mathbf{x}$

$$\begin{aligned} D_m \left\{ D_r \left\{ \int \tau(\mathbf{x}) y_s y_n d\mathbf{y} - x_n \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - x_s \int \tau(\mathbf{x}) y_n d\mathbf{y} + x_n x_s \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\} \right. \\ \left. + x_n D_r \left\{ \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - x_s \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\} + x_s D_r \left\{ \int \tau(\mathbf{x}) y_n d\mathbf{y} - x_n \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\} \right. \\ \left. + x_n x_s D_r \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\}, \end{aligned}$$

woraus sich durch auflösen der inneren Klammern der Term (4.58) schließlich zu

$$D_m D_r \int \tau(\mathbf{x}) y_s y_n d\mathbf{y} - \delta_{rn} D_m \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - \delta_{rs} D_m \int \tau(\mathbf{x}) y_n d\mathbf{y} \quad (4.60)$$

vereinfacht. Mit der identischen Vorgehensweise rechnet man für den Term (4.59)

$$\begin{aligned} - x_n D_m \int \psi(\mathbf{z})(\nabla_r \psi)(\mathbf{z} + \mathbf{x})(z_s + x_s) dz \\ = - x_n D_m \left\{ D_r \int \psi(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) z_s dz + x_s D_r \int \psi(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) dz \right\} \\ = - x_n D_m \left\{ D_r \left\{ \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - x_s \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\} + x_s D_r \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\} \\ = - x_n D_m D_r \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} + \delta_{rs} x_n D_m \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \end{aligned}$$

und sieht unmittelbar, daß Term (4.55) die Darstellung

$$\delta_{rs} D_m \int \tau(\mathbf{x}) y_n d\mathbf{y} - \delta_{rs} x_n D_m \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y}$$

besitzt. Letztlich wird der Ausdruck (4.56) mit denselben Techniken zu

$$\begin{aligned} & - \delta_{mn} \int (\nabla_r \psi)(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) (z_s + x_s) dz \\ &= -\delta_{mn} D_r \int \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) z_s dz - \delta_{mn} x_s D_r \int \psi(\mathbf{z} + \mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) dz \\ &= -\delta_{mn} D_r \left\{ \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - x_s \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \right\} - \delta_{mn} x_s D_r \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y} \\ &= -\delta_{mn} D_r \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} + \delta_{mn} \delta_{rs} \int \tau(\mathbf{x}) d\mathbf{y}, \end{aligned}$$

so daß sich insgesamt etliche Terme gegenseitig aufheben und

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{x})|_{mnr s} &= D_m D_r \int \tau(\mathbf{x}) y_s y_n d\mathbf{y} - \delta_{rn} D_m \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} \\ &\quad - x_n D_m D_r \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} - \delta_{mn} D_r \int \tau(\mathbf{x}) y_s d\mathbf{y} \\ &= \nabla_{mr}^2 \int \tau(\mathbf{x}) y_s (y_n - x_n) d\mathbf{y} = \nabla_{mr}^2 V_{sn}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

resultiert. Nach Lemma 4.2.17 ist  $\mathbf{V} = \mathbf{V}^T$  symmetrisch, also

$$\mathbf{M}(\mathbf{x})|_{mnr s} = \nabla_{mr}^2 V_{sn}(\mathbf{x}) = \nabla_{mr}^2 V_{ns}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}(\mathbf{x})|_{msrn}$$

□

**Bemerkung 4.2.20.** Die Darstellung (4.52) und die Symmetrie (4.53) in der zweiten und vierten Komponente von  $\mathbf{M}$  zeigen eine weitere Eigenschaft des 4-Tensors  $\mathbf{M}$ . Unter der Voraussetzung von Lemma 4.2.19 an die Formfunktion  $\psi$  ist für jedes  $1 \leq m, n, r, s \leq d$

$$\mathbf{M}(\mathbf{x})|_{mnr s} = \mathbf{M}(\mathbf{x})|_{rsmn}. \quad (4.61)$$

Erinnert man sich daran, daß der Tensor  $\mathbf{M}$  (bis auf die Konstante  $mc^2 h^{-2}$ ) gerade die um den Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho}$  linearisierte Ableitung  $\frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{H}_i \partial \mathbf{H}_j} = \frac{\partial^2 V}{\partial \bar{\mathbf{H}}_j \partial \bar{\mathbf{H}}_i}$  über dem Gitter  $\mathbf{G}$  mit  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$ , ist, so überrascht dieses Resultat in keinsten Weise.

Faßt man für jeden Gitterpunkt  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  die Auslenkungen  $\mathbf{d}_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}^d$  und  $\mathbf{D}_{\mathbf{k}} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$  als einen langen Vektor  $(\mathbf{d}_{\mathbf{k}}, \mathbf{D}_{\mathbf{k}}) \in \mathbb{R}^{(d+d^2)}$  auf, so ist die Kontraktionsdarstellung der beiden linearisierten Bewegungsgleichungen (4.39)&(4.40) wegen der Isomorphie  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \cong \mathbb{R}^{d^2}$  via  $(r, s) \mapsto m = r + (s-1)d$  für jedes  $1 \leq r, s \leq d$  äquivalent zu der Matrix-Vektor-Multiplikation

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & J\mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{d}}_{\mathbf{k}} \\ \ddot{\mathbf{D}}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \frac{c^2}{h^2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \begin{pmatrix} \mathbf{U}''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) & \mathbf{G}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \\ \mathbf{N}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) & \mathbf{M}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{d}_{\mathbf{l}} \\ \mathbf{D}_{\mathbf{l}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(d+d^2)}. \quad (4.62)$$

Für die Konsistenz dieser Diskretisierung mit der akustischen Wellengleichung bzw. deren Ortsableitung ist das folgende Resultat entscheidend. Dank der eben gezeigten Symmetrien in den Tensoren  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{N}$  und  $\mathbf{M}$  gilt die Aussage für alle Ansatzfunktionen, die aus Tensorprodukten von  $B_n$ -Splines mit  $n > 3$  bestehen.

**Satz 4.2.21.** *Ist die Formfunktion  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d B_n(x_\mu)$  das Tensorprodukt von  $B_n$ -Splines mit  $n > 3$ , so gilt für alle vektorwertigen Polynome  $\mathbf{p} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  vom Grad  $\deg(\mathbf{p}) \leq 3$*

$$\begin{pmatrix} \nabla(\operatorname{div} \mathbf{p})(h\mathbf{k}) \\ Jh\nabla(\operatorname{Div}(\nabla\mathbf{p})^T)(h\mathbf{k}) \end{pmatrix} = h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \begin{pmatrix} \mathbf{U}''(\mathbf{k}-\mathbf{l}) & \mathbf{G}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \\ \mathbf{N}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) & \mathbf{M}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{p}(h\mathbf{l}) \\ h(\nabla\mathbf{p})(h\mathbf{l}) \end{pmatrix}.$$

*Beweis.* Schreibt man  $\mathbf{p}(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{k} - \mathbf{x}/h)$ , so gilt die Behauptung genau dann, wenn für alle vektorwertigen Polynome  $\tilde{\mathbf{p}} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  vom Grad  $\deg(\tilde{\mathbf{p}}) \leq 3$

$$\begin{pmatrix} \nabla(\operatorname{div} \tilde{\mathbf{p}})(0) \\ -J\nabla(\operatorname{Div}(\nabla\tilde{\mathbf{p}})^T)(0) \end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \begin{pmatrix} \mathbf{U}''(\mathbf{k}-\mathbf{l}) & \mathbf{G}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \\ \mathbf{N}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) & \mathbf{M}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \\ -(\nabla\tilde{\mathbf{p}})(\mathbf{k}-\mathbf{l}) \end{pmatrix}$$

gilt. In Kontraktionsschreibweise ist dies genau dann der Fall, wenn die beiden Gleichungen

$$\nabla(\operatorname{div} \tilde{\mathbf{p}})(0) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{U}''(\mathbf{k})\tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{G}(\mathbf{k})[(\nabla\tilde{\mathbf{p}})(\mathbf{k})], \quad (4.63)$$

$$-J\nabla(\operatorname{Div}(\nabla\tilde{\mathbf{p}})^T)(0) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{N}(\mathbf{k})[\tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{k})] - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{M}(\mathbf{k})[(\nabla\tilde{\mathbf{p}})(\mathbf{k})] \quad (4.64)$$

über dem unendlich ausgedehnten Gitter  $\mathbf{G}$  erfüllt sind. Bezeichnet  $\mathbf{e}_\nu$  den  $\nu$ -ten Einheitsvektor des  $\mathbb{R}^d$ , so genügt es sogar vektorwertige Polynome der Form  $\tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x})\mathbf{e}_\nu$  mit skalarwertigen Polynomen  $P : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  vom Grad  $\deg(P) \leq 3$  zu betrachten. Jedes vektorwertige Polynom läßt sich nämlich durch Linearkombination aus derartigen Polynomen konstruieren. Durch komponentenweises nachrechnen lassen sich für jedes  $\mu = 1, \dots, d$  leicht die Beziehungen

$$\operatorname{div} \tilde{\mathbf{p}} = D_\nu P, \quad \operatorname{Div}(\nabla\tilde{\mathbf{p}})^T = \nabla(D_\nu P), \quad (\nabla\tilde{\mathbf{p}}) = [\mathbf{e}_\nu][(\nabla P)]^T$$

verifizieren und die Gleichungen (4.63) & (4.64) sind äquivalent zu den beiden Gleichungen

$$\nabla(D_\nu P)(0) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} P(\mathbf{k})\mathbf{U}''(\mathbf{k})\mathbf{e}_\nu - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{G}(\mathbf{k})[[\mathbf{e}_\nu][(\nabla P)(\mathbf{k})]^T], \quad (4.65)$$

$$-J\nabla^2(D_\nu P)(0) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} P(\mathbf{k})\mathbf{N}(\mathbf{k})[\mathbf{e}_\nu] - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{M}(\mathbf{k})[[\mathbf{e}_\nu][(\nabla P)(\mathbf{k})]^T]. \quad (4.66)$$

Für  $d \geq 3$  und  $1 \leq \mu \neq \xi \neq \zeta \leq d$  ist durch  $\langle 1, x_\mu, x_\mu^2, x_\mu x_\xi, x_\mu^3, x_\mu^2 x_\xi, x_\mu x_\xi x_\zeta \rangle$  eine vollständige Basis des Raumes der skalarwertigen Polynome  $P : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  vom Grad  $\deg(P) \leq 3$  gegeben, während für kleinere Dimensionen  $d = 1, 2$  die Basiselemente mit  $\xi$  und  $\zeta$  bzw.  $\zeta$  nicht mehr auftauchen. Durchläuft  $P$  diese Basen, so sind die linken Seiten von (4.65) bzw. (4.66) offensichtlich nur für Basiselemente zweiten bzw. dritten Grades von Null verschieden. Für jedes  $1 \leq r, s, \mu, \xi \leq d$  gilt dann zum einen

$$\nabla_r(D_\nu x_\mu^2)(0) = 2\delta_{\nu\mu}\delta_{\mu r}, \quad \nabla_r(D_\nu x_\mu x_\xi)(0) = \delta_{\nu\xi}\delta_{r\mu} + \delta_{\nu\mu}\delta_{r\xi}$$

und zum anderen

$$-J\nabla_{rs}^2(D_\nu x_\mu^3)(0) = -6J\delta_{r\mu}\delta_{s\mu}\delta_{\mu\nu},$$

sowie

$$-J\nabla_{rs}^2(D_\nu x_\mu^2 x_\xi)(0) = -2J\delta_{s\mu}\delta_{\mu\nu}\delta_{\xi r} - 2J\delta_{r\mu}\delta_{\mu\nu}\delta_{s\xi} - 2J\delta_{r\mu}\delta_{s\mu}\delta_{\xi\nu}$$

und auch

$$\begin{aligned} -J\nabla_{rs}^2(D_\nu x_\mu x_\xi x_\zeta)(0) &= -J(\delta_{\mu\nu}\delta_{s\xi}\delta_{r\zeta} + \delta_{\mu\nu}\delta_{s\zeta}\delta_{r\xi} + \delta_{\nu\xi}\delta_{s\mu}\delta_{r\zeta} \\ &\quad + \delta_{\nu\xi}\delta_{s\zeta}\delta_{r\mu} + \delta_{\nu\zeta}\delta_{s\mu}\delta_{r\xi} + \delta_{\nu\zeta}\delta_{s\xi}\delta_{r\mu}). \end{aligned}$$

Es bleibt noch zu zeigen, daß die rechte Seite von (4.65) bzw. (4.66) auf dieselben Terme führt, was sich komponentenweise beweisen läßt. Entscheidend hierfür ist Lemma 2.1.2. Dieses gestattet, die in allen Termen auftretenden Summen der Art

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{y} - \mathbf{k}) k_\mu^{q_1} k_\xi^{q_2} k_\zeta^{q_3}, \quad |\mathbf{q}| \leq 3 \text{ für jeden Multiindex } \mathbf{q} \in \mathbb{N}^d,$$

wegen der Tensorproduktstruktur der Formfunktion  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d B_n(x_\mu)$  mit  $n > 3$  zu berechnen. So ist etwa für das Basiselement  $\{x_\mu^2\}$  nach der Definition des Potentials  $U$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} k_\mu^2 U''(\mathbf{k}) \mathbf{e}_\nu \Big|_r &= - \int \left( \sum_{\mathbf{k}} k_\mu^2 (\nabla_r \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{k}) \right) (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= - \int \left( \frac{\partial}{\partial y_r} \sum_{\mathbf{k}} k_\mu^2 \psi(\mathbf{y} - \mathbf{k}) \right) (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= -2 \int (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y}) y_\mu \delta_{\mu r} d\mathbf{y} = 2\delta_{\nu\mu} \delta_{\mu r}. \end{aligned}$$

Mit dem Satz von Fubini erhält man nämlich durch partielle Integration über den kompakten Träger von  $\psi$  mit der Normierungsbedingung (2.4)

$$- \int (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y}) y_\mu d\mathbf{y} = \int \psi(\mathbf{y}) \delta_{\nu\mu} d\mathbf{y} = \delta_{\nu\mu}. \quad (4.67)$$

Wegen der Tensorproduktstruktur von  $\psi$  ist

$$\sum_{\mathbf{k}} k_\mu k_\xi \psi(\mathbf{y} - \mathbf{k}) = \left( \sum_{k_\mu} k_\mu B_n(y_\mu - k_\mu) \right) \left( \sum_{k_\xi} k_\xi B_n(y_\xi - k_\xi) \right) \left( \prod_{t \neq (\mu, \xi)} \left( \sum_{k_t} B_n(y_t - k_t) \right) \right)$$

und für das andere Basiselement zweiter Ordnung  $\{x_\mu x_\xi\}$  ergibt sich in Dimensionen  $d \geq 2$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} k_\mu k_\xi U''(\mathbf{k}) \mathbf{e}_\nu \Big|_r &= - \int \left( \sum_{\mathbf{k}} k_\mu k_\xi (\nabla_r \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{k}) \right) (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= - \int \left( \frac{\partial}{\partial y_r} y_\mu y_\xi \right) (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= \delta_{\nu\xi} \delta_{r\mu} + \delta_{\nu\mu} \delta_{r\xi}. \end{aligned}$$

Da dieser Term aber für alle anderen Basiselemente, die nicht von Ordnung zwei sind, verschwindet und auch

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{G}} \mathbf{G}(\mathbf{k}) [[\mathbf{e}_\nu][(\nabla P)(\mathbf{k})]^T]$$

für alle Basiselemente keinen Beitrag liefert, ist die erste Gleichung (4.65) bewiesen. Zum Beweis der zweiten Gleichung (4.66) zeigt man unter Verwendung der Symmetrie (4.61) durch analoge Rechnungen, daß auch

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{G}} \mathbf{M}(\mathbf{k}) [[\mathbf{e}_\nu][(\nabla P)(\mathbf{k})]^T]$$

für jedes Basiselement verschwindet und nur

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{G}} P(\mathbf{k}) \mathbf{N}(\mathbf{k}) [\mathbf{e}_\nu]$$

für Basiselemente dritter Ordnung von Null verschieden ist. Hierfür benötigt man die Beziehung (4.49) zwischen den 3-Tensoren  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{N}$ . Mit ihr und der Definition (2.6) der Trägheitskonstanten  $J$  erhält man exemplarisch für das Basiselement  $\{x_\mu^3\}$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{G}} k_\mu^3 \mathbf{N}(\mathbf{k}) [\mathbf{e}_\nu] \Big|_{rs} &= \int \left( \sum_{\mathbf{k}} k_\mu^3 (\nabla_\nu \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{k}) \right) \left( (\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s + \psi(\mathbf{y}) \delta_{rs} \right) d\mathbf{y} \\ &= \int (3y_\mu^2 \delta_{\mu\nu} + \gamma \delta_{\mu\nu}) \left( (\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s + \psi(\mathbf{y}) \delta_{rs} \right) \\ &= \left( 3 \int (\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s y_\mu^2 d\mathbf{y} + 3J \delta_{rs} \right) \delta_{\mu\nu}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet  $\gamma$  die Konstante aus Lemma 2.1.2 und der obige Ausdruck verschwindet sicherlich für  $r \neq (s, \mu)$ . Durch partielle Integration resultiert dann

$$3 \int (\nabla_r \psi)(\mathbf{y}) y_s y_\mu^2 d\mathbf{y} = -3 \int \psi(\mathbf{y}) (y_\mu^2 \delta_{rs} + 2y_s y_\mu \delta_{r\mu}) d\mathbf{y}$$

und somit

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{G}} k_\mu^3 \mathbf{N}(\mathbf{k}) [\mathbf{e}_\nu] \Big|_{rs} = -6J \delta_{r\mu} \delta_{s\mu} \delta_{\mu\nu}.$$

Mit identischen Argumenten erhält man auch für die beiden anderen Basiselemente dritter Ordnung  $\{x_\mu^2 x_\xi, x_\mu x_\xi x_\zeta\}$  Gleichungen, die nicht mehr von der Konstanten  $\gamma$  abhängen und mit den oben angegebenen linken Seiten von (4.66) für  $\{x_\mu^2 x_\xi\}$  in  $d \geq 2$  bzw.  $\{x_\mu x_\xi x_\zeta\}$  in  $d \geq 3$  übereinstimmen. Folglich ist auch (4.66) für alle Polynome vom Grad  $\deg(P) \leq 3$  in allen Dimensionen  $d \geq 1$  erfüllt und somit alles gezeigt.  $\square$

**Bemerkung 4.2.22.** Ohne die Beziehung (4.49) zwischen den 3-Tensoren  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{N}$ , sowie der Symmetrie (4.61) des 4-Tensors  $\mathbf{M}$  wäre der Beweis von Satz 4.2.21 nur für Tensorprodukte  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d B_n(x_\mu)$  von  $B_n$ -Splines mit  $n > 4$  möglich. Es müßten dann nämlich auch Summen der Form

$$\sum_{\mathbf{k}} k_\mu^4 \psi(\mathbf{y} - \mathbf{k})$$

berechnet werden, die erst für Tensorprodukte von  $B_n$ -Splines mit  $n > 4$  eine einheitliche Form wie in Lemma 2.1.2 besitzen.

Sei  $(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})$  die zweimal stetig differenzierbare exakte Lösung der akustischen Wellengleichung und ihrer Ortsableitung (4.44). Bezeichnen  $\mathbf{u}(h\mathbf{k}, t)$  und  $(\nabla \mathbf{u})(h\mathbf{k}, t)$  die zugehörigen Werte in den Gitterpunkten, so gilt nach Definition des lokalen Abbruchfehlers  $\tau_{\mathbf{k}}(t)$  durch Einsetzen der exakten Lösung in das Differenzenverfahren (4.62)

$$c^2 \begin{pmatrix} \nabla(\operatorname{div} \mathbf{u})(h\mathbf{k}, t) \\ Jh \nabla(\operatorname{Div}(\nabla \mathbf{u})^T)(h\mathbf{k}, t) \end{pmatrix} = \frac{c^2}{h^2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \begin{pmatrix} U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) & \mathbf{G}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \\ \mathbf{N}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) & \mathbf{M}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}(h\mathbf{l}) \\ h(\nabla \mathbf{u})(h\mathbf{l}) \end{pmatrix} + \tau_{\mathbf{k}}(t).$$

Die Differenzen

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}}(t) := \begin{pmatrix} \mathbf{u}(h\mathbf{k}, t) - \mathbf{d}_{\mathbf{k}}(t) \\ h(\nabla \mathbf{u})(h\mathbf{k}, t) - \mathbf{D}_{\mathbf{k}}(t) \end{pmatrix}$$

zwischen den Werten der exakten Lösung in den Gitterpunkten und der Lösung der Differenzgleichung (4.62) mit den Anfangswerten

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{\mathbf{k}}(0) &= \mathbf{u}(h\mathbf{k}, 0), & \mathbf{d}'_{\mathbf{k}}(0) &= \mathbf{u}(h\mathbf{k}, 0), \\ \mathbf{D}_{\mathbf{k}}(0) &= h(\nabla \mathbf{u})(h\mathbf{k}, 0), & \mathbf{D}'_{\mathbf{k}}(0) &= h(\nabla \mathbf{u})(h\mathbf{k}, 0) \end{aligned}$$

erfüllen die Gleichung

$$\mathbf{K} \ddot{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{c^2}{h^2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \begin{pmatrix} U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) & \mathbf{G}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \\ \mathbf{N}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) & \mathbf{M}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \end{pmatrix} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}(t) + \tau_{\mathbf{k}}(t)$$

mit den Anfangswerten  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}(0) = 0$ ,  $\mathbf{e}'_{\mathbf{k}}(0) = 0$ . Nach Satz 4.2.11 ist damit

$$\|\mathbf{e}(t)\|_L \leq C \int_0^t (t-s) \|\tau(s)\|_L ds$$

und der Diskretisierungsfehler  $\mathbf{e}$  strebt mit derselben Geschwindigkeit im Diskretisierungsparameter  $h$  gegen 0 wie der lokale Abbruchfehler  $\tau$ . Für diesen gilt wegen Satz 4.2.21 aber

$$\|\tau(s)\|_L = O(h^2).$$

Über einem unendlich ausgedehnten Würfelgitter liefert die Methode der Finiten Massen in den Positionsauslenkungen  $\mathbf{d}$  damit eine Diskretisierung zweiter Ordnung der akustischen Wellengleichung, was das Resultat aus Kapitel 4.1.3 bestätigt. Darüberhinaus ist nun sogar eine Konvergenzaussage bezüglich dem Gradienten (4.44) der akustischen Wellengleichung möglich. Wie eben gezeigt wird dieser linear durch die Deformationsauslenkungen  $\mathbf{D}$  approximiert.

### 4.3 Numerische Simulation

Zur Simulation der Schallausbreitung in adiabatischen Fluiden müssen die linearisierten Bewegungsgleichungen (4.39), (4.40) über einem regelmäßigen Gitter aufgesetzt und das zugehörige Differenzenverfahren numerisch gelöst werden.

Im Teilchenmodell mit ausschließlich translatorischen Freiheitsgraden gestaltet sich dies besonders einfach. Hier reduzieren sich die linearisierten Bewegungsgleichungen auf die Gestalt (4.6), zu deren Lösung lediglich die Hesse-Matrix des Potentials (4.5) in endlich vielen Gitterpunkten  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  benötigt wird. Ist  $\mathbf{G} = \mathbb{Z}^d$  ein Würfelgitter und  $\psi$  das Tensorprodukt (4.11) einer ebenfalls Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren Funktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit kompaktem Träger, so ist die Normierungsbedingung (2.4) nach Lemma 4.1.2 genau dann erfüllt, wenn

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} \tilde{\psi}(x - k) = 1 \quad (4.68)$$

gilt. Mit der durch (4.13) definierten skalaren Funktion  $\tilde{U} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$  besitzt das Potential dann auch Tensorproduktstruktur (4.12) und die Berechnung der Matrizen  $U''(\mathbf{k}), \mathbf{k} \in \mathbf{G}$  beschränkt sich auf die Bestimmung der skalaren Werte

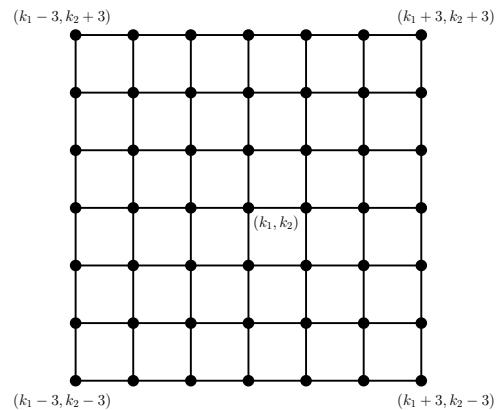
$$\tilde{U}(k), \quad \tilde{U}'(k), \quad \tilde{U}''(k), \quad k \in \mathbb{Z}$$

in den Gitterpunkten  $k$  innerhalb des Trägers von  $\tilde{U}$  bzw.  $\tilde{\psi}$ .

Liegt den Untersuchungen hingegen das allgemeine Modell deformierbarer Teilchen zu Grunde, so benötigt man wegen der Beziehung (4.49) außer der Hesse-Matrix des Potentials  $U$  zusätzlich die zweiten Ableitungen der Funktionen (4.45) und (4.46). Dabei genügt es wiederum, diese in den endlich vielen Gitterpunkten  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  zu bestimmen, die innerhalb des Trägers der Formfunktion  $\psi$  liegen. Eine für die Simulation geeignete Wahl der Formfunktion  $\tilde{\psi}$  stellen die in Abschnitt 2.1.1 eingeführten  $B_n$ -Splines für  $n \geq 3$  dar. Diese sind nämlich derart konstruiert, daß ihre Überlagerung

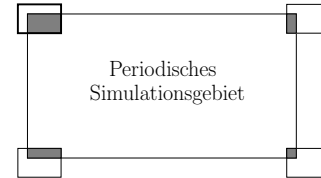
$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} B_n(x - k) = \gamma \quad (4.69)$$

stets einen skalaren Wert  $\gamma \in \mathbb{R}$  annimmt. Durch Skalierung erreicht man  $\gamma = 1$  und erfüllt die erforderliche Normierungsbedingung (4.68). Da  $B_n$ -Splines einen kompakten Träger besitzen sind nur die um endlich viele Gitterpunkte  $k \in \mathbb{Z}$  verschobenen Splines  $B_n(x - k)$  auf dem Träger von  $B_n(x)$  von Null verschieden. Deren Anzahl wächst mit zunehmendem  $n$ , was auch die Größe des zugehörigen Differenzensterns linear anwachsen läßt. Während für  $n = 3$  die um  $k = -2 \dots 2$  verschobenen  $B_3$ -Splines berücksichtigt werden müssen, liefern für  $n = 4$  bereits die entsprechend um  $k = -3 \dots 3$  verschobenen  $B_4$ -Splines einen Beitrag. Nebenstehende Abbildung zeigt den Differenzenstern für  $n = 4$  in Dimension  $d = 2$ .





Die dem Differenzenverfahren zugrunde liegenden Gitterpunktgleichungen aus Satz 4.2.16 sind über einem unendlich ausgedehnten Gitter angegeben und beschreiben dementsprechend die Schallausbreitung in unendlich ausgedehnten, adiabatischen Fluiden. Um die vorliegende Situation zu simulieren, ordnet man unendlich viele Teilchen entlang den Gitterpunkten  $\mathbf{k} \in \mathcal{G}$  an und rechnet periodisch. Dies reduziert die eigentlich unendlich große Anzahl von Teilchen auf endlich viele Repräsentanten  $N$ . Bei der Berechnung der Kräfte müssen damit die zu jedem Repräsentanten gehörigen Teilchen berücksichtigt werden, die einen nichtleeren Schnitt mit dem Simulationsgebiet haben. Nebenstehende Skizze veranschaulicht diesen Effekt. Insbesondere benötigt man zur Berechnung der Massendichte eines randnahen Punktes innerhalb des Simulationsgebiets, den Beitrag sämtlicher Teilchen, die in das Simulationsgebiet hereinragen.



Mit Hilfe einer auf dem Träger von  $\psi$  exakten Quadraturformel werden die entsprechenden Tensoren (4.41),(4.43), wie auch die Hesse-Matrix von  $U$  diskretisiert und das Differenzenverfahren mittels eines geeigneten Zeitintegrators gelöst. Dazu faßt man die Vektoren  $\mathbf{d}_k$  und Matrizen  $\mathbf{D}_k$  der Positions- und Deformationsauslenkungen zu einem langen Vektor  $\mathbf{z} = (\mathbf{d}_k, \mathbf{D}_k)_{k \in \mathcal{G}}$  der Dimension  $(d + d^2)N$  zusammen. Mit dieser Notation besitzt das Differenzenverfahren die Darstellung

$$\mathbf{z}'' = \mathbf{f}(\mathbf{z}),$$

wobei die Kräfte  $\mathbf{f}(\mathbf{z})$  mit den rechten Seiten von (4.39) und (4.40) korrespondieren. In beiden Modellen bietet sich das symplektische Störmer-Verlet-Schema als Zeitintegrationsverfahren an. Dieses respektiert die physikalischen Eigenschaften eines abgeschlossenen Systems und erhält neben der Energie auch Impuls und Drehimpuls. Die Approximationen an  $\mathbf{z}$  und  $\mathbf{z}'$  zum Zeitpunkt  $t_{m+1} = t_m + \tau$  berechnen sich dabei aus dem Zwischenwert

$$\mathbf{z}_{m+1/2} = \mathbf{z}_m + \frac{\tau}{2} \mathbf{z}'_m,$$

gemäß dem zeitreversiblen Integrationsschema

$$\mathbf{z}'_{m+1} = \mathbf{z}'_m + \tau \mathbf{f}(\mathbf{z}_{m+1/2}), \quad \mathbf{z}_{m+1} = \mathbf{z}_{m+1/2} + \frac{\tau}{2} \mathbf{z}'_{m+1}.$$

Mit dem hier vorgestellten Differenzenverfahren ist damit eine einfache Möglichkeit gegeben, die Schallausbreitung in adiabatischen Fluiden zu simulieren. Seine Attraktivität liegt insbesondere darin begründet, daß die numerische Kräfteberechnung mit dem zugehörigen Differenzenstern mühelos zu realisieren ist.

# Kapitel 5

## Galerkin Diskretisierung

Ein weiterer Zugang zur numerischen Behandlung der akustischen Wellengleichung basiert auf ihrer schwachen Formulierung. Diese wurde in Kapitel 3 in den stetig und dicht eingebetteten Hilberträumen  $H(\operatorname{div}) \hookrightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  hergeleitet und ermöglicht nun die Durchführung einer Galerkin Diskretisierung. Dabei wird das zugehörige inhomogene Anfangswertproblem (SWG) über einem noch näher zu spezifizierenden Ansatzfunktionenraum  $V_h \subseteq H(\operatorname{div})$  diskretisiert. Für gegebene Anfangswerte  $\mathbf{u}_{h,0}, \mathbf{v}_{h,0} \in V_h$  des Ansatzfunktionenraums  $V_h$  sucht man eine Funktion  $\mathbf{u}_h : \mathbb{R}_+ \ni t \rightarrow \mathbf{u}_h(t) \in V_h$ , die eine (eindeutige) Lösung des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems

$$(DAP) \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}_h(t), \mathbf{v}_h \rangle_{\mathcal{L}^2} + B(\mathbf{u}_h(t), \mathbf{v}_h) = \langle \mathbf{f}(t), \mathbf{v}_h \rangle_{\mathcal{L}^2} & \text{für alle } \mathbf{v}_h \in V_h, \\ \mathbf{u}_h(0) = \mathbf{u}_{h,0}, \\ \dot{\mathbf{u}}_h(0) = \mathbf{v}_{h,0} \end{cases}$$

darstellt. Besteht der Ansatzfunktionenraum aus diskreten Verschiebungen  $\mathbf{u}_h$  spezieller Gestalt, so läßt sich die Galerkin Diskretisierung als geringfügig modifizierte Methode der Finiten Massen interpretieren, bei der man mit der diskreten kinetischen Gesamtenergie

$$E^D := \frac{1}{2} \bar{\rho} \int |\dot{\mathbf{u}}_h(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \quad (5.1)$$

anstelle der Summe der kinetischen Energien der Einzelteilchen (2.22) in die Lagrangefunktion eingeht. Es stellt sich nämlich heraus, daß die aus der inneren Energie hervorgehende Linearisierung der Kräfte und Drehmomente um den Gleichgewichtszustand konstanter Massendichte  $\bar{\rho} > 0$  bei der Galerkin Diskretisierung auf dieselben Terme führt, wie in der Methode der Finiten Massen. Die Linearisierung findet dabei über einem regelmäßigen Gitter der Gitterweite  $h > 0$  statt.

Es folgt eine ausführliche Stabilitäts- und Konvergenzanalyse der modifizierten Methode der Finiten Massen, in dem man die äquivalente Galerkin Semidiskretisierung mit geeigneten Techniken untersucht. Da der Ansatzfunktionenraum  $V_h$  abgeschlossen in  $H(\operatorname{div})$  ist, überträgt sich die kontinuierliche Stabilitätsabschätzung aus Korollar 3.3.8 ins Diskrete und die Güte der Approximation reduziert sich auf Abschätzungen des Approximationsfehlers in der Sobolev  $H^1$ - (Halb)norm. Unter bestimmten Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  ist man durch Konstruktion entsprechender Quasiinterpolanten in der Lage, beliebig gute Abschätzungen dieses Approximationsfehlers anzugeben. Dadurch kann eine beliebig hohe Konvergenzrate des Verfahrens erzielt werden. Zum Beweis dieser Aussagen gehen wir im vorliegenden Kapitel systematisch vor und beginnen damit, die Übereinstimmung der linearisierten Kräfte und Drehmomente zu beweisen.

## 5.1 Übereinstimmung der linearisierten Kräfte und Drehmomente

Geht man mit diskreten Ansatzfunktionen  $\mathbf{u}_h \in V_h$  in die kontinuumsmechanische kinetische Gesamtenergie (3.9) und die innere Energie (3.10) ein, so leiten sich aus den resultierenden diskreten Energien  $E^D := E_K(\dot{\mathbf{u}}_h)$  und  $V^D := V_K(\mathbf{u}_h)$  die schwach formulierten diskreten Lagrangeschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial E^D}{\partial \dot{\mathbf{u}}_h} \cdot \mathbf{v}_h + \frac{\partial V^D}{\partial \mathbf{u}_h} \cdot \mathbf{v}_h = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{v}_h \in V_h$$

eines Systems ab. Deren Linearisierung um den Gleichgewichtszustand  $(\rho, \mathbf{u}_h) = (\bar{\rho}, 0)$  mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho} > 0$  führt auf die schwache Formulierung

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}_h(t), \mathbf{v}_h \rangle_{\mathcal{L}^2} + B(\mathbf{u}_h(t), \mathbf{v}_h) = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{v}_h \in V_h,$$

die sich auch als Galerkin Diskretisierung der kontinuierlichen Gleichung (3.16) auffassen läßt und als solche analysiert wird. Über dem speziellen Ansatzfunktionenraum

$$V_h := V_h(\mathbb{R}^d) := \left\{ \mathbf{v}_h \mid \mathbf{v}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) (\mathbf{q}_{\mathbf{k}}(t) + \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(t)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})) \right\}$$

bedarf es hierfür einer Nachdifferenzierung der symmetrischen, nichtnegativen Bilinearform  $B(\cdot, \cdot) = c^2 \langle \operatorname{div} \cdot, \operatorname{div} \cdot \rangle_{\mathcal{L}^2}$  aus Satz 3.2.2 nach  $\mathbf{q}_{\mathbf{k}}$  bzw.  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$ . Bilden die Gleichgewichtspunkte  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  ein unendlich ausgedehntes Gitter der Gitterweite  $h > 0$ , so besteht der Ansatzfunktionenraum  $V_h$  gerade aus den diskreten Verschiebungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \psi(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) (\mathbf{q}_i(t) + \mathbf{H}_i(t) \bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i))$$

und man ist in der Lage, neben den Kräften

$$\mathbf{F}_{\mathbf{k}}^D := - \frac{\partial V^D}{\partial \mathbf{q}_{\mathbf{k}}}$$

auch die Drehmomente

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}}^D := - \frac{\partial V^D}{\partial \mathbf{H}_{\mathbf{k}}}$$

direkt aus der Bilinearform  $B$  zu berechnen. Nach Abschnitt 3.1 und (3.7) ist die diskrete innere Energie nämlich von der Gestalt

$$V^D = \frac{1}{2} \bar{\rho} B(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h), \quad (5.2)$$

so daß tatsächlich lediglich die Bilinearform  $B$  differenziert werden muß.

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß man bei der Linearisierung der Kräfte und Drehmomente über diesem Ansatzfunktionenraum auf dieselben Terme geführt wird wie in der Methode der Finiten Massen. Die Galerkin Diskretisierung stellt damit eine geringfügig modifizierte Methode der Finiten Massen dar, bei der man mit der diskreten kinetischen Gesamtenergie  $E^D$  (5.1) anstelle der kinetischen Energie  $E$  (5.1) in die Lagrangefunktion eingeht.

Eine Linearisierung der in der Methode der Finiten Massen auftretenden Kräfte  $\mathbf{F}_i$  bzw. Drehmomente  $\mathbf{M}_i$  um die Gleichgewichtslage  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$ ,  $\bar{\mathbf{q}} = (\bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots)$ ,  $\bar{\mathbf{H}} = (\bar{\mathbf{H}}_1, \bar{\mathbf{H}}_2, \dots)$  mit konstanter Massendichte führte in Abschnitt 4.2.1 auf die Terme

$$\bar{\mathbf{F}}_i = \mathbf{F}_i(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = 0, \quad (5.3)$$

$$\bar{\mathbf{M}}_i = \mathbf{M}_i(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = 0, \quad (5.4)$$

$$\bar{\mathbf{F}}_{ij} = \mathbf{F}_{ij}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int [\nabla \bar{\psi}_i][\nabla \bar{\psi}_j]^T d\mathbf{x}, \quad (5.5)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_{ij} = \mathbf{G}_{ij}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = \varepsilon''(\bar{\rho}) \int \nabla \bar{\psi}_i \odot \frac{\partial \bar{\psi}_j}{\partial \mathbf{H}_j} d\mathbf{x}, \quad (5.6)$$

$$\bar{\mathbf{N}}_{ij} = \mathbf{N}_{ij}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = \varepsilon''(\bar{\rho}) \int \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \mathbf{H}_i} \odot \nabla \bar{\psi}_j d\mathbf{x}, \quad (5.7)$$

$$\bar{\mathbf{M}}_{ij} = \mathbf{M}_{ij}(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = -\varepsilon''(\bar{\rho}) \int \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \mathbf{H}_i} \otimes \frac{\partial \bar{\psi}_j}{\partial \mathbf{H}_j} d\mathbf{x}. \quad (5.8)$$

Hierbei werden die Ansatzfunktionen  $\bar{\psi}_i$  und deren Gradienten  $\nabla \bar{\psi}_i$  in den Gleichgewichtspunkten  $\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)$  ausgewertet. Legt man wiederum ein regelmäßiges Gitter  $\mathbf{G}$  der Gitterweite  $h > 0$  in die Gleichgewichtspunkte  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\bar{\mathbf{q}}_j = h\mathbf{l}$  mit  $\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathbf{G}$ , so nehmen die nichtverschwindenden Ableitungsterme  $\bar{\mathbf{F}}_{ij}$ ,  $\bar{\mathbf{G}}_{ij}$ ,  $\bar{\mathbf{N}}_{ij}$  und  $\bar{\mathbf{M}}_{ij}$  die Gestalt

$$\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} := \bar{\rho}c^2 h^{d-2} \mathbf{U}''(\mathbf{k} - \mathbf{l}), \quad (5.9)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} := \bar{\rho}c^2 h^{d-2} \mathbf{G}(\mathbf{k} - \mathbf{l}), \quad (5.10)$$

$$\bar{\mathbf{N}}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} := \bar{\rho}c^2 h^{d-2} \mathbf{N}(\mathbf{k} - \mathbf{l}), \quad (5.11)$$

$$\bar{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} := \bar{\rho}c^2 h^{d-2} \mathbf{M}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \quad (5.12)$$

an. Dies folgt aus dem Beweis von Satz 4.2.16 mit den Gleichungen (4.28) und der Beziehung (3.7) zwischen der zweiten Ableitung der inneren Energie und der Schallgeschwindigkeit.

Zum Beweis der anvisierten Behauptung, daß auch die Galerkin Diskretisierung über dem Ansatzfunktionenraum  $V_h$  die obige Linearisierung der Kräfte und Drehmomente liefert, benötigt man das folgende Lemma. Es gibt Auskunft über die Divergenz einer Ansatzfunktion  $\mathbf{u}_h \in V_h$  und ermöglicht die Berechnung der Bilinearform über  $V_h$ .

**Lemma 5.1.1.** *Für die Divergenz bezüglich  $\mathbf{x}$  einer Ansatzfunktion  $\mathbf{u}_h \in V_h$  gilt*

$$\operatorname{div} \mathbf{u}_h = h^{-1} \left( \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} (\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{q}_{\mathbf{k}} + \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})) + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{H}_{\mathbf{k}} : \mathbf{I} \right).$$

*Insbesondere ist über dem Gleichgewichtszustand  $\operatorname{div} \bar{\mathbf{u}}_h := \operatorname{div} \mathbf{u}_h(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = 1$ .*

*Beweis.* Durch partielle Differentiation der  $m$ -ten Komponente  $u_m$  der diskreten Verschie-

bung  $\mathbf{u}_h$  nach  $x_m$  erhält man mit

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{u}_h &= \sum_m \frac{\partial u_{h,m}}{\partial x_m} = h^{-1} \sum_m \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} (\nabla_m \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) (\mathbf{q}_{\mathbf{k}} + \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})) \Big|_m \\ &\quad + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) h^{-1} \sum_n \mathbf{H}_{\mathbf{k}} \Big|_{mn} \delta_{mn}, \end{aligned}$$

unmittelbar die erste Behauptung. Über dem Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  sind alle Punkte  $\bar{\mathbf{q}}_{\mathbf{k}}$  mit  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  von der Form  $\bar{\mathbf{q}}_{\mathbf{k}} = h\mathbf{k}$ . Für alle  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  gilt  $\bar{\mathbf{H}}_{\mathbf{k}} = h\mathbf{I}$  und somit

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \bar{\mathbf{u}}_h &= \operatorname{div} \mathbf{u}_h(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}}) = h^{-1} \left( \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} (\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \cdot (h\mathbf{k} + \mathbf{x} - h\mathbf{k}) + h\psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \right) \\ &= (D_r \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})) \cdot \mathbf{x} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) = 1 \end{aligned}$$

nach Lemma 4.1.2. □

**Satz 5.1.2.** Die aus der inneren Energie  $V^D$  abgeleiteten Kräfte  $\mathbf{F}_{\mathbf{k}}^D$  und Drehmomente  $\mathbf{M}_{\mathbf{k}}^D$  besitzen dieselbe Linearisierung um den Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  mit konstanter Massendichte  $\bar{\rho}$ , wie die Kräfte  $\mathbf{F}_i$  und Drehmomente  $\mathbf{M}_i$  der Methode der Finiten Massen, in der die Gleichgewichtspunkte  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$  ein regelmäßiges Gitter der Gitterweite  $h > 0$  bilden.

*Beweis.* Aus der im vorherigen Lemma 5.1.1 berechneten Divergenz einer Ansatzfunktion  $\mathbf{u}_h \in \mathbf{V}_h$  erhält man zum einen

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{\mathbf{k}}} (\operatorname{div} \mathbf{u}_h) = h^{-1} (\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \quad (5.13)$$

und zum anderen durch komponentenweises nachrechnen

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{H}_{\mathbf{k}}} (\operatorname{div} \mathbf{u}_h) = h^{-1} ([(\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})][\mathbf{x}/h - \mathbf{k}]^T + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})\mathbf{I}), \quad (5.14)$$

woraus wegen (5.2) die Kräfte

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\mathbf{k}}^D &= -\frac{\partial V^D}{\partial \mathbf{q}_{\mathbf{k}}} = -\frac{1}{2} \bar{\rho} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{\mathbf{k}}} B(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h) \right) = -\frac{1}{2} \bar{\rho} c^2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{\mathbf{k}}} \int |\operatorname{div} \mathbf{u}_h|^2 d\mathbf{x} \\ &= -\bar{\rho} c^2 h^{-1} \int (\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \operatorname{div} \mathbf{u}_h d\mathbf{x} \end{aligned}$$

sowie die Drehmomente

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}}^D = -\frac{\partial V^D}{\partial \mathbf{H}_{\mathbf{k}}} = -\bar{\rho} c^2 h^{-1} \int ([(\nabla \psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})][\mathbf{x}/h - \mathbf{k}]^T + \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})\mathbf{I}) \operatorname{div} \mathbf{u}_h d\mathbf{x}$$

resultieren. Über dem Gleichgewichtszustand  $(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  ist nach Lemma 5.1.1 die Divergenz der diskreten Verschiebung  $\operatorname{div} \bar{\mathbf{u}}_h = 1$ , so daß sowohl die Kräfte  $\bar{\mathbf{F}}_{\mathbf{k}}^D := \mathbf{F}_{\mathbf{k}}^D(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  als auch

die Drehmomente  $\bar{\mathbf{M}}_k^D := \mathbf{M}_k^D(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{H}})$  verschwinden. Für die Kräfte  $\bar{\mathbf{F}}_k^D$  folgt dies aus dem Transformationssatz und der Normierungsbedingung (2.4). Es ist nämlich

$$\int (\nabla\psi)(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) d\mathbf{x} = h^d \int (\nabla\psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = h^d \nabla \int \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = 0.$$

Mit derselben Transformation  $\mathbf{y} = \mathbf{x}/h - \mathbf{k}$  auf das Referenzteilchen und Lemma 4.2.1 zeigt man auch das Verschwinden der Drehmomente  $\bar{\mathbf{M}}_k^D$ . Bleibt noch die Linearisierung der Kräfte  $\mathbf{F}_k^D$  und Drehmomente  $\mathbf{M}_k^D$  um den Gleichgewichtszustand durchzuführen. Durch erneute Differentiation der Kräfte und Drehmomente nach  $\mathbf{q}_l$  bzw.  $\mathbf{H}_l$ ,  $l \in \mathbf{G}$ , erhält man mit den Ableitungen (5.13) & (5.14) und erneuter Transformation auf das Referenzteilchen dieselben Terme (5.9)-(5.12), wie in der Methode der Finiten Massen.  $\square$

## 5.2 Stabilität der Semidiskretisierung

Die Stabilität der Semidiskretisierung folgt wie üblich aus der kontinuierlichen Stabilitätsabschätzung und der Abgeschlossenheit des Ansatzfunktionenraumes.

**Satz 5.2.1.** *Der unendlichdimensionale Ansatzfunktionenraum*

$$V_h := V_h(\mathbb{R}^d) := \left\{ \mathbf{v}_h \mid \mathbf{v}_h(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) (\mathbf{q}_k + \mathbf{H}_k(\mathbf{x}/h - \mathbf{k})) \right\},$$

der diskreten Verschiebungen  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_i \psi(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) \{ \mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) \}$  über dem regelmäßigen Gitter  $\mathbf{G}$  der Gleichgewichtspunkte  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$ , ist abgeschlossen in  $H(\text{div})$ .

*Beweis.* Sei  $(\mathbf{v}_h^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$  eine Cauchyfolge in  $V_h = V_h(\mathbb{R}^d)$  mit  $\mathbf{v}_h^{(n)} \xrightarrow{H(\text{div})} \mathbf{v} \in H(\text{div})$ . Es ist  $\mathbf{v} \in V_h$  zu zeigen. Hierfür sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$  beschränkt. Für alle  $\mathbf{u} \in H(\text{div})$  ist  $\|\mathbf{u}\|_{H(\text{div})} \geq \|\mathbf{u}\|_{H(\text{div}; \Omega)}$ . Folglich impliziert die Konvergenz in  $H(\text{div})$  die Konvergenz in  $H(\text{div}; \Omega)$  und die Einschränkung  $V_h(\Omega) := V_h(\mathbb{R}^d)|_\Omega$  bildet einen endlichdimensionalen  $\|\cdot\|_{H(\text{div}; \Omega)}$ -normierten Vektorraum. Dieser ist somit abgeschlossen, d.h.

$$\mathbf{v}_h^{(n)}|_\Omega \xrightarrow{H(\text{div}; \Omega)} \mathbf{v}|_\Omega \in V_h(\Omega) \text{ und } \mathbf{v}|_\Omega = \mathbf{v}_0|_\Omega$$

mit  $\mathbf{v}_0 \in V_h(\mathbb{R}^d)$ . Durch sukzessives vergrößern der Teilmenge  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$  folgt schließlich die Behauptung. Ist nämlich  $\Omega_1 \supseteq \Omega$ , so existiert wiederum ein  $\mathbf{v}_1 \in V_h(\mathbb{R}^d)$  mit

$$\mathbf{v}_h^{(n)}|_{\Omega_1} \xrightarrow{H(\text{div}; \Omega_1)} \mathbf{v}|_{\Omega_1} \in V_h(\Omega_1) \text{ und } \mathbf{v}|_{\Omega_1} = \mathbf{v}_1|_{\Omega_1}.$$

Da aber  $\mathbf{v}_1|_\Omega = \mathbf{v}_0|_\Omega$  ist  $\mathbf{v} \in V_h$ .  $\square$

**Satz 5.2.2.** *Für  $\mathbf{u}_{h,0}, \mathbf{v}_{h,0} \in V_h$  und  $\mathbf{f} \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d))$  besitzt das diskrete Anfangswertproblem*

$$(DAP) \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}_h(t), \mathbf{v}_h \rangle_{\mathcal{L}^2} + B(\mathbf{u}_h(t), \mathbf{v}_h) = \langle \mathbf{f}(t), \mathbf{v}_h \rangle_{\mathcal{L}^2} & \text{für alle } \mathbf{v}_h \in V_h, \\ \mathbf{u}_h(0) = \mathbf{u}_{h,0}, \\ \dot{\mathbf{u}}_h(0) = \mathbf{v}_{h,0} \end{cases}$$

eine eindeutige Lösung  $\mathbf{u}_h : \mathbb{R}_+ \rightarrow V_h$ .

*Beweis.* Nach Satz 5.2.1 ist  $V_h \subseteq H(\operatorname{div})$  abgeschlossen und die Behauptung folgt unmittelbar aus Lemma 3.3.5, der Existenz und Eindeutigkeit des kontinuierlichen Problems.  $\square$

**Satz 5.2.3.** *Bezeichnet  $|\cdot|_B$  die von der nichtnegativen Bilinearform  $B(\cdot, \cdot) = c^2 \langle \operatorname{div} \cdot, \operatorname{div} \cdot \rangle$  induzierte Halbnorm, so gilt für die eindeutige Lösung  $\mathbf{u}_h : \mathbb{R}_+ \rightarrow V_h$  des diskreten Anfangswertproblems (DAP)*

$$B(\mathbf{u}_h(t), \mathbf{u}_h(t)) + \|\dot{\mathbf{u}}_h(t)\|_{\mathcal{L}^2}^2 \leq B(\mathbf{u}_h(0), \mathbf{u}_h(0)) + \|\dot{\mathbf{u}}_h(0)\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \int_0^t \|\mathbf{f}(s)\|_{\mathcal{L}^2}^2 ds$$

und

$$|\mathbf{u}_h(t)|_B + \|\dot{\mathbf{u}}_h(t)\|_{\mathcal{L}^2} \leq \sqrt{2} \left\{ |\mathbf{u}_h(0)|_B + \|\dot{\mathbf{u}}_h(0)\|_{\mathcal{L}^2} + \int_0^t \|\mathbf{f}(s)\|_{\mathcal{L}^2} ds \right\}.$$

*Beweis.* Da  $V_h \subseteq H(\operatorname{div})$  abgeschlossen ist, folgt die erste Ungleichung unmittelbar mit der kontinuierlichen Abschätzung aus Korollar 3.3.8, während die zweite Ungleichung aus der für alle  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  gültigen Abschätzung  $\|\mathbf{x}\|_1 \leq \sqrt{2}|\mathbf{x}|$  zwischen der Summennorm  $\|\cdot\|_1$  und der euklidischen Norm  $|\cdot|$  folgt.  $\square$

### 5.3 Konvergenz der Semidiskretisierung

Da die Bilinearform  $B(\cdot, \cdot)$  der inneren Energie  $H(\operatorname{div})$ -elliptisch bezüglich  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  ist, definiert die Bilinearform  $B_\lambda : H(\operatorname{div}) \times H(\operatorname{div}) \rightarrow \mathbb{R}$ ,

$$B_\lambda(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \lambda \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{L}^2},$$

für alle  $\lambda > 0$  ein Skalarprodukt auf  $H(\operatorname{div})$ . Es bezeichne  $\|\cdot\|_{B_\lambda}$  die von  $B_\lambda(\cdot, \cdot)$  induzierte Norm auf  $H(\operatorname{div})$ . Wegen der Abgeschlossenheit des Ansatzfunktionsraums  $V_h \subseteq H(\operatorname{div})$  nach Satz 5.2.1 existiert die lineare elliptische Ritz-Projektion  $P_h : H(\operatorname{div}) \rightarrow V_h$  mit

$$B_\lambda(P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h) = B_\lambda(\mathbf{u}, \mathbf{v}_h) \quad \text{für alle } \mathbf{v}_h \in V_h \quad (5.15)$$

und man erhält folgende Konvergenzabschätzung.

**Satz 5.3.1.** *Ist die exakte Lösung  $\mathbf{u} : \mathbb{R}_+ \rightarrow H(\operatorname{div})$  zweimal stetig differenzierbar, so gilt für alle  $t \geq 0$*

$$\begin{aligned} |\mathbf{u}(t) - \mathbf{u}_h(t)|_B + \|\dot{\mathbf{u}}(t) - \dot{\mathbf{u}}_h(t)\|_{\mathcal{L}^2} &\leq |\mathbf{u}(t) - P_h \mathbf{u}(t)|_B + \|\dot{\mathbf{u}}(t) - P_h \dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathcal{L}^2} \\ &+ \sqrt{2} \left\{ |\mathbf{u}_h(0) - P_h \mathbf{u}(0)|_B + \|\dot{\mathbf{u}}_h(0) - P_h \dot{\mathbf{u}}(0)\|_{\mathcal{L}^2} \right. \\ &\left. + \int_0^t \|\ddot{\mathbf{u}}(s) - P_h \ddot{\mathbf{u}}(s)\|_{\mathcal{L}^2} + \lambda \|\mathbf{u}(s) - P_h \mathbf{u}(s)\|_{\mathcal{L}^2} ds \right\}. \end{aligned}$$

*Beweis.* Nach Definition der  $\|\cdot\|_{B_\lambda}$ -Norm ist  $\sqrt{\lambda} \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2} \leq \|\mathbf{u}\|_{B_\lambda}$  für alle  $\mathbf{u} \in H(\operatorname{div})$  und  $\lambda > 0$ . Mit der Linearität des Projektors  $P_h$ , erhält man damit

$$\begin{aligned} \left\| \frac{P_h \mathbf{u}(t+h) - P_h \mathbf{u}(t)}{h} - P_h \dot{\mathbf{u}}(t) \right\|_{\mathcal{L}^2} &= \left\| P_h \left\{ \frac{\mathbf{u}(t+h) - \mathbf{u}(t)}{h} - \dot{\mathbf{u}}(t) \right\} \right\|_{\mathcal{L}^2} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left\| P_h \left\{ \frac{\mathbf{u}(t+h) - \mathbf{u}(t)}{h} - \dot{\mathbf{u}}(t) \right\} \right\|_{B_\lambda} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left\| \frac{\mathbf{u}(t+h) - \mathbf{u}(t)}{h} - \dot{\mathbf{u}}(t) \right\|_{B_\lambda} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

für  $h \rightarrow 0$ , falls  $\mathbf{u} : \mathbb{R}_+ \rightarrow H(\text{div})$  differenzierbar ist. Unter der Voraussetzung, daß  $\mathbf{u}$  zweimal stetig differenzierbar ist, erhält man folglich

$$\frac{d^2}{dt^2} P_h \mathbf{u}(t) = P_h \ddot{\mathbf{u}}(t).$$

Bezeichnet  $\langle \cdot, \cdot \rangle := \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{L}^2}$  das Skalarprodukt in  $\mathcal{L}^2$ , so ist

$$\begin{aligned} & \langle \ddot{\mathbf{u}}_h - P_h \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h - P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h) \\ &= \langle \ddot{\mathbf{u}}_h - P_h \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) - B(P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h) \\ &= \langle \ddot{\mathbf{u}}_h - P_h \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) - B_\lambda(P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h) + \lambda \langle P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h \rangle \\ &= \langle \ddot{\mathbf{u}}_h - P_h \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) - B_\lambda(\mathbf{u}, \mathbf{v}_h) + \lambda \langle P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h \rangle \\ &= \langle \ddot{\mathbf{u}}_h - P_h \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) - B(\mathbf{u}, \mathbf{v}_h) - \lambda \langle \mathbf{u}, \mathbf{v}_h \rangle + \lambda \langle P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h \rangle \\ &= \left\{ \langle \ddot{\mathbf{u}}_h, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) \right\} - \left\{ \langle \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}, \mathbf{v}_h) \right\} \\ &\quad + \left\{ \langle \ddot{\mathbf{u}} - P_h \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h \rangle - \lambda \langle \mathbf{u} - P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h \rangle \right\} \\ &= \langle \{ \ddot{\mathbf{u}} - P_h \ddot{\mathbf{u}} \} - \lambda \{ \mathbf{u} - P_h \mathbf{u} \}, \mathbf{v}_h \rangle \end{aligned}$$

und damit

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u}_h - P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h \rangle + B(\mathbf{u}_h - P_h \mathbf{u}, \mathbf{v}_h) = \langle \{ \ddot{\mathbf{u}} - P_h \ddot{\mathbf{u}} \} - \lambda \{ \mathbf{u} - P_h \mathbf{u} \}, \mathbf{v}_h \rangle.$$

Aus der Stabilitätsabschätzung von Satz 5.2.3 folgt

$$\begin{aligned} |\mathbf{u}_h(t) - P_h \mathbf{u}(t)|_B + \|\dot{\mathbf{u}}_h(t) - P_h \dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathcal{L}^2} &\leq +\sqrt{2} \left\{ \|\dot{\mathbf{u}}_h(0) - P_h \dot{\mathbf{u}}(0)\|_{\mathcal{L}^2} + |\mathbf{u}_h(0) - P_h \mathbf{u}(0)|_B \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t \|\ddot{\mathbf{u}}(s) - P_h \ddot{\mathbf{u}}(s)\|_{\mathcal{L}^2} + \lambda \|\mathbf{u}(s) - P_h \mathbf{u}(s)\|_{\mathcal{L}^2} ds \right\}. \end{aligned}$$

Schließlich ist  $|\mathbf{u}_h(t) - P_h \mathbf{u}(t)|_B \geq |\mathbf{u}(t) - \mathbf{u}_h(t)|_B - |\mathbf{u}(t) - P_h \mathbf{u}(t)|_B$  und analog  $\|\dot{\mathbf{u}}_h(t) - P_h \dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathcal{L}^2} \geq \|\dot{\mathbf{u}}(t) - \dot{\mathbf{u}}_h(t)\|_{\mathcal{L}^2} - \|\dot{\mathbf{u}}(t) - P_h \dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathcal{L}^2}$ , woraus die Behauptung folgt.  $\square$

Wählt man die diskreten Anfangswerte  $\mathbf{u}_{h,0}, \mathbf{v}_{h,0} \in V_h$  genügend nahe an den kontinuierlichen  $\mathbf{u}_0 \in H(\text{div}), \mathbf{v}_0 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ , so wird demnach die Güte der Approximation durch die Approximationseigenschaften des  $B_\lambda$ -orthogonalen Projektors  $P_h$  in den jeweiligen (Halb-)normen bestimmt. Ist die exakte Lösung  $\mathbf{u} : \mathbb{R}_+ \rightarrow H(\text{div})$  eine zweimal stetig differenzierbare Funktion der Zeit, so hängt die Konvergenzordnung des Verfahrens sogar ausschließlich von der Ordnung der Terme  $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H(\text{div})}, \inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\dot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_h\|_{H(\text{div})}$  und  $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\ddot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_h\|_{H(\text{div})}$  ab. Für alle  $\mathbf{u} \in H(\text{div})$  ist wegen

$$\left. \begin{aligned} & |\mathbf{u}|_B \\ & \sqrt{\lambda} \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2} \end{aligned} \right\} \leq \|\mathbf{u}\|_{B_\lambda} \leq C \|\mathbf{u}\|_{H(\text{div})}, \quad C > 0, \quad (5.16)$$

nach dem Lemma von Céa nämlich

$$\|\mathbf{u} - P_h \mathbf{u}\|_{B_\lambda} = \inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{B_\lambda} \leq C \inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H(\text{div})}. \quad (5.17)$$



**Lemma 5.3.2.** *Der Sobolevraum  $H^1(\mathbb{R}^d) = W^{1/2}(\mathbb{R}^d) = \{\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d) \mid D\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)\}$  ist stetig in  $H(\text{div})$  eingebettet. Genauer ist  $\|\mathbf{u}\|_{H(\text{div})} \leq \sqrt{d}\|\mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$  für alle  $\mathbf{u} \in H^1(\mathbb{R}^d)$ .*

*Beweis.* Für alle  $\mathbf{u} \in H^1(\mathbb{R}^d)$  ist mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung

$$\|\text{div } \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})}^2 = \int_{\mathbb{R}^d} \left| \sum_{j=1}^d \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right|^2 d\mathbf{x} \leq d \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^d \left| \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right|^2 d\mathbf{x} \leq d \|\mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 \quad (5.18)$$

und folglich

$$\|\mathbf{u}\|_{H(\text{div})}^2 = \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \|\text{div } \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})}^2 \leq d \|\mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2.$$

□

Unter der geringfügig stärkeren Annahme, daß die eindeutige Lösung  $\mathbf{u}(\cdot, t)$  und deren Ableitungen  $\dot{\mathbf{u}}(\cdot, t)$  und  $\ddot{\mathbf{u}}(\cdot, t)$  im Sobolevraum  $H^1(\mathbb{R}^d)$  liegen, genügt es demnach Methoden zu entwickeln, die es einem gestatten  $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$  mit derselben Vorgehensweise wie  $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\dot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$  und  $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\ddot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$  abzuschätzen. Da sowohl der Sobolevraum  $H^1(\mathbb{R}^d)$  als auch der Raum  $H(\text{div})$  Ableitungen bis einschließlich vom Grad eins enthalten, verschlechtert sich dadurch die Konvergenzordnung nicht.

### 5.3.1 Abschätzungen des Fehlers $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$

Um die Konvergenzordnung des Verfahrens angeben zu können, benötigt man demnach Abschätzungen des Approximationsfehlers  $\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$  durch geeignete Normen. Für genügend glatte Funktionen  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  bieten sich hierfür die Sobolevnormen  $\|\cdot\|_{H^n(\mathbb{R}^d)}$  oder die Sobolevhalbnormen  $|\cdot|_{H^n(\mathbb{R}^d)}$  an, und man sucht neben verschiedenen von  $h$  unabhängigen Konstanten  $C > 0$  möglichst große  $\gamma \in \mathbb{N}$ , so daß mit natürlichen  $n \geq m \geq 1$  Abschätzungen der Form

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq \inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^m(\mathbb{R}^d)} \leq Ch^\gamma \|\mathbf{u}\|_{H^n(\mathbb{R}^d)}, \quad (5.19)$$

oder

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq \inf_{\mathbf{v}_h \in V_h} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^m(\mathbb{R}^d)} \leq Ch^\gamma |\mathbf{u}|_{H^n(\mathbb{R}^d)}, \quad (5.20)$$

erfüllt sind. Diese geben wir im vorliegenden Abschnitt unter der folgenden Voraussetzung an.

$$(V) \quad \begin{cases} \text{Stets sei } \psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \tilde{\psi}(x_\mu) \text{ das Tensorprodukt von skalarwertigen B-Splines} \\ \tilde{\psi} = B_n \text{ und } \mathbf{G} = \mathbb{Z}^d \text{ ein ganzzahliges Würfelgitter der Gitterweite } h > 0. \end{cases}$$

Es stellt sich heraus, daß die Ordnung der Galerkin Diskretisierung gerade durch den Parameter  $\gamma \in \mathbb{N}$  gegeben ist. Natürlich hängt dessen Größe neben der Glattheit der exakten Lösung  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  und der gewählten Formfunktion  $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$  wesentlich von den

Freiheitsgraden  $\mathbf{q}_k$  und  $\mathbf{H}_k$  ab. Zu diesem Zweck unterscheiden wir zwischen dem Ansatzfunktionenraum

$$V_{h,q}^{(n-1)} := \left\{ \mathbf{v}_h \in V_h \mid \mathbf{H}_k = 0 \text{ für alle } \mathbf{k} \in \mathbf{G} \text{ und } \psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d B_n(x_\mu) \right\},$$

der ausschließlich Elemente mit positionellen Freiheitsgraden besitzt und dem vollen Ansatzfunktionenraum

$$V_h^{(n)} := \left\{ \mathbf{v}_h \in V_h \mid \psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d B_n(x_\mu) \right\}.$$

Besteht die Formfunktion aus einem Tensorprodukt von  $B_n$ -Splines, so bestehen Elemente des Ansatzfunktionenraumes  $V_{h,q}^{(n-1)}$  in jeder Komponente  $x_\mu, \mu = 1, \dots, d$ , aus stückweisen Polynomen  $(n-1)$ -ten Grades, während sie für Elemente  $\mathbf{v}_h \in V_h^{(n)}$  stückweise Polynome vom Grad  $n$  sind. Dies erklärt auch, warum die obige Notation derart gewählt wurde.

Im Folgenden sei zunächst  $\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(n-1)}$ , also  $\mathbf{H}_k = 0$  für alle  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$ . In dieser Situation bekommt man leicht eine erste Abschätzung des Approximationsfehlers, da die Ansatzfunktionen

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_k$$

aus einem Tensorprodukt von B-Splines bestehen, deren Approximationsgüte bereits 1970 von Bramble-Hilbert angegeben wurde.

**Satz 5.3.3.** *Seien  $n \geq m \geq 1$  und  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$ . Für  $d < 2n$  existiert eine von der Gitterweite  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit*

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(n-1)}} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^m(\mathbb{R}^d)} \leq Ch^{n-m} \|\mathbf{u}\|_{H^n(\mathbb{R}^d)}.$$

*Beweis.* vgl. [BrHi70, Theorem 9]. □

Der gleichmäßigen Anordnung der Teilchen über dem Gleichgewichtszustand ist es zu verdanken, daß die Formfunktion  $\psi$  translationsinvariant ist und man mit der Fouriertransformation eine Technik kennt, um an Abschätzungen der Art (5.19) zu gelangen. Insbesondere der Beweis von Satz 5.3.3 beruht wesentlich auf der Fouriertransformierten  $\widehat{\psi}$  von  $\psi \in H^n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ , die bekanntlich durch

$$\widehat{\psi}(\mathbf{w}) := \int_{\mathbb{R}^d} \psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{w}} d\mathbf{x}$$

fast überall definiert werden kann. Nach Voraussetzung besitzt  $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  einen kompakten Träger, weshalb die Fouriertransformierte  $\widehat{\psi}(\mathbf{w}) \in C^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  eine unendlich oft stetig differenzierbare Funktion darstellt. Dies wurde Anfang der 70er Jahre von Babuška [Bab70] und Strang [Str71] ausgenutzt, die damit weitere Abschätzungen der Art (5.19) angeben konnten. Schließlich fanden 1973 Strang und Fix [StFi73] hinreichende Kriterien, anhand derer sich die Existenz der gewünschten Abschätzungen einfach nachprüfen läßt.

**Satz 5.3.4. (Strang und Fix)** Für  $\psi \in H^n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  mit kompaktem Träger und natürlichem  $n \geq 1$  sind die folgenden Aussagen äquivalent.

- (i) Für jeden Multiindex  $\nu \in \mathbb{N}^d$  mit  $|\nu| \leq n - 1$  ist  $\widehat{\psi}(0) \neq 0$  und  $D^\nu \widehat{\psi}(2\pi\mathbf{k}) = 0$  für  $0 \neq \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d$ .
- (ii) Für fast alle  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  und  $|\nu| \leq n - 1$  existiert ein  $\lambda \neq 0$  sowie ein Polynom  $q$  vom Grad  $< |\nu|$ , so daß

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \mathbf{k}^\nu \psi(\mathbf{x} - \mathbf{k}) = \lambda \mathbf{x}^\nu + q(\mathbf{x}) \quad (5.21)$$

gilt. Die Funktion auf der rechten Seite von (5.21) ist stetig. Da die Funktion auf der linken Seite für  $d < 2n$  ebenfalls stetig ist, gilt die Gleichung (5.21) in diesem Fall für alle  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ .

- (iii) Sei  $n \geq m \geq 1$ . Für jedes  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  existieren reelle Koeffizienten  $\alpha_{\mathbf{k}}^h$  mit  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d$  und  $h > 0$  derart, daß

$$\left\| \mathbf{u} - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}}^h \right\|_{H^m(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})} \leq Ch^{n-m} \|\mathbf{u}\|_{H^n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})}$$

mit einer von  $h$  unabhängigen Konstanten  $C > 0$  gilt.

*Beweis.* vgl. [StFi73]. □

Ist eine der äquivalenten Aussagen des Theorems von Strang und Fix erfüllt, so bilden die Funktionen  $\psi(\mathbf{x} - \mathbf{k})/\lambda$  nach Aussage (ii) wegen  $\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x} - \mathbf{k}) = \lambda \neq 0$  eine Zerlegung der Eins und man befindet sich in der Lage, Approximationsaussagen für Elemente  $\mathbf{v}_h$  des Ansatzfunktionenraums  $V_{h,q}^{(n-1)}$  treffen zu können. Der Grund hierfür ist die Tatsache, daß der Satz von Strang und Fix mühelos komponentenweise auf vektorwertige Funktionen  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  verallgemeinert werden kann. Danach existieren insbesondere genau dann Gewichtsvektoren  $\mathbf{q}_{\mathbf{k}} := \mathbf{q}_{\mathbf{k}}^h$ , die komponentenweise aus den Gewichten  $\alpha_{\mathbf{k}}^h$  bestehen und eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit

$$\left\| \mathbf{u} - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_{\mathbf{k}} \right\|_{H^m(\mathbb{R}^d)} \leq Ch^{n-m} \|\mathbf{u}\|_{H^n(\mathbb{R}^d)},$$

wenn für  $\psi \in H^n(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  die Bedingung (i) aus Satz 5.3.4 erfüllt ist, also  $\widehat{\psi}(0) \neq 0$  und  $D^\nu \widehat{\psi}(2\pi\mathbf{k}) = 0$  für  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d$  und  $|\nu| \leq n - 1, n \geq m \geq 1$ , gilt. Es resultiert folgendes Korollar.

**Korollar 5.3.5.** Sei  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  und  $n \geq m \geq 1$ . Unter der Voraussetzung (V) existiert eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(n-1)}} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^m(\mathbb{R}^d)} \leq \left\| \mathbf{u} - \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_{\mathbf{k}} \right\|_{H^m(\mathbb{R}^d)} \leq Ch^{n-m} \|\mathbf{u}\|_{H^n(\mathbb{R}^d)}.$$

*Beweis.* Durch Fouriertransformation erhält man

$$\widehat{B}_1(w) = \int_{-1/2}^{1/2} e^{iw x} dx = \frac{\sin(w/2)}{w/2}$$

und somit für  $n \in \mathbb{N}$

$$\widehat{B}_n(w) = \left( \frac{\sin(w/2)}{w/2} \right)^n.$$

Unter der Voraussetzung (V) besteht die Formfunktion  $\psi(\mathbf{x})$  aus einem Tensorprodukt von  $B_n$ -Splines und die Fouriertransformierte besitzt die Darstellung

$$\widehat{\psi}(\mathbf{w}) = \prod_{\mu=1}^d \widehat{B}_n(x_\mu) = \prod_{\mu=1}^d \left( \frac{\sin(w_\mu/2)}{w_\mu/2} \right)^n.$$

Sicherlich ist  $\widehat{\psi}(0) \neq 0$  und  $D^\nu \widehat{\psi}(2\pi \mathbf{k}) = 0$  für  $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d$  und  $|\nu| \leq n - 1$ , woraus die Behauptung aus der Vorbemerkung mit  $n \geq m \geq 1$  folgt.  $\square$

Leider gilt die Poincaré Ungleichung nicht auf dem ganzen  $\mathbb{R}^d$ , so daß hier die Sobolevnormen nicht äquivalent zu den entsprechenden Sobolevhalbnormen sind. Um an Abschätzungen der Art (5.20) in der Sobolevhalbnorm für Elemente  $\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(n-1)}$  zu gelangen, bedarf es deshalb einiger Anstrengung. Eine Lösung besteht in der Konstruktion beschränkter Quasiinterpolanten  $J_h^{(n-1)} : H^1(\mathbb{R}^d) \supseteq H^n(\mathbb{R}^d) : \rightarrow V_{h,q}^{(n-1)}$ , die Tensorprodukte stückweiser Polynome vom Grad  $n - 1$  für jedes  $n \geq 1$  reproduzieren. Da sich die Konstruktion ein wenig mühsam gestaltet, erscheint es sinnvoll diese zunächst unter der Voraussetzung (V) für Tensorprodukte von 3B-Splines  $\widetilde{\psi} = B_4$  durchzuführen und anschließend (siehe Bemerkung 5.3.9) auf beliebige Splines  $B_n$  mit  $n \geq 1$  zu verallgemeinern. Dazu definiert man die folgenden Polynomräume.

**Definition 5.3.6.** Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}$  offen und  $\widetilde{p}_s : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  für jedes  $s = 1, \dots, d$  ein stückweises Polynom vom Grad  $\deg(\widetilde{p}_s)$ . Mit dem Multiindex  $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_d) \in \mathbb{N}^d$ , wo  $|\nu| = \nu_1 + \dots + \nu_d$ , und  $\mathbf{x}^\nu := x_1^{\nu_1} \dots x_d^{\nu_d}$  ist, definiert man für  $\mathbf{x} \in \Omega^d \subseteq \mathbb{R}^d$  die Polynomräume

$$\Pi^{(n)}(\Omega^d, \mathbb{R}^d) := \left\{ \mathbf{p} \mid p_s(\mathbf{x}) = \prod_{\mu=1}^d \widetilde{p}_s(x_\mu) \text{ mit } \deg(\widetilde{p}_s) \leq n \text{ für jedes } s = 1, \dots, d \right\}$$

und

$$\mathcal{P}^{(n)}(\Omega^d, \mathbb{R}^d) := \left\{ \mathbf{p} \mid p_s(\mathbf{x}) = \sum_{|\nu| \leq n} a_{\nu,s} \mathbf{x}^\nu, \text{ stückweise für jedes } s = 1, \dots, d \right\}.$$

Die entsprechenden Räume skalarwertiger Polynome werden mit  $\Pi^{(n)}(\Omega^d, \mathbb{R})$  beziehungsweise  $\mathcal{P}^{(n)}(\Omega^d, \mathbb{R})$  bezeichnet. Ist  $\Omega^d = \mathbb{R}^d$ , so schreiben wir  $\Pi^{(n)}(\mathbb{R}^d)$  und  $\mathcal{P}^{(n)}(\mathbb{R}^d)$ .

Mit dieser Definition gilt folgendes Lemma.

**Lemma 5.3.7.** Sei  $\Omega_h^d$  ein  $d$ -dimensionaler offener Würfel der Kantenlänge  $h$ , der in der Mitte des  $d$ -dimensionalen offenen Würfels  $\tilde{\Omega}_h^d$  der Kantenlänge  $7h$  enthalten ist. Für gegebene Aufpunkte  $\mathbf{a}_j = (a_{j_1}, \dots, a_{j_d})$ ,  $j = 1, \dots, 4$  und Gitterpunkte  $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_d)$  definiert man für jedes Polynom  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d)$  die Quasiinterpolante  $I_h^{(3)} : \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}(\mathbb{R}^d)$ ,

$$I_h^{(3)} \mathbf{p}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_{\mathbf{k}} \text{ mit } \mathbf{q}_{\mathbf{k}} = \sum_{j_1, \dots, j_d=1}^4 \left[ \prod_{\mu=1}^d \omega_{j_\mu} \right] \mathbf{p}(h\mathbf{k} + h\mathbf{a}_{j_\mu}).$$

Wählt man die Gewichte  $\omega_j := \omega_{j_\mu}$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , für jedes  $\mu = 1, \dots, d$  derart, daß die zugehörigen Aufpunkte  $a_i := a_{i_\mu} \neq a_{j_\mu} =: a_j$  die eindeutige Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\ a_1^2 & a_2^2 & a_3^2 & a_4^2 \\ a_1^3 & a_2^3 & a_3^3 & a_4^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \\ \omega_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{1}{3} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

sind, so besitzt  $I_h^{(3)}$  für alle  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  die Eigenschaften

$$(1) \quad I_h^{(3)} \mathbf{p} = \mathbf{p}|_{\Omega_h^d}$$

$$(2) \quad \text{Es existiert eine von } h \text{ unabhängige Konstante } C > 0 \text{ mit } \|I_h^{(3)} \mathbf{p}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|\mathbf{p}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}.$$

*Beweis.* Der Beweis gliedert sich in zwei Teile. Zunächst zeigen wir, daß die Quasiinterpolante  $I_h^{(3)} : \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d) \subseteq \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}(\Omega_h^d, \mathbb{R}^d) \subseteq V_{h,q}^{(3)}(\mathbb{R}^d)$  mit derart bestimmten Gewichten  $\omega_{j_\mu}$  ( $j = 1, \dots, 4$  für jedes  $\mu = 1, \dots, d$ ) und den daraus resultierenden Koeffizientenvektoren  $\mathbf{q}_{\mathbf{k}}$ , Polynome  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  lokal auf  $\Omega_h^d$  reproduziert. Diese Eigenschaft gilt genau dann, wenn jede Komponente  $s = 1, \dots, d$  der Quasiinterpolanten  $I_h^{(3)}$  mit Gewichten  $\omega_{j_\mu}$  und Koeffizienten  $\alpha_{\mathbf{k},s} := q_{\mathbf{k},s}$  Polynome  $p := p_s \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R})$  lokal auf  $\Omega_h^d$  reproduziert. Da das Polynom  $p \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R})$  nach Definition die Tensorproduktstruktur  $p(\mathbf{x}) = \prod_{\mu} \tilde{p}(x_\mu)$  besitzt, genügt es wegen der Tensorproduktstruktur des Splines  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu} \psi(x_\mu)$  eine eindimensionale Quasiinterpolante  $I_h^{(3)} : \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h, \mathbb{R}) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}(\Omega_h, \mathbb{R})$ ,

$$I_h^{(3)} \tilde{p}(x_\mu) := \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \tilde{\psi}(x_\mu/h - k_\mu) \alpha_{k_\mu}, \quad \alpha_{k_\mu} = \sum_{j_\mu=1}^4 \omega_{j_\mu} \tilde{p}(hk_\mu + ha_{j_\mu}),$$

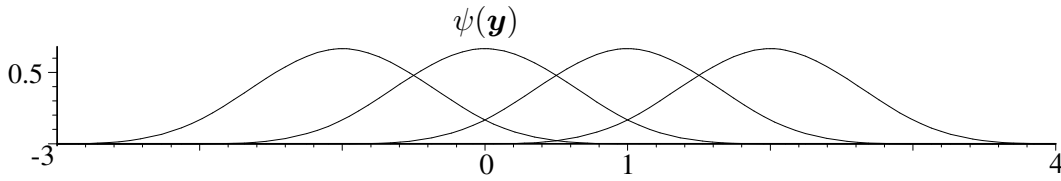
mit  $I_h^{(3)} \tilde{p} = \tilde{p}|_{\Omega_h}$  für  $\mu = \{1, \dots, d\}$  zu konstruieren. Dabei ist es wegen der Translationsinvarianz des Problems ausreichend, etwa die offenen Intervalle  $\Omega_h := (0, h) \subseteq (-3h, 4h) =: \tilde{\Omega}_h$ , den Betrachtungen zu Grunde zu legen. Durch Transformation auf ein ganzzahliges Referenzgitter der Gitterweite 1 müssen die Gewichte  $\omega_j$ ,  $j = 1, \dots, 4$ , demnach derart bestimmt werden, daß  $I_1^{(3)} : \Pi^{(3)}((-3, 4), \mathbb{R}) \rightarrow V_{1,q}^{(3)}((0, 1), \mathbb{R})$ ,

$$I_1^{(3)} \tilde{p}(y) := \sum_{k=-1}^2 \tilde{\psi}(y - k) \alpha_k, \quad \alpha_k = \sum_{j=1}^4 \omega_j \tilde{p}(k + a_j),$$

für alle Polynome  $\tilde{p} \in \Pi^{(3)}((-3, 4), \mathbb{R})$  die Reproduktionseigenschaft  $I_1^{(3)}\tilde{p} = \tilde{p}|_{(0,1)}$  erfüllt. Hieraus resultieren vier Gleichungen für die vier Unbekannten Gewichte  $\omega_j$ , nämlich

$$\sum_{j=1}^4 \left( \sum_{k=-1}^2 (k + a_j)^i \tilde{\psi}(y - k) \right) \omega_j = y^i \text{ für } y \in (0, 1) \text{ und } i = 0, 1, 2, 3. \quad (5.23)$$

Die Summation durchläuft hierbei lediglich die ganzzahligen Gitterpunkte  $k = -1, \dots, 2$ , da auf dem Intervall  $(0, 1)$  nur die um die Punkte  $-1, 0, 1, 2$  zentrierten 3B-Splines  $\tilde{\psi}(y + 1)$ ,



$\tilde{\psi}(y)$ ,  $\tilde{\psi}(y - 1)$  und  $\tilde{\psi}(y - 2)$  einen Beitrag liefern. Es ist (vgl. Satz 2.1.2)

$$\sum_{k=-1}^2 \tilde{\psi}(y - k) = 1, \quad \sum_{k=-1}^2 k \tilde{\psi}(y - k) = y, \quad (5.24)$$

$$\sum_{k=-1}^2 k^2 \tilde{\psi}(y - k) = y^2 + \frac{1}{3}, \quad \sum_{k=-1}^2 k^3 \tilde{\psi}(y - k) = y^3 + y, \quad (5.25)$$

woraus durch einfache Rechnung aus den vier Gleichungen (5.23) das lineare Gleichungssystem (5.22) für die Gewichte  $\omega_j, j = 1, \dots, 4$ , resultiert. Da die Determinante  $\prod_{i < j} (a_i - a_j)^2$  für  $a_i \neq a_j$  von Null verschieden ist, ist die Quasiinterpolante eindeutig bestimmt und  $I_h^{(3)} \mathbf{p} = \mathbf{p}|_{\Omega_h^d}$  für alle  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  nach Konstruktion. Bleibt die Beschränktheit in der  $H^1$ -Norm zu zeigen. Sowohl der Bild- als auch der Urbildbereich von  $I_h^{(3)}$  sind für alle  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  endlichdimensional, und es existiert sicherlich eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit

$$\|I_h^{(3)} \mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_h^d)} \leq C \|\mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\tilde{\Omega}_h^d)}.$$

Jedes Polynom  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\Omega_h^d, \mathbb{R}^d)$  erfüllt bekanntlich die inverse Abschätzung  $\|D\mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_h^d)} \leq Ch^{-1} \|\mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_h^d)}$ , und mit der Ungleichung von Poincaré folgt

$$\begin{aligned} |I_h^{(3)} \mathbf{p}|_{H^1(\Omega_h^d)} &= \|DI_h^{(3)} \mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_h^d)} \leq Ch^{-1} \|I_h^{(3)} \mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_h^d)} \leq Ch^{-1} \|\mathbf{p}\|_{\mathcal{L}^2(\tilde{\Omega}_h^d)} \\ &\leq Chh^{-1} |\mathbf{p}|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)} \end{aligned} \quad (5.26)$$

für jedes  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$ . Hierbei bezeichnet  $C > 0$  verschiedene, von  $h$  unabhängige Konstanten, womit alles gezeigt ist.  $\square$

Durch Komposition von  $I_h^{(3)} : \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}$  mit

$$Q_h^{(3)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d)$$

bezüglich der  $H^1$ -Norm,

$$\langle Q_h^{(3)} \mathbf{u}, \mathbf{p} \rangle_{H^1(\mathbb{R}^d)} = \langle \mathbf{u}, \mathbf{p} \rangle_{H^1(\mathbb{R}^d)}$$

$$\begin{array}{ccc} H^1(\mathbb{R}^d) & \xrightarrow{Q_h^{(3)}} & \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d) \\ & \searrow J_h^{(3)} & \downarrow I_h^{(3)} \\ & & V_{h,q}^{(3)} \end{array}$$

für alle  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\mathbb{R}^d)$ , erhält man die gesuchte Quasiinterpolante  $J_h^{(3)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}(\mathbb{R}^d)$  mit den gewünschten Eigenschaften.

**Satz 5.3.8.** Seien  $\Omega_h^d \subseteq \tilde{\Omega}_h^d$   $d$ -dimensionale Würfel wie in Lemma 5.3.7. Die Quasiinterpolante  $J_h^{(3)} := I_h^{(3)} \circ Q_h^{(3)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}(\mathbb{R}^d)$  erfüllt die Bedingungen

$$(1) \quad J_h^{(3)} \mathbf{p} = \mathbf{p}|_{\Omega_h^d} \text{ für alle } \mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d).$$

(2) Für alle  $\mathbf{u} \in H^1(\tilde{\Omega}_h^d)$  existiert eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit

$$\|J_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}$$

und für  $\mathbf{u} \in H^4(\mathbb{R}^d)$  existiert eine weitere von  $h$  unabhängige Konstante  $C^* > 0$  mit

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(3)}} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq \|\mathbf{u} - J_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq C^* h^3 |\mathbf{u}|_{H^4(\mathbb{R}^d)}.$$

*Beweis.* Für  $\mathbf{p} \in \Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  folgt die erste Behauptung unmittelbar aus Eigenschaft (1) von Lemma 5.3.7. Ist  $\mathbf{u} \in H^1(\mathbb{R}^d)$ , so gilt für die  $H^1$ -orthogonale Projektion natürlich  $\|Q_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)} \leq \|\mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}$  und man erhält nach Lemma 5.3.7 (2)

$$\|J_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} = \|I_h^{(3)} \circ Q_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|Q_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)} \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}.$$

Da jedes Element des Polynomraums  $\mathcal{P}^{(3)}(\Omega_h^d, \mathbb{R}^d)$  weniger Freiheitsgrade als ein Element des Polynomraums  $\Pi^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  besitzt, gilt die Reproduktionseigenschaft (1) der Quasiinterpolanten  $J_h^{(3)}$  auch für jedes  $\mathbf{p} \in \mathcal{P}^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$ . Damit ist

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - J_h^{(3)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} &= \|(\mathbf{u} - \mathbf{p}) - J_h^{(3)}(\mathbf{u} - \mathbf{p})\|_{H^1(\Omega_h^d)} \\ &\leq \|\mathbf{u} - \mathbf{p}\|_{H^1(\Omega_h^d)} + \|J_h^{(3)}(\mathbf{u} - \mathbf{p})\|_{H^1(\Omega_h^d)} \\ &\leq C^* \|\mathbf{u} - \mathbf{p}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)} \leq C^* h^3 |\mathbf{u}|_{H^4(\tilde{\Omega}_h^d)} \end{aligned}$$

nach dem Theorem von Bramble-Hilbert für  $\mathbf{u} \in H^4(\mathbb{R}^d)$  mit verschiedenen von  $h$  unabhängigen Konstanten  $C^* > 0$ . Sei  $i \in I$  und  $\bigcup_{i \in I} \Omega_{h,i}^d$  eine Überdeckung des  $\mathbb{R}^d$  mit offenen

$d$ -dimensionalen Würfeln der Kantenlänge  $h$  und endlichem Überdeckungsgrad. Ferner sei  $\tilde{\Omega}_{h,i}^d \supseteq \Omega_{h,i}^d$  der zugehörige Einzugsbereich der Quasiinterpolanten  $J_h^{(3)}$  des  $i$ -ten Würfels mit

der Kantenlänge  $7h$ . Dann existieren verschiedene von  $h$  unabhängige Konstanten  $C^* > 0$  mit

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - J_h^{(3)}\mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}^2 &\leq C^* \sum_{i \in I} \|\mathbf{u} - J_h^{(3)}\mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_{h,i}^d)}^2 \leq C^* \sum_{i \in I} (h^3 |\mathbf{u}|_{H^4(\tilde{\Omega}_{h,i}^d)})^2 \\ &\leq C^* h^6 |\mathbf{u}|_{H^4(\mathbb{R}^d)}^2 \end{aligned}$$

und alles ist gezeigt.  $\square$

**Bemerkung 5.3.9.** Unter der Voraussetzung (V) läßt sich die obige Konstruktion der Quasiinterpolanten  $J_h^{(3)} := I_h^{(3)} \circ Q_h^{(3)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(3)}$  in den Ansatzfunktionenraum  $V_{h,q}^{(3)}$  der Konvexkombinationen von Tensorprodukten aus  $B_4$ -Splines für jedes  $n \geq 1$  auf beliebige Ansatzfunktionenräume  $V_{h,q}^{(n-1)}$  verallgemeinern. Hierfür seien  $\Omega_{h,n}^d$   $d$ -dimensionale offene Würfel der Kantenlänge  $h$  und  $\tilde{\Omega}_{h,n}^d$   $d$ -dimensionale offene Würfel der Kantenlänge  $(2n - 1)h$ . Für jedes  $n \geq 1$  sei  $\Omega_{h,n}^d$  in der Mitte des Würfels  $\tilde{\Omega}_{h,n}^d$  enthalten und man definiert für jedes Polynom  $\mathbf{p} \in \Pi^{(n-1)}(\mathbb{R}^d)$  die Quasiinterpolante  $I_h^{(n-1)} : \Pi^{(n-1)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(n-1)}(\mathbb{R}^d)$  durch

$$I_h^{(n-1)}\mathbf{p}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_{\mathbf{k}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{q}_{\mathbf{k}} = \sum_{j_1, \dots, j_d=1}^4 \left[ \prod_{\mu=1}^d \omega_{j_\mu} \right] \mathbf{p}(h\mathbf{k} + h\mathbf{a}_j).$$

Da der  $B_n$ -Spline bekanntlich ein stückweises Polynom vom Grad  $n - 1$  darstellt und folglich  $n$  Freiheitsgrade besitzt, müssen entsprechend viele Aufpunkte  $\mathbf{a}_j = (a_{j_1}, \dots, a_{j_d})$  mit  $j = 1, \dots, n$  gewählt werden, damit die Konstruktion wie in Lemma 5.3.7 durchgeführt werden kann. Die Gewichte und die daraus resultierenden Koeffizientenvektoren  $\mathbf{q}_{\mathbf{k}}$  sind dann derart zu bestimmen, daß die Quasiinterpolante

$$I_h^{(n-1)} : \Pi^{(n-1)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d) \subseteq \Pi^{(n-1)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(n-1)}(\Omega_h^d, \mathbb{R}^d) \subseteq V_{h,q}^{(n-1)}$$

Polynome  $\mathbf{p} \in \Pi^{(n-1)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  lokal auf  $\Omega_h^d$  reproduziert. Analog zum Beweis von Lemma 5.3.7 genügt es hierfür, nach Transformation auf ein ganzzahliges Referenzgitter, die Gewichte  $\omega_j$ ,  $j = 1, \dots, n$ , derart zu bestimmen, daß die eindimensionale Quasiinterpolante  $I_1^{(n-1)} : \Pi^{(n-1)}((1-n, n), \mathbb{R}) \rightarrow V_{1,q}^{(n-1)}((0, 1), \mathbb{R})$ ,

$$I_1^{(n-1)}\tilde{p}(y) := \sum_k \tilde{\psi}(y - k) \alpha_k, \quad \alpha_k = \sum_{j=1}^n \omega_j \tilde{p}(k + a_j)$$

für alle Polynome  $\tilde{p} \in \Pi^{(n-1)}((1-n, n), \mathbb{R})$  die Reproduktionseigenschaft  $I_1^{(n-1)}\tilde{p} = \tilde{p}|_{(0,1)}$  erfüllt. Die Summe über  $k$  hat hierbei  $n$  Summanden und läuft über  $k = 1 - \frac{n}{2}, \dots, \frac{n}{2}$  für gerade  $n$  und für ungerade  $n$  über  $k \leq \lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor$ . Da die Fouriertransformierte  $\hat{B}_n$  von  $B_n$  sowohl  $\hat{B}_n(0) \neq 0$ , als auch  $D^\nu \hat{B}_n(2\Pi k) = 0$  für  $\nu \leq n - 1$  erfüllt, existiert nach dem Satz 5.3.4 von Strang und Fix ein  $\lambda \neq 0$ , sowie ein Polynom  $q$  vom Grad  $\leq \nu$  mit

$$\sum_k k^\nu B_n(y - k) = \lambda y^\nu + q(y)$$



und das resultierende Gleichungssystem für die  $n$  unbekanntenen Gewichte  $\omega_j$

$$\sum_{j=1}^n \left( \sum_k (k + a_j)^i \tilde{B}_n(y - k) \right) \omega_j = y^i \text{ für } y \in (0, 1) \text{ und } i = 0, \dots, n - 1$$

führt stets auf ein Vandermonde-System

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ a_1^2 & a_2^2 & \cdots & a_n^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1^{n-1} & a_2^{n-1} & \cdots & a_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \\ \vdots \\ \omega_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda \\ * \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$$

das für  $a_i \neq a_j$  eindeutig lösbar ist. Wegen der Normierung (2.4) des Splines ist sogar  $\lambda = 1$  (vgl. Lemma 4.1.2). Mit denselben Argumenten wie im Beweis von Lemma 5.3.7 erhält man wieder die Beschränktheit in der  $H^1$ -Norm und hat somit für jedes  $n \geq 1$  eine Quasiinterpolante konstruiert, die für alle  $\mathbf{p} \in \Pi^{(n-1)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  folgende Eigenschaften erfüllt.

- (1)  $I_h^{(n-1)} \mathbf{p} = \mathbf{p}|_{\Omega_h^d}$ .
- (2)  $\|I_h^{(n-1)} \mathbf{p}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|\mathbf{p}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}$  mit  $C > 0$  unabhängig von  $h$ .

Ist  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$ , so existiert nach dem Theorem von Bramble-Hilbert für alle Polynome  $\mathbf{p} \in \mathcal{P}^{(n-1)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C^* > 0$  mit

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{p}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)} \leq C^* h^{n-1} |\mathbf{u}|_{H^n(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)}.$$

Durch Komposition von  $I_h^{(n-1)} : \Pi^{(n-1)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(n-1)}$  mit der orthogonalen Projektion  $Q_h^{(n-1)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow \Pi^{(n-1)}(\mathbb{R}^d)$  bezüglich der  $H^1$ -Norm, erhält man mit denselben Argumenten wie im Beweis von Satz 5.3.8 für jedes  $n \geq 1$  eine Quasiinterpolante

$$J_h^{(n-1)} := I_h^{(n-1)} \circ Q_h^{(n-1)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_{h,q}^{(n-1)}(\mathbb{R}^d),$$

die folgenden Satz erfüllt.

**Satz 5.3.10.** Für jedes  $n \geq 1$  und  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  existiert unter der Voraussetzung (V) eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C^* > 0$  mit

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(n-1)}} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq \|\mathbf{u} - J_h^{(n-1)} \mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq C^* h^{n-1} |\mathbf{u}|_{H^n(\mathbb{R}^d)}.$$

Es bleibt die interessante Frage, ob sich die Abschätzungen des Approximationsfehlers für Elemente  $\mathbf{v}_h$  aus dem ganzen Ansatzfunktionenraum  $V_h^{(n)}$  noch verbessern lassen. Im Gegensatz zu Elementen aus dem Ansatzfunktionenraum  $V_{h,q}^{(n-1)}$  mit ausschließlich positionellen Freiheitsgraden, die in jeder Komponente ein stückweises Polynom  $(n-1)$ -ten Grades darstellen, bestehen diese in jeder Komponente aus stückweisen Polynomen vom Grad  $n$ . Daß sich dadurch eine Konvergenzordnung gewinnen läßt, zeigt der Rest dieses Abschnitts. Der

Trick besteht wieder in der Konstruktion  $H^1$ -beschränkter Quasiinterpolanten, die jetzt sogar Polynome vom Grad  $n$ , und nicht nur  $n - 1$ , reproduzieren.

Sicherlich gestattet der hierfür verwendete Ansatz die Konstruktion solcher Quasiinterpolanten für jeden beliebigen  $B_n$ -Spline in jeder Dimension  $d$ . Mit steigendem Polynomgrad in den Splinefunktionen  $B_n$  steigt natürlich auch der Genauigkeitsgewinn, der jedoch sehr schnell in keinem Verhältnis zum benötigten Rechen- und Speicheraufwand mehr steht. Da in der Natur mehr als dreidimensionale Strömungen nicht vorkommen, läßt sich die Konstruktion auf die praxisrelevanten Fälle  $d = 2, 3$  mit Splinefunktionen  $B_3$  und  $B_4$  beschränken.

**Lemma 5.3.11.** *Sei  $d=2,3$  und  $n=3,4$ . Ferner sei  $\Omega_h^d$  ein  $d$ -dimensionaler offener Würfel der Kantenlänge  $h$ , der in der Mitte des  $d$ -dimensionalen offenen Würfels  $\tilde{\Omega}_h^d$  der Kantenlänge  $(2n-1)h$  enthalten ist und es bezeichnen  $\Omega_h^d \subseteq \tilde{\Omega}_h^d$  die offenen Intervalle entsprechender Lage und Länge. Für gegebene Aufpunkte  $\mathbf{a}_j = (a_{j1}, \dots, a_{jd})$ ,  $j = 1, \dots, n$  und Gitterpunkte  $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_d)$  definiert man für jedes Polynom  $f_\mu \in \mathcal{P}^{(n)}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  die Quasiinterpolanten  $\tilde{I}_{h,\mu}^{(n)} : \mathcal{P}^{(n)}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}) \rightarrow V_h^{(n)}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ ,*

$$\tilde{I}_{h,\mu}^{(n)} f_\mu(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \{ \alpha_{\mathbf{k}} + \mathbf{c}_{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \}$$

mit der  $\mu$ -ten Komponente von  $\mathbf{q}_{\mathbf{k}}$ ,

$$\alpha_{\mathbf{k}} := \mathbf{q}_{\mathbf{k}} \Big|_{\mu} := \sum_{\substack{j=1 \\ j \in \mathbb{Z}^d}}^n \omega_j f_\mu(h\mathbf{k} + h\mathbf{a}_j),$$

und dem  $\mu$ -ten Zeilenvektor von  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$ ,

$$\mathbf{c}_{\mathbf{k}} := \mathbf{H}_{\mathbf{k}} \Big|_{(\mu, \cdot)} := \sum_{\substack{j=1 \\ j \in \mathbb{Z}^d}}^n h \gamma_j (\nabla f_\mu)(h\mathbf{k} + h\mathbf{a}_j).$$

Wählt man für jedes  $\mu = 1, \dots, d$  die Aufpunkte  $\mathbf{a}_{j\mu}$  etwa als Intervallmittelpunkte des  $B_n$ -Splines,  $\{-1, 0, 1\}$  für  $B_3$  und  $\{-3/2, 1/2, 1/2, 3/2\}$  für  $B_4$ , so lassen sich die  $2n^d$  Gewichte  $(\omega_j, \gamma_j)$ ,  $j = 1, \dots, n$  derart bestimmen, daß  $\tilde{I}_{h,\mu}^{(n)}$  für alle  $f_\mu \in \mathcal{P}^{(n)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R})$  die Eigenschaften

- (1)  $\tilde{I}_{h,\mu}^{(n)} f_\mu = f_\mu |_{\Omega_h}$ ,
- (2) Es existiert eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit

$$\|\tilde{I}_{h,\mu}^{(n)} f_\mu\|_{H^1(\Omega_h^d, \Omega_h)} \leq C \|f_\mu\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d, \tilde{\Omega}_h)},$$

besitzt. Damit ist

$$\tilde{I}_h^{(n)} := \begin{pmatrix} \tilde{I}_{h,1}^{(n)} \\ \vdots \\ \tilde{I}_{h,d}^{(n)} \end{pmatrix} : \mathcal{P}^{(n)}(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_h^{(n)}(\mathbb{R}^d)$$

eine Quasiinterpolante, die für jedes  $\mathbf{f} \in \mathcal{P}^{(n)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  die folgenden Aussagen erfüllt:

$$(3) \quad \tilde{I}_h^{(n)} \mathbf{f} = \mathbf{f}|_{\Omega_h^d}.$$

(4) Es existiert eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$  mit  $\|\tilde{I}_h^{(n)} \mathbf{f}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|\mathbf{f}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}$ .

*Beweis.* Nach Voraussetzung ist  $d = 2, 3$  und  $n = 3, 4$  und es sind vier  $H^1$ -beschränkte Quasiinterpolanten zu konstruieren, die Polynome entsprechenden Grades reproduzieren. Wir zeigen zunächst die Reproduktionseigenschaft (1) im Fall  $d = 2$  und  $n = 3$ , wo  $\psi(\mathbf{x}) = \prod_{\mu} B_3(x_{\mu})$  ein Tensorprodukt von eindimensionalen  $B_3$ -Splines ist. Hier ist eine zweidimensionale Quasiinterpolante  $\tilde{I}_{h,\mu}^{(3)} : \mathcal{P}^{(3)}(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}) \rightarrow V_h^{(3)}(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$ ,

$$\tilde{I}_{h,\mu}^{(3)} f_{\mu}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \{ \alpha_{\mathbf{k}} + \mathbf{c}_{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \}$$

mit

$$\alpha_{\mathbf{k}} := \mathbf{q}_{\mathbf{k}}|_{\mu} := \sum_{\substack{j=1 \\ j \in \mathbb{Z}^2}}^n \omega_j f_{\mu}(h\mathbf{k} + h\mathbf{a}_j), \quad \mathbf{c}_{\mathbf{k}} := \mathbf{H}_{\mathbf{k}}|_{(\mu, \cdot)} := \sum_{\substack{j=1 \\ j \in \mathbb{Z}^2}}^n h \gamma_j (\nabla f_{\mu})(h\mathbf{k} + h\mathbf{a}_j)$$

zu konstruieren, die Polynome  $f_{\mu} \in \mathcal{P}^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^2, \mathbb{R})$  lokal auf  $\Omega_h$  reproduziert. Wegen der Translationsinvarianz des Problems genügt es etwa die offenen Intervalle  $\Omega_h := (-h/2, h/2) \subseteq (-5h/2, 5h/2) =: \tilde{\Omega}_h$  den Betrachtungen zugrunde zu legen. Nach Transformation auf ein ganzzahliges Referenzgitter der Gitterweite 1 ist die Reproduktionseigenschaft  $\tilde{I}_{h,\mu}^{(3)} f_{\mu} = f_{\mu}|_{\Omega_h}$  genau dann erfüllt, wenn

$$\tilde{I}_1^{(3)} f(\mathbf{y}) := \sum_{\substack{\mathbf{k}=-1 \\ \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^2}}^1 \psi(\mathbf{y} - \mathbf{k}) \{ \alpha_{\mathbf{k}} + \mathbf{c}_{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{k}) \}$$

mit

$$\alpha_{\mathbf{k}} := \sum_{\substack{j=1 \\ j \in \mathbb{Z}^2}}^n \omega_j f(\mathbf{k} + \mathbf{a}_j), \quad \mathbf{c}_{\mathbf{k}} := \sum_{\substack{j=1 \\ j \in \mathbb{Z}^2}}^n \gamma_j (\nabla f)(\mathbf{k} + \mathbf{a}_j)$$

für alle Polynome  $f := f_{\mu} \in \mathcal{P}^{(3)}((-1/2, 1/2)^2, \mathbb{R})$  die Reproduktionseigenschaft

$$\tilde{I}_1^{(3)} f = f|_{(-1/2, 1/2)} \quad (5.27)$$

erfüllt. Dabei läuft die Summation über die ganzzahligen Gitterpunkte  $k_j = -1, 0, 1$  für  $j = 1, 2$ , da auf dem Intervall  $(-1/2, 1/2)$  nur die  $\tilde{\psi} = B_3$ -Splines  $\tilde{\psi}(y-1), \tilde{\psi}(y), \tilde{\psi}(y+1)$

von Null verschieden sind. Durchläuft man gemäß nebenstehender Tabelle mit allen zehn Basiselementen des Polynomraums  $\mathcal{P}^{(3)}(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$  und deren partiellen Ableitungen die Reproduktionsforderung (5.27), so resultieren unter Berücksichtigung der Beziehungen

$$\sum_{k=-1}^1 \tilde{\psi}(y-k) = 1, \quad \sum_{k=-1}^1 k \tilde{\psi}(y-k) = y$$

$$\sum_{k=-1}^1 k^2 \tilde{\psi}(y-k) = y^2 + \frac{1}{4}, \quad \sum_{k=-1}^1 k^3 \tilde{\psi}(y-k) = y$$

Basis $f$	$\nabla_1 f$	$\nabla_2 f$
1	0	0
$y_1$	1	0
$y_2$	0	1
$y_1^2$	$2y_1$	0
$y_2^2$	0	$2y_2$
$y_1^3$	$3y_1^2$	0
$y_2^3$	0	$3y_2^2$
$y_1 y_2$	$y_2$	$y_1$
$y_1^2 y_2$	$2y_1 y_2$	$y_1^2$
$y_1 y_2^2$	$y_2^2$	$2y_1 y_2$

13 Gleichungen für die 18 Koeffizienten  $(\omega_j, \gamma_j)$ . Genauer erhält man zehn Gleichungen für die neun Koeffizienten  $\omega_j$  und 3 Gleichungen für die  $\gamma_j$ , die in der unteren Tabelle aufgelistet sind. Bezeichnen  $\omega, \gamma \in \mathbb{R}^9$  die aus den jeweiligen Koeffizienten  $(\omega_j, \gamma_j)$ ,  $\mathbb{Z}^d \ni j = 1, \dots, 3$  bestehenden Vektoren, so lassen sich die Gleichungen in Form von zwei linearen Gleichungssystemen  $\mathbf{A}\omega = \mathbf{b}$  und  $\mathbf{B}\gamma = \mathbf{c}$  schreiben, wobei sich die Zeilen der Matrizen

Basis $f$	Bedingung für $\omega_{(j_1, j_2)}$	Bedingung für $\gamma_{(j_1, j_2)}$
1	$\sum \omega_{(j_1, j_2)} = 1$	-
$y_1$	$\sum a_{j_1} \omega_{(j_1, j_2)} = 0$	-
$y_2$	$\sum a_{j_2} \omega_{(j_1, j_2)} = 0$	-
$y_1^2$	$\sum a_{j_1}^2 \omega_{(j_1, j_2)} = -\frac{1}{12}$	$\sum \gamma_{(j_1, j_2)} = \frac{1}{3}$
$y_2^2$	$\sum a_{j_2}^2 \omega_{(j_1, j_2)} = -\frac{1}{12}$	
$y_1^3$	$\sum a_{j_1}^3 \omega_{(j_1, j_2)} = c_1$	$\sum a_{j_1} \gamma_{(j_1, j_2)} = \frac{2}{3} c_1$ $\sum a_{j_2} \gamma_{(j_1, j_2)} = \frac{2}{3} c_2$
$y_2^3$	$\sum a_{j_2}^3 \omega_{(j_1, j_2)} = c_2$	
$y_1 y_2$	$\sum a_{j_1} a_{j_2} \omega_{(j_1, j_2)} = 0$	-
$y_1^2 y_2$	$\sum a_{j_1}^2 a_{j_2} \omega_{(j_1, j_2)} = \frac{1}{3} c_2$	-
$y_1 y_2^2$	$\sum a_{j_1} a_{j_2}^2 \omega_{(j_1, j_2)} = \frac{1}{3} c_2$	-

$\mathbf{A} \in \mathbb{M}^{10 \times 9}(\mathbb{R})$  und  $\mathbf{B} \in \mathbb{M}^{3 \times 9}(\mathbb{R})$  in derselben Reihenfolge befinden sollen, wie sie in der Tabelle aufgeführt sind. Während  $\mathbf{B}$  vollen Rang besitzt und das lineare Gleichungssystem  $\mathbf{B}\gamma = \mathbf{c}$  unendlich viele Lösungen besitzt, ist  $\text{rang}(\mathbf{A})=9$  und die aus den Basiselementen  $\{y_1^3, y_2^3\}$  resultierenden Zeilenvektoren  $\mathbf{A}_{(6, \cdot)}$  und  $\mathbf{A}_{(7, \cdot)}$  sind linear abhängig. Genauer ist bei der Wahl der vorgeschlagenen Aufpunkte  $\mathbf{a}_j = (a_{j_1}, a_{j_2})$  mit  $a_{j_1} = a_{j_2} \in \{-1, 0, 1\}$   $\mathbf{A}_{(6, \cdot)} = \mathbf{A}_{(2, \cdot)}$  und  $\mathbf{A}_{(7, \cdot)} = \mathbf{A}_{(3, \cdot)}$ , so daß die entsprechenden Komponenten  $b_6 = b_2$  und  $b_7 = b_3$  übereinstimmen müssen, um eine Lösung des linearen Gleichungssystems  $\mathbf{A}\omega = \mathbf{b}$  zu gewährleisten. Durch Wahl der Konstanten  $c_1 = c_2 = 0$  ist dies problemlos möglich und es existieren nach komponentenweiser Konstruktion unendlich viele Quasiinterpolanten  $\tilde{I}_h^{(3)} : \mathcal{P}^{(3)}(\mathbb{R}^2) \rightarrow V_h^{(3)}(\mathbb{R}^2)$ , die lokal Polynome dritten Grades  $\mathbf{f} \in \mathcal{P}^{(3)}(\tilde{\Omega}_h^2, \mathbb{R}^2)$  reproduzieren, also (3) erfüllen. Mit derselben Vorgehensweise lassen sich auch in den übrigen drei Fällen  $(d, n)=(2,4), (3,3)$  und  $(3,4)$  unendlich viele Quasiinterpolanten konstruieren, die Polynome entsprechenden Grades lokal reproduzieren. Lediglich die Dimension der linearen Gleichungssysteme wächst mit größeren Dimensionen  $d$  und Polynomgraden  $n$  und es müssen wesentlich mehr Basiselemente durchlaufen werden. Im Falle  $(d, n)=(3,4)$  sind dies bereits  $\dim(\mathcal{P}^{(4)}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}))=35$ . Bleibt noch die  $H^1$ -Beschränktheit der Quasiinterpolanten zu

zeigen. Da in allen 4 Fällen der Bild- und Urbildbereich endlichdimensional ist, sind diese in der  $L^2$ -Norm beschränkt und mit der Ungleichung von Poincaré folgt wie in (5.26) die Behauptung, womit alles gezeigt ist.  $\square$

Durch Komposition der Quasiinterpolanten  $\tilde{I}_h^{(n)}$  mit der zugehörigen orthogonalen Projektion  $\tilde{Q}_h^{(n)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{P}^{(n)}(\mathbb{R}^d)$  bezüglich der  $H^1$ -Norm,

$$\langle \tilde{Q}_h^{(n)} \mathbf{u}, \mathbf{f} \rangle_{H^1(\mathbb{R}^d)} = \langle \mathbf{u}, \mathbf{f} \rangle_{H^1(\mathbb{R}^d)}$$

erhält man für alle  $\mathbf{f} \in \mathcal{P}^{(n)}(\mathbb{R}^d)$  und  $d = 2, 3$  sowie  $n = 3, 4$  Quasiinterpolanten  $\tilde{J}_h^{(n)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_h^{(n)}(\mathbb{R}^d)$  mit den gesuchten Merkmalen.

**Satz 5.3.12.** *Sei  $d=2,3$  und  $n=3,4$ . Ferner seien  $\Omega_h^d \subseteq \tilde{\Omega}_h^d$   $d$ -dimensionale Würfel wie in Lemma 5.3.11. Die Quasiinterpolanten  $\tilde{J}_h^{(n)} := \tilde{I}_h^{(n)} \circ \tilde{Q}_h^{(n)} : H^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow V_h^{(n)}(\mathbb{R}^d)$  erfüllen die Bedingungen*

$$(1) \quad \tilde{J}_h^{(n)} \mathbf{f} = \mathbf{f}|_{\Omega_h^d} \text{ für alle } \mathbf{f} \in \mathcal{P}^{(n)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$$

$$(2) \quad \text{Für alle } \mathbf{u} \in H^1(\tilde{\Omega}_h^d) \text{ existiert eine von } h \text{ unabhängige Konstante } C > 0 \text{ mit}$$

$$\|\tilde{J}_h^{(n)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}$$

und für  $\mathbf{u} \in H^{n+1}(\mathbb{R}^d)$  existiert eine weitere, von  $h$  unabhängige Konstante  $C^* > 0$  mit

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_h^{(n)}} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq \|\mathbf{u} - \tilde{J}_h^{(n)} \mathbf{u}\|_{H^1(\mathbb{R}^d)} \leq C^* h^n |\mathbf{u}|_{H^{n+1}(\mathbb{R}^d)}.$$

*Beweis.* Für alle zulässigen  $(d, n)$  und  $\mathbf{f} \in \mathcal{P}^{(n)}(\tilde{\Omega}_h^d, \mathbb{R}^d)$  folgt die Behauptung (1) unmittelbar aus Lemma 5.3.11. Hieraus resultiert für  $\mathbf{u} \in H^1(\mathbb{R}^d)$  ebenfalls

$$\|\tilde{J}_h^{(n)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} = \|\tilde{I}_h^{(n)} \circ \tilde{Q}_h^{(n)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} \leq C \|\tilde{Q}_h^{(n)} \mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)} \leq C \|\mathbf{u}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)}.$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u} - \tilde{J}_h^{(n)} \mathbf{u}\|_{H^1(\Omega_h^d)} &\leq \|\mathbf{u} - \mathbf{f}\|_{H^1(\Omega_h^d)} + \|\tilde{J}_h^{(n)}(\mathbf{u} - \mathbf{f})\|_{H^1(\Omega_h^d)} \\ &\leq C^* \|\mathbf{u} - \mathbf{f}\|_{H^1(\tilde{\Omega}_h^d)} \leq C^* h^n |\mathbf{u}|_{H^{n+1}(\tilde{\Omega}_h^d)} \end{aligned}$$

nach dem Theorem von Bramble-Hilbert für  $\mathbf{u} \in H^{n+1}(\mathbb{R}^d)$ , mit verschiedenen von  $h$  unabhängigen Konstanten  $C^* > 0$ . Durch Konstruktion einer Überdeckung des  $\mathbb{R}^d$  mit endlichem Überdeckungsgrad folgt die Behauptung wie im Beweis von Satz 5.3.8.  $\square$

### 5.3.2 Konvergenzaussagen in der Energiehalbnorm

Zusammen mit dem Konvergenzresultat aus Satz 5.3.1 gestatten es die im vorherigen Abschnitt angegebenen Abschätzungen des Approximationsfehlers nun, die Konvergenzordnung des Galerkin Verfahrens anzugeben. Über einem Würfelgitter der Gitterweite  $h > 0$  kann unter geeigneten Voraussetzungen an die Formfunktion und die diskreten Anfangswerte eine beliebig hohe Konvergenzrate erzielt werden. Der folgende Satz zeigt, daß dies bereits für Ansatzfunktionen mit ausschließlich positionellen Freiheitsgraden möglich ist.

**Satz 5.3.13.** *Ist die exakte Lösung  $\mathbf{u} : \mathbb{R}_+ \rightarrow H(\text{div})$  zweimal stetig differenzierbar und werden die diskreten Anfangswerte  $\mathbf{u}_{h,0}, \mathbf{v}_{h,0} \in V_{h,q}^{(n-1)}$  durch*

$$|\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_{h,0}|_B = \|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{h,0}\|_{\mathcal{L}^2} = O(h^{n-1})$$

*entsprechend nahe an den kontinuierlichen Anfangswerten  $\mathbf{u}_0 \in H(\text{div}), \mathbf{v}_0 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$  gewählt, so gilt unter der Voraussetzung (V) für jedes  $n \geq 1$  und  $\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \ddot{\mathbf{u}} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  die Abschätzung*

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h|_B = O(h^{n-1}),$$

*wobei in die von der Gitterweite  $h > 0$  unabhängigen Konstanten die Halbnormen  $|\mathbf{u}|_{H^n(\mathbb{R}^d)}, |\dot{\mathbf{u}}|_{H^n(\mathbb{R}^d)}$  und  $|\ddot{\mathbf{u}}|_{H^n(\mathbb{R}^d)}$  eingehen.*

*Beweis.* Der Beweis basiert auf den Abschätzungen des Approximationsfehlers

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in V_{h,q}^{(n-1)}} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$$

aus Korollar 5.3.5 oder Satz 5.3.8 für  $\mathbf{u} \in H^n(\mathbb{R}^d)$ , die unter der Voraussetzung (V) gelten und für  $\dot{\mathbf{u}}, \ddot{\mathbf{u}} \in H^n(\mathbb{R}^d)$  auf die Zeitableitungen  $\inf \|\dot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}, \inf \|\ddot{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_h\|_{H^1(\mathbb{R}^d)}$  übertragen werden können. Da der Sobolevraum  $H^1(\mathbb{R}^d)$  stetig in  $H(\text{div})$  eingebettet ist, folgt daraus für zweimal stetig differenzierbares  $\mathbf{u} : \mathbb{R}_+ \rightarrow H(\text{div})$  mit der angegebenen Wahl der diskreten Anfangswerte und den Abschätzungen (5.16) sowie (5.17) die Behauptung unmittelbar aus Satz 5.3.1.  $\square$

Da die linearisierten Kräfte und Drehmomente der bei der Galerkin Diskretisierung nach Satz 5.1.2 mit denen der Methode der Finiten Massen übereinstimmen, handelt es sich beim Galerkin Verfahren um eine Modifizierung der Methode der Finiten Massen, bei der man mit der diskreten kinetischen Gesamtenergie anstelle der kinetischen Energien der Einzelteilchen in die Lagrangefunktion eingeht. Wählt man die Formfunktion  $\psi$  als Tensorprodukt von  $B_n$  Splines, so sind die Konvergenzraten des vorherigen Satzes gerade die Konvergenzraten der modifizierten Methode der Finiten Massen. Allerdings ist  $\psi$  in der Methode der Finiten Massen als stückweise stetig differenzierbare, Lipschitz-stetige Funktion mit kompaktem Träger vorausgesetzt, so daß mindestens  $n \geq 3$  gewählt werden muß. Für Tensorprodukte von  $B_3$ -Splines konvergiert die Lösung der modifizierten Methode der Finiten Massen demnach quadratisch gegen die Lösung der akustischen Wellengleichung, während für kubische  $B_4$ -Splines bereits kubische Konvergenz vorliegt. Dies gilt bereits für Ansatzfunktionen mit ausschließlich positionellen Freiheitsgraden, bei denen die Teilchen keinerlei Deformation erfahren können. Daß sich diese Konvergenzrate noch um eine Potenz verbessert, wenn mit vollen Ansatzfunktionen gearbeitet wird, zeigt der folgende Satz, dessen Beweis auf den in Satz 5.3.12 konstruierten Quasiinterpolanten beruht.

**Satz 5.3.14.** *Sei  $d = 2, 3$  und  $n = 3, 4$ . Werden die diskreten Anfangswerte  $\mathbf{u}_{h,0}, \mathbf{v}_{h,0} \in V_h^{(n)}$  derart gewählt, daß*

$$|\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_{h,0}|_B = \|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{h,0}\|_{\mathcal{L}^2} = O(h^n)$$

*gilt, so erhält man unter der Voraussetzung (V) für  $\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \ddot{\mathbf{u}} \in H^{n+1}(\mathbb{R}^d)$  die Abschätzung*

$$|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h|_B = O(h^n).$$

*Die hierbei auftretende Konstante hängt von den Sobolev-Halbnormen  $|\cdot|_{H^{n+1}(\mathbb{R}^d)}$  der Funktionen  $\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}$  und  $\ddot{\mathbf{u}}$  ab, nicht aber von der Gitterweite  $h > 0$ .*

*Beweis.* Folgt analog zum Beweis von Satz 5.3.13 aus der Konstruktion der Quasiinterpolanten aus Satz 5.3.12.  $\square$

Besteht die Formfunktion  $\psi$  aus einem Tensorprodukt von  $B_3$ -Splines, so konvergiert die Lösung der modifizierten Methode der Finiten Massen für Ansatzfunktionen aus dem vollständigen Ansatzfunktionenraum  $V_h^{(3)}$  demnach sogar kubisch gegen die Lösung der akustischen Wellengleichung. Mit Tensorprodukten von kubischen  $B_4$ -Splines erhöht sich die Konvergenzordnung entsprechend um eine Ordnung und es liegt Konvergenz vierter Ordnung vor.

# Kapitel 6

## Die Methode der Finiten Massen für hyperelastische Materialien

Die Methode der Finiten Massen wurde ursprünglich zur Simulation kompressibler Strömungen in Flüssigkeiten oder Gasen entwickelt. Durch entsprechende Modifikationen des Ansatzes ist sie auch in der Lage, die Verformungen von elastischen Körpern zu reproduzieren. Ein wesentlicher Unterschied zu den Bewegungsgleichungen von Fluiden besteht darin, daß die Elastizitätsgleichungen (A.4) mit Hilfe der Piola-Kirchhoff Transformation über dem Referenzzustand ausgedrückt werden. Man benötigt deshalb eine geeignete Definition der Deformation über dem Referenzzustand, sowie eine innere Energie, die das Verhalten des Materials zumindest für kleine Verformungen eindeutig bestimmt. Dies ist auch der Grund, weshalb man sich auf die Klasse der hyperelastischen Materialien beschränkt.

### 6.1 Die Deformation

Das wichtigste Instrument der Elastizitätstheorie ist die Deformation. Sie beschreibt die Verformungen eines Körpers, dessen Volumen durch den Abschluß einer offenen, zusammenhängenden Menge  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$  mit genügend glattem Rand repräsentiert wird. Der Abschluß von  $\Omega$  bezeichnet den Referenzzustand, für den etwa der Ausgangszustand  $\bar{\Omega}_0$  zur Zeit  $t = 0$  eine geeignete Wahl darstellen könnte. Zur Untersuchung der Schallausbreitung ist es jedoch naheliegend, im Folgenden den Referenzzustand mit dem spannungsfreien Gleichgewichtszustand  $\bar{\Omega}$  zu identifizieren. Nach der Idee der Methode der Finiten Massen teilt man die Masse des Körpers auf endlich viele Massenpakete mit endlicher Ausdehnung auf. Bezeichnet  $\mathbf{x} := \bar{\mathbf{q}}_i + \bar{\mathbf{H}}_i \mathbf{y}$ , so bewegen sich nach (2.2) die Teilchen entlang der Trajektorien

$$t \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{u}_i(\mathbf{x}, t),$$

wobei

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}_i(t) + \mathbf{H}_i(t) (\bar{\mathbf{H}}_i^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)) - \mathbf{x}.$$

Da  $\mathbf{u}_i(\mathbf{x}, 0) = 0$  ist, bezeichnet man  $\mathbf{u}_i(\mathbf{x}, t)$  als die Verschiebung des  $i$ -ten Teilchens und definiert mit Hilfe der lokalen Massenanteile (2.18) die Gesamtverschiebung

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \bar{\chi}_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i(\mathbf{x}, t).$$

In der Mechanik besteht zwischen der Verschiebung und der Deformation die Beziehung (A.1), was uns zu der folgenden Definition ermutigt.

**Definition 6.1.1.** Die Funktion  $\varphi : \bar{\Omega} \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  mit

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \sum_i \bar{\chi}_i(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}, t) \tag{6.1}$$



und

$$\varphi_i(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}_i(t) + \mathbf{H}_i(t)(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i))$$

bezeichnet man als die Deformation eines Körper  $\Omega$  über dem Referenzzustand  $\bar{\Omega}$ .

Man beachte, daß dabei die lokalen Massenanteile  $\bar{\chi}_i(\mathbf{x})$  unabhängig von den Positionen  $\mathbf{q}_i(t)$  und den Deformationen  $\mathbf{H}_i(t)$  sind, was die Herleitung der Kräfte  $\mathbf{F}_i$  und Drehmomente  $\mathbf{M}_i$  im übernächsten Abschnitt erheblich vereinfacht.

Neben der Deformation stellt vor allem der Deformationsgradient eine entscheidende Größe dar, da sowohl die Materialgesetze als auch der Cauchysche Spannungstensor aus Abschnitt A.3 davon abhängen. Man ist deshalb an dessen Ableitung nach  $\mathbf{x}$  interessiert.

**Lemma 6.1.2.** Für den Gradienten der Deformation  $\varphi$  bezüglich  $\mathbf{x}$  gilt

$$\nabla\varphi(\mathbf{x}) = \sum_i [\varphi_i(\mathbf{x}, t)][\nabla\bar{\chi}_i(\mathbf{x})]^T + \bar{\chi}_i(\mathbf{x})\mathbf{H}_i(t)\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}. \quad (6.2)$$

*Beweis.* Zur Vereinfachung der Notation unterdrückt man die Zeitabhängigkeit von  $\mathbf{q}_i$  und  $\mathbf{H}_i$ . Bezeichnen  $\mathbf{H} := \mathbf{H}_i\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}$  und  $\mathbf{v}_i = \mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i(\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i))$ , so ist die  $k$ -te Komponente der Deformation  $\varphi(\mathbf{x})$  von der Form  $\varphi_k(\mathbf{x}) = \sum \bar{\chi}_i(\mathbf{x})\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_k$ . Wegen

$$D_l(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_k) = D_l\left(\sum_{n=1}^d H_{mn}x_n\right) \cdot \mathbf{e}_k = D_l\sum_{n=1}^d H_{kn}x_n = H_{kl}$$

folgt aus

$$\nabla\varphi_{kl} = D_l\varphi_k = \sum_i \{D_l\bar{\chi}_i(\mathbf{x})\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_k + \bar{\chi}_i(\mathbf{x})D_l\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_k\}$$

mit  $v_i = \varphi_i$  die Behauptung. □

## 6.2 Die innere Energie

Neben der kinetischen Energie benötigt man auch bei hyperelastischen Materialien die innere Energie des Systems um die Lagrangefunktion aufzustellen und daraus die Bewegungsgleichungen abzuleiten. Im Gegensatz zu den elastischen Materialien ist ein (inhomogenes) Material genau dann hyperelastisch, wenn es ein Energiefunktional  $W : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  gibt, dessen Fréchet-Ableitung mit der Antwortfunktion des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors übereinstimmt (vgl. Definition A.3.8). Dies rechtfertigt den folgenden Ansatz.

**Definition 6.2.1.** Ein (homogenes) hyperelastisches Material ist durch sein hinreichend oft stetig differenzierbares Energiefunktional  $W : \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  eindeutig bestimmt und es bezeichnet

$$V = \int W(\nabla\varphi(\mathbf{x})) d\mathbf{x} \quad (6.3)$$

die zugehörige innere Energie.

### 6.3 Die Bewegungsgleichungen hyperelastischer Materialien

Aus der kinetischen Energie (2.22) und der inneren Energie (6.3) eines hyperelastischen Materials leiten sich wie bei adiabatischen Fluiden in Kapitel 2.3 aus der Lagrangefunktion  $\mathcal{L} = E - V$  die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_i} = 0, \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{H}}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{H}_i} = 0$$

ab. Mit den mit negativem Vorzeichen versehenen Kräften

$$\mathbf{F}_i := \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (6.4)$$

und den Drehmomenten

$$\mathbf{M}_i := \frac{\partial V}{\partial \mathbf{H}_i} \quad (6.5)$$

sind diese von der ähnlichen Gestalt

$$\begin{aligned} m_i \ddot{\mathbf{q}}_i &= -\mathbf{F}_i, \\ J m_i \ddot{\mathbf{H}}_i &= -\mathbf{M}_i. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Der Unterschied beruht auf der anderen Definition der Kräfte und Drehmomente, die hier im Gegensatz zu adiabatischen Fluiden nicht als negative Ableitungen der inneren Energie angesetzt werden. Bei der folgenden Berechnung der Kräfte und Drehmomente spart man sich damit ein Vorzeichen, das über die Bewegungsgleichungen (6.6) wieder eingeht.

**Satz 6.3.1.** *Bezeichnet  $\mathbf{F}$  den Deformationsgradienten  $\nabla \varphi$ , so sind die in den Bewegungsgleichungen (6.6) relevanten Kräfte*

$$\mathbf{F}_i = \int W'(\mathbf{F}) \nabla \bar{\chi}_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (6.7)$$

und Drehmomente

$$\mathbf{M}_i = \int W'(\mathbf{F}) (\nabla \bar{\mathbf{w}}_i(\mathbf{x}))^T d\mathbf{x}. \quad (6.8)$$

Hierbei bezeichnet  $\bar{\mathbf{w}}_i(\mathbf{x}) = \bar{\chi}_i(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)$  und folglich

$$\nabla \bar{\mathbf{w}}_i(\mathbf{x}) = [\bar{\mathbf{H}}_i^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i)] [\nabla \bar{\chi}_i(\mathbf{x})]^T + \bar{\chi}_i(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{H}}_i^{-1}.$$

*Beweis.* Da  $W$  und  $\varphi$  genügend glatt sind, erhält man durch Differentiation unter dem Integral einerseits

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial q_{i,m}} &= \int \sum_{k,l} \frac{\partial W}{\partial F_{kl}} \frac{\partial F_{kl}}{\partial q_{i,m}} d\mathbf{x} \\ &= \int \sum_{k,l} \frac{\partial W}{\partial F_{kl}} D_l \frac{\partial \varphi_k}{\partial q_{i,m}} d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (6.9)$$

und andererseits analog

$$\frac{\partial V}{\partial H_{i,mn}} = \int \sum_{k,l} \frac{\partial W}{\partial F_{kl}} D_l \frac{\partial \varphi_k}{\partial H_{i,mn}} d\mathbf{x}. \quad (6.10)$$

Es ist

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial q_{i,m}} = \frac{\partial}{\partial q_{i,m}} \sum_j \bar{\chi}_j(\mathbf{x}) q_{j,k} = \delta_{mk} \bar{\chi}_i(\mathbf{x}),$$

woraus durch Einsetzen in (6.9) die Darstellung der Kräfte folgt. Mit  $\mathbf{w}_i$  wie oben definiert erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_k}{\partial H_{i,mn}} &= \frac{\partial}{\partial H_{i,mn}} \sum_j \sum_r H_{j,kr} w_{j,r} = \sum_j \sum_r \delta_{ij} \delta_{mk} \delta_{nr} w_{j,r} \\ &= \delta_{mk} w_{i,n} \end{aligned}$$

und wegen  $D_l w_{i,n} = \nabla w_{i,nl}$  folgt die Behauptung für die Drehmomente aus (6.10). Durch Unterdrückung des Teilchenindex  $i$  schließlich findet man

$$\begin{aligned} D_l w_k &= D_l \chi(\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{e}_k) + \chi D_l \sum_{j=1}^d H_{kj}^{-1} x_j \\ &= D_l \chi(\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{e}_k) + \chi H_{kl}^{-1}, \end{aligned}$$

womit alles gezeigt ist. □

## 6.4 Externe Kräfte

Für zahlreiche Anwendungen in der Mechanik ist es erforderlich, die Bewegung in einem externen Kraftfeld mit spezifischer Kraftdichte

$$\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d : (\mathbf{x}, t) \mapsto \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$$

beschreiben zu können. Für Potentialkräfte ist das mit unserem Ansatz mühelos möglich. Ist nämlich

$$\mathbf{f} = -\nabla U$$

eine konservative Kraft mit einem zweimal stetig differenzierbaren Potential  $U : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ , so muß die innere Energie lediglich um

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

erweitert werden. Da sich die Gesamtmassendichte  $\rho$  durch Superposition der lokalen Massendichten ergibt, kann die innere Energie auf das Referenzteilchen transformiert werden und ist dort von der Gestalt

$$V^{(e)} = \sum_i m_i \int U(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

Die Bewegungsgleichungen (6.6) der Methode der Finiten Massen erhalten folglich die zusätzlichen Terme

$$\mathbf{F}_i^{(e)} := \frac{\partial V^{(e)}}{\partial \mathbf{q}_i} = -m_i \int \mathbf{f}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y},$$
$$\mathbf{M}_i^{(e)} := \frac{\partial V^{(e)}}{\partial \mathbf{H}_i} = -m_i \int [\mathbf{f}(\mathbf{q}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{y})][\mathbf{y}]^T \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

# Kapitel 7

## Schallausbreitung in hyperelastischen Materialien

Linearisiert man die Elastizitätsgleichung (A.5) um einen spannungsfreien Grundzustand und vernachlässigt dabei die quadratischen Terme im Green -St. Venantschen Verzerrungstensor, so erhält man die lineare Elastizitätsgleichung (A.6). Für kleine Deformationsgradienten  $\nabla\varphi \rightarrow 0$  beschreibt diese die Schallausbreitung in elastischen Materialien. Betrachtet man ausschließlich isotrope Materialien, auf die keine äußeren Kräfte wirken und die Antwort des Materials demnach in allen Richtungen gleich ausfällt, so ist die lineare Elastizitätsgleichung

$$\bar{\rho}\ddot{\varphi} = \text{Div } \mathbf{A}[\nabla\varphi]. \quad (7.1)$$

Der lineare Elastizitätstensor besitzt hierbei die Komponenten

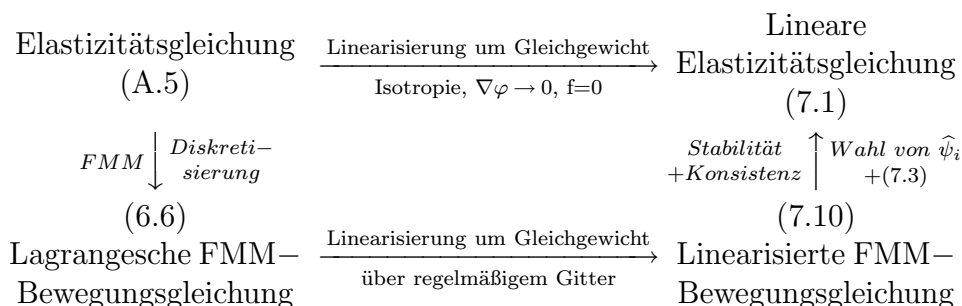
$$A_{mnlk} = \mu(\delta_{mk}\delta_{nl} + \delta_{ml}\delta_{nk}) + \lambda\delta_{mn}\delta_{kl} \quad (7.2)$$

und hängt von den beiden Lamé-Konstanten  $\mu, \lambda \in \mathbb{R}$  ab. Da die Verzerrungsenergie eines Materials nicht negativ sein kann, ist es sinnvoll anzunehmen, daß auch der Tensor  $\mathbf{A}$  stets nicht negativ ist. Nach [Gur81, Kapitel 29] ist dies genau dann der Fall, wenn

$$\mu \geq 0, \quad 2\mu + 3\lambda \geq 0 \quad (7.3)$$

gilt.

Im folgenden Kapitel wird gezeigt, daß die Methode der Finiten Massen für diese Klasse von Materialien auf eine konvergente Diskretisierung der linearen Elastizitätsgleichung (7.1) führt und die Schallausbreitung in hyperelastischen Materialien in korrekter Form erfaßt. Den Untersuchungen liegen dabei Teilchen zugrunde, die ausschliesslich translatorische Freiheitsgrade besitzen und sich frei im Raum bewegen können. Wie bei adiabatischen Fluiden ist die Konvergenz bei geeigneter Wahl der Formfunktionen  $\hat{\psi}_i$  quadratisch und die Vorgehensweise spiegelt sich im folgenden Diagramm wider.



## 7.1 Die linearisierten Bewegungsgleichungen über regelmäßigen Gittern

Um die Schallausbreitung in hyperelastischen Materialien mit der Methode der Finiten Massen beschreiben zu können, muß man wie bei adiabatischen Fluiden zunächst die in Kapitel 6.3 aufgestellten Bewegungsgleichungen (6.6) um den spannungsfreien Gleichgewichtszustand linearisieren. Beschränkt man sich dabei auf Teilchen, die lediglich translatorische Freiheitsgrade besitzen und deren Punkte  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$  des  $i$ -ten Teilchens sich entlang der Trajektorien

$$t \rightarrow \mathbf{q}_i(t) + \mathbf{y}$$

bewegen, so genügt es, die Linearisierung der Bewegungsgleichungen der Teilchenpositionen

$$m_i \ddot{\mathbf{q}}_i = -\mathbf{F}_i \quad (7.4)$$

mit den Kräften

$$\mathbf{F}_i = \int W'(\mathbf{F}) \nabla \bar{\chi}_i d\mathbf{x} \quad (7.5)$$

um den Gleichgewichtszustand anzugeben. In Analogie zu Kapitel 4.1 geht man hierfür auch bei hyperelastischen Materialien von unendlich vielen Teilchen  $i \in I$  aus, die um die Gleichgewichtslage  $\bar{\mathbf{q}} = (\bar{\mathbf{q}}_i)_{i \in I}$  oszillieren. Sind die Teilchen im Gleichgewicht, so bedeutet dies, daß man annimmt, die Gesamtmassendichte

$$\bar{\rho} = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{\psi}_i(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^{\infty} \hat{\psi}_i(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i) \quad (7.6)$$

ist auf dem ganzen  $\mathbb{R}^d$  konstant und positiv. Natürlich enthält dieses System unendlich vieler Teilchen auch unendlich viel innere Energie

$$V = \int W(\mathbf{F}(\mathbf{x})) d\mathbf{x}.$$

In einer Umgebung  $U_\varepsilon(\bar{\mathbf{q}})$ , in der die Teilchen genügend nahe an den Gleichgewichtspunkten liegen, sind die Kräfte  $\mathbf{F}_i$  jedoch wohldefiniert und können dort Taylor-entwickelt werden. Hierfür benötigt man die Ableitungen

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{q}_j},$$

die wir zunächst für endlich viele Teilchen  $N$  in Komponenten angeben. Die Kraft des  $i$ -ten Teilchens ist dann eine Funktion  $\mathbf{F}_i : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^3$ ,  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)^T \mapsto \mathbf{F}_i(\mathbf{q})$ .

**Lemma 7.1.1.** Für endlich viele Teilchen  $1 \leq i, j \leq N$  und  $1 \leq m, n, k, l \leq 3$  ist

$$\frac{\partial F_{i,m}}{\partial q_{j,n}} = \int \sum_{k,l} \frac{\partial^2 W}{\partial F_{mk} \partial F_{nl}}(\mathbf{F}(\mathbf{q})) [\nabla \bar{\chi}_i] [\nabla \bar{\chi}_j]_{kl}^T d\mathbf{x}.$$

*Beweis.* Durch Differentiation unter dem Integral erhält man

$$\begin{aligned}\frac{\partial F_{i,m}}{\partial q_{j,n}} &= \int \frac{\partial}{\partial q_{j,n}} \sum_k \frac{\partial W}{\partial F_{mk}}(\mathbf{F}(\mathbf{q})) D_k \bar{\chi}_i d\mathbf{x} = \int \sum_k \frac{\partial}{\partial F_{mk}} \left\{ \frac{\partial W}{\partial q_{j,n}}(\mathbf{F}(\mathbf{q})) \right\} D_k \bar{\chi}_i d\mathbf{x} \\ &= \int \sum_k \frac{\partial}{\partial F_{mk}} \left\{ \sum_{r,l} \frac{\partial W}{\partial F_{rl}} \frac{\partial F_{rl}}{\partial q_{j,n}}(\mathbf{q}) \right\} D_k \bar{\chi}_i d\mathbf{x} \\ &= \int \sum_k \frac{\partial}{\partial F_{mk}} \left\{ \sum_{r,l} \frac{\partial W}{\partial F_{rl}} D_l \left( \frac{\partial \varphi_r}{\partial q_{j,n}}(\mathbf{q}) \right) \right\} D_k \bar{\chi}_i d\mathbf{x}.\end{aligned}$$

Wegen

$$\frac{\partial \varphi_r}{\partial q_{j,n}} = \frac{\partial}{\partial q_{j,n}} \sum_i \bar{\chi}_i q_{i,r} = \sum_i \delta_{ij} \delta_{nr} \bar{\chi}_i = \bar{\chi}_j \delta_{nr}$$

folgt daraus

$$\begin{aligned}\frac{\partial F_{i,m}}{\partial q_{j,n}} &= \int \sum_k \frac{\partial}{\partial F_{mk}} \sum_l \frac{\partial W}{\partial F_{nl}} D_l \bar{\chi}_j D_k \bar{\chi}_i d\mathbf{x} \\ &= \int \sum_{k,l} \frac{\partial^2}{\partial F_{mk} \partial F_{nl}} W(\mathbf{F}) D_k \bar{\chi}_i D_l \bar{\chi}_j d\mathbf{x}.\end{aligned}$$

□

In der Gleichgewichtslage  $\bar{\mathbf{q}}$  ist der Deformationsgradient

$$\nabla \bar{\varphi} = \sum_{i=1}^N [\bar{\mathbf{q}}_i + \mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i] [\nabla \bar{\chi}_i]^T + \bar{\chi}_i \mathbf{I} = \mathbf{x} \underbrace{\sum_{i=1}^N [\mathbf{1}] [\nabla \bar{\chi}_i]^T}_{=0} + \underbrace{\left( \sum_{i=1}^N \bar{\chi}_i \right)}_{=1} \mathbf{I} = \mathbf{I}$$

natürlich die Identität und der auftretende 4-Tensor

$$\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{F}^2}(\mathbf{I}) = \frac{\partial \hat{\mathbf{T}}}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{I}) = \mathbf{A}(\mathbf{I})$$

ist gerade der lineare Elastizitätstensor  $\mathbf{A} : \mathbb{M}^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$ . Für diesen definiert man die folgende Kontraktion, welche eine geschmeidigere Form der Linearisierung gestatten wird.

**Definition 7.1.2.** Für einen dreidimensionalen Tensor 4-ter Stufe  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3^4}$  und eine Matrix  $\mathbf{M} \in \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  entsprechender Dimension bezeichnet

$$\mathbf{A} \langle \mathbf{M} \rangle \Big|_{mn} := \sum_{r,s=1}^3 A_{mrns} M_{rs}$$

die zugehörige Kontraktion über  $r$  und  $s$ .

Schreibt man die Teilchenpositionen in der Form

$$\mathbf{q}_i(t) = \bar{\mathbf{q}}_i + \mathbf{d}_i(t),$$

so können die  $\mathbf{d}_i(t)$  als eine Verschiebung aus dem Gleichgewicht heraus interpretiert werden und es gilt folgender Satz.

**Satz 7.1.3.** *Bezeichnet  $\|\cdot\|$  eine beliebige Norm auf dem  $\mathbb{R}^3$ , so besitzen auf einer genügend kleinen Umgebung der Gleichgewichtslage die Kräfte die Darstellung*

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{q}) = \mathbf{F}_i(\bar{\mathbf{q}}) + \sum_{j=1}^N \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j + O(\|\mathbf{d}\|^2),$$

$$\text{mit } \bar{\mathbf{F}}_{ij} := \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{q}_j}(\bar{\mathbf{q}}) = \int \mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]^T \rangle d\mathbf{x} \in \mathbb{M}^3(\mathbb{R}).$$

*Beweis.* Ist  $\varepsilon > 0$  genügend klein, so gilt für die  $m$ -te Komponente der stetig differenzierbaren Funktion  $\mathbf{F}_i : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^3$  nach dem Satz von Taylor in einer Umgebung  $U_\varepsilon(\bar{\mathbf{q}})$  der Gleichgewichtslage

$$\begin{aligned} F_{i,m}(\mathbf{q}) &= F_{i,m}(\bar{\mathbf{q}}) + \sum_{r=1}^{3N} \frac{\partial F_{i,m}}{\partial q_r}(\bar{\mathbf{q}})(q_r - \bar{q}_r) + O(\|\mathbf{q} - \bar{\mathbf{q}}\|^2) \\ &= F_{i,m}(\bar{\mathbf{q}}) + \sum_{j=1}^N \sum_{n=1}^3 \frac{\partial F_{i,m}}{\partial q_{j,n}}(\bar{\mathbf{q}}) d_{j,n} + O(\|\mathbf{d}\|^2). \end{aligned}$$

Nach Lemma 7.1.1 erhält man somit unter Berücksichtigung von Definition 7.1.2

$$\begin{aligned} F_{i,m}(\mathbf{q}) &= F_{i,m}(\bar{\mathbf{q}}) \\ &+ \sum_{j=1}^N \sum_{n=1}^3 \left( \int \sum_{r,s} \frac{\partial^2 W}{\partial F_{mr} \partial F_{ns}}(\mathbf{F}(\bar{\mathbf{q}})) [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]_{rs}^T d\mathbf{x} \right) d_{j,n} + O(\|\mathbf{d}\|^2) \\ &= F_{i,m}(\bar{\mathbf{q}}) + \sum_{j=1}^N \sum_{n=1}^3 \left( \int \mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]^T \rangle_{mn} d\mathbf{x} \right) d_{j,n} + O(\|\mathbf{d}\|^2), \end{aligned}$$

woraus die Behauptung folgt. □

Nach diesen Resultaten ist es nun ein Leichtes, zu unendlich vielen Teilchen zurückzukehren und die Bewegungsgleichungen (7.4) um die Gleichgewichtslage  $\bar{\mathbf{q}} = (\bar{\mathbf{q}}_i)_{i \in I}$  in ihrer linearisierten Form anzugeben. Zusätzlich vereinfacht wird dies durch die Tatsache, daß die Kräfte im Gleichgewicht verschwinden. Befindet sich das System nämlich im Gleichgewicht, d.h.  $\mathbf{d}_i(t) = 0 \forall i \in I$ , so ist die innere Energie extremal und deren Ortsableitung (6.4) ist

$$\mathbf{F}_i(\bar{\mathbf{q}}) = W'(\mathbf{I}) \int \nabla \chi_i d\mathbf{x} = 0. \quad (7.7)$$



**Satz 7.1.4.** Für genügend kleine Störungen  $\mathbf{d}_i(t)$  sind die über dem Gleichgewichtszustand linearisierten Bewegungsgleichungen

$$\mathbf{d}_i''(t) = -\frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{\infty} \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j(t), \quad (7.8)$$

wobei  $\bar{\mathbf{F}}_{ij} = \int \mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]^T \rangle d\mathbf{x}$ .

*Beweis.* Da sich im Träger des  $i$ -ten Teilchens nur endlich viele Teilchen befinden, ist die Summe

$$\sum_{j=1}^{\infty} \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j(t) < \infty$$

endlich und die Behauptung folgt unmittelbar aus Satz 7.1.3 und der Tatsache (7.7), daß die Kräfte im Gleichgewicht verschwinden.  $\square$

Gibt man die im obigen Satz hergeleiteten, linearisierten Bewegungsgleichungen (7.8) in den Gitterpunkten eines regelmäßigen, unendlich ausgedehnten Einheitsgitters an, so resultiert daraus ein gewöhnliches Differenzenverfahren und eine äußerst effiziente Art und Weise, die Gleichungen zu lösen. Zu diesem Zweck schreibt man die Gleichgewichtspunkte in der Form

$$\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}, \quad \mathbf{k} \in \mathbf{G}$$

über einem wie in Definition 4.1.1 eingeführten Gitter  $\mathbf{G}$  mit Diskretisierungsparameter  $h > 0$ . Geht man davon aus, daß die Massenverteilung aller Teilchen durch dieselbe Lipschitzstetige, stückweise stetig differenzierbare Formfunktion

$$\hat{\psi}_i : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}, \quad \hat{\psi}_i(\mathbf{y}) = \frac{m}{h^3} \psi\left(\frac{\mathbf{y}}{h}\right)$$

mit kompaktem Träger und der Normierungsbedingung (2.4) gegeben ist, so besitzen alle Teilchen dieselbe Masse  $m_i = m$ . Addieren sich Translationen der Formfunktion um Gitterpunkte zu einer Konstanten, so ist diese nach Lemma 4.1.2 sogar eindeutig bestimmt. Da es sich hierbei um denselben Ansatz wie bei adiabatischen Fluiden handelt, ist es wenig überraschend, daß sich die Gesamtdichte des Gleichgewichtszustandes (7.6) ebenfalls zu

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \sum_{i=1}^{\infty} \hat{\psi}_i(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{m}{h^3} \psi\left(\frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i}{h}\right) \\ &= \frac{m}{h^3} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi\left(\frac{\mathbf{x} - h\mathbf{k}}{h}\right) = \frac{m}{h^3} \end{aligned} \quad (7.9)$$

vereinfacht. Auch die Koeffizientenmatrizen  $\bar{\mathbf{F}}_{ij}$  der linearisierten Bewegungsgleichungen (7.8) lassen sich mit dem Potential

$$U(\mathbf{x}) = \int \psi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

aus Definition 4.1.3 berechnen. Genauer wird der lineare Elastizitätstensor  $\mathbf{A}$  über dem Gitter in der Hessematrix  $U''$  ausgewertet.

**Satz 7.1.5.** Die linearisierten Bewegungsgleichungen (7.8) sind in den Gitterpunkten  $\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathbf{G}$  von der Form

$$\mathbf{d}_{\mathbf{k}}''(t) = \frac{1}{\bar{\rho}h^2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \rangle \mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t). \quad (7.10)$$

Dabei ist  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{I}) : \mathbb{M}^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  der vom Material eindeutig bestimmte lineare Elastizitätstensor.

*Beweis.* Über dem Gleichgewichtszustand ist  $\nabla \bar{\chi}_i = \nabla \bar{\psi}_i / \bar{\rho}$  und mit (7.9) erhält man

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{F}}_{ij} &= \int \mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]^T \rangle d\mathbf{x} = \frac{1}{\bar{\rho}^2} \int \mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\psi}_i][\nabla \bar{\psi}_j]^T \rangle d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\bar{\rho}^2} \int \mathbf{A} \left\langle \left[ \frac{m}{h^{3+1}} (\nabla \psi) \left( \frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i}{h} \right) \right] \left[ \frac{m}{h^{3+1}} (\nabla \psi) \left( \frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_j}{h} \right) \right]^T \right\rangle d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{h^2} \int \mathbf{A} \left\langle \left[ (\nabla \psi) \left( \frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_i}{h} \right) \right] \left[ (\nabla \psi) \left( \frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_j}{h} \right) \right]^T \right\rangle d\mathbf{x} \\ &= h \int \mathbf{A} \left\langle \left[ (\nabla \psi) \left( \mathbf{y} - \left( \frac{\bar{\mathbf{q}}_i - \bar{\mathbf{q}}_j}{h} \right) \right) \right] \left[ (\nabla \psi)(\mathbf{y}) \right]^T \right\rangle d\mathbf{y} \end{aligned}$$

nach Transformation auf das Referenzteilchen via  $\mathbf{y} = \frac{1}{h}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{q}}_j)$ . Auf dem regelmäßigen Gitter  $\mathbf{G}$  ist  $\bar{\mathbf{q}}_i = h\mathbf{k}, \bar{\mathbf{q}}_j = h\mathbf{l}$  für  $\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathbf{G}$  und es ist

$$\bar{\mathbf{F}}_{kl} = h \int \mathbf{A} \langle [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - (\mathbf{k} - \mathbf{l}))][(\nabla \psi)(\mathbf{y})]^T \rangle d\mathbf{y}. \quad (7.11)$$

unabhängig von der Größe und Position der Teilchen. Das obige Integral definiert eine Funktion  $\mathbf{H} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  mit

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) := \int \mathbf{A} \langle [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})][(\nabla \psi)(\mathbf{y})]^T \rangle d\mathbf{y}.$$

Deren  $mn$ -te Komponente ist mit dem in Definition 4.1.3 eingeführten Potential  $U$  von der Form

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{x})|_{mn} &= \int \sum_{r,s} A_{mrns} (\nabla_r \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x}) (\nabla_s \psi)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= \sum_{r,s} A_{mrns} \int [(\nabla \psi)(\mathbf{y} - \mathbf{x})][(\nabla \psi)(\mathbf{y})]_{rs}^T d\mathbf{y} \\ &= - \sum_{r,s} A_{mrns} U''(\mathbf{x})_{rs} = -\mathbf{A} \langle U''(\mathbf{x}) \rangle|_{mn} \end{aligned}$$

und somit

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = -\mathbf{A} \langle U''(\mathbf{x}) \rangle. \quad (7.12)$$

Durch Einsetzen von (7.12) in (7.11) folgt wegen  $m_i = m = \bar{\rho}h^3$  aus Satz 7.1.4

$$\mathbf{d}_{\mathbf{k}}''(t) = + \frac{1}{\bar{\rho}h^3} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} h \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \rangle \mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t).$$

□

## 7.2 Energieerhaltung und Stabilität der Finiten Massen- Diskretisierung

Die Stabilität der linearisierten Bewegungsgleichung (7.8) kann mit der in Kapitel 4.1.2 skizzierten Vorgehensweise aus [Yse01] bewiesen werden. Dazu faßt man die Störungen  $\mathbf{d}_i$  zu Folgen  $\mathbf{d} = (\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots)$  zusammen und sucht nach Lösungen der zu (7.8) äquivalenten Operatorgleichung

$$\mathbf{d}''(t) = \mathbf{T}\mathbf{d}(t) \quad (7.13)$$

mit

$$\mathbf{T}\mathbf{d}(t) = \left( -\frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{\infty} \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j(t) \right)_{i=1}^{\infty}$$

im Hilbertraum  $H$  der Folgen  $\mathbf{d}$  mit endlicher (gewichteter) Norm

$$\|\mathbf{d}\|^2 := \sum_{i=1}^{\infty} m_i |\mathbf{d}_i|^2 < \infty.$$

Zusammen mit einigen Annahmen von ausschließlich theoretischer Bedeutung ist man in der Lage, eine eindeutige Lösung der Operatorgleichung (7.13) im Hilbertraum  $H$  für gegebene Anfangswerte zu finden. Zum Einen vermöge hierfür die Anzahl der Teilchen innerhalb des Trägers des  $i$ -ten Teilchens für alle  $i$  gleichmäßig beschränkt sein. Da sich im Träger eines jeden Teilchens nur endlich viele andere Teilchen befinden, ist dies durch Übergang zum Maximum stets erfüllt. Zum Anderen existiere eine gemeinsame obere Schranke für die Norm der Koeffizientenmatrizen aus (7.8), d.h.  $\|\bar{\mathbf{F}}_{ij}\| \leq M$  für alle  $i, j$  mit  $M \geq 0$ , was der Forderung gleichkommt, das Abreisen des Materials nicht zuzulassen.

**Satz 7.2.1.** *Für gegebene Anfangswerte  $\mathbf{d}(0), \mathbf{d}'(0) \in H$  besitzt die Differentialgleichung (7.13) eine eindeutige Lösung  $\mathbf{d}, \mathbf{d}' : [0, \infty) \rightarrow \mathcal{H}$ .*

*Beweis.* Unter den gegebenen Voraussetzungen ist wegen

$$\begin{aligned} \|\mathbf{T}\mathbf{d}\|^2 &= \sum_i m_i \left| \frac{1}{m_i} \sum_j \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j \right|^2 \leq \sum_{i,j} \frac{1}{m_i} |\bar{\mathbf{F}}_{ij}|^2 |\mathbf{d}_j|^2 \\ &\leq \left( \sum_i \frac{M^2}{m_i} \right) \sum_j |\mathbf{d}_j|^2 \leq C \sum_j m_j |\mathbf{d}_j|^2 = C \|\mathbf{d}\|^2 \end{aligned}$$

$\mathbf{T}$  auf  $H$  ein beschränkter Operator und die Existenz- und Eindeutigkeitssätze gewöhnlicher Differentialgleichungen liefern die Behauptung.  $\square$

Unter der Gesamtenergie  $\mathcal{E}(t) = E(t) + V(t)$  eines Systems versteht man die Summe aus kinetischer Energie  $E(t)$  der Teilchen und der inneren Energie  $V(t)$ . Um zeigen zu können, daß die linearisierte Gesamtenergie  $\mathcal{E}_{lin}(t) = E(t) + V_{lin}(t)$  eine Erhaltungsgröße ist, benötigt man die folgenden Eigenschaften des linearen Operators  $\mathbf{T}$ .

**Lemma 7.2.2.** *Der beschränkte lineare Operator  $\mathbf{T} : H \rightarrow H$  ist selbstadjungiert und nicht-positiv, falls die Lamé-Konstanten die Beziehung (7.3) erfüllen. Dies kommt der sinnvollen Forderung gleich, daß die Verzerrungsenergie eines elastischen Materials und somit der lineare Elastizitätstensor (7.2) nicht negativ sind.*

*Beweis.* Sei  $\mathcal{W} = \{\mathbf{d} = (d_i) : d_i = 0 \text{ bis auf endlich viele } i \in I\} \subset H$ . Wegen der Symmetrie  $A_{mnlk} = A_{klmn}$  ist

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{F}}_{ij}^T &= \int (\mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]^T \rangle)^T d\mathbf{x} \\ &= \int \mathbf{A} \langle [\nabla \bar{\chi}_j][\nabla \bar{\chi}_i]^T \rangle d\mathbf{x} = \bar{\mathbf{F}}_{ji}\end{aligned}$$

und  $\mathbf{T}$  ist selbstadjungiert auf  $\mathcal{W}$ . Für isotrope Materialien besitzt der lineare Elastizitätstensor  $\mathbf{A}$  die Form (7.2) und  $\mathbf{T}$  ist negativ semidefinit auf  $\mathcal{W}$ , wenn

$$\begin{aligned}\sum_i d_i \cdot \left( - \sum_j \bar{\mathbf{F}}_{ij} d_j \right) &= - \sum_{i,j} \sum_{m,n} d_{i,m} \int A \langle [\nabla \bar{\chi}_i][\nabla \bar{\chi}_j]^T \rangle_{mn} d\mathbf{x} d_{j,n} \\ &= - \sum_{m,n} \sum_{k,l} \int A_{mknl} \left( \sum_i d_{i,m} D_k \bar{\chi}_i \right) \left( \sum_j d_{j,n} D_l \bar{\chi}_j \right) d\mathbf{x} \\ &= - \sum_{n,l} \mu \int \left( \sum_i d_{i,n} D_l \bar{\chi}_i \right) \left( \sum_j d_{j,n} D_l \bar{\chi}_j \right) d\mathbf{x} \\ &\quad - \sum_{n,l} \mu \int \left( \sum_i d_{i,l} D_n \bar{\chi}_i \right) \left( \sum_j d_{j,n} D_l \bar{\chi}_j \right) d\mathbf{x} \\ &\quad - \sum_{k,l} \lambda \int \left( \sum_i d_{i,k} D_k \bar{\chi}_i \right) \left( \sum_j d_{j,l} D_l \bar{\chi}_j \right) d\mathbf{x}\end{aligned}$$

kleiner gleich Null ist. Hierfür untersucht man zunächst, unter welchen Voraussetzungen die Summe der  $\mu$ -Terme größer gleich Null ist. Bezeichnet

$$\mathbf{S} := \sum_i [d_i][\nabla \bar{\chi}_i]^T$$

die endliche Summe von Matrizen, so ist dies genau dann der Fall, wenn

$$\mu \sum_{n,l} (S_{nl}S_{nl} + S_{ln}S_{nl}) \geq 0 \quad (7.14)$$

ist. Mit der Notation  $B_{nl} := S_{nl}S_{nl} + S_{ln}S_{nl}$  gilt

$$\begin{aligned}\sum_{n,l} B_{nl} &= \sum_{n=l} B_{nl} + \sum_{n<l} B_{nl} + \sum_{n>l} B_{nl} \\ &= \sum_{n=l} B_{nl} + \sum_{n<l} (B_{nl} + B_{ln}) \\ &= 2 \sum_n S_{nn}^2 + \sum_{n<l} (S_{nl}S_{nl} + 2S_{nl}S_{ln} + S_{ln}S_{ln}) \\ &= 2 \sum_n S_{nn}^2 + \sum_{n<l} (S_{nl} + S_{ln})^2 \geq 0\end{aligned}$$

und (7.14) ist genau dann größer gleich Null, wenn  $\mu \geq 0$  ist. Zwischen dem ersten Elementarsymmetrischen Polynom  $S_1 := \sum_{n=1}^d S_{nn}$  und dem zweiten Polynom  $S_2$  besteht die Beziehung

$$S_2 = \frac{1}{2}(S_1^2 - P), \quad P := \sum_{n=1}^d S_{nn}^2.$$

Die Newton Ungleichung [Die02, Lemma 2.2] liefert in Dimension  $d = 3$  die Abschätzung  $P \geq \frac{1}{3}S_1^2$ , woraus

$$\begin{aligned} \sum_i \mathbf{d}_i \cdot \left( - \sum_j \bar{\mathbf{F}}_{ij} \mathbf{d}_j \right) &= - \int 2\mu P + \mu \sum_{k<l} (S_{nl} + S_{ln})^2 + \lambda S_1^2 d\mathbf{x} \\ &\leq - \int \left( \frac{2\mu}{3} + \lambda \right) S_1^2 d\mathbf{x} \leq 0 \end{aligned}$$

mit Voraussetzung (7.3) folgt. Da  $\mathcal{W}$  dicht in  $H$  liegt und stetige Operatoren stetig auf den Abschluß fortgesetzt werden können, folgt damit die Behauptung.  $\square$

**Satz 7.2.3.** *Die linearisierte Gesamtenergie*

$$\mathcal{E}_{lin}(t) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{d}'(t), \mathbf{d}'(t) \rangle - \frac{1}{2} \langle \mathbf{d}(t), \mathbf{T} \mathbf{d}(t) \rangle$$

ist eine Erhaltungsgröße.

*Beweis.* Nach Definition von  $H$  und dem zugehörigen Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$  gilt  $E(t) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{d}'(t), \mathbf{d}'(t) \rangle$  und  $V_{lin}(t) = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{d}(t), \mathbf{T} \mathbf{d}(t) \rangle$ . Da  $\mathbf{T}$  beschränkt und nach Lemma 7.2.2 auch selbstadjungiert ist, erhält man durch Differentiation

$$\begin{aligned} \mathcal{E}'_{lin}(t) &= \langle \mathbf{d}''(t), \mathbf{d}'(t) \rangle - \frac{1}{2} (\langle \mathbf{d}'(t), \mathbf{T} \mathbf{d}(t) \rangle + \langle \mathbf{T} \mathbf{d}(t), \mathbf{d}'(t) \rangle) \\ &= \langle \mathbf{d}''(t), \mathbf{d}'(t) \rangle - \langle \mathbf{T} \mathbf{d}(t), \mathbf{d}'(t) \rangle = \langle \mathbf{d}''(t), \mathbf{d}'(t) \rangle - \langle \mathbf{d}''(t), \mathbf{d}'(t) \rangle = 0 \end{aligned}$$

mit (7.13).  $\square$

**Korollar 7.2.4.** *Die kinetische Energie  $E(t) = \frac{1}{2} \|\mathbf{d}'(t)\|^2$  ist für alle Zeiten  $t$  durch die linearisierte Gesamtenergie  $\mathcal{E}_{lin}(0)$  beschränkt. Insbesondere ist die Linearisierung stabil.*

*Beweis.* Da die linearisierte Gesamtenergie konstant ist und der Operator  $\mathbf{T} \in \mathcal{L}(H)$  nicht-positiv, folgt dies unmittelbar wie im Beweis von Korollar 4.2.14.  $\square$

### 7.3 Konsistenz und Konvergenz mit der linearen Elastizitätsgleichung

Unter geeigneten Voraussetzungen an die Formfunktion  $\psi$  bilden die über dem Gitter  $\mathcal{G}$  linearisierten Bewegungsgleichungen (7.10) aus Satz 7.1.5 eine konsistente Diskretisierung der linearen Elastizitätsgleichung (7.1)

$$\bar{\rho} \ddot{\varphi} = \text{Div } \mathbf{A}[\nabla \varphi].$$

Zusammen mit dem Stabilitätsresultat aus Korollar 7.2.4 ist die Diskretisierung demnach konvergent und die Störungen breiten sich wie Schallwellen entlang des Gitters aus. Der Beweis dieser Eigenschaft beruht entscheidend auf dem folgenden Konsistenzkriterium.

**Satz 7.3.1.** Für alle vektorwertigen Polynome  $\mathbf{p} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  vom Grad  $2p+1$  ist die Gleichung

$$h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \rangle \mathbf{p}(h\mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \text{Div } \mathbf{A} [(\nabla \mathbf{p})(h\mathbf{l})] \quad (7.15)$$

genau dann erfüllt, wenn für alle skalarwertigen Polynome  $P : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  vom Grad  $2p+1$

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} P(\mathbf{k}) \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k}) \mathbf{A} \langle P''(\mathbf{k}) \rangle \quad (7.16)$$

gilt. Dies ist genau dann der Fall, wenn (7.16) für alle homogenen Polynome  $P$  vom Grad kleiner gleich  $2p$  gilt.

*Beweis.* Schreibt man  $\mathbf{p}(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{k} - \mathbf{x}/h)$ , so erhält man aus (7.15)

$$h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \rangle \tilde{\mathbf{p}}(\mathbf{k} - \mathbf{l}) = h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \text{Div } \mathbf{A} [(\nabla \tilde{\mathbf{p}})(\mathbf{k} - \mathbf{l})]$$

und mit  $\mathbf{m} = \mathbf{k} - \mathbf{l}$  genügt es über dem unendlich ausgedehnten Gitter  $\mathbf{G}$  nach Umbenennung von  $\mathbf{m}$  in  $\mathbf{k}$  und  $\tilde{\mathbf{p}}$  in  $\mathbf{p}$

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle \mathbf{p}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k}) \text{Div } \mathbf{A} [(\nabla \mathbf{p})(\mathbf{k})] \quad (7.17)$$

zu zeigen. Darüberhinaus genügt es vektorwertige Polynome der Form  $\mathbf{p}(\mathbf{x}) = P(\mathbf{x})\mathbf{e}_n$  zu betrachten, deren  $n$ -te Komponente ein skalarwertiges Polynom  $P : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  enthält. Wegen

$$\begin{aligned} \text{Div}_m \mathbf{A} [(\nabla \mathbf{p})(\mathbf{k})] &= \sum_r D_r \mathbf{A} [(\nabla \mathbf{p})(\mathbf{k})] \Big|_{mr} = \sum_r D_r \sum_{n,s} A_{mrns} (D_s \mathbf{p}_n)(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{r,n,s} A_{mrns} (\nabla_{rs}^2 \mathbf{p}_n)(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

ergibt sich für die rechte Seite von (7.17)

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k}) \text{Div}_m \mathbf{A} [(\nabla \mathbf{p})(\mathbf{k})] = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k}) \mathbf{A} \langle P''(\mathbf{k}) \rangle \Big|_{mn}$$

Entsprechend hat man für die  $m$ -te Komponente der linken Seite von (7.17)

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle \mathbf{p}(\mathbf{k}) \Big|_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle \Big|_{mn} \mathbf{p}_n(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r,n,s} A_{mrns} U''_{rs}(\mathbf{k}) \mathbf{p}_n(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r,s} A_{mrns} U''_{rs}(\mathbf{k}) P(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

und (7.15) gilt genau dann, wenn (7.16) für alle reellwertigen Polynome  $P$  vom Grad  $2p+1$  erfüllt ist. Da aber  $U$  unabhängig von den Eigenschaften der Formfunktion gerade ist, gilt (7.16) automatisch für alle ungeraden Polynome  $P$  und insbesondere sogar für alle homogenen Polynome ungeraden Grades. Es genügt demnach (7.16) für alle homogenen, geraden Polynome vom Grad  $\leq 2p$  sicherzustellen.  $\square$

Aus Abschnitt 4.1.3 weiß man bereits, daß jedes lineare Polynom  $P : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  die Darstellung

$$\sum_{\mathbf{l}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l})P(\mathbf{l}) = P(\mathbf{k})$$

besitzt. Die linearisierten Bewegungsgleichungen (7.10) sind konsistent mit der linearen Elastizitätsgleichung (7.1) und die Gleichung

$$h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \rangle \mathbf{p}(h\mathbf{l}) = \text{Div } \mathbf{A} [(\nabla \mathbf{p})(h\mathbf{k})]$$

ist in diesem Sinne für alle Polynome vom Grad 3 genau dann erfüllt, wenn (7.16) für alle skalarwertigen Polynome  $P$  vom Grad 3 oder nur 2 erfüllt ist. Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} P(\mathbf{k}) \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle = \mathbf{A} \langle P''(0) \rangle = \text{const}$$

gilt. Ein Kriterium hierfür liefert der folgende Satz.

**Satz 7.3.2.** *Spannen die Translationen  $U(\cdot - \mathbf{k})$ ,  $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$ , von  $U$  den Raum der Polynome vom Grad  $2p$  auf, so ist die Konsistenzbedingung (7.16) aus Satz 7.3.1 für alle Polynome vom Grad  $2p+1$  erfüllt.*

*Beweis.* In den Translationen von  $U$  habe  $P$  die Darstellung

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \alpha(\mathbf{k}) U(\mathbf{x} - \mathbf{k}).$$

Nach Definition und Satz 4.1.3 sind sowohl  $U$  als auch  $U''$  gerade und man erhält

$$P(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{l}) U(\mathbf{l}), \quad P''(\mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{l}) U''(\mathbf{k}),$$

woraus

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} P(\mathbf{k}) \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}} \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{l}) U(\mathbf{l}) \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k}) \rangle = \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{l}) \mathbf{A} \langle \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \alpha(\mathbf{k} + \mathbf{l}) U''(\mathbf{k}) \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{l}) \mathbf{A} \langle P''(\mathbf{l}) \rangle \end{aligned}$$

folgt. □

Damit liegt eine völlig identische Situation zu der Schallausbreitung in adiabatischen Fluiden mit Teilchen konstanter Größe vor. Auch bei isotropen hyperelastischen Materialien ist die Konsistenz der Finiten Massen Diskretisierung gewährleistet, wenn die Translationen des Potentials  $U$  den Raum der Polynome vom Grad  $2p$  aufspannen. Es ist daher naheliegend, die Formfunktion  $\psi$  auch in diesen Medien als Tensorprodukt einer Lipschitz-stetigen, stückweise stetig differenzierbaren Funktion  $\tilde{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit kompaktem Träger zu wählen. Hierfür bieten sich wieder die  $B_n$ -Splines für jedes  $n \geq 3$  an. Mit dem Potential (4.12) liefert die Methode der Finiten Massen über einem Würfelgitter dann eine konsistente Diskretisierung der

linearen Elastizitätsgleichung (7.1). Aufgrund der Stabilität der Diskretisierung konvergieren die Lösungen der Gitterpunktgleichung (7.10) für jeden zulässigen  $B_n$ -Spline quadratisch gegen die Lösungen der linearen Elastizitätsgleichung.

Der Versuch ist naheliegend, wie bei adiabatischen Fluiden die Konvergenzordnung in die Höhe zu treiben, in dem man mit der kontinuumsmechanischen kinetischen Energie (4.14) anstelle der kinetischen Energien der Einzelteilchen in die Lagrangefunktion eingeht. Ausgehend von der diskreten Deformation

$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbf{G}} \psi(\mathbf{x}/h - \mathbf{k}) \mathbf{q}_{\mathbf{k}}(t)$$

über einem unendlich ausgedehnten Würfelgitter  $\mathbf{G}$  der Gitterweite  $h > 0$  resultieren hier die linearisierten Bewegungsgleichungen

$$\sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} U(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \mathbf{d}_{\mathbf{l}}''(t) = c^2 h^{-2} \sum_{\mathbf{l} \in \mathbf{G}} \mathbf{A} \langle U''(\mathbf{k} - \mathbf{l}) \rangle \mathbf{d}_{\mathbf{l}}(t).$$

Leider genügen diese nicht mehr der Konsistenzbedingung (7.16) und es ist nicht offensichtlich, ob auf diese Art und Weise eine höhere Konvergenzordnung erzielt werden kann.



# Anhang A

## Einführung in die Elastizitätstheorie

Der Kern der von Cauchy und Poisson in den 20er Jahren des 19. Jahrhunderts aufgestellten Elastizitätstheorie bildet die Mechanik der als Kontinua aufgefaßten festen Körper. Sie betrachtet den Zustand von Körpern unter der Einwirkung von Kräften und studiert Verzerrungen und Spannungen, die durch Deformationen im oder am Körper erzeugt werden. Ihre wesentlichen Bestandteile sind die Kinematik, die Gleichgewichtsbedingungen und die Materialgesetze. Wir begnügen uns im Folgenden damit, die nichtlineare, dreidimensionale Theorie statisch zu erläutern, da dies den Zugang erleichtert und die relevanten Größen und Begriffe besser verständlich werden. Zumal der Unterschied zur dynamischen Variante nur durch einen mit der Massendichte  $\bar{\rho}$  des Referenzzustands multiplizierten, zusätzlichen Beschleunigungsterm besteht. Diesen werden wir in Abschnitt A.4 bei der Einführung der linearen Theorie hinzufügen und die lineare Theorie, wegen der durchgeführten Konvergenzanalyse der Methode der Finiten Massen für hyperelastische Materialien, dynamisch behandeln. Eine ausführliche Übersicht über die Elastizitätstheorie findet man in den Büchern von Ciarlet [Cia88], Marsden und Hughes [MaHu83] oder Truesdell und Noll [TrNo77].

### A.1 Kinematik und starre Deformationen

Sei  $\Omega$  eine beschränkte, offene, zusammenhängende Menge im  $\mathbb{R}^3$  mit genügend glattem Rand. Der Abschluß  $\bar{\Omega}$  von  $\Omega$  repräsentiert das Volumen eines Körpers vor dessen Verformung und wird dementsprechend als Referenzzustand bezeichnet. In der Regel ist  $\bar{\Omega}$  gerade die Teilmenge des  $\mathbb{R}^3$ , die der Körper im spannungsfreien Grundzustand einnimmt. Eine *Deformation* wird durch ein genügend glattes, orientierungstreues Vektorfeld  $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$  auf der Referenzkonfiguration beschrieben, welches außer auf dem Rand von  $\Omega$  injektiv ist. Der Grund, warum eine Deformation ihre Injektivität auf dem Rand verlieren kann, liegt in der Tatsache begründet, daß der Körper mit sich selbst in Kontakt kommen kann. Für jeden Punkt  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$  bezeichnet  $\partial_k = \frac{\partial}{\partial y_k}$  die partielle Ableitung nach der Komponente  $y_k$  in Richtung der Standardbasis  $\{\mathbf{e}_k\}$ . Ist  $\varphi = \sum_k \varphi_k \mathbf{e}_k$  eine Deformation, so definieren wir in jedem Punkt  $\mathbf{y} \in \Omega$  den *Deformationsgradienten*

$$\nabla \varphi = \begin{pmatrix} \partial_1 \varphi_1 & \partial_2 \varphi_1 & \partial_3 \varphi_1 \\ \partial_1 \varphi_2 & \partial_2 \varphi_2 & \partial_3 \varphi_2 \\ \partial_1 \varphi_3 & \partial_2 \varphi_3 & \partial_3 \varphi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla \varphi_1^T \\ \nabla \varphi_2^T \\ \nabla \varphi_3^T \end{pmatrix},$$

den wir in Anlehnung an die gängige Literatur auch mit  $\mathbf{F}$  bezeichnen. Da  $\varphi$  als orientierungstreu vorausgesetzt wurde gilt

$$\det \nabla \varphi(\mathbf{y}) > 0 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \bar{\Omega},$$

die Matrix  $\mathbf{F}$  ist insbesondere in jedem Punkt invertierbar. Neben der Deformation  $\varphi$  ist es oft gebräuchlich, die *Verschiebung*  $\mathbf{u} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$  durch die Beziehung

$$\varphi = id + \mathbf{u} \quad (\text{A.1})$$

zu definieren. Hierbei bezeichnet  $id$  die identische Abbildung von  $\mathbb{R}^3|_{\bar{\Omega}} \rightarrow \mathbb{R}^3|_{\bar{\Omega}}$ . Zwischen dem *Verschiebungsgradienten*  $\nabla \mathbf{u}$  und dem Deformationsgradienten besteht die Relation

$$\nabla \varphi = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}. \quad (\text{A.2})$$

In jedem Punkt  $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{y})$  des *deformierten Zustandes*  $\bar{\Omega} = \varphi(\bar{\Omega})$  definiert man die Vektoren  $\nabla_l \varphi(\mathbf{y}) = \sum_k \nabla_l \varphi_k(\mathbf{y}) \mathbf{e}_k$ , welche die lokale Deformation in Richtung des Vektors  $\mathbf{e}_k$  messen. Da der Vektor  $\nabla_l \varphi(\mathbf{y})$  gerade die  $l$ -te Spalte der Matrix  $\nabla \varphi(\mathbf{y})$  ist, kann man somit aus der Kenntnis des Deformationsgradienten auf die lokale Deformation schließen. Ist die Deformation  $\varphi$  differenzierbar in  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$ , so gilt nach Definition für alle Punkte  $\mathbf{y} + \delta \mathbf{v} \in \bar{\Omega}$ :

$$\varphi(\mathbf{y} + \delta \mathbf{v}) - \varphi(\mathbf{y}) = \nabla \varphi(\mathbf{y}) \delta \mathbf{v} + o(\|\delta \mathbf{v}\|)$$

und folglich

$$\|\varphi(\mathbf{y} + \delta \mathbf{v}) - \varphi(\mathbf{y})\|^2 = \delta \mathbf{v}^T \underbrace{\nabla \varphi^T(\mathbf{y}) \nabla \varphi(\mathbf{y})}_{\mathbf{C}} \delta \mathbf{v} + o(\|\delta \mathbf{v}\|^2).$$

Hierbei bezeichnet

$$\mathbf{C} := \nabla \varphi^T \nabla \varphi$$

den *rechten Cauchy-Greenschen Verzerrungstensor*. Neben dem rechten Cauchy-Greenschen Verzerrungstensor spielt bei der Beschreibung der Antwortfunktion isotroper elastischer Materialien der *linke Cauchy-Greensche Verzerrungstensor*

$$\nabla \varphi \nabla \varphi^T.$$

eine entscheidende Rolle.

**Definition A.1.1.** Eine Deformation heißt genau dann *starre Deformation*, wenn eine Rotation  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  und ein Verschiebungsvektor  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$  derart existieren, daß

$$\varphi(\mathbf{y}) = \mathbf{Q} \mathbf{y} - \mathbf{v} \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \Omega$$

ist.

Starre Deformationen können mit Hilfe des rechten Cauchy-Greenschen Verzerrungstensors gut charakterisiert werden. Es gilt folgender Satz.

**Satz A.1.2.** Eine stetig differenzierbare Deformation ist genau dann *starr*, wenn der rechte Cauchy-Greensche Verzerrungstensor  $\mathbf{C} = \mathbf{I}$  erfüllt.

*Beweis.* Vgl. [Cia88, Thm. 1.8-1]. □

Als Maß für die Abweichung zwischen einer gegebenen und einer starren Deformation kann nach diesem Theorem der *Green-St. Venantsche Verzerrungstensor*

$$\mathbf{E} := \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I})$$

betrachtet werden. In der Verschiebung  $\mathbf{u}$  ist dieser von der Gestalt

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}). \quad (\text{A.3})$$

## A.2 Die Gleichgewichtsbedingungen

Auf einen Körper wirken verschiedene Kräfte ein. Sie werden in zwei Klassen unterteilt.

(1) **Äußere Volumenkkräfte.** Dabei handelt es sich um Kräfte, die auf alle Massenteile des Volumenelements  $d\mathbf{x}$  wirken. Die auf  $d\mathbf{x}$  wirkende Volumenkraft wird durch ein Vektorfeld

$$\mathbf{f} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^3$$

angegeben, welches die *Dichte der äußeren Volumenkraft (pro Einheitsvolumen)* beschreibt.

(2) **Äußere Oberflächenkräfte.** Dabei handelt es sich um Kräfte, die nur auf die Randflächen  $da$  des Volumenelements  $d\mathbf{x}$  wirken. Sie werden durch ein Vektorfeld

$$\mathbf{g} : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^3$$

angegeben, welches auf einer Teilmenge  $\mathcal{G}$  des Randes  $\partial\mathcal{D}$   $da$ -meßbar ist und die *Dichte der äußeren Oberflächenkraft (pro Einheitsvolumen)* beschreibt.

Bezeichnet  $\rho : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$  die *Massendichte des deformierten Zustands*, so ist die Masse jeder  $d\mathbf{x}$ -meßbaren Teilmenge  $\mathcal{U} \subseteq \mathcal{D}$  durch

$$\int_{\mathcal{U}} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

gegeben. Da die Masse stets positiv ist, ist es vernünftig  $\rho(\mathbf{x}) > 0$  für alle  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$  zu verlangen. Natürlich kann die äußere Volumenkraft ebenso durch ihre *Dichte*

$$\mathbf{h} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^3$$

*pro Einheitsmasse* definiert werden. Diese steht dann durch

$$\mathbf{f} = \rho\mathbf{h}$$

in Relation zur Dichte  $\mathbf{f}$  pro Einheitsvolumen.

**Beispiel.** Eine typische Volumenkraft ist durch ein Gravitationsfeld  $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = -g\rho(\mathbf{x})\mathbf{e}_3$  für alle  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ , mit der Gravitationskonstanten  $g$ , gegeben. Dagegen wird eine äußere Oberflächenkraft etwa durch die Bewegung eines anderen Körpers (welcher Art auch immer) entlang dem Randstück  $\mathcal{G}$  erzeugt.

### A.2.1 Das Axiom des statischen Gleichgewichts

Das folgende Axiom bildet die Grundlage der Kontinuumsmechanik. Es verdankt seinen Namen den wesentlichen Beiträgen von Euler [Eul57], [Eul71] und Cauchy [Cau23], [Cau27a] und besagt, daß sich ein Körper genau dann im statischen Gleichgewicht befindet, wenn das folgende Spannungsprinzip erfüllt ist.

**Axiom A.2.1. (Spannungsprinzip von Euler und Cauchy)** Ein deformierter Körper  $\bar{\mathcal{D}}$  befinde sich unter Einwirkung der Volumenkraft  $\mathfrak{f} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^3$  sowie der Oberflächenkraft  $\mathfrak{g} : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^3$  im statischen Gleichgewicht. Bezeichnet  $S_2 := \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3 : |\mathbf{v}| = 1\}$  die Einheitskugel im  $\mathbb{R}^3$ , so existiert ein Vektorfeld

$$\mathfrak{t} : \bar{\mathcal{D}} \times S_2 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

mit folgenden Eigenschaften:

- (1) Für jede Teilmenge  $\mathcal{U} \subseteq \bar{\mathcal{D}}$  und in jedem Randpunkt  $\mathbf{x} \in \mathcal{G} \cap \partial\mathcal{U}$  in dem die auswärts gerichtete Einheitsnormale  $\mathbf{n} \in \mathcal{G} \cap \partial\mathcal{U}$  existiert gilt

$$\mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \mathfrak{g}(\mathbf{x}).$$

- (2) Für jede Teilmenge  $\mathcal{U} \subseteq \bar{\mathcal{D}}$  ist

$$\int_{\mathcal{U}} \mathfrak{f}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\mathcal{U}} \mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) \, d\mathbf{a} = 0.$$

Hier bezeichnet  $\mathbf{n}$  die auswärts gerichtete Einheitsnormale entlang  $\partial\mathcal{U}$ .

- (3) Für jede Teilmenge  $\mathcal{U} \subseteq \bar{\mathcal{D}}$  ist

$$\int_{\mathcal{U}} \mathbf{x} \times \mathfrak{f}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\mathcal{U}} \mathbf{x} \times \mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) \, d\mathbf{a} = 0.$$

Der Vektor  $\mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n})$  heißt *Cauchyscher Spannungsvektor*. Nach dem Aktio-Reaktio-Prinzip gilt

$$\mathfrak{t}(\mathbf{x}, -\mathbf{n}) = -\mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}).$$

Aus der Existenz des Cauchyschen Spannungsvektors läßt sich ein Satz von Cauchy [Cau23], [Cau27b] ableiten, der uns die Darstellung der Spannungsvektoren mittels eines Tensors, dem sogenannten Cauchyschen Spannungstensor, ermöglicht.

**Satz A.2.2.** Ist die äußere Volumenkraftdichte  $\mathfrak{f} \in C(\bar{\mathcal{D}}, \mathbb{R}^3)$  stetig und das Cauchysche Spannungsvektorfeld

$$\mathfrak{t} : \bar{\mathcal{D}} \times S_2 \rightarrow \mathbb{R}^3, (\mathbf{x}, \mathbf{n}) \mapsto \mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n})$$

stetig differenzierbar nach  $\mathbf{x} \in \bar{\mathcal{D}}$  für jedes feste  $\mathbf{n} \in S_2$ , sowie stetig in  $\mathbf{n} \in S_2$  für jedes feste  $\mathbf{x} \in \bar{\mathcal{D}}$ , so gibt es ein stetig differenzierbares Tensorfeld

$$\mathbf{T}_c : \bar{\mathcal{D}} \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R}), \mathbf{x} \mapsto \mathbf{T}_c(\mathbf{x})$$

mit der Eigenschaft, daß der Cauchysche Spannungsvektor

$$\mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \mathbf{T}_c(\mathbf{x})\mathbf{n} \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \bar{\mathcal{D}}, \mathbf{n} \in S_2$$

erfüllt. Ferner gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \mathbf{T}_c(\mathbf{x}) + \mathfrak{f}(\mathbf{x}) &= 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathcal{D}, \\ \mathbf{T}_c(\mathbf{x}) &= \mathbf{T}_c(\mathbf{x})^T, \\ \mathbf{T}_c(\mathbf{x})\mathbf{n} &= \mathfrak{g}(\mathbf{x}) \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathcal{G}. \end{aligned}$$

*Beweis.* Vgl. [Cia88, Thm. 2.3-1]. □

Der symmetrische Tensor  $\mathbf{T}_c(\mathbf{x})$  heißt *Cauchyscher Spannungstensor*. Wegen der Beziehung  $t(\mathbf{x}, \mathbf{e}_k) = \mathbf{T}_c(\mathbf{x})_{kl} \mathbf{e}_l$  repräsentieren die Elemente der  $k$ -ten Zeile des Tensors  $\mathbf{T}_c(\mathbf{x})$  die Komponenten des Cauchyschen Spannungsvektors  $t(\mathbf{x}, \mathbf{n})$  im Punkt  $(\mathbf{x}, \mathbf{e}_k)$ .

**Beispiel.** Ist  $\mathbf{T}_c(\mathbf{x}) = -\pi \mathbf{I}$ ,  $\pi \in \mathbb{R}$ , so beschreibt der Cauchysche Spannungstensor einen konstanten Druck. In diesem Fall ist der Cauchysche Spannungsvektor  $t(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = -\pi \mathbf{n}$  normal bezüglich dem elementaren Oberflächenelement. Seine Länge ist konstant und er ist für  $\pi > 0$  nach innen gerichtet.

### A.2.2 Das Prinzip der virtuellen Arbeit

Nach Satz A.2.2 erfüllt der Cauchysche Spannungstensor ein Randwertproblem über dem deformierten Zustand. Eine bemerkenswerte Eigenschaft dieses Randwertproblems ist es, daß es aufgrund seiner Divergenzform einer Variationsformulierung zugänglich ist, welche sich im Prinzip der virtuellen Arbeit postuliert. Dieses Prinzip spielt eine Schlüsselrolle in der Theorie hyperelastischer Materialien, die in Abschnitt A.3.2 eingeführt werden.

**Satz A.2.3.** *Das Randwertproblem*

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \mathbf{T}_c(\mathbf{x}) + \mathbf{f}(\mathbf{x}) &= 0 \text{ in } \mathfrak{D}, \\ \mathbf{T}_c(\mathbf{x}) \mathbf{n} &= \mathbf{g}(\mathbf{x}) \text{ auf } \mathfrak{G} \end{aligned}$$

ist für alle genügend glatten Vektorfelder  $\mathbf{v} : \mathfrak{D} \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit

$$\mathbf{v} = 0 \text{ auf } \mathfrak{G}_v := \partial \mathfrak{D} - \mathfrak{G}$$

äquivalent zu der Variationsformulierung

$$\int_{\mathfrak{D}} \mathbf{T}_c : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \int_{\mathfrak{D}} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\mathfrak{G}} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a}.$$

*Beweis.* Vgl. [Cia88, Thm. 2.4-1]. □

### A.2.3 Die Piola-Kirchhoff-Transformation

Die Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \mathbf{T}_c + \mathbf{f} &= 0 \text{ in } \mathfrak{D}, \\ \mathbf{T}_c &= \mathbf{T}_c^T \text{ in } \mathfrak{D}, \\ \mathbf{T}_c \mathbf{n} &= \mathbf{g} \text{ auf } \mathfrak{G} \end{aligned}$$

aus Satz A.2.2 werden auch als *Gleichgewichtsbedingungen des deformierten Zustands* bezeichnet. Der Nachteil dieser Gleichungen besteht in der unbekanntenen Variablen  $\mathbf{x}$ . Um diese Schwierigkeit aus dem Weg zu räumen, werden die Gleichungen in die bekannte Variable  $\mathbf{y}$  des Referenzzustands umgeschrieben. Dies geschieht, in dem man die Piola Transformation  $\mathbf{T} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  auf den Cauchyschen Spannungstensor  $\mathbf{T}_c$  anwendet.

**Definition A.2.4.** Der Tensor  $\mathbf{T} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  mit

$$\mathbf{T}(\mathbf{y}) = (\det \mathbf{F}(\mathbf{y})) \mathbf{T}_c(\mathbf{x}) \mathbf{F}(\mathbf{y})^{-T}$$

heißt der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor.

Im Gegensatz zum Cauchyschen Spannungstensor  $\mathbf{T}_c$  ist der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor nicht symmetrisch, sondern erfüllt

$$\mathbf{T}(\mathbf{y})^T = \mathbf{F}(\mathbf{y})^{-1} \mathbf{T}(\mathbf{y}) \mathbf{F}(\mathbf{y})^T.$$

Zusätzlich müssen noch die in den Gleichgewichtsbedingungen auftretenden äußeren Kräfte in den Referenzzustand übertragen werden. Der Dichte der äußeren Volumenkraft  $\mathfrak{f} : \mathfrak{D} \rightarrow \mathbb{R}^3$  ordnet man hierfür ein Vektorfeld  $\mathbf{f} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$  derart zu, daß

$$\int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int_{\mathfrak{D}} \mathfrak{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \text{für alle } \mathbf{x} = \varphi(\mathbf{y}) \in \mathfrak{D}$$

ist. Das Vektorfeld  $\mathbf{f} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$  gibt die Dichte der äußeren Volumenkraft über dem Referenzzustand an. Wegen  $d\mathbf{x} = \det \mathbf{F}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$  erhält man

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}) = (\det \mathbf{F}(\mathbf{y})) \mathfrak{f}(\mathbf{x}).$$

Ebenso verfährt man mit der Dichte der äußeren Oberflächenkraft  $\mathfrak{g} : \mathfrak{G} \rightarrow \mathbb{R}^3$ . Man ordnet ihr ein Vektorfeld  $\mathbf{g} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit

$$\int_{\Gamma} \mathbf{g}(\mathbf{y}) d\mathbf{a} = \int_{\mathfrak{G}} \mathfrak{g}(\mathbf{x}) d\mathbf{a} \quad \text{für alle } \mathbf{x} = \varphi(\mathbf{y}) \in \mathfrak{G}$$

zu und erhält wegen  $d\mathbf{a} = (\det \mathbf{F}(\mathbf{y})) |\mathbf{F}(\mathbf{y})^{-T} \mathbf{n}| d\mathbf{a}$  den Vektor

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}) = (\det \mathbf{F}(\mathbf{y})) |\mathbf{F}(\mathbf{y})^{-T} \mathbf{n}| \mathfrak{g}(\mathbf{x}).$$

Mit diesen Vereinbarungen stellt sich nun Satz A.2.3 über dem Referenzzustand in folgender Form dar.

**Satz A.2.5.** Der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor  $\mathbf{T}(\mathbf{y})$  erfüllt mit  $\int \mathbf{f} d\mathbf{y} = \int \mathfrak{f} d\mathbf{x}$  und  $\int \mathbf{g} d\mathbf{a} = \int \mathfrak{g} d\mathbf{a}$  über dem Referenzzustand  $\bar{\Omega}$  die Gleichungen

$$\begin{cases} \operatorname{Div} \mathbf{T}(\mathbf{y}) + \mathbf{f}(\mathbf{y}) = 0 & \text{für alle } \mathbf{y} \in \Omega, \\ \mathbf{F}(\mathbf{y}) \mathbf{T}(\mathbf{y})^T = \mathbf{T}(\mathbf{y}) \mathbf{F}(\mathbf{y})^T & \text{für alle } \mathbf{y} \in \Omega, \\ \mathbf{T}(\mathbf{y}) \mathbf{n} = \mathbf{g}(\mathbf{y}) & \text{für alle } \mathbf{y} \in \Gamma. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Für alle genügend glatten Vektorfelder  $\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit

$$\mathbf{v} = 0 \text{ auf } \Gamma_v := \partial\Omega - \Gamma$$

sind die erste und die dritte Gleichung äquivalent zu der Variationsformulierung

$$\int_{\Omega} \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} d\mathbf{y} = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{y} + \int_{\Gamma} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{a}.$$

*Beweis.* Folgt durch einfache Rechnung aus Satz A.2.3.  $\square$

Für manche Anwendungen ist es nützlich, mit einer symmetrischen Transformation auf den Referenzzustand arbeiten zu können. Man definiert deshalb den folgenden Tensor.

**Definition A.2.6.** Der symmetrische Tensor  $\mathbf{S} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  mit

$$\mathbf{S}(\mathbf{y}) = \mathbf{F}(\mathbf{y})^{-1} \mathbf{T}(\mathbf{y}) = (\det \mathbf{F}(\mathbf{y})) \mathbf{F}(\mathbf{y})^{-1} \mathbf{T}_c(\mathbf{x}) \mathbf{F}(\mathbf{y})^{-T}$$

heißt *zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor*.

Mit dessen Hilfe lassen sich die Gleichgewichtsbedingungen über dem Referenzzustand in eine einfachere Form bringen.

**Satz A.2.7.** Der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor  $\mathbf{S}(\mathbf{y})$  erfüllt über dem Referenzzustand  $\bar{\Omega}$  die Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} (\mathbf{F}(\mathbf{y}) \mathbf{S}(\mathbf{y})) + \mathbf{f}(\mathbf{y}) &= 0 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \Omega, \\ \mathbf{S}(\mathbf{y}) &= \mathbf{S}(\mathbf{y})^T, \\ \mathbf{F}(\mathbf{y}) \mathbf{S}(\mathbf{y}) \mathbf{n} &= \mathbf{g}(\mathbf{y}) \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \Gamma. \end{aligned}$$

Für alle genügend glatten Vektorfelder  $\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit

$$\mathbf{v} = 0 \text{ auf } \Gamma_v := \partial\Omega - \Gamma$$

sind die erste und die dritte Gleichung äquivalent zu der Variationsformulierung

$$\int_{\Omega} \mathbf{F} \mathbf{S} : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{y} = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{y} + \int_{\Gamma} \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{a}.$$

*Beweis.* Offensichtlich durch Einsetzen der Definition von  $\mathbf{S}$  in Satz A.2.5.  $\square$

#### A.2.4 Äußere Kräfte

Die in den Gleichgewichtsbedingungen durch ihre Dichte auftretenden äußeren Kräfte  $\mathbf{f}$  und  $\mathbf{g}$  haben wir bei unserer Einführung bisher ausgeschlossen. Sie können unterschiedlicher Art sein.

**(1) Tote Lasten.** Die äußere Volumenkraft, sowie die äußere Oberflächenkraft werden als *tote Lasten* bezeichnet, falls die zugehörigen Dichten  $\mathbf{f} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ , sowie  $\mathbf{g} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3$  unabhängig von der Deformation  $\varphi$  sind. Dies ist zum Beispiel für ein Gravitationsfeld der Fall, bei dem

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}) = g\rho(\mathbf{y})\mathbf{e}_3$$

ist. Hält man einen Teil des Randes  $\mathcal{G}$  fest, während auf dem übrigen Teil keine äußeren Kräfte wirken ( $\mathbf{g} = 0$ ), so ist auch

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}) = 0 \quad \text{auf } \Gamma$$

unabhängig von der Deformation  $\varphi$ . Handelt es sich also um tote Lasten, so sind die rechten Seiten des resultierenden Randwertproblems bekannte Funktionen in der Variablen  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$ . Betrachtet man etwa eine Drucklast, deren Dichte über dem deformierten Zustand durch

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = -\pi \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad , \mathbf{x} \in \mathcal{G}, \pi = \text{const}$$

gegeben ist, so ist dies nur für  $\pi = 0$  eine tote Last. Intuitiv ist das klar: Man denke etwa an einen leeren Luftballon als Referenzzustand, welcher durch Aufblasen in einen deformierten Zustand übergeht. In diesem Beispiel findet man

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}) = -\pi(\text{Cof } \mathbf{F}(\mathbf{y}))\mathbf{n}(\mathbf{y}) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma.$$

Die zugehörige Randbedingung hat demnach die Form

$$\mathbf{T}(\mathbf{y})\mathbf{n}(\mathbf{y}) = \mathbf{g}(\mathbf{y}) =: \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma,$$

wobei die Abbildung  $\widehat{\mathbf{g}} : \Gamma \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}^3$  durch

$$\widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = -\pi(\text{Cof } \mathbf{F})\mathbf{n}(\mathbf{y})$$

gegeben ist. Motiviert durch dieses Beispiel kann man stets annehmen, daß es sich bei den äußeren Kräften entweder um tote Lasten handelt, oder die zugehörigen Dichten über dem Referenzzustand von der Form

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{y}) &= \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) \quad , \mathbf{y} \in \Omega, \\ \mathbf{g}(\mathbf{y}) &= \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma \end{aligned}$$

mit bekannten Abbildungen  $\widehat{\mathbf{f}} : \Omega \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  und  $\widehat{\mathbf{g}} : \Gamma \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}^3$  sind.

**(2) Konservative Kräfte** Die äußere Volumenkraft, sowie die äußere Oberflächenkraft werden als *konservative Kräfte* bezeichnet, wenn das jeweilige Integral

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} &= \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}, \\ \int_{\Gamma} \mathbf{g}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{a} &= \int_{\Gamma} \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{a} \end{aligned}$$

aus dem Prinzip der virtuellen Arbeit als Fréchet-Ableitung

$$\begin{aligned} F'(\varphi)\mathbf{v} &= \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}, \\ G'(\varphi)\mathbf{v} &= \int_{\Gamma} \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{a} \end{aligned}$$

eines Funktionals  $F$  bzw.  $G$  der Form

$$\begin{aligned} F(\tau) &= \int_{\Omega} \widehat{F}(\mathbf{y}, \tau(\mathbf{y})) \, d\mathbf{y}, \\ G(\tau) &= \int_{\Gamma} \widehat{G}(\mathbf{y}, \tau(\mathbf{y}), \nabla\tau(\mathbf{y})) \, d\mathbf{a} \end{aligned}$$



geschrieben werden kann. Wenn dies der Fall ist, so bezeichnet man die Funktionen  $\widehat{F} : \Omega \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  und  $\widehat{G} : \Gamma \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  als *Potential der äußeren Volumen- bzw. Oberflächenkraft*. Natürlich ist jede tote Last eine konservative Kraft mit

$$\widehat{F}(\mathbf{y}, \zeta) = \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}) \cdot \zeta \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \Omega, \zeta \in \mathbb{R}^3,$$

oder

$$\widehat{G}(\mathbf{y}, \zeta, \mathbf{F}) = \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) \cdot \zeta \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \Gamma, \zeta \in \mathbb{R}^3, \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}).$$

### A.3 Materialgesetze

Ein wichtiges Problem besteht darin, zu gegebenen äußeren Kräften die Deformation eines Körpers zu bestimmen. Die Gleichgewichtsbedingungen liefern dazu nur 3 Gleichungen. Damit sind die 3 Komponenten der Deformation und die 6 Komponenten des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors (unter Berücksichtigung der Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensors) noch nicht bestimmt. Die fehlenden Gleichungen ergeben sich aus den Materialgesetzen. Darin kommt zum Ausdruck, daß die Deformationen zu gegebenen Kräften auch von den Materialeigenschaften abhängen.

#### A.3.1 Elastische Materialien

Im Gegensatz zu den plastischen Materialien rufen bei elastischen Materialien, die durch äußere Einwirkungen verursachten Deformationen Kräfte hervor, die diese Deformation rückgängig zu machen versuchen. Mathematisch postuliert sich das in folgender Definition.

**Definition A.3.1.** *Ein Material heißt elastisch, wenn es eine Abbildung*

$$\check{T} : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}), \quad (\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \mapsto \check{T}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y}))$$

*derart gibt, daß für jeden deformierten Zustand der Cauchysche Spannungstensor  $\mathbf{T}_c(\mathbf{x})$  in jedem Punkt  $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{y}) \in \bar{\Omega}$  das konstitutive Gesetz*

$$\mathbf{T}_c(\mathbf{x}) = \check{T}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y}))$$

*erfüllt. Die Abbildung  $\check{T}$  heißt Antwortfunktion des Cauchyschen Spannungstensors.*

Hinter dem konstitutiven Gesetz verbirgt sich insbesondere die Annahme, daß die Spannungen in lokaler Weise von den Verschiebungen abhängen, und auch nur von deren ersten Ableitungen. Berücksichtigt man die Beziehungen  $\mathbf{T} = (\det \mathbf{F})\mathbf{T}_c\mathbf{F}^{-T}$  bzw.  $\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{T}$  zwischen dem ersten bzw. dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor und dem Cauchyschen Spannungstensor, so findet man Abbildungen

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{T}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) &\rightarrow \mathbb{M}^3(\mathbb{R}), \quad \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = (\det \mathbf{F})\check{T}(\mathbf{y}, \mathbf{F})\mathbf{F}^{-T}, \\ \widehat{\mathbf{S}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) &\rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R}), \quad \widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = (\det \mathbf{F})\mathbf{F}^{-1}\check{T}(\mathbf{y}, \mathbf{F})\mathbf{F}^{-T} \end{aligned}$$

mit der Eigenschaft, daß

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(\mathbf{y}) &= \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})), \\ \mathbf{S}(\mathbf{y}) &= \widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \end{aligned}$$

für alle  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  gilt. Da diese Gleichungen äquivalente Definitionen für elastische Materialien darstellen, werden sie ebenfalls als *konstitutive Gesetze* bezeichnet. Die Abbildungen  $\check{\mathbf{T}}$  und  $\hat{\mathbf{S}}$  bezeichnet man entsprechend als *Antwortfunktionen* des ersten und zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors. Materialien bei denen die Antwortfunktion  $\check{\mathbf{T}}$  nicht explizit vom Ort  $\mathbf{y}$  abhängt, bezeichnet man als *homogene Materialien*. Andernfalls werden sie als *inhomogen* bezeichnet. Für ein homogenes elastisches Material ist das konstitutive Gesetz demnach von der Gestalt

$$\mathbf{T}_c(\mathbf{x}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{F}(\mathbf{y})) \text{ bzw. } \mathbf{T}(\mathbf{y}) = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}(\mathbf{y})).$$

### Axiom der Koordinatenunabhängigkeit

Nach einem allgemeinen physikalischen Sachverhalt muß jede observierbare Größe invariant gegenüber einem Wechsel des Bezugssystems sein. Es darf demnach keine Rolle spielen, über welcher orthogonalen Basis der Cauchysche Spannungsvektor eines deformierten Körpers berechnet wird. Diese Tatsache findet sich im sogenannten *Axiom der Koordinatenunabhängigkeit*, welches oft auch als *Axiom der Invarianz gegenüber einem Wechsel des Bezugssystems* bezeichnet wird, wieder.

**Axiom A.3.2. (Invarianz gegenüber Wechsel des Bezugssystems)** *Wird der deformierte Zustand  $\bar{\mathcal{D}}$  mittels einer orthogonalen Matrix  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$  durch  $\sigma = \mathbf{Q}\varphi$  in einen anderen deformierten Zustand  $\sigma(\bar{\mathcal{D}})$  gedreht, so gilt für alle  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  und  $\mathbf{n} \in S_2$*

$$\mathfrak{t}^\sigma(\sigma(\mathbf{x}), \mathbf{Q}\mathbf{n}) = \mathbf{Q}\mathfrak{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}).$$

Hierbei sind die Vektorfelder  $\mathfrak{t}^\sigma : \sigma(\bar{\mathcal{D}}) \times S_2 \rightarrow \mathbb{R}^3$  und  $\mathfrak{t} : \bar{\mathcal{D}} \times S_2 \rightarrow \mathbb{R}^3$  die jeweiligen Cauchyschen Spannungsvektoren.

**Satz A.3.3.** *Für ein elastisches Material ist das Axiom der Koordinatenunabhängigkeit genau dann erfüllt, wenn für jedes  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  und jede orthogonale Matrix  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$*

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{Q}\mathbf{F}) = \mathbf{Q}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F})\mathbf{Q}^T \quad \text{für alle } \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R})$$

*gilt. Ferner ist dies genau dann der Fall, wenn eine der folgenden äquivalenten Bedingungen erfüllt ist:*

- (i) *Sind  $\mathbf{R} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  und  $\mathbf{U} \in \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R})$  die Matrizen aus der Polarzerlegung  $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ , so gilt*

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \mathbf{R}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{U})\mathbf{R}^T.$$

- (ii) *Es gibt eine Abbildung  $\bar{\mathbf{T}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R})$ , so daß für alle  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  und  $\mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R})$*

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \mathbf{F}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{C})\mathbf{F}^T.$$

- (iii) *Es gibt eine Abbildung  $\bar{\mathbf{S}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$ , so daß für alle  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  und  $\mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R})$*

$$\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{C}).$$

*Beweis.* Seien  $\mathbf{T}_c(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{T}_c^\sigma((\sigma(\mathbf{x})))$  die jeweiligen Cauchyschen Spannungstensoren in  $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$  und dem via  $\sigma = \mathbf{Q}\varphi$  rotierten Punkt  $\sigma(\mathbf{x}) \in \sigma(\bar{\Omega})$ . Nach dem Axiom der Koordinatenunabhängigkeit ist für alle  $\mathbf{n} \in S_2$

$$\mathbf{T}_c^\sigma(\sigma(\mathbf{x}))\mathbf{Q}\mathbf{n} = \mathbf{t}^\sigma(\sigma(\mathbf{x}), \mathbf{Q}\mathbf{n}) = \mathbf{Q}\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \mathbf{Q}\mathbf{T}_c(\mathbf{x})\mathbf{n}$$

und somit  $\mathbf{T}_c^\sigma((\sigma(\mathbf{x}))) = \mathbf{Q}\mathbf{T}_c(\mathbf{x})\mathbf{Q}^T$ . Die geometrische Interpretation des Deformationsgradienten wiederum besagt, daß  $\nabla\sigma(\mathbf{y}) = \mathbf{Q}\nabla\varphi(\mathbf{y})$  und das Axiom der Koordinatenunabhängigkeit ist genau dann erfüllt, wenn

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \nabla\sigma(\mathbf{y})) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{Q}\nabla\varphi(\mathbf{y})) = \mathbf{Q}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \nabla\varphi(\mathbf{y}))\mathbf{Q}^T$$

gilt. Seien  $\mathbf{R} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  und  $\mathbf{U} \in \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R})$  die Matrizen aus der Polarzerlegung  $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ . Wegen der Orthogonalität von  $\mathbf{R}$  impliziert  $\check{\mathbf{T}}(\mathbf{Q}\mathbf{F}) = \mathbf{Q}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F})\mathbf{Q}^T$  unmittelbar

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{R}\mathbf{U}) = \mathbf{R}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{U})\mathbf{R}^T$$

und damit (i). In diesem Fall ist  $\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) = \mathbf{R}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{U})\mathbf{R}^T = \mathbf{F}\mathbf{U}^{-1}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{U})\mathbf{U}^{-T}\mathbf{F}^T$  und die Wahl des symmetrischen Anteils  $\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{C}^{1/2}$  liefert die Existenz einer Abbildung

$$\bar{\mathbf{T}} : \mathbf{C} \mapsto \mathbf{C}^{-1/2}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{C}^{1/2})\mathbf{C}^{-1/2}$$

mit der erforderlichen Eigenschaft  $\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) = \mathbf{F}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{C})\mathbf{F}^T$ . Da für alle  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F})\mathbf{Q}^T &= \mathbf{Q}\mathbf{F}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{F}^T\mathbf{F})\mathbf{F}^T\mathbf{Q}^T = (\mathbf{Q}\mathbf{F})\bar{\mathbf{T}}((\mathbf{Q}\mathbf{F})^T(\mathbf{Q}\mathbf{F}))(\mathbf{Q}\mathbf{F})^T \\ &= \check{\mathbf{T}}(\mathbf{Q}\mathbf{F}) \end{aligned}$$

gilt, bleibt nur noch die Äquivalenz zwischen den letzten beiden Behauptungen zu zeigen. Wegen  $\widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{F}) = [\det \mathbf{F}]\mathbf{F}^{-1}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-T}$  und  $\det \mathbf{F} = \sqrt{\det \mathbf{C}}$  ist (ii) äquivalent zu

$$\widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{F}) = \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{C})$$

mit  $\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{C}) = \sqrt{\det \mathbf{C}}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{C})$ . □

### Axiom des spannungsfreien Grundzustands

Nach Äquivalenz (iii) von Satz (A.3.3) und der Definition der Antwortfunktionen der beiden Piola-Kirchhoffschen Spannungstensoren  $\widehat{\mathbf{T}}, \widehat{\mathbf{S}}$  ist das Axiom der Koordinatenunabhängigkeit insbesondere auch dann erfüllt, wenn es eine Abbildung  $\bar{\mathbf{S}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  mit

$$\widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \mathbf{F}\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{C})$$

gibt. Der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor besitzt als Funktion der Verzerrung  $\mathbf{E}$  somit die Darstellung

$$\mathbf{T}(\mathbf{y}) = \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \mathbf{F}\widetilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}),$$

wobei  $\widetilde{\mathbf{S}} : \bar{\Omega} \times \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  durch  $\widetilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{I} + 2\mathbf{E})$  definiert ist. Nimmt man an, daß für alle  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$

$$\widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{I}) = 0 \quad \text{bzw.} \quad \widetilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, 0) = 0$$

gilt, so handelt es sich um einen *spannungsfreien Grundzustand*. Die Fréchet-Ableitung von  $\tilde{\mathbf{S}}$  im Punkt  $\mathbf{E} = 0$  bezeichnen wir mit  $\tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0)$ . Es handelt sich dabei um eine lineare Abbildung  $\tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0) : \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$ , die als Matrix die Einträge  $\tilde{\mathbf{S}}'|_{ij,kl} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{S}}_{ij}}{\partial \mathbf{E}_{kl}}$  besitzt. Die Taylorentwicklung von  $\tilde{\mathbf{S}}$  um den spannungsfreien Grundzustand liefert dann

$$\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = \tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0)[\mathbf{E}] + O(\|\mathbf{E}\|^2).$$

### Isotropie elastischer Materialien

Während das Axiom der Koordinatenunabhängigkeit für jedes Material gilt, ist die Isotropie eine reine Materialeigenschaft. Sie bedeutet, daß im Material keine Richtung ausgezeichnet ist, die Antwort des Materials also in allen Richtungen gleich ausfällt. Die Spannungsvektoren ändern sich demnach nicht, wenn man den nicht deformierten Körper  $\bar{\Omega}$  vor der Deformation dreht. Isotropie gilt nicht für geschichtetes Material, Holz oder Kristalle. Um diese Eigenschaft mathematisch erfassen zu können, betrachten wir einen Punkt  $\mathbf{x} \in \bar{\mathcal{D}}$ . Da es sich um ein elastisches Material handelt, ist der Cauchysche Spannungstensor durch

$$\mathbf{T}_c(\mathbf{x}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y}))$$

gegeben. Wenn wir nun die Referenzkonfiguration  $\Omega$  mittels einer Rotation  $\mathbf{Q}^T$  um den Punkt  $\mathbf{y} \in \Omega$  drehen, so kann derselbe deformierte Zustand  $\bar{\mathcal{D}}$  durch die Komposition

$$\tilde{\varphi} = \varphi \circ \sigma^{-1} : \sigma(\bar{\Omega}) \rightarrow \bar{\mathcal{D}}, \quad \tilde{\mathbf{y}} \mapsto \varphi(\mathbf{y} + \mathbf{Q}(\sigma(\tilde{\mathbf{y}}) - \mathbf{y}))$$

mit  $\sigma(\tilde{\mathbf{y}}) = \mathbf{y} + \mathbf{Q}^T(\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{y})$  für alle  $\tilde{\mathbf{y}} \in \Omega$ , als Bild der neuen Referenzkonfiguration  $\sigma(\bar{\Omega})$  erhalten werden. Im gemeinsamen Punkt  $\varphi(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}(\mathbf{y}) =: \tilde{\mathbf{x}}$  ist der Cauchysche Spannungstensor demnach

$$\mathbf{T}^{\tilde{\varphi}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \nabla \tilde{\varphi}(\mathbf{y})) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \nabla \varphi(\mathbf{y})\mathbf{Q}).$$

Dies motiviert uns zu folgender Definition.

**Definition A.3.4.** Für ein elastisches Material mit dem Cauchyschen Spannungstensor  $\mathbf{T}_c(\mathbf{x}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F})$  bezeichnet man

$$\mathcal{G}(\mathbf{y}) = \{ \mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R}) \mid \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}\mathbf{Q}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}), \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \}$$

als die Symmetriegruppe des Materials im Punkt  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$ .

Man weist leicht nach, daß  $\mathcal{G}(\mathbf{y})$  eine Untergruppe von  $\mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$  ist. Gilt  $\mathcal{G}(\mathbf{y}) = \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$  für alle  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$ , d.h. ist in jedem Punkt  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}\mathbf{Q}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F})$$

für alle  $\mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R})$  und  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$ , so spricht man von einem *isotropen* Material. Um den ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor eines isotropen Materials über einem spannungsfreien Grundzustand besser charakterisieren zu können, benötigt man die folgenden Lemmata.

**Lemma A.3.5.** Die verschiedenen Spannungstensoren eines elastischen Körpers genügen für alle  $\mathbf{C} = \mathbf{I} + 2\mathbf{E} \in \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R})$ ,  $\mathbf{Q} \in \mathcal{G}(\mathbf{y})$  und  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  den Bedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{C})\mathbf{Q}^T &= \bar{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{Q}\mathbf{C}\mathbf{Q}^T) \\ \mathbf{Q}\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{C})\mathbf{Q}^T &= \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{Q}\mathbf{C}\mathbf{Q}^T) \\ \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E})\mathbf{Q}^T &= \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T) \\ \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0)[\mathbf{E}]\mathbf{Q}^T &= \tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0)[\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T], \end{aligned}$$

wobei Letzteres lediglich über einem spannungsfreien Grundzustand gilt.

*Beweis.* Sei  $\mathbf{C} \in \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R})$ ,  $\mathbf{Q} \in \mathcal{G}(\mathbf{y})$  und etwa  $\mathbf{F} = \mathbf{C}^{1/2} \in \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$ . Dann ist  $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F}$ , also

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{C})\mathbf{Q}^T &= \mathbf{Q}\mathbf{F}^{-1}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F})\mathbf{F}^{-T}\mathbf{Q}^T = (\mathbf{F}\mathbf{Q}^{-1})^{-1}\check{\mathbf{T}}(\mathbf{F})(\mathbf{F}\mathbf{Q}^{-1})^{-T} \\ &= \bar{\mathbf{T}}((\mathbf{F}\mathbf{Q}^{-1})^T(\mathbf{F}\mathbf{Q}^{-1})) = \bar{\mathbf{T}}(\mathbf{Q}\mathbf{C}\mathbf{Q}^T). \end{aligned}$$

Mit  $\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{C}) = \sqrt{\det \mathbf{C}}\bar{\mathbf{T}}(\mathbf{C})$  und  $\det \mathbf{C} = \det \mathbf{Q}\mathbf{C}\mathbf{Q}^T$  folgt

$$\mathbf{Q}\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{C})\mathbf{Q}^T = \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{Q}\mathbf{C}\mathbf{Q}^T)$$

und daraus mit  $\mathbf{F}\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{E}) = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) = \mathbf{F}\bar{\mathbf{S}}(\mathbf{C})$  die Gleichung

$$\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{E})\mathbf{Q}^T = \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T).$$

Wegen  $\tilde{\mathbf{S}}(0) = 0$  ist einerseits  $\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T) = \tilde{\mathbf{S}}'(0)[\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T] + O(\|\mathbf{E}\|^2)$  und andererseits

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T) &= \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{E})\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q} \left\{ \tilde{\mathbf{S}}'(0)[\mathbf{E}] + O(\|\mathbf{E}\|^2) \right\} \mathbf{Q}^T \\ &= \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}'(0)[\mathbf{E}]\mathbf{Q}^T + O(\|\mathbf{E}\|^2), \end{aligned}$$

so daß sich  $\tilde{\mathbf{S}}'(0)[\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T] = \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}'(0)[\mathbf{E}]\mathbf{Q}^T$  ergibt. □

**Lemma A.3.6.** Sei  $\mathbf{A} : \mathbb{S}^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  eine lineare Abbildung mit  $\mathbf{Q}\mathbf{A}[\mathbf{S}]\mathbf{Q}^T = \mathbf{A}[\mathbf{Q}\mathbf{S}\mathbf{Q}^T]$  für alle  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  und  $\mathbf{S} \in \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$ . Dann gilt

$$\mathbf{A}[\mathbf{S}] = 2\mu\mathbf{S} + \lambda(\operatorname{sp}\mathbf{S})\mathbf{I}$$

mit zwei Konstanten  $\mu, \lambda \in \mathbb{R}$ .

*Beweisskizze.* Nach [Gur81] wählen wir zunächst einen Vektor  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^3$  mit  $|\mathbf{e}| = 1$  und ordnen ihm die symmetrische Projektionsmatrix

$$\mathbf{P}_e \mathbf{v} = \langle \mathbf{e}, \mathbf{v} \rangle \mathbf{e} \quad , \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3,$$

zu. Mit Hilfe der orthogonalen Householdertransformation  $\mathbf{H}_e = \mathbf{I} - 2\mathbf{P}_e$  und unter Benutzung der Voraussetzungen zeigt man, daß  $\mathbf{e}$  ein Eigenvektor von  $\mathbf{A}[\mathbf{P}_e]$  ist. Den entsprechenden Eigenwert bezeichnen wir mit  $\alpha_e$ . Da  $\mathbf{P}_e$  symmetrisch ist, existieren nach dem Spektralsatz zwei weitere reelle Eigenwerte  $\lambda_e, \lambda'_e$  mit entsprechenden Eigenvektoren, die

auf  $e$  senkrecht stehen. Mit Hilfe einer äußerst geschickt konstruierten Matrix  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  zeigt man, daß  $\lambda_e = \lambda'_e$  gilt. Wegen

$$\mathbf{A}[\mathbf{P}_e]\mathbf{P}_e = \alpha_e\mathbf{P}_e, \quad \mathbf{A}[\mathbf{P}_e](\mathbf{I} - \mathbf{P}_e) = \lambda_e(\mathbf{I} - \mathbf{P}_e)$$

gilt dann

$$\mathbf{A}[\mathbf{P}_e] = \alpha_e\mathbf{P}_e + \lambda_e(\mathbf{I} - \mathbf{P}_e).$$

Mit Hilfe der Voraussetzungen zeigt man nun, daß für alle  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$

$$\alpha_{\mathbf{Q}e} = \alpha_e, \quad \lambda_{\mathbf{Q}e} = \lambda_e,$$

gilt, d.h., sowohl  $\alpha$  als auch  $\lambda$  unabhängig von  $e$  sind. Mit  $2\mu = \alpha - \lambda$  erhalten wir

$$\mathbf{A}[\mathbf{P}_e] = 2\mu\mathbf{P}_e + \lambda\mathbf{I}.$$

Ist nun  $\mathbf{S} \in \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  beliebig mit Eigenwerten  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  und paarweise zueinander orthogonalen Eigenvektoren  $e_1, e_2, e_3$ , so gilt

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{P}_{e_i}.$$

Aus der Linearität von  $\mathbf{A}$  folgt daher  $\mathbf{A}[\mathbf{S}] = 2\mu\mathbf{S} + \lambda(\text{sp}\mathbf{S})\mathbf{I}$ . □

Dieses Lemma zeigt insbesondere, daß die Forderung nach der Invarianz gegenüber einem Wechsel des Bezugssystems einer linearen Abbildung  $\mathbf{A} : \mathbb{S}^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  die Zahl der Freiheitsgrade auf 2 reduziert.

**Satz A.3.7.** *Für isotrope elastische Materialien über einem spannungsfreien Grundzustand gilt*

$$\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = 2\mu(\mathbf{y})\mathbf{E} + \lambda(\mathbf{y})(\text{sp}\mathbf{E})\mathbf{I} + O(\|\mathbf{E}\|^2)$$

mit zwei Konstanten  $\mu(\mathbf{y}), \lambda(\mathbf{y}) \in \mathbb{R}$ , die als Lamé-Konstanten des Materials im Punkt  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  bezeichnet werden.

*Beweis.* Wegen der Isotropie ist  $\mathcal{G}(\mathbf{y}) = \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  für alle  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}^3(\mathbb{R})$  und somit nach Lemma A.3.5

$$\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0)[\mathbf{E}]\mathbf{Q}^T = \tilde{\mathbf{S}}'(\mathbf{y}, 0)[\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T].$$

Über einem spannungsfreien Grundzustand folgt die Behauptung unmittelbar aus Lemma A.3.6. □

Rivlin und Ericksen [RiEr55] ist es 1955 gelungen die Antwortfunktion isotroper Materialien mit den Hauptinvarianten einer Matrix näher zu beschreiben. Wir werden darauf nicht eingehen und verweisen den interessierten Leser auf [Vil77].

### A.3.2 Hyperelastische Materialien

Wie man im vorigen Abschnitt gesehen hat, erfüllt bei einem elastischen Material der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor  $\mathbf{T}(\mathbf{y}) = \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y}))$ , womit der Gleichgewichtszustand eines elastischen Körpers unter der Wirkung von konservativen Kräften nach Satz A.2.5 durch das Randwertproblem

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) + \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) &= 0 \quad , \mathbf{y} \in \Omega, \\ \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \mathbf{n} &= \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma, \\ \varphi(\mathbf{y}) &= \widehat{\varphi}(\mathbf{y}) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma_v \end{aligned}$$

über dem Referenzzustand beschrieben ist. Hierbei ist  $\widehat{\varphi} : \Gamma_v \rightarrow \mathbb{R}^3$  gegeben. Die erste und zweite Gleichung sind für alle genügend glatten Vektorfelder  $\mathbf{v} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ , die auf  $\Gamma_v$  verschwinden, äquivalent zu der Variationsformulierung

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{y})) : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} &= \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &+ \int_{\Gamma} \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{a}. \end{aligned}$$

Die hierbei auf der rechten Seite auftretenden Integrale können als Fréchet-Ableitungen

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} &= F'(\varphi) \mathbf{v}, \\ \int_{\Gamma} \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{a} &= G'(\varphi) \mathbf{v} \end{aligned}$$

der Funktionale

$$\begin{aligned} F(\tau) &= \int_{\Omega} \widehat{F}(\mathbf{y}, \tau(\mathbf{y})) \, d\mathbf{y}, \\ G(\tau) &= \int_{\Gamma} \widehat{G}(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y})) \, d\mathbf{a} \end{aligned}$$

betrachtet werden. Es stellt sich demnach die Frage, ob die linke Seite des Prinzips der virtuellen Arbeit sich ebenfalls als Fréchet-Ableitung

$$\int_{\Omega} \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = W'(\tau) \mathbf{v}$$

eines geeigneten Funktionals  $W$  schreiben läßt. Wenn dies der Fall ist, so kann äquivalent zum Prinzip der virtuellen Arbeit, die Fréchet-Ableitung des Funktionals  $\{W - (F + G)\}$  für alle Variationen  $\mathbf{v}$ , die auf  $\Gamma_v$  verschwinden, gleich null gesetzt werden. Dies motiviert uns zu folgender Definition, die durch den nachstehenden Satz gerechtfertigt wird.

**Definition A.3.8.** Ein elastisches Material heißt hyperelastisch, wenn es ein Energiefunktional  $W : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  derart gibt, daß

$$\widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \Omega, \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R})$$

gilt.

**Satz A.3.9.** *Die Gleichgewichtsbedingungen*

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) + \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) &= 0 \quad , \mathbf{y} \in \Omega, \\ \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \mathbf{n} &= \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma \end{aligned}$$

sind für ein hyperelastisches Material unter konservativen Kräften genau dann erfüllt, wenn die Gesamtenergie

$$I(\varphi) = \int_{\Omega} W(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \, d\mathbf{y} - \{F(\varphi) + G(\varphi)\}$$

für alle genügend glatten, auf  $\Gamma_v$  verschwindenden Vektorfelder  $\mathbf{v} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$  stationär wird, also

$$I'(\varphi)\mathbf{v} = 0$$

ist.

*Beweis.* Für jedes genügend glatte Vektorfeld  $\tau : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$  betrachten wir die *Verzerrungsenergie*

$$V(\tau) := \int_{\Omega} W(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y})) \, d\mathbf{y}.$$

Ist  $\mathbf{v} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$  ein beliebiges Vektorfeld, so ist wegen

$$\begin{aligned} V(\tau + \mathbf{v}) - V(\tau) &= \int_{\Omega} \{W(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y}) + \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y})) - W(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y}))\} \, d\mathbf{y} \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial W}{\partial \nabla \tau}(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y})) : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y}) + o(\|\nabla \mathbf{v}(\mathbf{y})\|) \right\} \, d\mathbf{y} \\ &= \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y})) : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} + \int_{\Omega} o(\|\nabla \mathbf{v}(\mathbf{y})\|) \, d\mathbf{y} \end{aligned}$$

die Fréchet-Ableitung

$$V'(\tau)\mathbf{v} = \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \nabla \tau(\mathbf{y})) : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}.$$

Folglich ist

$$\begin{aligned} I'(\varphi)\mathbf{v} &= \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) : \nabla \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &\quad - \left\{ \int_{\Omega} \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} + \int_{\Gamma} \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{a} \right\} \end{aligned}$$

und die Behauptung folgt aus Satz A.2.5. □

Man ist nun natürlich bemüht, anstatt des stationären Punktes das Minimum des Funktionals der totalen Energie,  $I(\varphi) = \min_{\psi \in \Psi} I(\psi)$ , zu bestimmen. Hierfür ist zunächst zu gewährleisten, daß der Raum  $\Psi$  wohldefiniert ist. Da jedoch der Spuoperator  $\sigma : C^1(\bar{\Omega}) \rightarrow L^2(\Omega)$ ,  $\chi \rightarrow \chi|_{\partial\Omega}$  stetig auf den Sobolevraum  $W^{1/2}(\Omega)$  fortgesetzt werden kann, ist

$$\Psi = \{\chi \in W^{1/2}(\Omega) \mid \sigma\chi = \widehat{\varphi} \text{ auf } \Gamma_v\}$$



nicht leer und bildet einen affinen Raum. In diesem  $\Psi = \widehat{\varphi} + \mathbf{v}$  liegen nun sowohl  $\varphi$  als auch  $\mathbf{v}$ . Das Funktional  $\widehat{I}(\mathbf{v}) := I(\mathbf{v} + \widehat{\varphi}) = I(\Psi)$  wird demnach im Punkt  $(\varphi - \widehat{\varphi})$  stationär, da

$$\widehat{I}'(\varphi - \widehat{\varphi}) = 0 \Leftrightarrow \widehat{I}'(\varphi - \widehat{\varphi})\mathbf{v} = I'(\varphi)\mathbf{v} = 0$$

für alle auf  $\Gamma_v$  verschwindenden Variationen  $\mathbf{v}$ . Aus dieser Erkenntnis ergibt sich unmittelbar das folgende entscheidende Korollar aus Satz A.3.9.

**Korollar A.3.10.** *Für ein hyperelastisches Material unter konservativen Kräften gilt: Jedes genügend glatte Vektorfeld*

$$\varphi \in \mathcal{T} := \{\tau : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid \tau = \widehat{\varphi} \text{ auf } \Gamma_v\},$$

welches die Randbedingungen erfüllt und die totale Energie

$$I(\varphi) = \inf_{\tau \in \mathcal{T}} I(\tau)$$

minimiert, löst das zu den Gleichgewichtsbedingungen gehörige Randwertproblem

$$\begin{aligned} \operatorname{Div} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) + \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{y}, \varphi(\mathbf{y})) &= 0 \quad , \mathbf{y} \in \Omega, \\ \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y}))\mathbf{n} &= \widehat{\mathbf{g}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}(\mathbf{y})) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma, \\ \varphi(\mathbf{y}) &= \widehat{\varphi}(\mathbf{y}) \quad , \mathbf{y} \in \Gamma_v. \end{aligned}$$

### Axiom der Koordinatenunabhängigkeit

Erinnert man sich daran, was es für ein elastisches Material bedeutete, invariant gegenüber einem Wechsel des Bezugssystems zu sein, so motiviert dies zu folgender Definition.

**Definition A.3.11.** *Das Energiefunktional  $W : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  eines hyperelastischen Materials erfüllt genau dann das Axiom der Koordinatenunabhängigkeit, wenn die Antwortfunktion  $\check{\mathbf{T}}$  des Cauchyschen Spannungstensors das Axiom der Koordinatenunabhängigkeit erfüllt.*

**Satz A.3.12.** *Das Energiefunktional  $W : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  eines hyperelastischen Materials ist genau dann unabhängig gegenüber einem Wechsel des Bezugssystems, falls eine der beiden äquivalenten Bedingungen erfüllt ist:*

- (i)  $W(\mathbf{y}, \mathbf{QF}) = W(\mathbf{y}, \mathbf{F})$  für alle  $\mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R})$ ,  $\mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$ .
- (ii) Es existiert ein Energiefunktional  $\bar{W} : \bar{\Omega} \times \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  mit

$$W(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \bar{W}(\mathbf{y}, \mathbf{F}^T \mathbf{F}) \quad \text{für alle } \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}).$$

Genauer ist  $\bar{W}(\mathbf{C}) = W(\mathbf{C}^{1/2})$ .

*Beweis.* Vgl. [Cia88, Thm. 4.2-1].

□

Damit ist für jedes  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  das Energiefunktional  $W$  nur vom Cauchy-Greenschen Verzerrungstensor  $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$  abhängig. Aus der Koordinatenunabhängigkeit eines hyperelastischen Materials kann man ferner schließen, daß der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor von der Form

$$\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{C}) = 2 \frac{\partial \bar{W}}{\partial \mathbf{C}}(\mathbf{y}, \mathbf{C})$$

ist.

### Isotropie hyperelastischer Materialien

Auch hier ist die Definition der Isotropie naheliegend und ergibt sich aus der für elastische Materialien.

**Definition und Satz A.3.13.** *Das Energiefunktional  $W : \bar{\Omega} \times \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  eines hyperelastischen Materials ist genau dann isotrop in  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$ , wenn die zugehörige Antwortfunktion  $\check{\mathbf{T}}$  des Cauchyschen Spannungstensors isotrop  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$  ist, also*

$$\check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \check{\mathbf{T}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}\mathbf{Q}) \quad \text{für alle } \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}), \mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$$

erfüllt. Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$\hat{W}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \hat{W}(\mathbf{y}, \mathbf{F}\mathbf{Q}) \quad \text{für alle } \mathbf{F} \in \mathbb{M}_+^3(\mathbb{R}), \mathbf{Q} \in \mathbb{O}_+^3(\mathbb{R})$$

gilt.

*Beweis.* Vgl. [Cia88, Thm. 4.3-1]. □

### A.3.3 St. Venant-Kirchhoff Materialien

Nach Satz A.3.7 besitzt unter den Voraussetzungen der Isotropie, eines spannungsfreien Grundzustands sowie der Unabhängigkeit bezüglich einem Wechsel des Bezugssystems das einfachst denkbare, elastische Material einen in  $\mathbf{E}$  linearen Spannungstensor  $\check{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E})$ . Materialien mit dieser Eigenschaft

$$\check{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = 2\mu(\mathbf{y})\mathbf{E} + \lambda(\mathbf{y})(\text{sp}\mathbf{E})\mathbf{I} \quad , \mathbf{E} \in \mathbb{S}_+^3(\mathbb{R})$$

nennt man *St. Venant-Kirchhoff Materialien*. Mit Hilfe geschickt konstruierter Gedankenexperimente weist man nach, daß die skalaren Lamé-Konstanten  $\mu(\mathbf{y})$  und  $\lambda(\mathbf{y})$  echt größer als Null sein müssen. Da St. Venant-Kirchhoff Materialien lediglich das Verhalten für kleine Werte von  $\|\mathbf{E}\|$  modellieren, kann man nicht erwarten, daß sie sich auch bei großen Verzerrungen noch gutartig verhalten. Tatsächlich erreichen sie mit endlicher Energie unendlich große Kompressionsraten. Wir werden in diesem Abschnitt zeigen, daß St. Venant-Kirchhoff Materialien hyperelastisch sind. Leider ist ihr Energiefunktional nicht polykonvex und damit der Existenztheorie von John Ball [Bal77] nicht zugänglich.

**Lemma A.3.14.** *Ist das Energiefunktional eines hyperelastischen Materials unabhängig vom Bezugssystem, also*

$$W(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \bar{W}(\mathbf{y}, \mathbf{C}) = \check{W}(\mathbf{y}, \mathbf{E})$$

mit  $\tilde{W}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = \bar{W}(\mathbf{y}, \mathbf{I} + 2\mathbf{E})$  und ist oBdA  $\frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{E}_{kl}} = \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{E}_{lk}}$  für  $k, l = 1, 2, 3$ , so ist

$$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \mathbf{F} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{E}}(\mathbf{y}, \mathbf{E})$$

und folglich

$$\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{E}}(\mathbf{y}, \mathbf{E}).$$

*Beweis.* Komponentenweise erhält man für jedes  $1 \leq k, l \leq 3$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial F_{rs}}(\mathbf{E}) &= \sum_{k,l} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{kl}} \frac{\partial}{\partial F_{rs}} \frac{1}{2} \sum_m (F_{mk} F_{ml} - \delta_{kl}) \\ &= \sum_{k,l} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{kl}} \left( \frac{1}{2} \delta_{sk} F_{rl} + \frac{1}{2} \delta_{sl} F_{rk} \right) = \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{sl}} F_{rl} + \frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{ks}} F_{rk} \\ &= \sum_k F_{rk} \left( \frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{sk}} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{ks}} \right) = \sum_k F_{rk} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{ks}} \end{aligned}$$

nach Voraussetzung. □

**Korollar A.3.15.** *St. Venant-Kirchhoff-Materialien sind hyperelastisch und ihr Energiefunktional ist durch*

$$W(\mathbf{y}, \mathbf{F}) = \tilde{W}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = \mu(\mathbf{y}) \mathbf{E} : \mathbf{E} + \frac{1}{2} \lambda(\mathbf{y}) (\text{sp} \mathbf{E})^2$$

mit  $\tilde{W}(\mathbf{y}, \mathbf{E}) = \bar{W}(\mathbf{y}, \mathbf{I} + 2\mathbf{E})$  gegeben.

*Beweis.* Es gilt

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial E_{kl}} = 2\mu E_{kl} + \lambda(\text{sp} \mathbf{E}) \delta_{kl}$$

und somit folgt wegen  $\mathbf{F} \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{E}) = \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}(\mathbf{F})$  die Behauptung aus Lemma A.3.14. □

## A.4 Lineare Elastizitätstheorie

Unterliegt ein Körper  $\bar{\Omega}$  einem dynamischen Prozeß, so wird die Deformation  $\varphi : \bar{\Omega} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  gerne als Bewegung bezeichnet. Die Gleichgewichtsbedingungen erweitern sich über dem Referenzzustand (A.4) um den Beschleunigungsterm  $\bar{\rho} \ddot{\varphi}$  und die zeitliche Entwicklung des Systems wird nach (A.4) durch die Bewegungsgleichung

$$\text{Div} \mathbf{T} + \mathbf{f} = \bar{\rho} \ddot{\varphi} \tag{A.5}$$

beschrieben. Dabei bezeichnet  $\mathbf{T} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{T}^\varphi \mathbf{F}^{-T}$  den ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor und  $\bar{\rho}$  die Massendichte zum Referenzzeitpunkt. In der linearen Elastizitätstheorie werden in den Gleichungen nur Terme erster Ordnung in den Verschiebungen  $\mathbf{u}$  verwendet und Terme höherer Ordnung vernachlässigt. Das betrifft den Green-St. Venantschen Verzerrungstensor (A.3) dessen linearer Anteil

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$$

auch *infinitesimale Verzerrung* genannt wird. Der kritische Schritt der Linearisierung ist jedoch das konstitutive Gesetz  $\mathbf{T} = \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{F})$  elastischer Materialien. Um das Verhalten dieser Gleichung für  $\nabla \mathbf{u} \rightarrow 0$  zu untersuchen, faßt man  $\widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{F})$  als Funktion von  $\nabla \mathbf{u}$  auf. Wegen (A.2) erhält man im spannungsfreien Grundzustand

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{F}) &= \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) = \widehat{\mathbf{T}}(\mathbf{I}) + \widehat{\mathbf{T}}'(\mathbf{I})[\nabla \mathbf{u}] + O(\|\nabla \mathbf{u}\|^2) \\ &= \mathbf{A}[\nabla \mathbf{u}] + O(\|\nabla \mathbf{u}\|^2).\end{aligned}$$

Hierbei verwendet man die folgende Definition.

**Definition A.4.1.** Die Fréchet-Ableitung der Antwortfunktion des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors nach  $\mathbf{F}$  im spannungsfreien Grundzustand,

$$\mathbf{A} := \mathbf{A}(\mathbf{I}) := \widehat{\mathbf{T}}'(\mathbf{I}),$$

heißt *Elastizitätstensor*. Dieser Tensor vierter Stufe besitzt die Symmetrien

$$\mathbf{A}_{mnkl} = \mathbf{A}_{nmkl} = \mathbf{A}_{mnlk} = \mathbf{A}_{klmn}$$

und für  $\mathbf{E} \in \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  ist

$$\mathbf{A}[\mathbf{E}]|_{mn} = \sum_{k,l} \frac{\partial \widehat{\mathbf{T}}|_{mn}}{\partial F_{kl}}(\mathbf{I}) E_{kl}.$$

Ist  $\mathbf{W}$  eine schiefsymmetrische Matrix, so können wir  $\nabla \mathbf{u}$  in der Form  $\nabla \mathbf{u} = \mathbf{E} + \mathbf{W}$  schreiben. Da die Auswertung des Elastizitätstensors in jeder schiefsymmetrischen Matrix verschwindet ([Gur81,29]), also  $\mathbf{A}[\mathbf{W}] = 0$  für alle schiefsymmetrischen  $\mathbf{W} \in \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  ist, erhalten wir die linearen Elastizitätsgleichungen

$$\begin{aligned}\bar{\rho} \ddot{\mathbf{u}} &= \text{Div } \mathbf{A}[\mathbf{E}] + \mathbf{f} \\ &= \text{Div } \mathbf{A}[\nabla \mathbf{u}] + \mathbf{f}.\end{aligned}\tag{A.6}$$

Man beachte, daß diese Gleichung in der Verschiebung  $\mathbf{u}(\mathbf{y}, t) = \varphi(\mathbf{y}, t) - \mathbf{y}$  und nicht in der Bewegung  $\varphi$  dargestellt wird. Für jedes  $\mathbf{H} \in \mathbb{M}^3(\mathbb{R})$  ist  $\mathbf{A}[\mathbf{H}] \in \mathbb{S}^3(\mathbb{R})$  invariant unter der Symmetriegruppe  $\mathcal{G}(\mathbf{y})$  des Materials im Punkt  $\mathbf{y} \in \bar{\Omega}$ . Nach Lemma A.3.6 hat dies die wichtige Konsequenz, daß jedes (homogene) isotrope Material zwei Konstanten  $\mu, \lambda \in \mathbb{R}$  mit

$$\mathbf{A}[\mathbf{E}] = 2\mu \mathbf{E} + \lambda(\text{sp } \mathbf{E}) \mathbf{I}$$

besitzt. Die Divergenz  $\text{Div } \mathbf{A}[\mathbf{I}] = 0$  verschwindet und die linearen Elastizitätsgleichungen (A.6) haben in der Bewegung  $\varphi$  dieselbe Gestalt

$$\bar{\rho} \ddot{\varphi} = \text{Div } \mathbf{A}[\nabla \varphi] + \mathbf{f}.\tag{A.7}$$

# Anhang B

## Bezeichnungen

Dieser Anhang gibt einen Überblick über die wichtigsten Bezeichnungen und Konventionen dieser Arbeit.

### B.1 Allgemeine Konventionen

$H$	Hilbertraum
$\langle a, b \rangle_H$	Skalarprodukt auf $\mathcal{H}$
$\ \cdot\ _H$	Norm auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$
$N^\perp$	Orthogonales Komplement von $N \subseteq H$
$N \oplus M$	Direkte Summe von $N, M \subseteq H$
$H \hookrightarrow L$	Stetig und dicht eingebetteter Hilbertraum $H$ in $L$
$d$	Raumdimension
$e_1, \dots, e_d$	Einheitsbasis des $\mathbb{R}^d$
$\mathbf{u} \times \mathbf{v}$	Kreuzprodukt zweier Vektoren
$[\mathbf{u}][\mathbf{v}]^T$	Äußeres Kreuzprodukt $[\mathbf{u}][\mathbf{v}]_{kl}^T = (u_k v_l)$ zweier Vektoren
$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$	Standardskalarprodukt auf $\mathbb{R}^d$
$ \mathbf{u} $	Euklidische Norm des Vektors $\mathbf{u}$
$\mathbf{I}$	Einheitsmatrix $\mathbf{I} = (\delta_{kl})$
$\mathbf{A} \odot \mathbf{x}$	Tensorprodukt $\mathbf{A} \odot \mathbf{x} \Big _{mns} = A_{mn} x_s$ von Matrizen mit Vektoren
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	Kroneckerprodukt $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \Big _{mnkl} = A_{mn} B_{kl}$ zweier Matrizen
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	Frobenius-Skalarprodukt zweier Matrizen $\mathbf{A} : \mathbf{B} = \sum_{k,l} A_{kl} B_{kl} = \text{sp}(\mathbf{A}^T \mathbf{B})$
$\ \mathbf{A}\ _F$	Frobenius-Norm einer Matrix $\ \mathbf{A}\ _F = \sqrt{\mathbf{A} : \mathbf{A}}$
$\text{sp}(\mathbf{A})$	Spur $\sum_k A_{kk}$ einer Matrix
$\text{Cof}(\mathbf{A})$	Cofaktor $\text{Cof}(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{A}) \mathbf{A}^{-T}$ einer invertierbaren Matrix
$\mathbf{A}^{1/2}$	Quadratwurzel einer symmetrisch positiv definiten Matrix

$\mathbb{M}^d(\mathbb{R})$	Algebra der reellen $d \times d$ -Matrizen
$\mathbb{O}^d(\mathbb{R})$	Gruppe der orthogonalen, reellen $d \times d$ -Matrizen
$\mathbb{S}^d(\mathbb{R})$	Halbgruppe der symmetrischen, reellen $d \times d$ -Matrizen
$\mathbb{M}_+^d(\mathbb{R})$	Gruppe der reellen $d \times d$ -Matrizen mit positiver Determinante
$\mathbb{O}_+^d(\mathbb{R})$	Halbgruppe der orthogonalen, reellen $d \times d$ -Matrizen mit positiver Determinante
$\mathbb{S}_+^d(\mathbb{R})$	Halbgruppe der symmetrischen, reellen $d \times d$ -Matrizen mit positiver Determinante

## B.2 Differentialkalkül

Seien  $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\mathbf{u} : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  und  $W : \mathbb{M}^d(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  genügend glatt.

$\nabla f$	Gradient von $f$
$\nabla^2 f$	Hesse-Matrix von $f$
$\nabla_k f$	$k$ -te Komponente des Gradienten von $f$ bezüglich des Arguments
$D_k f$	$k$ -te partielle Ableitung $\frac{\partial f}{\partial x_k}$ von $f$ nach $x_k \in \Omega$
$\nabla_{kl}^2 f$	$(k, l)$ -te Komponente der Hesse-Matrix von $f$
$D^\alpha \mathbf{u}$	Partielle Ableitung der Ordnung $ \alpha $ für $\alpha \in \mathbb{N}^d$
$\operatorname{div} \mathbf{u}$	Divergenz des Vektorfeldes $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^d$
$\operatorname{Div} \mathbf{A}$	Divergenz einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$
$W'(\mathbf{F})$	Gateaux-Ableitung $\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \Big _{kl} = \frac{\partial W}{\partial F_{kl}}(\mathbf{F})$ von $W$ in $\mathbf{F} \in \mathbb{M}^d(\mathbb{R})$

## B.3 Funktionenräume

Die aufgeführten Funktionenräume haben alle denselben Bild- und Urbildbereich. Sind Bild- und Urbildbereich verschieden, so werden diese getrennt angegeben und wir schreiben etwa  $C(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  für den Raum aller stetigen Funktionen von  $\mathbb{R}^d$  nach  $\mathbb{R}$ .

$C(\mathbb{R})$	Raum der stetigen Funktionen auf $\mathbb{R}$
$C^n(\mathbb{R})$	Raum der $n$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen auf $\mathbb{R}$
$C^\infty(\mathbb{R})$	Raum der unendlich oft stetig differenzierbaren Funktionen auf $\mathbb{R}$
$C_c^\infty(\mathbb{R})$	Raum der unendlich oft stetig differenzierbaren Funktionen auf $\mathbb{R}$ , die außerhalb einer kompakten Teilmenge verschwinden
$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$	Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen auf $\mathbb{R}^d$

$H(\text{div})$  Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen auf  $\mathbb{R}^d$ , deren Divergenz ebenfalls quadratintegrierbar ist

$H^n(\mathbb{R}^d)$  Sobolevraum  $W^{n/2}(\mathbb{R}^d)$  der quadratintegrierbaren Funktionen  $\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ , deren schwache Ableitungen  $D^\nu \mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ ,  $|\nu| \leq n \in \mathbb{Z}^d$  existieren

## B.4 Methode der Finiten Massen

Die folgenden Größen sind über dem Gleichgewichtszustand zusätzlich mit einem Querstrich versehen.

### B.4.1 Teilchengrößen

$i, j$	Teilchenindizes
$m_i$	Masse des $i$ -ten Teilchens
$\mathbf{q}_i$	Position des $i$ -ten Teilchens
$\mathbf{H}_i$	Verformung des $i$ -ten Teilchens
$\mathbf{F}_i$	Kraft des $i$ -ten Teilchens
$\mathbf{M}_i$	Deformationskraft des $i$ -ten Teilchens
$J$	Trägheit der Deformation der Referenzkonfiguration
$\psi$	Normierte Formfunktion, siehe (2.3)
$\hat{\psi}_i$	Formfunktion des $i$ -ten Teilchens, siehe (2.3)
$\psi_i$	Transformierte Formfunktion des $i$ -ten Teilchens, siehe (2.13)
$\chi_i$	Lokaler Massenanteil des $i$ -ten Teilchens
$E_i$	Kinetische Energie des $i$ -ten Teilchens
$\delta Q_i$	Wärmezuwachs

### B.4.2 Felder

$\rho$	Gesamtmassendichte
$\mathbf{v}$	Geschwindigkeit
$\mathbf{j}$	Massenfluß
$\varepsilon$	Dichte der inneren Energie
$\tilde{\varepsilon}$	Spezifische innere Energie

**B.4.3 Energien**

$V$	Innere Energie der Methode der Finiten Massen
$V_K$	Kontinuierliche innere Energie
$V_D$	Diskretisierte kontinuierliche innere Energie im Galerkin-Verfahren
$V_{lin}$	Linearisierte innere Energie
$\tilde{V}$	Integraldiskretisierte innere Energie
$E$	Kinetische Energie der Methode der Finiten Massen
$\bar{E}$	mittlere kinetische Gesamtenergie
$\hat{E}$	Fluktuationsenergie
$E_K$	Kontinuierliche kinetische Energie
$E_D$	Diskretisierte kontinuierliche kinetische Energie im Galerkin-Verfahren
$\mathcal{E}$	Gesamtenergie des Systems
$\mathcal{E}_{lin}$	Linearisierte Gesamtenergie des Systems
$\mathcal{L}$	Lagrangefunktion

**B.5 Elastizität**

$\Omega$	Referenzkörper
$\mathfrak{D}$	Deformierter Körper $\varphi(\Omega)$
$\varphi$	Deformation des Referenzkörpers $\Omega$
$\mathbf{F}$	Deformationsgradient $\nabla\varphi$
$\mathbf{C}$	Rechter Cauchy-Greenscher Verzerrungstensor $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$
$\mathbf{E}$	Green-St. Venantscher Verzerrungstensor $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I})$
$\mathfrak{f}, \mathbf{f}$	Dichte der äußeren Volumenkraft über $\mathfrak{D}, \Omega$
$\mathfrak{g}, \mathbf{g}$	Dichte der äußeren Oberflächenkraft über $\mathfrak{D}, \Omega$
$\mathbf{T}_c$	Cauchyscher Spannungstensor
$\check{\mathbf{T}}$	Antwortfunktion des Cauchyschen Spannungstensors
$\mathbf{T}$	Erster Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor
$\hat{\mathbf{T}}$	Antwortfunktion des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors
$\mathbf{A}$	Elastizitätstensor $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{T}}'(I)$
$W$	Energiefunktional eines Hyperelastischen Materials



# Anhang C

## Literaturverzeichnis

- [Bab70] Babuška, I.: *Approximation by hill functions*, Commentationes Mathematicae Universitatis Carolinae 11 (1970), 787-811.
- [Bal77] Ball, J.M.: *Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity*, Archive for rational mechanics and Analysis 63 (1977), 337-403.
- [BrHi70] Bramble J.H. und Hilbert, S.R.: *Estimation of linear functionals on Sobolev Spaces with application to Fourier Transforms and Spline Interpolation*, SIAM Journal of Numerical Analysis 7, No.1 (1970), 112-124.
- [Cau23] Cauchy, A.L.: *Recherches sur l'équilibre et le mouvement intérieur des corps solides ou fluides, élastiques ou non élastiques*, Ouvres(2) 2, Gauthier-Villars, Paris (1889), 300-304.
- [Cau27a] Cauchy, A.L.: *De la pression ou tension dans un corps solide*, Exercices de mathématique 2 (1827), 42-56.
- [Cau27b] Cauchy, A.L.: *Sur les relations qui existent dans l'état d'équilibre d'un corps solide ou fluide*, Ouvres(2) 7, Gauthier-Villars, Paris (1889), 141-145.
- [Cia88] Ciarlet, P.G.: *Mathematical Elasticity, Volume I: Three-dimensional elasticity*, North-Holland, Amsterdam, New York (1988).
- [Cha76] Chadwick, P.: *Continuum mechanics*, Wiley, New York (1976).
- [ChMa93] Chorin, A.J. und Marsden, J.E.: *A mathematical introduction to fluid mechanics*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1993).
- [CoFr48] Courant, R. und Friedrichs, K.O.: *Supersonic flow and shock waves*, Interscience Publishers, New York (1948).
- [DaLi92] Dautray, R. und Lions, J.-L.: *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology, Volume 5, Evolution Problems I*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1992).
- [Die02] Dieter, S.: *Krümmungsabschätzungen für degenerierte nichtlinere geometrische Evolutionsgleichungen*, Dissertation, Mathematische Fakultät, Eberhard-Karls-Universität Tübingen (2002).

- [EnNa00] Engel, K.-J. und Nagel, R.: *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*, Graduate Texts in Mathematics 194, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (2000).
- [Eul57] Euler, L.: *Continuation des recherches sur la théorie du mouvement des fluides*, Mémoire de l'académie de Berlin XV (1757), 316-361.
- [Eul59] Euler, L.: *De la propagation du son*, Mémoire de l'académie de Berlin XV (1759), 185-192.
- [Eul71] Euler, L.: *Sectio tertia de motu fluidorum lineari potissimum aquae*, Novi commentarii Academiae Scientiarum Imperialis petropolitanae 15 (1771), 219-360.
- [FiKa98] Fischer, H. und Kaul, H.: *Mathematik für Physiker, Band 2*, B.G. Teubner, Stuttgart (1998).
- [Gau00] Gauger, C.: *Erweiterungen der Methode der Finiten Massen*, Dissertation, Mathematische Fakultät, Eberhard-Karls-Universität Tübingen (2000).
- [GLY00] Gauger, C., Leinen, P., Yserentant, H.: The Finite Mass Method, *SIAM Journal of Numerical Analysis* 37 (2000), 1768-1799.
- [GoWa03] Goldstein, J.A. und Wacker, M.: *The Energy Space and Norm Growth for Abstract Wave Equations*, *Applied Mathematics Letters* 16 (2003), 767-772.
- [Gur81] Gurtin, M.E.: *An introduction to continuum mechanics*, Mathematics in science and engineering Vol. 158, Academic Press, San Diego (1981).
- [HaLu00] Hairer, E. und Lubich, C.: *Asymptotic expansions and backward analysis for numerical integrators*, *Dynamics of Algorithms*, Hrsg. R. de la Llave, L.R. Petzold, J. Lorenz, Springer IMA, Vol. 118 (2000), 91-106.
- [HoLu97] Hochbruck, M. und Lubich, C.: *On Krylov Subspace Approximations to the Matrix Exponential Operator*, *SIAM Journal of Numerical Analysis* 34, No.5 (1997), 1911-1925.
- [Kat66] Kato, T.: *Perturbation Theory for linear Operators*, Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Band 132, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1966).
- [Kl03a] Klingler, M.: *Die Methode der Finiten Massen in der astrophysikalischen Hydrodynamik*, Dissertation, Mathematische Fakultät, Eberhard-Karls-Universität Tübingen (2003).
- [Kl03a] Klingler, M.: *Hydrodynamic simulations of the accretion disk in U Geminorum*, Sonderforschungsbereich 382 Report Nr. 190, Eberhard-Karls-Universität Tübingen (2003).
- [LaLi91] Landau, L.D. und Lifschitz, E.M.: *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band VI, Hydrodynamik*, Akademie Verlag, Berlin (1991).

- [LiMa72] Lions, J.-L. und Magenes, E.: *Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications, Volume I*, Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Band 181, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1972).
- [MaHu83] Marsden, J.E. und Hughes, T.J.R.: *Mathematical Foundations of elasticity*, Prentice-Hall, Inc., London (1983).
- [Mon92] Monaghan, J.J.: *Smoothed Particle Hydrodynamics*, Annual Review of Astronomy and Astrophysics 30 (1992), 543-574.
- [Paz83] Pazy, A.: *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*, Applied Mathematical Sciences 44, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1983).
- [RaTh88] Raviart, P.A. und Thomas, J.M.: *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Masson, Paris, Milan, Barcelone (1988).
- [RiEr55] Rivlin, R.S. und Ericksen, J.L.: *Stress-deformation relations for isotropic materials*, Archive for rational mechanics and Analysis 4 (1955), 323-425.
- [Sch46] Schoenberg, I.J.: *Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions*, Quarterly Journal of mechanics and applied mathematics A,B (1946), 45-99, 113-141.
- [StFi73] Strang, G. und Fix, G.: *A Fourier Analysis of the Finite Element Variational Method*, Constructive Aspects of Functional Analysis, Edizioni Cremonese (1973), 795-840.
- [Str71] Strang, G.: *The Finite Element Method and Approximation Theory*, Numerical Solution of Partial Differential Equations II, SYNSPADE 1970, Academic Press, London (1970), 547-584.
- [TrNo77] Truesdell, C. und Noll, W.: *The nonlinear field theories of mechanics, Handbuch der Physik Vol. III/3*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1977).
- [Vil77] Villaggio, P.: *Qualitative methods in elasticity*, Nordhoff, Leyden (1977).
- [Wer92] Werner, J.: *Numerische Mathematik 1*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden (1992).
- [Wer95] Werner, D.: *Funktionalanalysis*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1995).
- [Ys97a] Yserentant, H.: *A new class of particle methods*, Numerische Mathematik 76 (1997), 87-109.
- [Ys97b] Yserentant, H.: *A particle model of compressible fluids*, Numerische Mathematik 76 (1997), 111-142.
- [Ys99a] Yserentant, H.: *Particles of variable size*, Numerische Mathematik 82 (1999), 143-159.

- [Ys99b] Yserentant, H.: *Entropy generation and shock resolution in the particle model of compressible fluids*, Numerische Mathematik 82 (1999), 161-177.
- [Yse00] Yserentant, H.: *A convergence analysis for the finite mass method for flows in external force and velocity fields*, SFB-Report Nr. 136, SFB 382, Eberhard-Karls-Universität Tübingen (2000).
- [Yse01] Yserentant, H.: *The propagation of sound in particle models of compressible fluids*, Numerische Mathematik 88 (2001), 581-601.

## Lebenslauf

### Persönliche Daten

Name	Gerd Sautter
Anschrift	Friedrichstr. 28 72800 Eningen u.A.
Geburtsdatum	10. Mai 1973
Geburtsort	Urach (jetzt Bad Urach)

### Schulbildung

1979 – 1981	Schillerschule, Eningen
1981 – 1982	Achalmschule, Eningen
1982 – 1983	Gaisentalgrundschule, Biberach
1983 – 1992	Pestalozzi Gymnasium, Biberach
Juni 1992	Abitur

### Studium

Okt. 1993 – Feb. 1999	Studium der Mathematik an der Universität Tübingen
Okt. 1995	Diplom-Vorprüfung an der Universität Tübingen
Feb. 1999	Diplom-Prüfung an der Universität Tübingen
Apr. 1999 – Apr. 2004	Anfertigung der vorliegenden Dissertation, Betreuer Professor Dr. Harry Yserentant

### Tätigkeiten

Jul. 1992 – Sep. 1993	Zivildienstleistender beim Arbeiter-Samariter-Bund, Biberach
Okt. 1997 – Feb. 1999	wissenschaftliche Hilfskraft am Mathematischen Institut der Eberhard-Karls-Universität Tübingen
seit April 1999	wissenschaftlicher Angestellter am Sonderforschungsbereich 382 “Numerische Verfahren und Algorithmen zur Simulation physikalischer Prozesse auf Höchstleistungsrechnern” im Ar- beitsbereich Numerik des Mathematischen Instituts der Uni- versität Tübingen bei Professor Dr. Harry Yserentant

### Akademische Lehrer

*In Tübingen:* F. Bea, R. Berndt, K.-J. Engel, W. Grölz, H. Kuhnle, P. Leinen, F. Loose, Ch. Lubich, R. Nagel, W. Neus, F. Rübiger, G. Ronning, H. Salzmann, E. Schaich, U. Schlotterbeck, P. Schmid, M. Schweitzer, J. van Neerven, M. Voit, F. Wagner, M. Wolff, H. Yserentant.